

**В ОЧЕРЕДНОМ НОМЕРЕ МЫ ПЛАНИРУЕМ
ОПУБЛИКОВАТЬ СЛЕДУЮЩИЕ СТАТЬИ:**

ЩЕПИН А.С., ПЕШКОВА Т.В., ПЕШКОВ С.А.

**ИНДУЦИРОВАНИЕ ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫХ ЗАПРЕЩЕННЫХ ПЕРЕХОДОВ
В МОЛЕКУЛЕ КИСЛОРОДА В СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫХ КОМПЛЕКСАХ O₂—H₂O**

АЛЕКСЕЕВ Н.В.

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СВЯЗЕЙ АЛЮМИНИЙ—УГЛЕРОД
В СОЕДИНЕНИЯХ ТРЕХКООРДИНИРОВАННОГО АЛЮМИНИЯ**

СЕМЁНОВ С.Г., БЕДРИНА М.Е.

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛ
(μ-ОКСО)БИС[ФТАЛОЦИАНИНАТОГАЛЛИЯ(III)]
И (μ-ОКСО)БИС[ПЕРФТОРФТАЛОЦИАНИНАТОГАЛЛИЯ(III)]**

СЕМЁНОВ С.Г., БЕДРИНА М.Е., МАКАРОВА М.В., ТИТОВ А.В.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНДОКОМПЛЕКСА Fe@C₆₀

ДЖАБИЕВА С.А., КУРБАТОВА С.В., КОЛОСОВА Е.А.

**ВЛИЯНИЕ ТОПОЛОГИИ МОЛЕКУЛ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОТРИАЗОЛА
НА ИХ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОЕ УДЕРЖИВАНИЕ В УСЛОВИЯХ ОФ ВЭЖХ**

MANSOORINASAB A., MORSALI A., HERAVI M.M., BEYRAMABADI S.A.

**QUANTUM MECHANICAL STUDY OF CARBON NANOTUBES FUNCTIONALIZED
WITH DRUG GENTAMICIN**

ZEIDABADINEJAD L., DEHESTANI M., POURESTARABADI S.

**ON THE CHEMICAL BONDING FEATURES IN PALLADIUM CONTAINING
COMPOUNDS: A COMBINED QTAIM/DFT TOPOLOGICAL ANALYSIS**

AMIRASLANZADEH S.

**EFFECTS OF HETEROATOMS ON THE ELECTRONIC, SENSOR,
AND ADSORPTION PROPERTIES OF GRAPHENE**

LIAO L.-M., HUANG X., LEI G.-D.

**STRUCTURAL CHARACTERIZATION AND CHROMATOGRAPHIC RETENTION
TIME SIMULATION FOR SOME ALIPHATIC CARBOXYLIC ACIDS**

ТАРАСОВ Ю.И., КОЧИКОВ И.В., КОВТУН Д.М., ПОЛЕНОВ Е.А., ИВАНОВ А.А.

**ВНУТРЕННЕЕ ВРАЩЕНИЕ И РАВНОВЕСНАЯ СТРУКТУРА МОЛЕКУЛЫ
2-МЕТИЛ-2-НИТРОПРОПАНА НА ОСНОВЕ СОВМЕСТНОЙ ОБРАБОТКИ
ДААННЫХ ГАЗОВОЙ ЭЛЕКТРОНОГРАФИИ, КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ
И МИКРОВОЛНОВОЙ СПЕКТРОСКОПИИ,**

А ТАКЖЕ РЕЗУЛЬТАТОВ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

*ПАНЮШКИН В.Т., ЩЕРБАКОВ И.Н., ВОЛЫНКИН В.А., БОЛОТИН С.Н., БУКОВ Н.Н.,
ШВЫДКО Т.В., ДЖАБРАИЛОВА Л.Х., ШАМСУТДИНОВА М.Х.*

О СТРОЕНИИ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ МЕДИ(II) С L-ГИСТИДИНОМ

GÜNEŞ E., PARLAK C., ŞENYEL M.

**DFT/TDDFT INVESTIGATION ON ELECTRONIC STRUCTURES AND SPECTRAL
CHARACTERISTICS OF C₅H₃XOS (X = H, F, Cl or Br)**

КАБЛОВ Е.Н., КУЗЬМИНА Н.А., ЕРЁМИН Н.Н., СВЕТЛОВ И.Л., НЕЙМАН А.В.

**АТОМНЫЕ МОДЕЛИ СТРУКТУРЫ СИЛИЦИДОВ НИОБИЯ
В IN SITU КОМПОЗИТАХ Nb—Si**

ВИТИУ А.А., КОРОПЧАНУ Э.Б., БОУРОШ П.Н.

**КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА
α-ДИМЕТИЛГЛИОКСИМАТОВ Co(III) С ИМИДАЗОЛОМ**

*СЕЙФУЛЛИНА И.И., МАРЦИНКО Е.Э., ЧЕБАНЕНКО Е.А., ПИРОЖОК О.В.,
ДЯКОНЕНКО В.В., ШИШКИНА С.В.*

**СТРУКТУРА БИС(ЦИТРАТО)ГЕРМАНАТОВ С КАТИОНАМИ РАЗЛИЧНОГО ТИПА:
(Hphen)₂[Ge(HCit)₂·3H₂O], [CuCl(phen)₂]₂[Ge(HCit)₂·6H₂O],
ГДЕ H₄Cit — ЛИМОННАЯ КИСЛОТА, phen — 1,10-ФЕНАНТРОЛИН**

ГОЛОВНЁВ Н.Н., МОЛОКЕЕВ М.С., СТЕРХОВА И.В., ВЕРЕЩАГИН С.Н., ГОЛОВНЁВА И.И.

**КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ПОЛИМЕРНОГО
ГЕКСААКВА-ГЕКСАКИС(2-ТИОБАРБИТУРАТО)-ДИСАМАРИЯ(III)**

*STOJKOVIĆ D.Lj., JEVTIĆ V.V., VUKOVIĆ N., VUKIĆ M., POTOČNÁK I., ZELEN I.R.,
ZARIĆ M.M., MIŠIĆ M.M., BASKIĆ D., KALUĐEROVIĆ G.N., TRIFUNOVIĆ S.R.*

**CRYSTAL AND MOLECULAR STRUCTURE OF A NEW PALLADIUM(II) COMPLEX
WITH A COUMARIN-VALINE DERIVATE**

VALIZADEH A., GHIASI R.

**THEORETICAL APPROACH ON THE MOLECULAR STRUCTURE,
CHEMICAL REACTIVITY, MOLECULAR ORBITAL ANALYSIS, SPECTROSCOPY
PROPERTIES (IR, UV, NMR), AND NBO ANALYSIS OF DEFERIPRONE**

ВАРФОЛОМЕЕВА В.В., ТЕРЕПТЬЕВ А.В.

**СЛАБЫЕ ВОДОРОДНЫЕ СВЯЗИ ПРИ АДСОРБЦИИ НЕЖЕСТКИХ МОЛЕКУЛ
НА ГРАФИТИРОВАННОЙ ТЕРМИЧЕСКОЙ САЖЕ**