

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.

ДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ КАК АЛЬТЕРНАТИВНЫЙ МЕТОД ОПИСАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ СОСТОЯНИЙ ОДНОЙ СИММЕТРИИ

Козлов С.В.

Химический факультет Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, Ленинские горы д1, стр3, г. Москва, Россия, sevlakoz@phys.chem.msu.ru

Прецизионное описание энергетических и радиационных характеристик электронновозбуждённых состояний невозможно без учёта внутримолекулярных взаимодействий. Вследствие высокой плотности электронных термов в ряде случаев оказываются значимыми взаимовозмущения состояний одной пространственной и спиновой симметрии, что в адиабатическом приближении приводит к непересечению функций потенциальной энергии. Радиальный матричный элемент взаимодействия (т.н. R-coupling) в этом случае имеет, как правило, форму, близкую к лоренцовой, что создаёт дополнительные трудности при решении обратной спектроскопической задачи. Альтернативным подходом для описания взаимодействующих состояний является диабатическое приближение, в рамках которого взаимодействие описывается матричным элементом электростатического взаимодействия, характеризующимся гладкой зависимостью от межъядерного расстояния[1].

В данной работе рассмотрены взаимодействующие комплексы состояний одной симметрии: $2\sim 3^3\Sigma^+$ молекулы KCs, $3\sim 4^1\Sigma^+$ молекулы NaRb и $1\sim 2^1\Pi$ молекулы KRb. Для данных молекул в рамках высокоточного неэмпирического расчёта рассчитаны функции потенциальной энергии, электронные дипольные моменты переходов и матричные элементы неадиабатического взаимодействия в адиабатическом приближении. Для трансформации функций в диабатическое представление использовано унитарное преобразование, параметры которого также вычислены из первых принципов. Установлено, что диабатическое представление позволяет получить функции потенциальной энергии, а также собственные и переходные матричные элементы, характеризующиеся более гладкой зависимостью от межъядерного расстояния. Продемонстрирована эффективность данного подхода для решения обратной спектроскопической задачи для систем сильно взаимодействующих состояний.

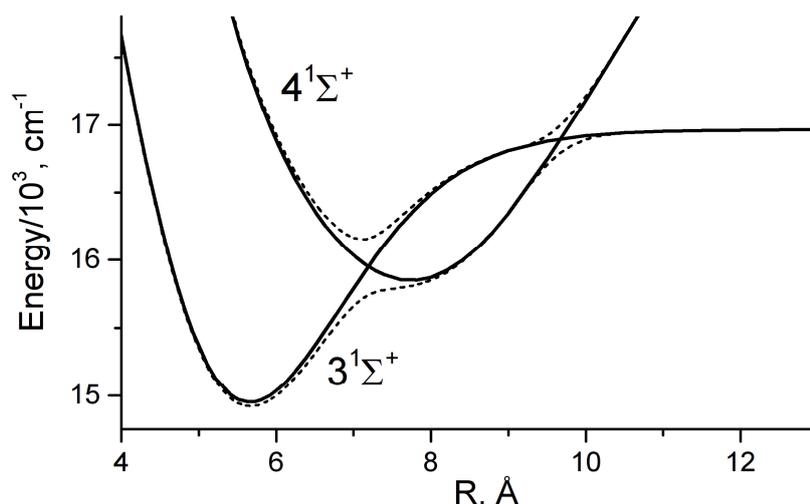


Рисунок 1. Функции потенциальной энергии для 3 и $4^1\Sigma^+$ состояний молекулы NaRb в адиабатическом (пунктирная кривая) и диабатическом (сплошная кривая) представлениях.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант РФФИ 16-03-00529).

1. Lefebvre-Brion H. and Field R.W., The Spectra and Dynamics of Diatomic Molecules: Revised and Enlarged Edition, Academic Press, 2004

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	
Дорофеенко 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., Сморгчов 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 СТРЕПТОЦИДА 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 ВОЗБУЖДЕННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЯХ	
Наваркин И.С., Соломоник В.Г., Смирнов А.Н.	50
КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ БИЯДЕРНЫХ КАРБОКСИЛАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ НИКЕЛЯ(II) С ТЕРМИНАЛЬНЫМИ АЗОТСОДЕРЖАЩИМИ 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 РЗЭ	
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