**Рольник, Константин Борисович.**

## Квантовохимические расчеты строения и свойств комплексов замещенных циклических нитрилов с хлоридами d-элементов : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.03. - Уфа, 2000. - 96 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Рольник, Константин Борисович

Введение

1. Литературный обзор

1.1. Синтез и свойства производных нитрилов

1.2. Комплексы на основе нитрилов

1.3. Квантовохимические расчеты свойств веществ и протекания 32 химйческих реакций

2. Результаты и обсуждение

2.1. Расчеты квантовохимических характеристик продуктов и 40 реагентов реакции синтеза циклических нитрильных комплексов.

2.2. Применение нитр ильных металлокомплексов

2.3. Компьютерный скрининг противоизносной и противозадирной 52 активности нитр ильных металокомплексов

3. Экспериментальная часть

3.1. Синтез продуктов диеновой конденсации

3.2. Продукты комплексообразования

3.3. Квантово-химические исследования

3.4. Методика компьютерного скрининга для определения связи 80 «структура - активность»

Выводы