

Вестник Московского университета

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в ноябре 1946 г.

Серия 2

ХИМИЯ

ТОМ 65

№ 4 • 2024 • ИЮЛЬ – АВГУСТ

Издательство Московского университета

Выходит один раз в два месяца

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Хренова М.Г., Столяров А.В.</i> Александр Владимирович Немухин (1946–2023)	275
<i>Ермилов А.Ю., Соловьев А.В., Морозов Ю.Н., Шабатина Т.И.</i> Взаимодействие кластеров меди с диоксидином	277
<i>Поляков И.В., Кривицкая А.В., Хренова М.Г.</i> Структура и динамика фермент-субстратного комплекса N-ацетиласпартилглутамат синтазы по данным компьютерного моделирования	284
<i>Добролюбов Е.О., Мануйлов В.М., Краснощеков С.В.</i> Предсказание колебательно-вращательного спектра поглощения полосы ν_2 молекулы $D_2^{16}O$ решением прямой задачи операторным методом возмущений и уточнение эффективных вращательных гамильтонианов	292
<i>Курышкина М.С., Кулакова А.М., Московский А.А., Хренова М.Г.</i> Сравнительный анализ динамического поведения бактериальных фоторегулируемых аденилатциклаз bPAC и OaPAC	306
<i>Блинова А.Р., Кулакова А.М., Григоренко Б.Л.</i> Механизм депротонирования аминокруппы глутамата при связывании с N-ацетилглутаматсинтазой	312
<i>Бородина О.С., Масунов А.Э., Барташевич Е.В.</i> Эволюция электронных свойств на пути от ковалентной к тетрельной связи в синтезе тетрафенилзамещенных соединений	319
<i>Рожков А.В., Игнатов С.К., Сулейманов Е.В.</i> Потенциальные параметры для оценки активационных характеристик ионной диффузии в твердых электролитах на основе стабилизированного оксида циркония	332
<i>Хадеева П.А., Шахова В.М., Ломачук Ю.В., Мосягин Н.С., Скрипников Л.В., Титов А.В.</i> Квантово-химическое исследование электронной структуры галогенидов иттербия	343
<i>Козлов С.В., Пазюк Е.А., Столяров А.В.</i> Волнообразные потенциалы ридберговских Σ^+ -состояний эксиплексных молекул Me–Rg: неэмпирическое моделирование Na–He	352

C O N T E N T S

<i>Khrenova M.G., Stolyarov A.V.</i> Alexander Vladimirovich Nemukhin (1946–2023)	275
<i>Ermilov A.Yu., Soloviev A.V., Morozov Yu.N., Shabatina T.I.</i> Interaction of Copper Clusters with Dioxidine	277
<i>Polyakov I.V., Krivitskaya A.V., Khrenova M.G.</i> Structure and Dynamics of the Enzyme-Substrate Complex of N-Acetylaspartylglutamate Synthase According to Computer Simulation Data	284
<i>Dobrolyubov E.O., Manuylov V.M., Krasnoshchekov S.V.</i> A prediction of the Vibration-rotation Absorption Spectra of the D ₂ ¹⁶ O Molecule ν_2 Band by Solving the Operator Perturbation Theory Direct Problem and a Refinement of the Effective Rotational Hamiltonians	292
<i>Kuryshkina M.S., Kulakova A.M., Moskovsky A.A., Khrenova M.G.</i> Comparative Study of the Dynamic Behavior of Bacterial Photoregulated Adenylate Cyclases bPAC and OaPAC	306
<i>Blinova A.R., Kulakova A.M., Grigorenko B.L.</i> Mechanism of Deprotonation of the Amino Group of Glutamate Upon Binding to N-Acetylglutamate Synthase	312
<i>Borodina O.S., Masunov A.E., Bartashevich E.V.</i> Evolution of Electronic Properties Along the Path from Covalent to Tetrel Bond in the Synthesis of Tetraphenyl Substituted Compounds	319
<i>Rozhkov A.V., Ignatov S.K., Suleimanov E.V.</i> Potential Parameters for Evaluating the Activation Characteristics of Ion Diffusion in Solid Electrolytes Based on Stabilized Zirconium Oxide	332
<i>Khadeeva P.A., Shakhova V.M., Lomachuk Y.V., Mosyagin N.S., Skripnikov L.V., Titov A.V.</i> Quantum Chemical Study of the Electronic Structure of Ytterbium Halides	343
<i>Kozlov S.V., Pazyuk E.A., Stolyarov A.V.</i> Undulating Potentials of Rydberg Σ^+ -States of Me–Rg Molecules: Non-Empirical Treatment of Na–He Exciplex	352