

П
Х46

ISSN 0132-6244

Х

И М И Я



етероциклических

С

оединений

2014 № 3 (561)

335–508

Chemistry of Heterocyclic Compounds

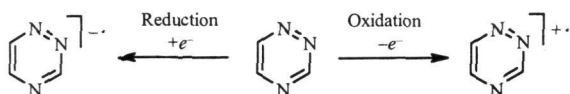
Heterociklisko savienojumu ķīmija

ХИМИЯ
гетероциклических
Соединений

СОДЕРЖАНИЕ

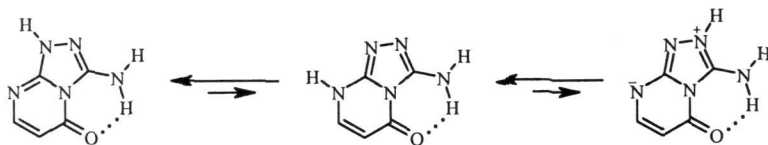
Химия гетероциклических соединений *in silico* (О. В. Шишкин) 339

L. K. Sviatenko, L. Gorb, F. C. Hill, D. Leszczynska, J. Leszczynski 341
Theoretical study of one-electron reduction and oxidation potentials of N-heterocyclic compounds



A. В. Астахов, В. М. Чернышев 349

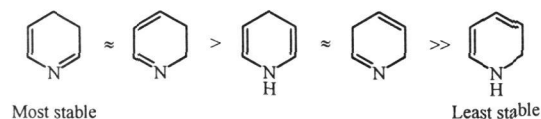
Молекулярная структура 3-амино[1,2,4]триазоло[4,3-*a*]пиримидин-5-она в различных таутомерных формах: исследование методами DFT и QTAIM



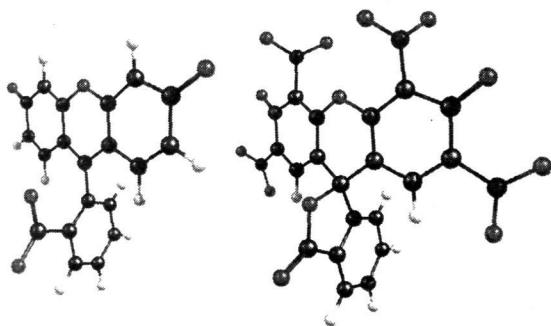
O. V. Shishkin, R. I. Zubatyuk, S. M. Desenko, J. Leszczynski 357

A theoretical investigation of the relative stability of isomeric dihydropyridines

Relative stability of isomeric dihydropyridines:



Квантово-химическое исследование таутомерных равновесий флуоресцеиновых красителей в ДМСО



Электронное строение гетероаннелированных циклооктатетраенов и их спектры поглощения в видимой и УФ областях

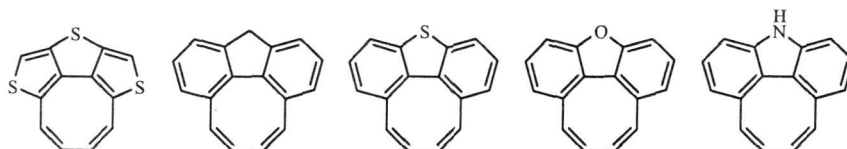
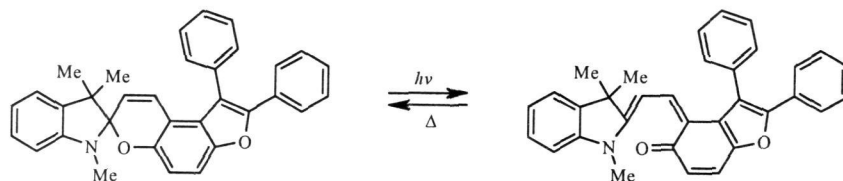
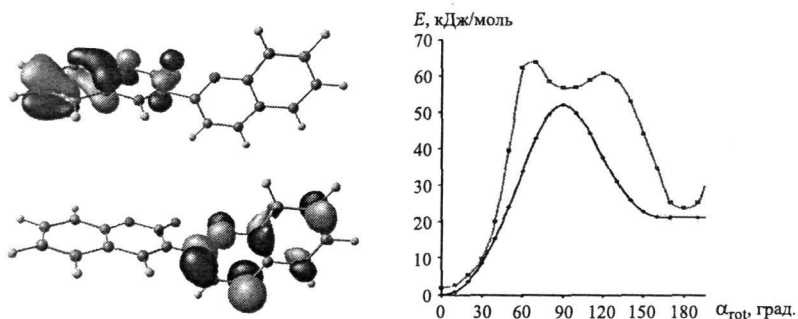


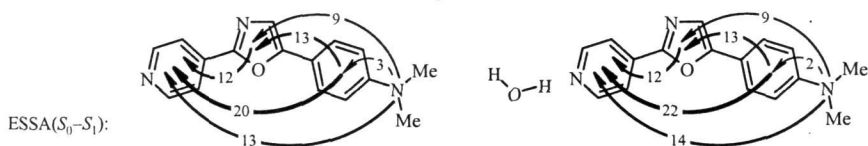
Фото- и термохромные спираны. 41. Квантово-химическое исследование геометрии и электронного строения 1,3,3-триметил-1',2'-дифенилспиро-[индолин-2,7'-фуоро[3,2-*f*]хромена] в основном и возбужденном состояниях



Квантово-химическое исследование структуры и спектральных свойств 2-(3-кумароил)бензопирилеиновых катионов

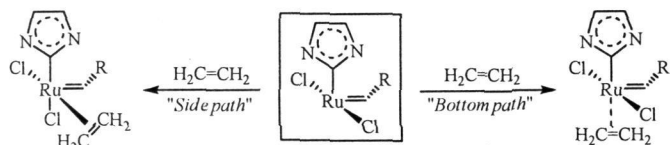


5-[4-(*N,N*-Диметиламино)фенил]-2-(4-пиридил)-1,3-оксазол
как флуоресцентный зонд для мониторинга микрогетерогенных сред



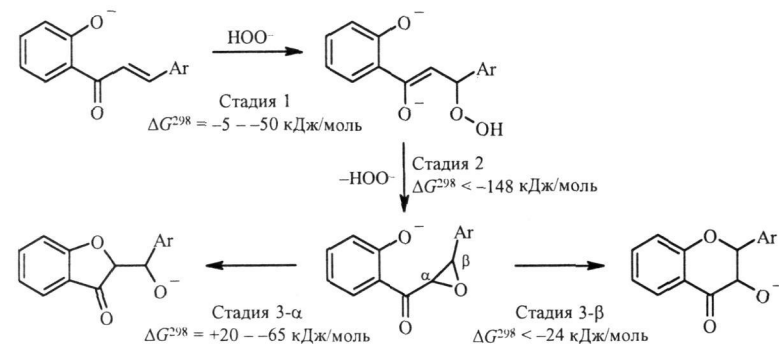
A. Poater, A. Correa, E. Pump, L. Cavallo

Cis/trans coordination in olefin metathesis by static and molecular dynamic DFT calculations



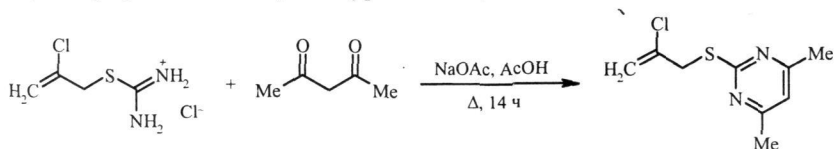
И. Э. Сердюк, А. Д. Рошаль, Е. Блажейовски

Квантово-химический анализ механизма реакции Альгара–Флинна–Оямады



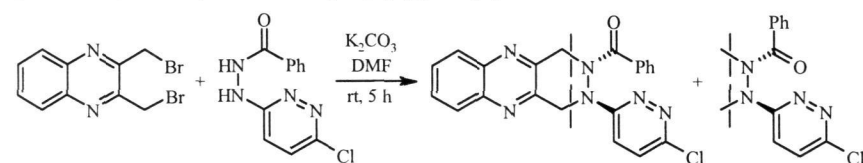
Л. М. Синеговская, В. А. Шагун, Е. П. Леванова,
Н. А. Корчевин, И. Б. Розенцвейг, В. И. Смирнов

Спектральное и квантово-химическое исследование кислотно-катализируемой гетероциклизации хлорида *S*-(2-хлорпроп-2-ен-1-ил)изотиуриония с ацетилацетоном



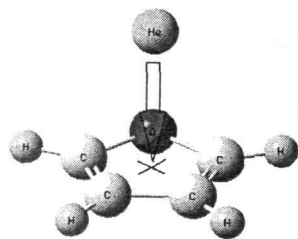
A. I. Karkhut, K. B. Bolibrukh, S. V. Polovkovich, O. Khoumeri,
O. S. Solovyov, T. Terme, P. Vanelle, V. P. Novikov

Synthesis and conformational analysis of [3-(6-chloropyridazin-3-yl)-3,4-dihydropyridazino[4,5-*b*]quinoxalin-2(1*H*)-yl](phenyl)methanone



Sensitivity of ^3He NMR parameters to the proximity of heterocyclic rings.

The helium–furan dimer

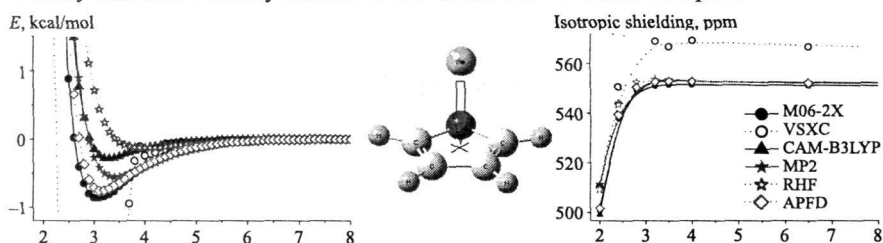


M. Nieradka, T. Kupka

467

Sensitivity of noble gas NMR parameters to the heterocyclic ring proximity.

Density functional theory studies of Ne–furan and Ar–furan complexes

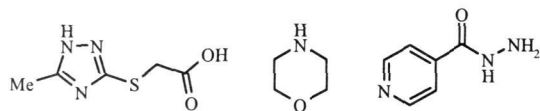


Р. И. Зубатюк, Л. И. Кучеренко, И. А. Мазур,

476

О. В. Хромылева, О. В. Шишкин

Теоретическое исследование строения комплексов изониазида с тиотриазолином



Д. А. Филимонов, А. А. Лагунин, Т. А. Глориозова, А. В. Рудик,

483

Д. С. Дружиловский, П. В. Погодин, В. В. Поройков

Предсказание спектров биологической активности органических соединений с помощью веб-ресурса PASS Online



IN MEMORIAM

Михаил Григорьевич Воронков (6.12.1921–20.02.2014)

500

(Б. А. Трофимов, С. Н. Тандура)

Алан Рой Катрицкий (18.08.1928–10.02.2014) (А. Ф. Пожарский)

506