**Петренко, Александр Николаевич.**

## Квантовохимические расчеты межмолекулярных обменных взаимодействий с переносом электронного возбуждения в приближении Хартри-Фока : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.17. - Новосибирск, 1984. - 128 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Петренко, Александр Николаевич

ВВЕДЕНИЕ

ГЛАВА I. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ ИХ

ПРИМЕНЕНИЯ К РАСЧЕТАМ ОБМЕННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ С ПЕРЕНОСОМ ЭЛЕКТРОННОГО ВОЗШЩЕНИЯ.

1.1. Приближение теории возмущений

1.2. Асимптотический метод

1.3. Сопоставление с экспериментом.

ГЛАВА 2. АНАЛИЗ И РАСЧЕТЫ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ПЕРЕНОСОМ ВОЗБУЖДЕНИЯ В ПРИБЛИЖЕНИИ ХАРТРИ-ФОКА

2.1. Прямой, асимптотический и линдерберговский подходы в расчетах обменных интегралов с переносом возбуждения

2.2. Методика расчетов

2.3. Эффекты затухания хартри-фжовских функций в расчетах спинобменных и резонансных интегралов

ГЛАВА 3. КВАНТО ВО ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ МЕШОЛЕКУЛЯРНЫХ

ОШЕННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ С ПЕРЕНОСОМ ВОЗЕВДЕНИЯ В ПРИБЛИЖЕНИЙ ХАРТРИ-ФОКА.

3.1. Эффекты затухания волновых функций молекул в расчетах обменных взаимодействий с переносом триплетных возбувдений.

Модельная система этилен-этилен

3.2. Межмолекулярные обменные взаимодействия с переносом триплетных возбуждений в системах: нафталин-нафталин, антрацен-антрацен.