**Мырзалиева, Сауле Керчаизовна.**

## Исследование закономерностей изменчивости отношений статистических сумм по состояниям изотопных форм молекул типов XV, XV4(Td), XV6(Oh) : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04. - Москва, 1984. - 291 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Мырзалиева, Сауле Керчаизовна

ВВЕДЕНИЕ.

I. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР.,.

1.1. Теоретические соотношения для расчета и интерпретации равновесных химических изотопных эффектов.

1.2. Модели силовых полей многоатомных молекул и закономерности изменчивости внутримолекулярных силовых постоянных.

1.2.1. Модели силовых полей многоатомных молекул.

1.2.2. Закономерности изменчивости внутримолекулярных силовых полей.

1.3. Закономерности термодинамики изотопного обмена.

П. ОБЩЕ МЕТОДИЧЕСКИЕ УСТАНОВКИ РАБОШ.

2.1. Вычислительные соотношения для ОСС®.

2.1.1. Приближение "жесткий ротатор-гармонический осциллятор". Погрешности этой модели по литературным данным.

2.1.2. Стандартная методика на вычисление ОССШ?

2.1.3. Методика вычисления ОССШ двухатомных молекул

2.2. О ценности различной дополнительной информации по силовым полям молекул.

2.3. Свойства вековых уравнений молекул и

ХУ6( О^ ). Выбор модели для молекул ХУ^ и ХУ^.

Ш. ЗАКОНОМЕРНОСТИ ИЗМЕНЧИВОСТИ ОСС® ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ.

3.1. Структурно-теоретическое описание ОССИФ молекул ХУ.

3.2. Феноменология ОССШ молекул ХУ.

3.3. Двухатомные гидриды элементов второго периода

3.4. Двухатомные молекулы элементов второго периода.

3.5. Изотопные эффекты двухатомных ионов

3.5.1. Изотопные эффекты, определяемые степенью ионизации двухатомных молекул.

3.5.2. Изотопные эффекты в изоэлектронных рядах гидридов и оксидов элементов второго периода

3.5.3. Изотопные эффекты ионизированных двухатомных гидридов и оксидов элементов второго периода.

17. ЗАКОНОМЕРНОСТИ ИЗМЕНЧИВОСТИ ОСС® ТЕТРАЭДРИЧЕСКИХ и

ОКТАЭДРИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ.

4.1. Выявление определяющих OCCJ0? констант силового поля.

4.2. Зависимость ОССИФ от степени окисления

4.3. Центральные изотопные эффекты конфигурационного перехода

4.4. Зависимость ОССШ? молекул и ^ ) от типа атома-партнера '.

4.5. Периферийные изотопные эффекты

4.5.1. Зависимость периферийных изотопных эффектов от природы центрального атома в молекулах ХУ4 и ХУ6.

4.5.2. Зависимость периферийных изотопных эффектов от конфигурации соединения.

4.6. Температурные зависимости ОССИЗ?.

ВЫВОДЫ.