**Гельфанд, Наталья Александровна.**

## Квантово-химическое моделирование оптических спектров поглощения растворов β-дикетонатов дифторида бора : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.08 / Гельфанд Наталья Александровна; [Место защиты: Дальневосточный федеральный университет]. - Владивосток, 2019. - 139 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат наук Гельфанд Наталья Александровна

ВВЕДЕНИЕ

ГЛАНД 1 в-ДИКЕТОНАТЫ ДИФТОРИДА БОРА: СТРОЕНИЕ, ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА, ПРИМЕНЕНИЕ

1.1 Пространственное строение

1.1.1 Кристаллическая структура

1.1.2 Влияние окружения на геометрию борхелатов

1.2 Электронное строение и оптические спектры

1.3 Оптические свойства и перспективы их применения

1.4 Методы квантовой химии в исследованиях структуры и свойств борорганических красителей

1 ЛАВА 2 МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ

2.1 Теория функционала плотности: основы метода, виды функционалов, моделирование возбужденных состояний

2.2 Методы учета эффектов окружения в растворах

2.3 Расчет формы полос в оптических спектрах

2.4 Моделирование спектров борорганических красителей: выбор оптимального функционала

2.5 Детали проведенных расчетов

ГЛАИДЗ ЭФФЕКТЫ ИЗОМЕРИИ В ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРАХ ПОГЛОЩЕНИЯ в-ДИКЕТОНАТОВ ДИФТОРИДА БОРА

3.1 Влияние протяженности п-системы и введения донорного заместителя на спектры поглощения в-дикетонатов дифторида бора

3.1.1 Геометрия и электронное строение соединений

3.1.2 Спектры поглощения соединений

3.1.3 Геометрия и электронное строение соединений

3.1.4 Спектры поглощения комплексов

3.1.5 Выводы

3.2 Изомерные бисхромофорные борорганические красители с фенантрильным

заместителем

3.2.1 Геометрия изомеров

3.2.2 Электронная структура и спектры поглощения

3.2.3 Выводы

I ЛАВА 4 ОРТО-ГИДРОКСИДИБЕНЗОИЛМЕТАНАТ ДИФТОРИДА БОРА: СТРУКТУРА, СПЕКТР ПОГЛОЩЕНИЯ, ХЕМОСЕНСОРНЫЕ СВОЙСТВА

4.1 Геометрия и спектр поглощения

4.2 Сольватационные эффекты

4.3 Взаимодействие красителя с аналитами

4.3.1 Взаимодействие с водой

4.3.2 Взаимодействие с аммиаком и гидратом аммиака в растворе

4.4 Выводы

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

ПРИЛОЖЕНИЕ