**Львов, Игорь Борисович.**

## Электронное строение и фотоэлектронная спектроскопия β-дикетонатных комплексов никеля и меди : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04. - Владивосток, 1998. - 119 с.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Львов, Игорь Борисович

Введение.

Глава 1. Метод фотоэлектронной спектроскопии и квантовохимические методы исследования электронной структуры химических соединений.,.

1.1. Основные положения метода ФЭС.

1.2. Основные приемы интерпретации ФЭ спектров.

1.2.1. Интерпретация спектров на основе эмпирических закономерностей.

1.2.2. Интерпретация спектров на основе теоремы Купманса в приближении ХФ-ССП.

1.2.3. Применение метода Ха и концепции переходного состояния к проблеме интерпретации ФЭ спектров

1.3. Исследование электронного строения (3-дикетонов и (3дикетонатных комплексов никеля и меди.

1.3.1. (3-дикетоны.

1.3.2. Комплексы никеля.

1.3.3. Комплексы меди.

Глава 2. Электронное строение производных малонового диальдегида.

2.1. Методика расчета.

2.2. Геометрические параметры.

2.3. Энергии МО и влияние на них типа используемого базисного набора.

2.4. Эффекты замещения О—кЫН.

2.5. Структура МО, атомные заряды и дипольные моменты.

2.6. Основные результаты исследований электронной структуры малонового диальдегида и его производных.

Глава 3. Электронное строение бис-хелатных комплексов никеля и меди.

3.1. Комплексы никеля.

3.2. Эффекты замещения атомов кислорода на NR-группы

3.3. Основные результаты исследования электронной структуры комплексов никеля.

3.4. Комплексы меди.

3.5. Основные результаты исследования электронной структуры комплексных соединений меди.

Глава 4. Квантовохимическое моделирование фотоэлектронных спектров комплексных соединений переходных металлов.

4.1. Общие положения.

4.2. Расчет электронного строения бис-хелатных комплексов никеля и меди методами ab initio, Ха-ДВ и INDO и сопоставление с экспериментальными величинами.

4.3. Расчет I комплексов методами переходного состояния и разности полных энергий.

4.4. Релаксационные эффекты.

Выводы.