**Марусов, Марк Анатольевич.**

## Влияние внутримолекулярной динамики в лигандах на комплексообразование РЗЭ с некоторыми аминокислотами по данным ЯМР спектроскопии : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.01. - Краснодар, 2004. - 124 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Марусов, Марк Анатольевич

ВВЕДЕНИЕ.

ГЛАВА 1. АНАЛИТИЧЕСКИЙ ОБЗОР.

1.1 Применение метода ЯМР для исследования комплексообразования в растворах.

1.1.1 Методы анализа зависимостей наблюдаемых химических сдвигов в спектрах ЯМР.

1.2 Метод анализа полной формы линий спектра ЯМР.

1.2.1 Квантовомеханическое описание спектров ЯМР.

1.2.2 Матрица плотности и её использование для описания спиновых систем.

1.3 Влияние природы аминокислот на процессы комплексообразования.

1.4 Водородная связь.

ГЛАВА 2. ВОЗМОЖНОСТИ И ГРАНИЦЫ ПРИМЕНИМОСТИ АДДИТИВНОЙ МОДЕЛИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ И ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНЫХ ПРОЦЕССОВ В РАСТВОРАХ МЕТОДОМ ЯМР ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ.

2.1 Погрешности определения констант равновесия и химических сдвигов в спектрах ЯМР комплексов.

2.1.1 Комплексы состава 1:1.

2.1.2 Комплексы состава 1:1 и 1:2.

2.2 Влияние внутримолекулярной водородной связи на наблюдаемые химические сдвиги в спектрах ЯМР лигандов и комплексов.

ГЛАВА 3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНОЙ ВОДОРОДНОЙ СВЯЗИ И ЕЕ ВЛИЯНИЯ НА КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ИОНОВ РЗЭ С АМИНОКИСЛОТАМИ.

3.1 Использованное оборудование и материалы.

3.2 Определение характеристик внутримолекулярной водородной связи.

3.2.1 Оценка внутримолекулярной водородной связи в пролине и (3-аланине.

3.2.2 Оценка внутримолекулярной водородной связи в цистеине и треонине.

3.2.3 Анализ полученных характеристик внутримолекулярной водородной связи в пролине р-аланине, цистеине и треонине.

3.3 Приготовление растворов и снятие спектров.

3.4 Изучение комплексообразования пролина (3-аланина, цистеина и треонина с Рг+3, Nd+3, Sm+3.

ВЫВОДЫ.