**Жорник, Валерий Валериевич.**

## Экспериментальное и теоретическое изучение структуры и свойств новых производных пиразол-5-она и их комплексов с редкоземельными элементами : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.01. - Москва, 1999. - 145 с.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Жорник, Валерий Валериевич

ВВЕДЕНИЕ.

ГЛАВА 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

1.1 Синтез, состав и свойства комплексных соединений производных пиразол-5-она.

1.2 Спектральные характеристики производных пиразол-5-она и его комплексов.

1.3 Современные теоретические методы исследования структуры и свойств молекул.

1.3.1 Метод Хартри-Фока.

1.3.2 Функции используемые в составе базисных систем.

1.3.3 Электронная корреляция.

1.3.3.1 Метод конфигурационного взаимодействия.

1.3.3.2 Многоконфигурационный метод самосогласованного поля.

1.3.3.3 Метод теории возмущений.

1.3.4 Эффективные внутренние потенциалы.

Выводы.

ГЛАВА 2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРАЗОЛ-5-ОНА, СИНТЕЗ, СОСТАВ И СВОЙСТВА ИХ ПРОТОНИРОВАННЫХ ФОРМ И КОМПЛЕКСОВ С ЛАНТАНИДАМИ

2.1 Исходные вещества.

2.2 Методы исследования.

2.3 Структура и свойства 4-ацетамидо-2,3-диметил-1-фенилпиразол-5-она и 4-малеиламидо-2,3-Диметил-1-фенил-пиразол-5-она.

2.3.1 Рентгеноструктурный анализ 1 и 2.

2.3.2 ИК-спектроскопический анализ 1 и 2.

2.4 Синтез и свойства протежированных форм 4-ацетамидо-2,3-диметил-1-фенилпиразол-5-она и 4-малеиламидо-2,3-диметил-1-фенилпиразол-5-она.

2.4.1 ИК-спектроскопический анализ растворов 1 и 2 в ацето-нитриле.

2.4.2 Синтез протонированных форм 4-ацетамидо-2,3-диметил-1-фенилпиразол-5-она и 4-малеиламидо-2,3-диметил-1 -фенилпиразол-5-она.

2.4.3 ИК-спектроскопический анализ растворов протонированных форм соединений 7 и 2.

2.4.4 УФ-спектроскопические исследования растворов соединений 1 и 2, и их протонированных форм.

2.5 Синтез и свойства комплексов нитратов некоторых лантани-дов (Рг и N(1) с 4-ацетамидо-2,3-диметил-1-фенилпиразол-5-оном и 4-малеиламидо-2,3-диметил-1-фенилпиразол-5-оном.

2.5.1 Синтез комплексов Ьп(ЫОз)з.

2.5.2 Химический анализ комплексов.

2.5.3 ИК-спектроскопический анализ комплексов.

Выводы.

ГЛАВА 3. КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРАЗОЛ-5-ОНА, ИХ ПРОТОНИРОВАННЫХ ФОРМ И МОДЕЛЬНЫХ ФРАГМЕНТОВ КОМПЛЕКСОВ С РЗЭ

3.1 Детали расчетов.

3.2 Структура и свойства 4-диметиламино-2,3-Диметил-1-фенил-пиразол-5-она (амидопирин).