

XI Всероссийская молодежная школа-конференция

Квантово-химические расчеты: структура и реакционная способность органических и неорганических молекул



Сборник материалов конференции

г. Иваново, ФГБОУ ВО "Ивановский государственный
химико-технологический университет"

11 ноября 2024 г. – 15 ноября 2024 г.

XI Всероссийская молодежная школа-конференция «Квантово-химические расчеты: структура и реакционная способность органических и неорганических молекул»

Материалы XI Всероссийской молодежной школы-конференции «Квантово-химические расчеты: структура и реакционная способность органических и неорганических молекул» (11 – 15 ноября 2024 г.), Иваново, 2024, 279 с.

Ответственные за выпуск:

д.х.н., проф. Гиричев Г.В.

д.х.н., доц. Жабанов Ю.А.

Тезисы публикуются в авторской редакции

© ФГБОУ ВО «Ивановский государственный
химико-технологический университет», 2024

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАВНОВЕСНОЙ СТРУКТУРЫ 3-АМИНО-4-ЦИАНО-1,2,5-ОКСАДИАЗОЛ-2-ОКСИДА

Лобанов Н.В.^{1,2}, Степанова А.В.¹, Шишков И.Ф.¹

¹ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва

² Объединённый институт высоких температур РАН, Москва

Lnw94@yandex.ru

Оксадiazольные циклы имеют высокую энтальпию образования и довольно стабильны. Указанная особенность делает этот класс соединений перспективной основой для создания высокоэнергетических материалов [1-3]. Аминооксадiazолы являются удобным органическим агентом для последующего синтеза нитрооксадiazолов: как показала практика, введение нитрогруппы в оксадiazольное кольцо ведёт к повышению плотности и детонационных параметров получаемых производных [4]. Недостатками многих соединений этого ряда с точки зрения практического применения являются низкая термическая и химическая устойчивость, а также чувствительность к механическим воздействиям [5].

3-амино-4-циано-1,2,5-оксадiazол-2-оксид (3-амино-4-цианофуроксан, АЦФО) также тщательно изучается из-за его широкого применения в качестве функционального фрагмента в синтезе различных энергетических материалов [6,7]. Следует отметить, что информация о термических, безопасных и энергетических свойствах нитро-, циано- и метилфуроксанов остается весьма ограниченной. В то же время исчерпывающие данные о разнообразном наборе этих соединений и углубленных взаимосвязях между структурой и свойствами важны для целенаправленного и ориентированного на разнообразие синтеза новых перспективных энергетических материалов.

Цель данной работы - определить равновесную структуру молекулы АЦФО в отсутствие межмолекулярных взаимодействий с помощью квантово-химических расчётов, а также сопоставить полученные результаты с литературными данными по экспериментальному определению молекулярной структуры ряда родственных соединений.

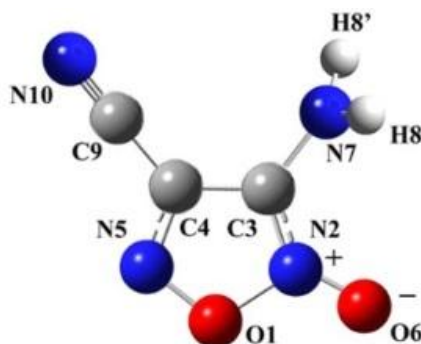


Рисунок 1. Номера атомов в молекуле 3-амино-4-циано-1,2,5-оксадiazол-2-оксида

Квантово-химические расчеты проводили с использованием комплекса программ Gaussian 09 [8] методом теории функционала плотности с функционалом B3LYP [9, 10] и теории возмущений MP2 [11] с корреляционно согласованными базисными наборами 6-31G(d,p) [12], cc-pVTZ [13] и aug-cc-pVTZ [14]. Также проведен расчет методом CCSD(T) [15] с базисным набором 6-31G(d,p). Для определения равновесных параметров АЦФО была выполнена полная оптимизация геометрии и расчёт частот колебаний. Нумерация атомов в исследуемой молекуле приведена на рисунке 1. Надёжность, которая может быть достигнута с помощью квантово-химических расчетов, зависит от правильного учета электронной корреляции и полноты набора базисных функций [16].

В таблице 1 приведены оптимизированные равновесные параметры 3-амино-4-цианофуроксана (АЦФО).

Таблица 1. Структурные параметры 3-амино-4-цианофуроксана

Параметр	B3LYP			MP2			CCSD(T)
	/6-31G(d,p)	/cc-pVTZ	/aug-cc-pVTZ	/6-31G(d,p)	/cc-pVTZ	/aug-cc-pVTZ	/6-31G(d,p)
r _e (O1–N2)	1.480	1.475	1.471	1.477	1.451	1.450	1.434
r _e (N2=C3)	1.330	1.324	1.323	1.364	1.359	1.358	1.323
r _e (C3–C4)	1.423	1.419	1.420	1.395	1.388	1.388	1.423
r _e (C4=N5)	1.322	1.315	1.314	1.351	1.347	1.348	1.315
r _e (O1–N5)	1.345	1.339	1.340	1.365	1.354	1.356	1.364
r _e (N2–O6)	1.230	1.223	1.225	1.220	1.210	1.212	1.241
r _e (C4–C9)	1.424	1.419	1.419	1.424	1.418	1.418	1.436
r _e (C9≡N10)	1.162	1.151	1.151	1.184	1.174	1.174	1.167
r _e (N7–H8)	1.014	1.008	1.007	1.011	1.009	1.010	1.011
A(O1–N2–C3)	105.9	106.0	106.1	105.6	106.0	106.1	107.6
A(N2–C3–C4)	106.7	106.6	106.6	106.6	106.3	106.4	105.8
A(C3–C4–N5)	111.7	111.6	111.6	113.0	112.7	112.6	111.7
A(O1–N5–C4)	107.1	107.3	107.3	105.6	105.6	105.5	106.4
A(N2–O1–N5)	108.6	108.4	108.4	109.0	109.4	109.4	108.5
A(O1–N2–O6)	120.9	120.6	120.6	121.2	121.3	121.4	119.9
A(C3–N2–O6)	133.2	133.4	133.2	133.1	132.7	132.5	132.5
A(N2–C3–N7)	121.6	121.7	121.7	120.0	119.5	119.4	122.0
A(C4–C3–N7)	131.6	131.6	131.6	132.9	134.0	134.0	131.8
A(C4–C9–N10)	176.5	176.1	176.0	177.2	176.6	176.1	177.1
A(C3–N7–H8)	115.7	116.0	116.6	113.4	113.5	114.3	113.6
A(H8–N7–H8')	114.1	114.1	114.8	111.1	111.8	112.8	111.3
D(O1–N2–C3–C4)	-0.6	-0.5	-0.4	0.4	-0.3	-0.2	0.0
D(N2–O1–N5–C4)	-1.0	-0.7	-0.6	-1.8	-0.8	-0.6	-1.4
D(C3–C4–N5–O1)	0.6	0.4	-0.6	2.1	0.7	0.5	1.5
D(O1–N5–C4–C9)	-0.3	-0.3	-0.3	-0.4	-0.1	-0.2	-0.4
D(C3–N7–H8–H8')	135.2	136.4	139.3	127.0	128.3	131.1	127.0

Длины связей даны в Å, величины углов – в градусах.

В данной работе также проведено сравнение структурных параметров 3-амино-4-цианофуроксана с геометрией близких по строению соединений, а именно 3,4-дицианофуроксаном, 3-метил-4-нитрофуроксаном и 4-метил-3-нитрофуроксаном, которые были определены с помощью метода газовой электронографии (ГЭ) в работах [17][18]. Результаты приведены в таблице 2.

Наилучшее согласие с экспериментальными данными показал уровень теории CCSD(T)/6-31G(d,p). Он воспроизводит результаты ГЭ в пределах погрешности эксперимента. Наибольшие различия наблюдаются в значениях длин связей N2–O6 и C3–N7 (примерно на 0,04 Å). Все остальные различия между сравниваемыми связями имеют ещё меньшую величину, лежащую в пределах от 0,01 Å до 0,03 Å. Если обратить внимание на валентные и тор-

сионные углы, то максимальная разница между результатами вычислительного эксперимента для 3-амино-4-цианофуроксана и газовой электронографии для 3,4-дицианофуроксана не превышает 2,5°.

Таблица 2. Сравнение структурных параметров 3-амино-4-цианофуроксана, дицианофуроксана, 3-метил-4-нитрофуроксана и 4-метил-3-нитрофуроксана

Параметр	3-амино-4- цианофуроксан CCSD(T)/6- 31G(d,p)	3,4- дицианофуроксан ГЭ [17]	3-метил-4- нитрофуроксан ГЭ [18]	4-метил-3- нитрофуроксан ГЭ [18]
r _e (O1–N2)	1.434	1.459(5)	1.462(9)	1.382(6)
r _e (N2=C3)	1.323	1.331(3)	1.333(9)	1.307(6)
r _e (C3–C4)	1.423	1.419(2)	1.414(9)	1.422(6)
r _e (C4=N5)	1.315	1.299(3)	1.304(9)	1.340(6)
r _e (O1–N5)	1.364	1.367(5)	1.354(9)	1.429(6)
r _e (N2–O6)	1.241	1.199(4)	1.215(9)	1.205(6)
r _e (C3–N7)	1.436	1.399(2)	1.488(9)	1.488(6)
A(O1–N2–C3)	107.6	105.0(4)	107.2(5)	107.5(3)
A(N2–C3–C4)	105.8	107.1(6)	104.6(5)	109.2(3)
A(C3–C4–N5)	111.7	111.7(3)	113.9(5)	109.2(3)
A(O1–N5–C4)	106.4	107.9(3)	106.1(10)	104.7(4)
A(N2–O1–N5)	108.5	108.8(3)	108.1(10)	109.4(5)
A(O1–N2–O6)	119.9	119.3(6)	118.1(6)	118.6(3)

Длины связей даны в Å, величины углов – в градусах.

Таким образом, наилучшее согласие с экспериментальной структурой получено на уровне теории CCSD(T)/6-31G(d,p), тогда как функционалы B3LYP оказались менее точными для описания молекулярной структуры 3-амино-4-цианофуроксана.

Показано, что присутствие только одной цианогруппы в качестве заместителя вызывает искажение геометрии исследуемой молекулы по сравнению с 3,4-дицианофуроксаном.

Выявлены также отличия молекулярной структуры АЦФО от структур родственных соединений.

Полученная информация о молекулярном строении свободного АЦФО, а также о подходящих теоретических методах может оказаться полезной для дальнейших структурных исследований соединений, содержащих фуроксановые фрагменты.

Авторы выражают благодарность и отмечают, что работа выполнена в рамках работ по теме № 121031300090-2 гос. задания «Молекулярное строение и надмолекулярная организация индивидуальных веществ, гибридных и функциональных материалов»; Н.В. Лобанов выражает благодарность и также отмечает, что данная работа выполнена в рамках государственного задания ОИВТ РАН на 2024 год № 075-00270-24-00 от 27.12.2023 г.

Список литературы

1. J. of Org. Chem. 1965, 30, 1854, doi:10.1021/jo01017a034
2. Advan. in Heter. Chem. 2001, 78, 65-188, doi:10.1016/S0065-2725(01)78003-8
3. Russ. Chem. Rev. 2013, 82, 1007-1033, doi:10.1070/RC2013v082n11ABEH004369
4. Chin. J. of Org. Chem. 2009, 29, 798-801
5. Russ. Chem. Rev. 2020, 89(1), 1–54, doi:10.1070/RCR4908
6. ChemPlusChem. 2020, 85, 237–239, doi:10.1002/cplu.201900710
7. Sci. Rep. 2019, 9, 4321, doi:10.1038/s41598-019-39723-z

8. Gaussian 09, Revision A.02, M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A. Marenich, J. Bloino, B.G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H.P. Hratchian, J.V. Ortiz, A.F. Izmaylov, J.L. Sonnenberg, D. Williams-Young, F. Ding, F. Lipparini, F. Egidi, J. Goings, B. Peng, A. Petrone, T. Henderson, D. Ranasinghe, V.G. Zakrzewski, J. Gao, N. Rega, G. Zheng, W. Liang, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, K. Throssell, J.A. Montgomery, Jr., J.E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J.J. Heyd, E. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, J.M. Millam, M. Klene, C. Adamo, R. Cammi, J.W. Ochterski, R.L. Martin, K. Morokuma, O. Farkas, J.B. Foresman, and D.J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.
9. Phys. Rev. A. 1988, 38(6), 3098–3100, doi:10.1103/physreva.38.3098.
10. Phys. Rev. B. 1988, 37, 785, doi:10.1103/PhysRevB.37.785
11. Chr. Møller, M.S. Plesset, Note on an Approximation Treatment for Many-Electron Systems, Physical Review, (1934), 46, p. 618, doi:10.1103/PhysRev.46.618.
12. J. Chem. Phys. 1988, 89(4), 2193–2218. doi:10.1063/1.455064
13. J. Chem. Phys. 1989, 90(2), 1007–1023. doi:10.1063/1.456153
14. J. Chem. Phys. 1992, 96(9), 6796–6806. doi:10.1063/1.462569
15. J. Chem. Theory Comput. 2009, 5(10), 2687–2693, doi:10.1021/ct900260g
16. Helgaker, P. Jørgensen and J. Olsen. Molecular Electronic Structure Theory, Wiley, Chichester, 2000.
17. Chem. Phys. Lett. 2023, 829, 140770, doi:10.1016/j.cplett.2023.140770
18. J. of Mol. Struct. 2020, 128856, doi:10.1016/j.molstruc.2020.128856.

Содержание

ПРИМЕНЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА МОРЗЕ В РАСЧЕТАХ ЭНЕРГИИ ДИССОЦИАЦИИ СВЯЗЕЙ ГУМИНОВОЙ КИСЛОТЫ <i>Ананичева С.А., Зеленцов С.В., Герасимова Э.В., Крапивницкая Т.О., Алыева А.Б., Песков Н.Ю., Глявин М.Ю.</i>	5
МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ И СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПРОИЗВОДНЫХ ЗАМЕЩЕННЫХ ТЕТРАГИДРОТИОФЕНА С РАЗВЕТВЛЕННОЙ СЕТКОЙ ВОДОРОНЫХ СВЯЗЕЙ <i>Антонюк А.В., Юшина И.Д.</i>	8
ПРОЯВЛЕНИЕ ИЗОМЕРИИ И ВОДОРОДНОЙ СВЯЗИ В ИК СПЕКТРАХ КРЕЗОЛА <i>П. И. Алексюнина, Л.М. Бабков, Н.А. Давыдова, И.В. Ивлиева (Перетоккина), М.А. Молькова.</i>	9
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИИ ЖИДКОФАЗНОГО ГИДРИРОВАНИЯ 5-НИТРОСАЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ <i>Балагадашова И.Д., Магдалинова Н.А., Ключев М.В.</i>	13
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ СТЕКОЛ $Bi_2O_3 - V_2O_5 - BaO$ ДЛЯ АДДИТИВНОЙ ТЕХНОЛОГИИ МИКРООПТИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВ <i>Балуева К.В., Плехович А.Д., Кутыин А.М., Плехович С.Д., Будруев А.В., Кошкина М.Е., Шумовская К.Ф.</i>	16
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ И АНАЛИЗ БИОХИМИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ДИФЕНИЛАМИНХЛОРАРСИНА <i>Балхаева К.С.</i>	18
ЭТИ КОВАРНЫЕ ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ, ИЛИ НАСКОЛЬКО ВЕРНЫ НАШИ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ О ПОТЕНЦИАЛАХ ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ <i>Батаев В.А.</i>	22
ВЛИЯНИЕ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНОЙ ВОДОРОДНОЙ СВЯЗИ НА ФОТОФИЗИКУ МОДИФИЦИРОВАННОГО ХРОМОФОРНОГО АНИОНА GFP <i>Белецан О.Б., Боченкова А.В.</i>	23
ОЦЕНКА НЕКОТОРЫХ СВОЙСТВ СОЕДИНЕНИЙ, ПОТЕНЦИАЛЬНО ПРИМЕНИМЫХ ДЛЯ ИНГИБИРОВАНИЯ БЕЛКА SOS1 С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ КВАНТОВОЙ ХИМИИ <i>Беликова А.А., Кованова М.А., Белова Н.В.</i>	25
ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА ПРИСОЕДИНЕНИЯ $TMSCl$ К ТИОХРОМАМ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ХИМИИ <i>Бетехтин А.А.</i>	29
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПУТЕЙ ОБРАЗОВАНИЯ И ОКИСЛЕНИЯ РАДИКАЛОВ БЕНЗАЛЬДЕГИДА И ИХ ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА <i>Болдин А.А., Бородин О.С., Барташевич Е.В.</i>	33
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФЕНИЛАЦЕТАТА С ДИПЕПТИДАМИ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ <i>Бондарь В.В., Кочетова Л.Б., Кустова Т.П.</i>	35
КВАНТОВАЯ ФОТОХИМИЯ БИОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ ПРИ ЛИНЕЙНОМ И НЕЛИНЕЙНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ <i>Боченкова А.В.</i>	39

АНАЛИЗ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТЫ С ВОДОЙ	
<i>Брыксин К.А., Пластун И.Л., Бабков Л.М., Майорова О.А.</i>	40
ВЛИЯНИЕ ОКРУЖЕНИЯ НА ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ КОМПЛЕКСОВ С ВОДОРОДНОЙ СВЯЗЬЮ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРИДИНА И АРОМАТИЧЕСКИХ СУЛЬФОКИСЛОТ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ	
<i>Булавина А.С., Филиппов А.А., Федоров М.С.</i>	44
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ЗВЕЗДООБРАЗНЫХ МЕЗОГЕННЫХ ЛЮМИНОФОРОВ С ФРАГМЕНТАМИ ОКСАДИАЗОЛА	
<i>Бумбина Н.В., Акопова О.Б., Жарникова Н.В., Смирнова А.И., Усольцева Н.В.</i>	47
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СТАБИЛЬНОСТИ НАНОКЛАСТЕРОВ, ПРЕДСТАВЛЯЮЩИХ ИНТЕРЕС ДЛЯ СОЗДАНИЯ НОВЫХ ЭНЕРГОЕМКИХ МАТЕРИАЛОВ	
<i>Ванеева Е.Е., Лепешкин С.В., Оганов А.Р.</i>	51
ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЯРНОГО КРИСТАЛЛА ЛЕЙЦИНА	
<i>Волкова Т.Г., Таланова И.О.</i>	53
СТРУКТУРООБРАЗУЮЩИЕ МОТИВЫ, ПОЛИМОРФИЗМ И ОСОБЕННОСТИ КР- СПЕКТРОВ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ СОЛЕЙ АНТИДЕПРЕССАНТА РАЗАГИЛИНА	
<i>Дрозд К.В., Венер М.В., Воронин А.П., Перлович Г.Л.</i>	56
МАСС-СПЕКТРЫ ЭЛЕКТРОННОГО УДАРА ГЕМИПОРФИРАЗИНА КОБАЛЬТА: ЭКСПЕРИМЕНТ И ТЕОРИЯ	
<i>Вьялкин Д.А., Рыжов И.В., Ерошин А.В., Жабанов Ю.А., Исляйкин М.К.</i>	58
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ МОЛЕКУЛ ОКСОХЛОРИДОВ МЕТАЛЛОВ VI В ГРУППЫ	
<i>Гаджимурадов С. Г., Сулейманов С. И., Абдулагатов И. М., Абдулагатов А. И.</i>	61
КОМПЛЕКСЫ ЗОЛОТА(III) С ГИДРАЗОНАМИ ВИТАМИНА В ₆ И АРОМАТИЧЕСКИХ КАРБОГИДРАЗИДОВ: СТРОЕНИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ ПО ДАННЫМ КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ	
<i>Гамов Г.А., Пименов О.А.</i>	62
ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА МЕТАЛЛ-КИСЛОРОД В ЛИТИЙ- ОБОГАЩЕННЫХ СЛОИСТЫХ ОКСИДАХ С ОКИСЛЕННОЙ АНИОННОЙ ПОДРЕШЕТКОЙ	
<i>Говоров Д.Н., Боев А.О., Аксенов Д.А.</i>	63
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕРОВ ТИАЗОЛО[3,2- с]ХИНАЗОЛИНИЯ, ОБРАЗОВАННЫХ ПРИ ЭКЗО- И ЭНДОЦИКЛИЗАЦИИ	
<i>Григорьева Е.А., Бахтеева Е.И., Большаков О.И., Барташевич Е.В.</i>	64
О ПРИРОДЕ СВЯЗИ АЗОТ-ЦЕНТРАЛЬНЫЙ АТОМ В МАКРОГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЯХ НЕМЕТАЛЛОВ	
<i>Даниленко А.А., Лазовский Д.А., Стужин П.А.</i>	66
МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИНИХ TADF ФЛУОРОФОРОВ НА ОСНОВЕ Cz-TRZ И ОЦЕНКА ИХ СТАБИЛЬНОСТИ	
<i>Дубинец Н.О., Сосоров А.Ю.</i>	67
ДИАМИН-АЦЕТИЛАЦЕТОНАТНЫЕ КОМПЛЕКСЫ ДИВАЛЕНТНЫХ МЕТАЛЛОВ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ	
<i>Евсеев Г.С., Крючкова Н.А., Викулова Е.С.</i>	68

КОНФОРМАЦИОННОЕ РАЗНООБРАЗИЕ ПРОИЗВОДНЫХ ПИПЕРИДИНА <i>Ерошин А.В., Шлыков С.А.</i>	71
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НУКЛЕОФИЛЬНОЙ АТАКИ НА η^3 - АЛЛИЛЬНЫЕ КОМПЛЕКСЫ ПАЛЛАДИЯ <i>Ершов В.В., Ткаченко О.Ю.</i>	75
ТЕРМОДИНАМИКА СУБЛИМАЦИИ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ КОМПЛЕКСА ЭТИОПОРФИРИНА-III С ВАНАДИЛОМ <i>Жабанов Ю.А., Ерошин А.В., Пахомов Г.Л.</i>	78
АНАЛИЗ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЯНТАРНОЙ КИСЛОТЫ И НИКОТИНАМИДА МЕТОДОМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ <i>Жулидин П.А., Филин П.Д., Пластун И.Л.</i>	80
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ПРЕДСКАЗАНИЕ КИСЛОТНОСТИ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ И ФЕНОЛОВ <i>Журко Г. А., Федорова А. А.</i>	84
ЦЕОЛИТЫ И ИХ МОДИФИЦИРОВАННЫЕ ФОРМЫ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЯЧЕЕК <i>Завьялова А.В.</i>	87
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕТИЛЕНОВОГО ГОЛУБОГО С МОДИФИЦИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ ЦЕОЛИТ@ЦИКЛОДЕКСТРИН <i>Завьялова А.В., Золотарева Н.В.</i>	91
МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ И АНАЛИЗ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ ДЛЯ ДЕАЦЕТИЛАЗ ГИСТОНОВ: ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ С НОВЫМИ ИНГИБИТОРАМИ <i>Заев Д.А., Голанцов Н.Е.</i>	95
ВЫСОКОТОЧНОЕ НЕЭМПИРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛ МОНОГАЛОГЕНИДОВ СКАНДИЯ И ИТТРИЯ <i>Игошин Ф.А., Борисова А.С., Наваркин И.С., Смирнов А.Н., Соломоник В.Г.</i>	99
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА ДИМЕРИЗАЦИИ ИМИНИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ <i>Кликушин А.С., Доронин М.М., Мулина О.М., Медведев М.Г., Терентьев А.О.</i>	103
РЕЗИСТИВНОЕ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЕ В НАНОСТРУКТУРЕ БИГРАФЕН/ДИАМАН, ПОЛУЧЕННОЙ НА ПОДЛОЖКЕ $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ ПУТЕМ ОБЛУЧЕНИЯ ПУЧКОМ ЭЛЕКТРОНОВ <i>Климчук Д.О., Варламова Л.А., Сорокин П.Б.</i>	104
ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ И ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ ОКТА(4- ПРОПИЛФЕНОКСИ)ФТАЛОЦИАНИНА И ЕГО МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСОВ С Al(III) , Ga(III) И In(III) <i>Князева А.А., Петрова У.А., Ерошин А.В., Жабанов Ю.А.</i>	105
СТРУКТУРА ИНДОМЕТАЦИНА КАК КЛЮЧ К СОЗДАНИЮ ТВЕРДЫХ ФОРМ С ЗАДАННЫМИ СВОЙСТВАМИ <i>Ковалев А.Е., Белов К.В., Ходов И.А.</i>	108
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ ДИ(5-ФЕНИЛ(1,3,4-ОКСАДИАЗОЛ-2-ИЛ))БЕНЗОЛА <i>Коновалова А.А., Лапыкина Е.А., Гиричева Н.И.</i>	109

ВКЛАД КОНФОРМЕРОВ В ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОРГАНИЧЕСКИХ
ВЕЩЕСТВ В СОСТОЯНИИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА НА ПРИМЕРЕ ПРОТЕИНОГЕННЫХ
АМИНОКИСЛОТ

Коробов М.А., Дунаев А.М., Моталов В.Б. 112

АЛГОРИТМ АВТОМАТИЗАЦИИ В МОДЕЛИРОВАНИИ РЕАКЦИЙ С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ МЕТАДИНАМИКИ

Красностанов Я.С., Кузовлев М.Д., Бородин О.С. 114

IN SILICO ИССЛЕДОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ПРОИЗВОДНЫХ
ВАЛЬПРОЕВОЙ КИСЛОТЫ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫХ ПРОТИВОСУДОРОЖНЫХ
ПРЕПАРАТОВ.

Кузнецова Н.В., Золотоверхая Е.А., Беспалов А.Я., Кубарская Л.Г. 116

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНФОРМЕРОВ ПРОИЗВОДНОГО
ПОРФИРИНА А₃В-ТИПА И ИХ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ

Кулев В.А., Гиричева Н.И., Смирнова А.И., Усольцева Н.В. 117

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНОЙ РЕЛАКСАЦИИ
ВОЗБУЖДЁННЫХ СОСТОЯНИЙ АНИОНОВ БИОЛОГИЧЕСКИХ ХРОМОФОРОВ

Кулиев Р.Г., Белецан О.Б., Боченкова А.В. 120

ГАЗОФАЗНАЯ ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ДИМЕТИЛФОСФИНО(ПЕРФТОР-
)ФЕНИЛЕНОВОГО И ДИФЕНИЛФОСФИНО(3,3,4,4,5,5-ГЕКСАФТОР-
)ЦИКЛОПЕНТЕНИЛОВОГО КОМПЛЕКСОВ ЗОЛОТА(I)

Курочкин И.Ю., Гиричев Е.Г., Гиричев Г.В. 121

ВОЗМОЖНОСТИ МЕТОДА ГАЗОВОЙ ЭЛЕКТРОНОГРАФИИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ И СОСТАВА НАСЫЩЕННОГО ПАРА ДОНОРНО-
АКЦЕПТОРНЫХ КОМПЛЕКСОВ НА ПРИМЕРЕ АДДУКТА N-ОКСИДА ПИРИДИНА И
ФТОРИДА БОРА (III)

Лебедев И.С., Белова Н.В., Гиричева Н.И., Гиричев Г.В. 125

СТАБИЛЬНОСТЬ ГАЗООБРАЗНЫХ АДДУКТОВ ТРИФТОРИДА БОРА: ГАЗОВАЯ
ЭЛЕКТРОНОГРАФИЯ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

Лебедев И.С., Белова Н.В., Гиричева Н.И., Гиричев Г.В. 129

ДИЗАЙН ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИХ АМОРФНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ
АЗОХРОМОФОРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

Левицкая А.И., Фоминых О.Д., Балакина М.Ю. 133

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЁТЫ СОРБЦИИ И ТРАНСПОРТА МОЛЕКУЛ ВОДЫ И
ЛЁГКИХ СПИРТОВ В ОКСИДЕ ГРАФЕНА

Лесных А.А., Гурьянов К.Е., Елисеев Ан.А., Елисеев Ар.А. 134

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАВНОВЕСНОЙ СТРУКТУРЫ 3-
АМИНО-4-ЦИАНО-1,2,5-ОКСАДИАЗОЛ-2-ОКСИДА

Лобанов Н.В., Степанова А.В., Шишков И.Ф. 135

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
МИКОТОКСИНОВ С ОРГАНОСИЛАНАМИ

Меняйло И.Е., Пожаров М.В., Бурмистрова Н.А. 139

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ
МОЛЕКУЛЫ ДИЦИКЛОПЕНТАДИЕНА

Мухина В.А., Ерошин А.В., Шлыков С.А. 143

СТРОЕНИЕ И СПЕКТРЫ ТРИБРОМИДА ИТТРИЯ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ <i>Наваркин И.С., Смирнов А.Н., Соломоник В.Г.</i>	147
DFT И TD DFT ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ И СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВ ДИБОРНЫХ КОМПЛЕКСОВ ФТАЛОЦИАНИНОВ <i>Никитин И.А., Попков А.Д., Стужин П.А.</i>	150
ВЗАИМНОЕ ВЛИЯНИЕ КРАУН-КОЛЬЦА И БЕНЗО-ГРУПП НА СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И ЗАРЯДОВОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ В МОЛЕКУЛАХ ЭФИРОВ 18- КРАУН-6, БЕНЗО-18-КРАУН-6 И ДИБЕНЗО-18-КРАУН-6 <i>Никифорова С.О., Кованова М.А., Кузьмина И.А.</i>	151
RedOx АКТИВНОСТЬ ЦИАНОКОБАЛАМИНА ОТ ПЕРЕФИРИЧЕСКОЙ МОДИФИКАЦИИ <i>Осокин В.С., Кулёв В.А., Деревеньков И.А.</i>	153
СИНТЕЗ И ФОТОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ОКСАЗОЛО[5,4- b]ПИРИДИНА <i>Паламарчук И.В., Кулаков И.В.</i>	156
СТРОЕНИЕ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ ПИРИДО[1,2-a]ПИРИМИДИНОВЫХ СИСТЕМ <i>И.В.Ивлиева(Перетокина), А.А. Мещерякова, Л.М. Бабков, В.В.Сорокин</i>	159
ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ПИРИДОКСАЛЬ-5'- ФОСФАТ 1Н-ТЕТРАЗОЛИЛ-5-ГИДРАЗОНА И ЕГО КОМПЛЕКСОВ С ИОНАМИ Cd(II) И Ga(III) <i>Петрова У.А., Князева А.А., Завалишин М.Н., Ерошин А.В., Жабанов Ю.А.</i>	162
ПРЕДСКАЗАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСОВ ФТАЛОЦИАНИНОВ <i>Кулёв В.А., Печникова Н.Л., Агеева Т.А.</i>	166
РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА ПАРАМЕТРИЗАЦИИ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОГО МЕТОДА PM7 ДЛЯ F-ЭЛЕМЕНТОВ <i>Пикулин И.С., Карпов К.В.</i>	169
АНАЛИЗ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОСНОВНЫХ ПОЛЯРНЫХ АМИНОКИСЛОТ С ФЛУОРЕСЦЕНТНЫМИ КРАСИТЕЛЯМИ <i>И.Л. Пластун, Е.В. Назарьев</i>	170
КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ И СПЕКТРОСКОПИЯ НАНОРАЗМЕРНОГО АЛЮМОИТТРИЕВОГО ГРАНАТА ПРИ ПОЛУЧЕНИИ СТЕКЛОКЕРАМИКИ МЕТОДОМ СЛС <i>Плехович А.Д., Кутьин А.М., Плехович С.Д., Будруев А.В., Балueva К.В., Ростокina Е.Е., Комшина М.Е.</i>	174
МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ АЛЮМОИТТРИЕВЫЙ ГРАНАТ ЛЕГИРОВАННЫЙ ИОНАМИ Er И Ce <i>Плехович С.Д., Кутьин А.М., Плехович А.Д., Будруев А.В., Балueva К.В., Ростокina Е.Е., Бирюкова Т.Ю.</i>	177
МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА ГИДРАЗОНА ФЛУОРЕСЦЕИНА И 2,4-ДИМЕТОКСИБЕНЗАЛЬДЕГИДА <i>Погонин А.Е., Завалишин М.Н., Гамов Г.А.</i>	179

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЙ РАСЧЁТ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ГОМОЛОГИЧЕСКОГО РЯДА АЦЕНОВ <i>Рихмайер М.А., Рихмайер А.М., Орлов Ю.Д.</i>	180
РАЗРАБОТКА ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОГО МЕТОДА РАСЧЕТА КИЭ ДЛЯ РЕАКЦИЙ ПРОТОННОГО ОБМЕНА <i>Руденко М.А., Елисеев А.А., Митрофанов А.А.</i>	182
ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ДИФФУЗНЫХ ФУНКЦИЙ БАЗИСНОГО НАБОРА НА ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ТРИСТРИАЗОЛОТРИАЗИНА <i>Салькова А.М., Лапыкина Е.А.</i>	185
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ ГЕКСАХЛОРБЕНЗОЛА И IN SILICO ПРОГНОЗ ТОКСИКОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК <i>Сафрыгина В.А.</i>	188
ОБ ОШИБКАХ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ СВОЙСТВ СОЕДИНЕНИЙ ЛАНТАНОИДОВ, ВЫЗВАННЫХ ВКЛЮЧЕНИЕМ 4f-ЭЛЕКТРОНОВ В СОСТАВ ЭФФЕКТИВНЫХ ОСТОВНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ <i>Смирнов А.Н., Соломоник В.Г.</i>	192
ОСОБЕННОСТИ ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ В МОЛЕКУЛАХ Ph-Ph, Ph-C≡C-Ph и Ph-C≡C-C≡C-Ph <i>Сморозин С.В., Твердова Н.В., Гиричева Н.И., Гиричев Г.В.</i>	194
СОВРЕМЕННАЯ КВАНТОВАЯ ХИМИЯ СОЕДИНЕНИЙ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ И ЛАНТАНОИДОВ: ДОСТИЖЕНИЯ И ПРОБЛЕМЫ <i>Соломоник В.Г.</i>	197
МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИОННОЙ СХЕМЫ ФОТОВОССТАНОВЛЕНИЯ НИТРОСОЕДИНЕНИЯ В ПРИСУТСТВИИ ДОНОРА ВОДОРОДА <i>Сорокина Т.М., Овсянников Д.В.</i>	199
УСТАНОВЛЕНИЕ СВЯЗИ МЕЖДУ СТРУКТУРОЙ И СВОЙСТВАМИ ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ: РОЛЬ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЁТОВ <i>А. Ю. Сосорев</i>	202
ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА КООРДИНАЦИЮ КЛАСТЕРОВ M ₄ , M ₉ , M ₁₉ С АРОМАТИЧЕСКИМИ ЗВЕНЬЯМИ СТИРОЛ-ДИВИНИЛБЕНЗОЛЬНЫХ СОПОЛИМЕРОВ В ОТСУТСТВИИ РАСТВОРИТЕЛЯ <i>Быков А.В., Демиденко Г.Н., Спиридонова Ю.В.</i>	203
УСТАНОВЛЕНИЕ НАПРАВЛЕНИЯ ПРОТЕКАНИЯ РЯДА ИОН-МОЛЕКУЛЯРНЫХ РЕАКЦИЙ С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО ПРОГРАММНОГО ПАКЕТА ORCA <i>Степанова Д.В., Александрова Д.А., Меламед Т.Б., Лузенина Л.А., Баберкина Е.П., Якушин Р.В.</i>	207
ВЛИЯНИЕ ФОРМЫ ПОВЕРХНОСТЕЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ И КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ НА ВНУТРЕННЕЕ ВРАЩЕНИЕ В МОЛЕКУЛАХ НЕКОТОРЫХ ЗАМЕЩЕННЫХ ЦИКЛОПРОПАНОВ <i>Стётин С.С., Батаев В.А.</i>	211
МЕХАНИЗМЫ ОБРАЗОВАНИЯ И ЭВОЛЮЦИИ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ И ЭКСПЕРИМЕНТ <i>Таупов М.М., Пишеничнюк С.А., Асфандиаров Н.Л., Комолов А.С.</i>	213

СИСТЕМА ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ ДЛЯ СИНХРОННОГО ЭЛЕКТРОНОГРАФИЧЕСКОГО/МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА И СТРОЕНИЕ ИОНОВ, СУЩЕСТВУЮЩИХ В МАСС-СПЕКТРЕ 1,4- БИС(ТРИМЕТИЛСИЛИЛ)-1,3-БУТАДИИНА <i>Твердова Н.В., Гиричев Е.Г.</i>	216
КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМА СБОРКИ ПИРРОЛО[1,2- А]ПИРАЗИН-N-ОКСИДОВ ИЗ N-АЛЛЕНИЛПИРРОЛ-2-КАРБАЛЬДЕГИДОВ И ГИДРОКСИЛАМИНА <i>Тепляшин Н.В., Бобков А.С., Витковская Н.М.</i>	220
МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЗГЛЯД НА ОБРАЗОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ ВКЛЮЧЕНИЯ МЕЖДУ β-ЦИКЛОДЕКСТРИНОМ И ХЕЛИДОНОВОЙ КИСЛОТОЙ <i>Терехина Е.Н., Одинцова Е.Г., Антипова М.Л., Петренко В.Е.</i>	224
ВЛИЯНИЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ, ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И СОЛЬВАТАЦИОННЫХ ПОПРАВК НА КОНФОРМАЦИОННЫЕ ЭНЕРГИИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КЛАСТЕРОВ ОРГАНИЧЕСКИХ КАРБОНАТОВ <i>Тума А.А., Рыжак А.С., Отлётков А.А., Миненков Ю.В.</i>	228
АНГАРМОНИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ РАСЧЁТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ В КВАНТОВОЙ ХИМИИ <i>Туровцев В.В.</i>	231
ПОПРАВКА НА КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ ЧАСТОТЫ К МОЛЕКУЛЯРНОМУ ПАРАМЕТРУ, ХАРАКТЕРИЗУЮЩЕМУ ЯДЕРНО-СПИН-ЗАВИСИМЫЕ ЭФФЕКТЫ, НАРУШАЮЩИЕ ПРОСТРАНСТВЕННУЮ ЧЁТНОСТЬ В КАТИОНЕ $^{29}\text{Si}^{16}\text{O}^+$ <i>Турченко П.Д., Скрипников Л. В.</i>	233
ВЫСОКОТОЧНОЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ СВОЙСТВ ТЯЖЁЛЫХ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ И ИХ СОЕДИНЕНИЙ <i>Уваров А.А., Смирнов А.Н., Соломоник В.Г.</i>	234
МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БЕТУЛИНА С ПОЛЯРНЫМИ РАСТВОРИТЕЛЯМИ НА ОСНОВЕ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ <i>Филин П.Д., Жулидин П.А., Пластун И.Л.</i>	238
ЭЛЕКТРОННАЯ ПЛОТНОСТЬ И УПРУГИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛА [CO(NH ₃) ₅ NO ₂]ClNO ₃ : ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ КВАНТОВОЙ КРИСТАЛЛОГРАФИИ <i>Хайновский М.А., Терехова Е.О., Болдырева Е.В., Цирельсон В.Г.</i>	242
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПТЕРИНА И НАНОКЛАСТЕРОВ ЗОЛОТА <i>Чеботаев П.П., Кононов А.И., Буглак А.А.</i>	243
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ КОМПЛЕКСОНОВ НА ОСНОВЕ АМИНОПОЛИКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ <i>Черепанова М.В., Лисицкий Т.М., Веселов И.Н., Никольский В.М.</i>	247
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЫ ГИДРАЗОНА ПИРИДОКСАЛЬ-5-ФОСФАТА И 2,4-ДИНИТРОФЕНИЛГИДРАЗИНА В РАМКАХ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ <i>Чикалов И.С., Пименов О.А., Завалишин М.Н.</i>	248
ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ И ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРОВ <i>Чудакова О.Г., Шипикина Н.В., Чудакова К.Е.</i>	251

МОЛЕКУЛЯРНОЕ СТРОЕНИЕ 5,6-БИС(4-ИОДФЕНИЛ)ПИРАЗИН-2,3-
ДИКАРБОНИТРИЛА

Е.В. Шагалов, А.Е. Погонин, А.Н. Киселев, В.Е. Майзлиш254

СТРУКТУРА И КОНФОРМАЦИОННЫЕ ОСОБЕННОСТИ СОЕДИНЕНИЙ,
СОДЕРЖАЩИХ ТРИФЛИЛЬНЫЕ ГРУППЫ, СВЯЗАННЫЕ С ЭНДОЦИКЛИЧЕСКИМИ
АТОМАМИ АЗОТА

Ерошин А.В., Шлыков С.А.255

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ
ПАРАМЕТРОВ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ
ЛАНТАНА С ОРГАНИЧЕСКИМИ ЛИГАНДАМИ

Шубина А.А., Сирик А.В., Орлова Т.Н.257

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИИ КИНЕТИЧЕСКОГО РАСЩЕПЛЕНИЯ ОРТО-
ЗАМЕЩЕННЫХ ПИПЕРИДИНОВ МЕТОДАМИ QM/MM (NEB)

Щетинкина М.А., Бородин О.С., Барташевич Е.В.261

КОНФОРМАЦИОННЫЙ ПОИСК ДЛЯ МАЛЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ В
ГАЗОВОЙ И ТВЕРДОЙ ФАЗЕ С ПОМОЩЬЮ АЛГОРИТМА ПЧЕЛИНОЙ КОЛОНИИ

Яблонский М.Д., Смирнова А.А., Королев В.В., Марченко Е.И., Митрофанов А.А.263

РАСЧЕТ КИНЕТИЧЕСКОГО ИЗОТОПНОГО ЭФФЕКТА ПРИ ДИССОЦИАЦИИ
ДИМЕРОВ ПОЛИГЛИЦИНА КАК МОДЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ ДЕНАТУРАЦИИ
БЕЛКОВ

Янишин А.О., Киселев В.Г., Бакланов А.В.267

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

А

Абдулагатов А. И. · 61
Абдулагатов И. М. · 61
Агеева Т.А. · 166
Акопова О.Б. · 47
Аксенов Д.А. · 63
Александрова Д.А. · 207
Алексюнина П.И. · 9
Алыева А.Б. · 5
Ананичева С.А. · 5
Антипова М.Л. · 224
Антонюк А.В. · 8
Асфандиаров Н.Л. · 213

Б

Баберкина Е.П. · 207
Бабков Л.М. · 9, 40, 159
Бакланов А.В. · 267
Балагадашова И.Д. · 13
Балакина М.Ю. · 133
Балуева К.В. · 16, 174, 177
Балхаева К.С. · 18
Барташевич Е.В. · 33, 64, 261
Батаев В.А. · 22, 211
Бахтеева Е.И. · 64
Белецан О.Б. · 23, 120
Беликова А.А. · 25
Белов К.В. · 108
Белова Н.В. · 25, 125, 129
Беспалов А.Я. · 116
Бетехтин А.А. · 29
Бирюкова Т.Ю. · 177
Бобков А.С. · 220
Боев А.О. · 63
Болдин А.А. · 33
Болдырева Е.В. · 242
Большаков О.И. · 64
Бондарь В.В. · 35
Борисова А.С. · 99
Бородин О.С. · 33, 114, 261
Боченкова А.В. · 23, 39, 120
Брыксин К.А. · 40
Буглак А.А. · 243
Будруев А.В. · 16, 174, 177
Булавина А.С. · 44
Бумбина Н.В. · 47
Бурмистрова Н.А. · 139
Быков А.В. · 203

В

Ванеева Е.Е. · 51
Варламова Л.А. · 104
Венер М.В. · 56
Веселов И.Н. · 247
Викулова Е.С. · 68
Витковская Н.М. · 220
Волкова Т.Г. · 53
Воронин А.П. · 56
Вьялкин Д.А. · 58

Г

Гаджимурадов С. Г. · 61
Гамов Г.А. · 62, 179
Герасимова Э.В. · 5
Гиричев Г.В. · 121, 125, 129, 194
Гиричев Е.Г. · 121, 216
Гиричева Н.И. · 109, 117, 125, 129, 194
Глявин М.Ю. · 5
Говоров Д.Н. · 63
Голанцов Н.Е. · 95
Григорьева Е.А. · 64
Гурьянов К.Е. · 134

Д

Давыдова Н.А. · 9
Даниленко А.А. · 66
Демиденко Г.Н. · 203
Деревеньков И.А. · 153
Доронин М.М. · 103
Дрозд К.В. · 56
Дубинец Н.О. · 67
Дунаев А.М. · 112

Е

Евсеев Г.С. · 68
Елисеев А.А. · 182
Елисеев Ан.А. · 134
Елисеев Ар.А. · 134
Ерошин А.В. · 58, 71, 78, 105, 143, 162, 255
Ершов В.В. · 75

Ж

Жабанов Ю.А. · 58, 78, 105, 162
Жарникова Н.В. · 47
Жулидин П.А. · 80, 238
Журко Г.А. · 84

З

Завалишин М.Н. · 162, 179, 248
Завьялова А.В. · 87, 91
Заев Д.А. · 95
Зеленцов С.В. · 5
Золотарева Н.В. · 91
Золотоверхая Е.А. · 116

И

Ивлиева (Перетокина) И.В. · 9, 159
Игошин Ф.А. · 99
Исляйкин М.К. · 58

К

Карпов К.В. · 169
Киселев А.Н. · 254
Киселев В.Г. · 267
Кликушин А.С. · 103
Климчук Д.О. · 104
Клюев М.В. · 13
Князева А.А. · 105, 162
Ковалев А.Е. · 108
Кованова М.А. · 25, 151
Комолов А.С. · 213
Комшина М.Е. · 16, 174
Коновалова А.А. · 109
Кононов А.И. · 243
Коробов М.А. · 112
Королев В.В. · 263
Кочетова Л.Б. · 35
Крапивницкая Т.О. · 5
Красностанов Я.С. · 114
Крючкова Н.А. · 68
Кубарская Л.Г. · 116
Кузнецова Н.В. · 116
Кузовлев М.Д. · 114
Кузьмина И.А. · 151
Кулаков И.В. · 156
Кулев В.А. · 117, 153, 166
Кулиев Р.Г. · 120
Курочкин И.Ю. · 121
Кустова Т.П. · 35
Кутьин А.М. · 16, 174, 177

Л

Лазовский Д.А. · 66
Лапыкина Е.А. · 109, 185
Лебедев И.С. · 125, 129
Левицкая А.И. · 133
Лепешкин С.В. · 51

Лесных А.А. · 134
Лисицкий Т.М. · 247
Лобанов Н.В. · 135
Лузенина Л.А. · 207

М

Магдалинова Н.А. · 13
Майзлиш В.Е. · 254
Майорова О.А. · 40
Марченко Е.И. · 263
Медведев М.Г. · 103
Меламед Т.Б. · 207
Меняйло И.Е. · 139
Мещерякова А.А. · 159
Миненков Ю.В. · 228
Митрофанов А.А. · 182, 263
Молькова М.А. · 9
Моталов В.Б. · 112
Мулина О.М. · 103
Мухина В.А. · 143

Н

Наваркин И.С. · 99, 147
Назарьев Е.В. · 170
Никитин И.А. · 150
Никифорова С.О. · 151
Никольский В.М. · 247

О

Овсянников Д.В. · 199
Оганов А.Р. · 51
Одинцова Е.Г. · 224
Орлов Ю.Д. · 180
Орлова Т.Н. · 257
Осокин В.С. · 153
Отлётов А.А. · 228

П

Паламарчук И.В. · 156
Пахомов Г.Л. · 78
Перлович Г.Л. · 56
Песков Н.Ю. · 5
Петренко В.Е. · 224
Петрова У.А. · 105, 162
Печникова Н.Л. · 166
Пикулин И.С. · 169
Пименов О.А. · 62, 248
Пластун И.Л. · 40, 80, 170, 238
Плехович А.Д. · 16, 174, 177
Плехович С.Д. · 16, 174, 177

ХI Всероссийская молодежная школа-конференция «Квантово-химические расчеты:
структура и реакционная способность органических и неорганических молекул»

Погонин А.Е. · 179, 254
Пожаров М.В. · 139
Попков А.Д. · 150
Пшеничнюк С.А. · 213

Р

Рихмайер А.М. · 180
Рихмайер М.А. · 180
Ростокина Е.Е. · 174, 177
Руденко М.А. · 182
Рыжако А.С. · 228
Рыжов И.В. · 58

С

Салькова А.М. · 185
Сафрыгина В.А. · 188
Сирик А.В. · 257
Скрипников Л. В. · 233
Смирнов А.Н. · 99, 147, 192, 234
Смирнова А.А. · 263
Смирнова А.И. · 47, 117
Сморозин С.В. · 194
Соломоник В.Г. · 99, 147, 192, 197, 234
Сорокин В.В. · 159
Сорокин П.Б. · 104
Сорокина Т.М. · 199
Сосорев А.Ю. · 67, 202
Спиридонова Ю.В. · 203
Степанова А.В. · 135
Степанова Д.В. · 207
Стёпин С.С. · 211
Стужин П.А. · 66, 150
Сулейманов С. И. · 61

Т

Таланова И.О. · 53
Таюпов М.М. · 213
Твердова Н.В. · 194, 216
Тепляшин Н.В. · 220
Терентьев А.О. · 103
Терехина Е.Н. · 224
Терехова Е.О. · 242
Ткаченко О.Ю. · 75
Тума А.А. · 228
Туровцев В.В. · 231
Турченко П. Д. · 233

У

Уваров А.А. · 234
Усольцева Н.В. · 47, 117

Ф

Федоров М.С. · 44
Федорова А. А. · 84
Филин П.Д. · 80, 238
Филиппов А.А. · 44
Фоминых О.Д. · 133

Х

Хайновский М.А. · 242
Ходов И.А. · 108

Ц

Цирельсон В.Г. · 242

Ч

Чеботаев П.П. · 243
Черепанова М.В. · 247
Чикалов И.С. · 248
Чудакова К.Е. · 251
Чудакова О.Г. · 251

Ш

Шагалов Е.В. · 254
Шипикина Н.В. · 251
Шишков И.Ф. · 135
Шлыков С.А. · 71, 143, 255
Шубина А.А. · 257
Шумовская К.Ф. · 16
Щетинкина М.А. · 261

Ю

Юшина И.Д. · 8

Я

Яблонский М.Д. · 263
Якушин Р.В. · 207
Яншин А.О. · 267