**Гладун, Любовь Васильевна.**
Квантово-статистический анализ равновесных изотопных эффектов комплексных соединений : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04. - Москва, 1985. - 184 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Гладун, Любовь Васильевна

введение.

ГЛАВА I. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР.

1.1. Обзор данных по равновесным изотопным эффектам металлов в системах с комплексообра-зованием.

1.2. Расчетно-теоретические данные о протяженности изотопного возмущения.

1.3. Теоретические соотношения для расчета и интерпретации равновесных изотопных эффектов

ГЛАВА П. ИССЛЕДОВАНИЕ СООТНОШЕНИЙ, ПРИМЕНИМЫХ ДЛЯ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ИЗОТОПНЫХ ЭФФЕКТОВ МНОГОАТОМНЫХ соединений. зз

2.1. Анализ свойств приближенного уравнения Немета - Князева - Бланк.

2.1.1. Ограничения и свободные параметры уравнения.

2.1.2. Точность приближения НКБ

2.1.3. Интерпретационные возможности приближения НКБ.

2.2. Анализ свойств точного разложения Князева-Бланк

ГЛАВА Ш. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ИЗОТОПНОГО ВОЗМУЩЕНИЯ ПО КОЛЕБАТЕЛЬНЫМ координатам.

3.1. Общая методика анализа связей йуз с силовыми и кинематическими характеристиками молекул.■.

3.2. Зависимость (пр от силовых и кинематических характеристик атомов в цепи.

3.2.1. Численный анализ величины йуз молекулы л/гГг

3.2.2. Алгебраическое решение для

3.2.3. Анализ структуры Injz методом отщепления

3.3. Зависимость (па от силовых и кинематических характеристик атомов в случае ветвления лиган

ГЛАВА 1У. КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ ОЦЕНКИ ИЗОТОПНЫХ ЭФФЕКТОВ КОМПЛЕКСНЫХ СОЩИНЕНИЙ.

4.1. Погрешности расчета изотопных эффектов многоатомных и комплексных соединении.

4.2. Карбонилы и цианиды типа М (ХУ)6.III

4.3. Аква-комплексы и аммиакаты.

4.4. Хелатные соединения.