**Волынкин, Виталий Анатольевич.**

## Комплексообразование РЗЭ Рг(III), Nd(III), Eu(III) с цистеином и треонином по данным спектров ЯМР с использованием метода спиновой матрицы плотности : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.01. - Краснодар, 1999. - 121 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Волынкин, Виталий Анатольевич

ЗВЕДЕНИЕ. лава 1. Аналитический обзор. 1.1. Методы ЯМР спектроскопии, применяющиеся для исследования комплексообразования в растворах.

1.1.1 .Анализ наблюдаемых химических сдвигов.

1.1.2. Анализ формы линии спектра ЯМР.

1.2. Квантово-механическое описание спектров ЯМР.

1.2.1. Квантово-механическая теория.

1.2.2. Матрица плотности и её использование для описания спиновых систем.

1.3. Некоторые особенности комплексообразования аминокислот и РЗЭ.

Глава 2. Моделирование ЯМР спектров для изучения комплексообра зования в водных растворах.'.

2.1. Практическая реализация метода.

2.1.1. Спиновая система АВХ3.

2.1.2. Описание систем с изменением типа спиновой системы. Система АВ2 ABC.

2.2.Оценка точности и границ применимости используемого метода.57 2.3.Ограничения метода в расчетах реальных систем и пути их разрешения.

2.4. Интерпретация информации, получаемой из ЯМР спектров с помощью анализа формы линии. Расчет кинетических, термодинамических, активационных и геометрических параметров систем.

Глава 3. Экспериментальное исследование комплексообразования некоторых аминокислот с хлоридами РЗЭ цериевой подгруппы.

3.1. Экспериментальная часть.

3.1.1. Использованные материалы и оборудование.

3.1.2. Приготовление растворов и снятие спектров.

3.2. Обработка спектров.

3.3. Результаты и их обсуждение

3.3.1. Система РЗЭ - цистеин.

3.3.2. Система РЗЭ - треонин.

ВЫВОДЫ.