

СОДЕРЖАНИЕ

Том 94, номер 5, 2020

МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ ПО ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ (ЧЕРНОГОЛОВКА)

Физическая химия в России и за рубежом: от квантовой химии до эксперимента	655
Теоретические и экспериментальные исследования субнаноразмерных молекул и кластеров <i>О. П. Чаркин, Н. М. Клименко</i>	657
Моделирование влияния количества диметилсульфоксида на энергию взаимодействия ионов в нафион-подобных мембранах <i>А. С. Зюбин, Т. С. Зюбина, Е. А. Сангинов, Р. Р. Каюмов, Л. В. Шмыглева, Ю. А. Добровольский</i>	672
Учет конформационной подвижности в квантово-химических расчетах потенциалов окисления нитроксильных радикалов <i>В. Б. Лужков</i>	680
Теоретические колебательные спектры реакционных интермедиатов в активном центре гуанозинтрифосфат-связывающих белков <i>Б. Л. Григоренко, А. В. Немухин</i>	686
Роль фуллерен-азотных комплексов щелочных металлов при фиксации азота, катализируемой C ₆₀ <i>А. Ф. Шестаков</i>	692
Влияние заместителей в гидролизованых цефалоспориновых на внутримолекулярную связь O—H...N <i>Е. О. Левина, М. Г. Хренова, В. Г. Цирельсон</i>	698
Квантово-химическое и ИК-спектроскопическое исследование ионной ассоциации в растворах LiCF ₃ SO ₃ в ацетонитриле <i>А. М. Эрбабаев, Т. В. Ярославцева, О. В. Бушкова</i>	706
Квантово-химическое моделирование строения комплексов сополимера n-винилпирролидона с диметакрилатом триэтиленгликоля с метформинном в водных растворах <i>В. М. Игнатьев, Н. С. Емельянова, Н. В. Фадеева, С. В. Курмаз</i>	713
Моделирование таутомерного равновесия и спектра поглощения 4,5-диметил-2-(2'-гидроксифенил)имидазола <i>Д. П. Капуста, А. М. Кулакова, М. Г. Хренова</i>	719
Квантово-химическое моделирование спектральных свойств красителя BODIPY с разными заместителями <i>А. В. Невидимов</i>	726
Спектроскопические свойства молекулы сульфида бария в низколежащих электронных состояниях $X^1\Sigma^+$, $a^3\Pi$, $A^1\Pi$, $b^3\Sigma^+$ и $A^1\Sigma^+$ <i>А. Н. Смирнов, В. Г. Соломоник</i>	731
Объем фуллеренового каркаса и неаддитивность поляризуемости эндофуллеренов и гидрированных эндофуллеренов с инкапсулированными атомами благородных газов <i>А. Д. Закирова, Д. Ш. Сабилов</i>	738
Квантово-химическое моделирование реакций согласованного распада циклов <i>Н. С. Емельянова, Т. С. Покидова</i>	747
Молекулярно-динамическое моделирование напыления тонких пленок, состоящих из слоев с чередующейся плотностью <i>Ф. В. Григорьев, В. Б. Сулимов, А. В. Тихонравов</i>	754

Каталитический синтез и исследование углерод-графеновых структур <i>А. А. Арбузов, А. А. Володин, Б. П. Тарасов</i>	760
Оптические исследования анизотропии в органических проводниках $D_4[MBr_4](Solvent)$ <i>Е. И. Жилева, Н. В. Дричко, Г. В. Шилов, А. М. Флакина, С. А. Торунова, Р. Н. Любовская</i>	766
Особенности гидрирования магния с Ni-графеновым покрытием <i>Б. П. Тарасов, С. А. Можжухин, А. А. Арбузов, А. А. Володин, Э. Э. Фокина, П. В. Фурсиков, М. В. Лотоцкий, В. А. Яртысь</i>	772
Квантово-химическое моделирование адсорбции краун-эфиров различной структуры на поверхностях лития и углерода <i>Г. З. Тулибаева, О. В. Ярмоленко, А. Ф. Шестаков</i>	778
Влияние механической активации интерметаллического соединения $LaNi_{2.5}Co_{2.4}Mn_{0.1}$ на абсорбцию водорода <i>П. А. Коник, Е. А. Бердоносова, Е. В. Мещерякова, С. Н. Клямкин</i>	784
Фазовый состав и микроструктура сорбирующих водород композитов эвтектического сплава Mg–Ni с графеноподобным материалом <i>П. В. Фурсиков, А. М. Слепцова, С. А. Можжухин, А. А. Арбузов, В. Н. Фокин, Э. Э. Фокина, И. И. Ходос, Б. П. Тарасов</i>	789
Корреляция между характеристиками процессов газофазного и электрохимического гидрирования интерметаллических соединений <i>А. А. Володин, П. В. Фурсиков, Э. Э. Фокина, Б. П. Тарасов</i>	796
К сведению авторов	803