

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Ивановский государственный химико-технологический университет
Российское химическое общество им. Д.И. Менделеева

*При финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных
исследований*

VII Всероссийская конференция по структуре и энергетике молекул

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

*Посвящается 100-летию со дня рождения
профессора К.С. Краснова*

ИГХТУ. Иваново. 19 – 23 ноября 2018 г.

Материалы VII Всероссийской конференции по структуре и энергетике молекул (19 – 23 ноября 2018 г.), Иваново, 2018, 112 с.

Ответственные за выпуск:

д.х.н., проф. Гиричев Г.В.

д.х.н., проф. Белова Н.В.

Тезисы публикуются в авторской редакции

ISBN 978-5-9616-0539-6

© ФГБОУ ВО «Ивановский государственный
химико-технологический университет», 2018

НЕАДИАБАТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СПИН-ОРБИТАЛЬНЫХ $A^1\Sigma^+ - b^3\Pi$ И $D^1\Pi - d^3\Pi$ КОМПЛЕКСОВ МОЛЕКУЛЫ $LiRb$ НА ОСНОВЕ НЕЭМПИРИЧЕСКИХ РАСЧЁТОВ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ

Бормотова Е.А.¹

¹*Московский государственный университет, Ленинские Горы, 1, стр.3, г. Москва,
bormotova.e.a@gmail.com*

Оптимизация оптических путей лазерного синтеза и лазерной ассоциации требует наличия высокоточных данных о потенциальных кривых и матричных элементов взаимодействия не только для основного состояния, но и для электронно-возбуждённых состояний. Особый интерес представляют состояния со «смешанным» синглет-триплетным характером. На данный момент, спин-орбитальные комплексы $A^1\Sigma^+ - b^3\Pi$ и $D^1\Pi - d^3\Pi$, молекулы $LiRb$ не исследованы.

В рамках этой работы проведен депертурбационный анализ $A^1\Sigma^+ - b^3\Pi$ и $D^1\Pi - d^3\Pi$ комплексов. Рассчитаны высокоточные неэмпирические потенциальные кривые и матричные элементы спин-орбитального взаимодействия в «а» случае связи по Гунду. Далее неэмпирические данные использовались как нулевое приближение для уточнения этих кривых с учётом спин-орбитального взаимодействия, используя все имеющиеся прецизионные спектроскопические данные [1-3], отнесенные к исследуемым состояниям.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-33-00753.

1. Stevenson I. C., Blasing D. B., Altaf A., Chen Y. P., Elliott D. S. // J. Chem. Phys., 2016, V. 145, p 224301.
2. Stevenson I. C., Blasing D. B., Chen Y. P., Elliott D. S. // Phys. Rev. A, 2017, V. 94, p. 62503.
3. Ivanova M., Stein A., Pashov A., Knöckel H., Tiemann E. // J. Chem. Phys., 2013, V. 138, p. 94315.

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|--|-----------|
| О Константине Соломоновиче Краснове | 3 |
| THE EQUILIBRIUM MOLECULAR STRUCTURE OF 1-METHYLISATIN BY GAS-PHASE ELECTRON DIFFRACTION AND COUPLED CLUSTER CALCULATIONS | |
| Belyakov A.V., Nikolaenko K.O., Oskorbin A.A., Vogt N., Rykov A.N., Shishkov I.F..... | 5 |
| ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛ 1,2-ДИПРОПИЛДИАЗИРИДИНА И 1,2,3-ТРИЭТИЛДИАЗИРИДИНА В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ | |
| Агеев Г.Г., Хайкин Л.С., Кочиков И.В., Рыков А.Н., Грикина О.Е., Шишков И.Ф..... | 6 |
| КИНЕМАТИЧЕСКАЯ АНГАРМОНИЧНОСТЬ КОЛЕБАНИЙ НЕЖЕСТКИХ МОЛЕКУЛ | |
| Батаев В.А., Пупышев В.И., Годунов И.А..... | 7 |
| ИЗУЧЕНИЕ КОНФОРМАЦИОННОГО МНОГООБРАЗИЯ МЕФЕНАМИНОВОЙ КИСЛОТЫ МЕТОДАМИ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР И КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ | |
| Белов К.В., Ходов И.А., Ефимов С.В., Батиста де Карвальо Л.А.Е. | 8 |
| THE EQUILIBRIUM MOLECULAR STRUCTURE OF GASEOUS 3-METHYL-4-NITRO-FUROXAN BY ELECTRON DIFFRACTION AND COUPELED CLUSTER CALCULATIONS | |
| Belyakov A.V., Oskorbin A.A., Losev V.A., Rykov A.N. Shishkov I.F..... | 9 |
| НЕАДИАБАТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СПИН-ОРБИТАЛЬНЫХ $A^1\Sigma^+ - b^3\Pi$ И $D^1\Pi - d^3\Pi$ КОМПЛЕКСОВ МОЛЕКУЛЫ $LiRb$ НА ОСНОВЕ НЕЭМПИРИЧЕСКИХ РАСЧЁТОВ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ | |
| Бормотова Е.А. | 10 |
| ЯДЕРНАЯ ДИНАМИКА ВОДОРОДСВЯЗАННЫХ КОМПЛЕКСОВ РАЗНОЙ ПРИРОДЫ | |
| Бубнова К.Е., Гиричева Н.И., Федоров М.С., Сырбу С.А., Гиричев Г.В..... | 11 |
| ИК-СПЕКТРЫ СИСТЕМЫ ПАРА-Н-ДОДЕЦИЛОКСИБЕНЗОЙНАЯ КИСЛОТА - ЕЕ ПИРИДИНОВЫЙ ЭФИР ПРИ РАЗЛИЧНЫХ КОНЦЕНТРАЦИЯХ КОМПОНЕНТОВ | |
| Бубнова К.Е., Гиричева Н.И., Федоров М.С., Сырбу С.А., Гиричев Г.В..... | 12 |
| ЛЕСТНИЧНЫЕ ОПЕРАТОРЫ ОСЦИЛЛЯТОРА МОРЗЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ КОЛЕБАНИЙ МОЛЕКУЛ | |
| Краснощекоев С.В., Степанов Н.Ф., Чан С., Бехтерева Е.С., Улеников О.Н. | 13 |
| ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ФОТОЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ БИС-ХЕЛАТОВ $Zn(II)$ | |
| Чех А.С., Короченцев В.В. | 14 |
| СТАНДАРТНЫЕ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ ПРОИЗВОДНЫХ ТЕТРАЗОЛА И ТРИАЗОЛОВ. КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ | |
| М.Г. Денисик, В.Э. Матулис | 15 |
| КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОТРЕКСАТ-ФУЛЛЕРЕНОЛОВЫХ КОНЬЮГАТОВ | |
| Дикусар Е.А., Пушкарчук А.Л., Безъязычная Т.В., Поткин В.И., Солдатов А.Г., Кутень С.А., Стёпин С.Г. | 16 |
| ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ КРИТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ПРОДУКТАХ СГОРАНИЯ СМЕСИ УГЛЕВОДОРОДА С ОРГАНИЧЕСКИМ ОКИСЛИТЕЛЕМ, СОДЕРЖАЩИМ $-NO_2$ И $-NF_2$ ГРУППЫ | |
| Дорофеев Е.М., Лемперт Д.Б. | 17 |
| СОСТАВ ПАРА ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ АЛКИЛИМИДАЗОЛИЯ С ФТОРСОДЕРЖАЩИМИ АНИОНАМИ | |
| Дунаев А.М., Моталов В.Б., Говоров Д.Н., Кудин Л.С. | 18 |
| КОНФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ ГИДРАЗОНА, ОБРАЗОВАННОГО ПИРИДОКСАЛЬ-5-ФОСФАТОМ И ИЗОНИАЗИДОМ | |
| Погонин А.Е., Гамов Г.А., Завалишин М.Н., Шарнин В.А..... | 19 |
| СТРОЕНИЕ И ДИНАМИКА МОЛЕКУЛ ОКСАЛИЛГАЛОГЕНИДОВ В ВОЗБУЖДЕННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЯХ | |
| Годунов И.А., Яковлев Н.Н., Маслов Д.В., Абраменков А.В., Батаев В.А. | 20 |

ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА V-Ti КАТАЛИЗАТОРОВ В РЕАКЦИИ ДЕГИДРИРОВАНИЯ ПРОПАНА

- Голосная М.Н., Никитина Н.А., Пичугина Д.А., Кузьменко Н.Е.**.....21
 ПРИМЕНЕНИЕ КОМПОЗИТНЫХ МЕТОДОВ КВАНТОВОЙ ХИМИИ К ВЫЧИСЛЕНИЮ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ КАТИОНОВ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ СОСТАВА C_nMIm ($n = 2, 4, 6$)
- Говоров Д.Н., Кудин Л.С., Дунаев А.М.**.....22
 ТЕРМОДИНАМИКА ГЕТЕРОГЕННЫХ РАВНОВЕСИЙ В СИСТЕМЕ Al_2O_3-MgO ПРИ 1900 К
- Грибченкова Н.А., Сморгачев К.Г., Колмаков А.Г., Алиханян А.С.**.....23
 АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ КАРБИНОПОДОБНОЙ УГЛЕРОДНОЙ ПЛЕНКИ, СИНТЕЗИРОВАННОЙ ИМПУЛЬСНО-ПЛАЗМЕННЫМ МЕТОДОМ
- Иваненко И.П., Краснощеков С.В., Павликов А.В.**.....24
 ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ Gd(III) СО СТЕАРАТ-АНИОНОМ И БЕТА-ДИКЕТОНАМИ
- Иванин С.Н., Бузько В.Ю., Панюшкин В.Т.**.....25
 ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕОМЕТРИИ И ЭНЕРГИИ СВЯЗЫВАНИЯ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ ТРИАДЫ СИЛИКАТЕИНА- α С МОЛЕКУЛОЙ ОРТОКРЕМНИЕВОЙ КИСЛОТЫ
- Изотова Е.Д., Багаева Т.В.**.....26
 ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,4-ТРИАЗОЛА И 1,2,4-ТРИАЗИНА НА ИХ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОЕ УДЕРЖИВАНИЕ
- Карасева И.Н., Курбатова С.В.**.....27
 ТЕРМОДИНАМИКА ПАРООБРАЗОВАНИЯ ФЕНАНТРОЛИНОВОГО КОМПЛЕКСА ПИВАЛАТА КАДМИЯ $Cd_2Piv_4Phen_2$
- Каюмова Д. Б., Малкерова И.П., Мамонтова С.Н., Камкин Н.Н., Шмелев М.А., Сидоров А.А., Алиханян А.С.**.....28
 ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ НИТРАТОВ АЛИФАТИЧЕСКИХ СПИРТОВ
- Храповский Г.М., Чачков Д.В., Гарифзянова Г.Г., Д.Л. Егоров, А.Г. Шамов**.....29
 ИДЕНТИФИКАЦИЯ ВЗАИМОСВЯЗИ КЛЮЧЕВЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В АКТИВНЫХ ЦЕНТРАХ ФЕРМЕНТОВ И МАКРОСПИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРИ ГИДРОЛИЗЕ ЦЕФАЛОСПОРИНОВЫХ АНТИБИОТИКОВ МЕТАЛЛО- β -ЛАКТАМАЗОЙ
- Хренова М.Г., Кривицкая А.В., Цирельсон В.Г.**.....30
 ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛ 2-ГИДРОКСИТИОБЕНЗАМИДА И СРЕПТОЦИДА В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ
- Колесникова И.Н., Рыков А.Н., Шишков И.Ф.**.....31
 ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ ПИРАЗОЛОНАТНОГО КОМПЛЕКСА ТЕРБИЯ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ DFT РАСЧЕТОВ
- Королькова К.А., Белова Н.В., Пименов О.А.**.....32
 ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ ПИРАЗОЛОНАТНОГО КОМПЛЕКСА НЕОДИМА ПО РЕЗУЛЬТАТАМ DFT РАСЧЕТОВ
- Котова В.Е., Белова Н.В., Пименов О.А.**.....33
 ДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ КАК АЛЬТЕРНАТИВНЫЙ МЕТОД ОПИСАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ СОСТОЯНИЙ ОДНОЙ СИММЕТРИИ
- Козлов С.В.**.....34
 АВТОМАТИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ИОНИЗАЦИИ МОЛЕКУЛ ЭЛЕКТРОНАМИ ДЛЯ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ УСТАНОВКИ ПРИ ПОМОЩИ ПРОГРАММИРУЕМОГО ИСТОЧНИКА ПИТАНИЯ
- Краилов А.А., Дунаев А.М., Кудин Л.С.**.....35

| | |
|--|-----------|
| СОПОСТАВЛЕНИЕ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ЧАСТОТ, РАССЧИТАННЫХ МЕТОДАМИ ОПЕРАТОРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ ВАН ФЛЕКА И КОЛЕБАТЕЛЬНОГО САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ | |
| Краснощеков С.В. | 36 |
| РАСЧЕТ АНГАРМОНИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ МОЛЕКУЛЫ ДИБОРАНА МЕТОДОМ ОПЕРАТОРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ ЧЕТВЕРТОГО ПОРЯДКА | |
| Краснощеков С.В. | 37 |
| ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ РАСЧЕТОВ АНГАРМОНИЧЕСКИХ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ С ПОМОЩЬЮ ЧИСЛЕННО-АНАЛИТИЧЕСКОЙ РЕАЛИЗАЦИИ ОПЕРАТОРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ ВАН ФЛЕКА | |
| Краснощеков С.В., Степанов Н.Ф. | 38 |
| КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ DFT-ДЕСКРИПТОРЫ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ И РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ | |
| Крылов Е.Н., Вирзум Л.В. | 39 |
| МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНТАЛЬПИИ СУБЛИМАЦИИ ТЕТРАФЕНИЛПОРФИРИНА | |
| Кудин Л.С., Дунаев А.М., Моталов В.Б., Михеев Е.Н. | 40 |
| МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАЗИЗАМКНУТЫХ ЦИКЛОВ ОПТИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДОВ В МОЛЕКУЛАХ СОЕДИНЕНИЙ ТЯЖЁЛЫХ ЭЛЕМЕНТОВ | |
| Кудрин А.В., Зайцевский А.В., Исаев Т.А. | 41 |
| ИЗМЕНЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ И ЭНЕРГИИ ДИАЛАНИНА ПРИ ЕГО ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С ДИМЕРОМ ДОДЕЦИЛСУЛЬФАТА НАТРИЯ | |
| Курбатова М.С., Баранников В.П., Гиричева Н.И. | 42 |
| ТЕРМОДИНАМИКА ПРОЦЕССА СУБЛИМАЦИИ 5,10,15,20-ТЕТРАКИС(4'- ФТОРФЕНИЛ)ПОРФИНА | |
| Курочкин И.Ю., Краснов А.В., Погонин А.Е., Киселёв А.Н. | 43 |
| ИССЛЕДОВАНИЕ ИСПАРЕНИЯ ФОТОХРОМНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СПИРОПИРАНОВ МЕТОДОМ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ КНУДСЕНА | |
| Кузьмин Н.А., Дунаев А.М., Моталов В.Б., Кудин Л.С. | 44 |
| НЕЭМПИРИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ, РАДИАЦИОННЫХ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СМЕСЕЙ Rb-Ar И Cs-Ar | |
| Медведев А.А. | 45 |
| ВЛИЯНИЕ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭФФЕКТОВ НА РАДИАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ВОЗБУЖДЁННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ LiRb И LiCs | |
| Медведев А.А., Бормотова Е.А., Козлов С.В. | 46 |
| DFT-МОДЕЛИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР 3d-МЕТАЛЛОХЕЛАТОВ ОТКРЫТОГО И ЗАМКНУТОГО КОНТУРОВ С (N,N)-, (N,O)- И (N,S)- ЛИГАНДАМИ И СОЧЛЕНЕННЫМИ ХЕЛАТНЫМИ ЦИКЛАМИ | |
| Михайлов О.В., Чачков Д.В. ³ | 47 |
| КОЛЛЕКТИВНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ И ЭНЕРГЕТИКА БИОМОЛЕКУЛ | |
| Митин А. В. | 48 |
| ПИВАЛАТЫ МЕДИ(I) И ПАЛЛАДИЯ(II): СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПРОЦЕССОВ С ИХ УЧАСТИЕМ | |
| Морозова Е.А., Столяров И.П., Малкерова И.П., Хорошилов А.В., Алиханян А.С. | 49 |
| НЕЭМПИРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЫ ДИФТОРИДА МЕДИ В ОСНОВНОМ И НИЗШИХ ВОЗБУЖДЁННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЯХ | |
| Наваркин И.С., Соломоник В.Г., Смирнов А.Н. | 50 |
| КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ БИЯДЕРНЫХ КАРБОКСИЛАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ НИКЕЛЯ(II) С ТЕРМИНАЛЬНЫМИ АЗОТСОДЕРЖАЮЩИМИ ЛИГАНДАМИ | |
| Никифоров А.А., Блинов Д.О., Еремин А.В., Панина Н.С., Беляев А.Н. | 51 |

| | |
|--|-----------|
| ГЕОМЕТРИЯ И ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ НИТРОТОЛУОЛОВ В ГАЗООБРАЗНОМ СОСТОЯНИИ ПО ДАННЫМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ | |
| Николаева Е.В., Чачков Д.В., Шамов А.Г., Храпковский Г.М. | 52 |
| ОСОБЕННОСТИ КОЛЛЕКТИВНЫХ ДВИЖЕНИЙ В ВОДОРОДНО-СВЯЗАННЫХ СИСТЕМАХ | |
| Новаковская Ю.В. | 53 |
| НОВОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ О СТРУКТУРЕ ВРАЩАТЕЛЬНО-КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА СВОБОДНОЙ СИСТЕМЫ ЧАСТИЦ | |
| Новосадов Б.К. | 54 |
| РАЗВИТИЕ РЕЛЯТИВИСТСКОГО МЕТОДА СВЯЗАННЫХ КЛАСТЕРОВ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ С НЕСКОЛЬКИМИ ОТКРЫТЫМИ ОБОЛОЧКАМИ | |
| Олейниченко А.В., Зайцевский А.В., Элиав Э. | 55 |
| КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ДИФЕНИЛСУЛЬФИДОВ | |
| Пашенко К.П., Бурмистрова Д.А., Сенкевич М.А. | 56 |
| THE SOME CASES OF METALLOPHILIC INTERACTION IN THE GAS PHASE | |
| Pimenov O.A., Berger R.J.F., Sliznev V.V. | 57 |
| ВЛИЯНИЕ ДВИЖЕНИЯ ЛЮТЕИНА НА НЕФОТОХИМИЧЕСКОЕ ТУШЕНИЕ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ В КОМПЛЕКСЕ LHCII РАСТЕНИЙ | |
| Поддубный В.В., Козлов М.И. | 58 |
| ПОЛУЧЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ КРИВЫХ И МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ СПИНОРБИТАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ СОСТОЯНИЙ $A^1\Sigma$ И $b^3\Pi$ МОЛЕКУЛЫ K_2 | |
| Поляев А.В. | 59 |
| СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ФЛАВОНОИДОВ | |
| Пулин В.Ф., Суринская Т. Ю., Рыжова Е. В. | 60 |
| КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ СОПРЯЖЁННО-ЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ | |
| Пулин В.Ф., Суринская Т. Ю., Рыжова Е. В. | 61 |
| СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ШЕСТИЧЛЕННЫХ ЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ | |
| Пулин В.Ф., Суринская Т. Ю., Рыжова Е. В. | 62 |
| МЕТОД НАХОЖДЕНИЯ ПЕРЕХОДНЫХ СОСТОЯНИЙ ПРИ СКЕЛЕТНЫХ ТРАНСФОРМАЦИЯХ ЦИКЛООКТОТЕТРАЕНА | |
| Родин Е.А., Томилин О.Б., Родионова Е.В., Фомина Л.В. | 63 |
| МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛОЕВ ЛЕНГМЮРА НА ОСНОВЕ ДИФИЛЬНЫХ БЕТА-ДИКЕТОНОВ | |
| Руднов П.С., Бузько В.Ю., Соколов М.Е., Панюшкин В.Т. | 64 |
| ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ БИЯДЕРНЫХ АЦЕТИЛАЦЕТОНАТОВ ДИФТОРИДА БОРА С СУЛЬФИДНОЙ, ДИСУЛЬФИДНОЙ И ДИСЕЛЕНИДНОЙ ГРУППАМИ | |
| Самойлов И.С., Тихонов С.А., Свистунова И.В., Борисенко А.В., Вовна В.И. | 65 |
| ГЕКСАФТОРОСИЛИКАТЫ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С НИКОТИНАМИДОМ: СИНТЕЗ, ИК-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ | |
| Санникова В.А. | 66 |
| КОНФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА И МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА КРЕМНИЙОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ | |
| Шлыков С.А., Кузьмина Л.Е., Чан Динь Фиен | 67 |
| НЕОРГАНИЧЕСКИЕ АССОЦИАТЫ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ | |
| Шугуров С.М., Лопатин С.И., Панин А.И. | 68 |
| ИССЛЕДОВАНИЯ МЕХАНОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СОЕДИНЕНИЙ $LN(NO_3)_3(NMPA)_3$ ($LN = SM, EU$) МЕТОДАМИ РФЭС И ТФП | |
| Вовна В.И., Шурыгин А.В., Короченцев В.В. | 69 |

| | |
|---|----|
| ФОТОЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА БОРФТОРИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ ДИПИРРОЛИЛМЕТЕНА С ОРГАНИЧЕСКИМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ Сидорин А.Е., Тихонов С.А. | 70 |
| ФОТОЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ФОРМАЗАНАТОВ БОРА С АРОМАТИЧЕСКИМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ Сидорин А.Е., Тихонов С.А., Самойлов И.С., Борисенко А.В., Вовна В.И. | 71 |
| СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ NbX ₄ (X=Cl, Br, I): КВАНТОВАЯ ХИМИЯ И ЭЛЕКТРОНОГРАФИЯ Слизнев В.В. | 72 |
| ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТА ЯНА-ТЕЛЛЕРА В МОЛЕКУЛАХ NbBr ₄ И NbI ₄ Слизнев В.В., Смородин С.В. | 73 |
| ВЫСОКОТОЧНОЕ ОПИСАНИЕ СВОЙСТВ СОЕДИНЕНИЙ ТРАНСУРАНОВЫХ ЭЛЕМЕНТОВ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ: МОЛЕКУЛЫ AmO И AmO ⁺ Смирнов А.Н., Соломоник В.Г. | 74 |
| ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ПРИЧИНЫ КАЖУЩИХСЯ ПАРАДОКСОВ В ЭНЕРГЕТИКЕ РАКЕТНЫХ ТОПЛИВ НА БАЗЕ ГАЛОГЕНСОДЕРЖАЩИХ ОКИСЛИТЕЛЕЙ И МЕТАЛЛОВ Согласнова С.И., Лемперт Д.Б. | 75 |
| ТЕРМОДИНАМИКА ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ И ЭКОЛОГИИ Столярова В.Л. | 76 |
| СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКИЙ МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА ОКИСЛЕНИЯ ОКСИДА МОЛИБДЕНА (VI) Суровая В.Э. | 77 |
| СТРОЕНИЕ И ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА НЕЖЕСТКИХ МОЛЕКУЛ. СОЧЕТАНИЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ Тарасов Ю.И., Кочкиков И.В. | 78 |
| СПЕКТР ВОЗБУЖДЕНИЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ И СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛЫ 2-МЕТИЛПРОПАНАЛЯ В S ₁ ВОЗБУЖДЕННОМ ЭЛЕКТРОННОМ СОСТОЯНИИ Р.В. Терентьев, И.А. Годунов, Д.В. Маслов, Н.Н. Яковлев, В.А. Батаев, А.В. Абраменков | 79 |
| ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ γ-ЗАМЕЩЕННЫХ АЦЕТИЛАЦЕОНАТОВ ДИФТОРИДА БОРА Тихонов С.А., Самойлов И.С., Крауклис И.В., Свистунова И.В., Вовна В.И. | 80 |
| ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ ИЗОМЕРНЫХ АЦЕТИЛНАФТОЛЯТОВ ДИФТОРИДА БОРА Тихонов С.А., Федоренко Е.В., Мирочник А.Г., Осьмушко И.С., Скитневская А.Д., Трофимов А.Б., Вовна В.И. | 81 |
| DFT STUDY OF INTERACTIONS BETWEEN HYDROXAMIC ACIDS AND HISTONE DEACETYLASES Toshev N., Cheshmedzhieva D., Dudev T. | 82 |
| КВАНТОВО-ТОПОЛОГИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ: ФАКТЫ, МИФЫ, ПЕРСПЕКТИВЫ Цирельсон В.Г. | 83 |
| КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИИ ГОМОЛИЗА КУМИЛГИДРОПЕРОКСИДА Туровский Н.А., Туровская М.К., Дорошкевич В.С., Павленко Р.Р. | 84 |
| РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НЕЖЕСТКИХ СОЕДИНЕНИЙ Туровцев В.В., Каплунов И.А., Орлов Ю.Д. | 85 |

| | |
|---|-----|
| ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИКИ СУБЛИМАЦИИ L-ПРОЛИНА И ЕГО ГИДРОКСИПРОИЗВОДНЫХ | |
| Тюнина В.В., Краснов А.В., Гиричев Г.В., Дунаев А.М. | 86 |
| КОНФОРМАЦИИ КАТИОНА ЦИПРОФЛОКСАЦИНА: ГАЗОФАЗНЫЕ РАСЧЁТЫ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ | |
| Васильев Н.А., Воронин А.П., Суров А.О. | 87 |
| ВИБРОННЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МОЛЕКУЛЕ $CeCl_3$ | |
| Васильев О.А., Соломоник В.Г. | 88 |
| ВОДОРОДНЫЕ СВЯЗИ N-H...O В МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛАХ АМИНОКИСЛОТ | |
| Волкова Т.Г., Таланова И.О. | 89 |
| ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГАФНАТОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ: МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ | |
| Ворожцов В.А., Столярова В.Л., Лопатин С.И.,..... | 90 |
| ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РЯДА АДДУКТОВ ХЕЛАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ R ₃ E | |
| Вовна В.И., Шурыгин А.В., Короченцев В.В. | 91 |
| МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗБУЖДЕННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛ РЕЛЯТИВИСТСКИМ МЕТОДОМ СВЯЗАННЫХ КЛАСТЕРОВ: НОВЫЕ ПЕРСПЕКТИВЫ | |
| Зайцевский А.В., Скрипников Л.В., Элиав Э. | 92 |
| МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА ДИКАРБАГЕМИПОРФИРАЗИНАТОВ НИКЕЛЯ И ЦИНКА ПО ДАННЫМ DFT-РАСЧЕТОВ | |
| Мерлян А.П., Веретенников В.В. | 93 |
| ЭФФЕКТЫ C-C И C-N СВЕРХСОПРЯЖЕНИЯ В МОЛЕКУЛЕ АЦЕНАФТЕНА ПО ДАННЫМ NBO-АНАЛИЗА | |
| Отлётов А.А., Гиричев Г.В. | 94 |
| СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛЫ MoF_5 : ЭФФЕКТ ЯНА-ТЕЛЛЕРА И СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ | |
| Слизнев В.В., Пименов О.А. | 95 |
| МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА И АРОМАТИЧНОСТЬ ТИАДИАЗОЛ-АННЕЛИРОВАННОГО ГЕМИГЕКСАФИРАЗИНА И ГЕТЕРОАЗАПОРФИРИНОИДА | |
| Веретенников В.В., Мерлян А.П., Отлётов А.А., Жабанов Ю.А. | 96 |
| ПОЛУКЛАССИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА МОДЕЛЬНЫХ СИСТЕМ: ПРИМЕНЕНИЕ ГАУССОВЫХ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ | |
| Парамонов Н. А., Новаковская Ю. В. | 97 |
| ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ ДВУХАТОМНЫХ СОЕДИНЕНИЯ АРГОНА | |
| Мальцев М.А., Морозов И.В., Осина Е.Л. | 98 |
| КОНФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛЫ 4-МЕТИЛПИРИДИН-N-ОКСИДА с BF_3 (BF_3 - PuO - CH_3) | |
| Воеводина Е.А., Белова Н.В., Слизнев В.В. | 99 |
| ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИСТЕМ BaO - CeO_2 И CeO_2 - ZrO_2 ПО ДАННЫМ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ | |
| С.И. Лопатин, С.М. Шугуров | 100 |
| ДИНАМИКА ЯДЕР И ЭЛЕКТРОНОВ В СВОБОДНЫХ МОЛЕКУЛАХ И КОНДЕНСИРОВАННОМ ВЕЩЕСТВЕ | |
| Ищенко А.А. | 101 |
| ВЛИЯНИЕ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ НА ПРОТОНОДОНОРНЫЕ СВОЙСТВА <i>ОРТО</i> -ДИСУЛЬФО- И ДИКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ БЕНЗОЛА | |
| Федоров М.С., Иванов С.Н., Игнатова А.В., Гиричева Н.И. | 102 |
| ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ В ИГХТУ | |
| Кудин Л.С. | 103 |