

21 2014 . 14.574.21.0112

«

-

»

. . . . , . . . .

21.10.2014

14.574.21.0112

«

2014-2020

»

4

01.01.2016

30.06.2016

:

4.1

4.2

4.3

4.4

4.5

4.6

Setal Setalux

4.7

4.8

Setalux

4.9

Setalux

4.10

Setal Setalux

:

-

;

-

;

-

(4,4), (5,5), (6,6)

60, 70, 80, 90, 78, 96

MM3, AM1, PM3, LSDA/3-21G\*, B3LYP/6-31G;

-

(5,5) (0,9)

60, 70, 80, 90, 78, 96

;

;

-

-40

-41;

-

-40, -41

;

-

,

,

;

-

-

-

-

Setal Setalux,

-

-

-

-

-

Setal Setalux

-

Setal Setalux

( )

-

-

3

4

«

«  
».

».

<https://sstp.ru>.