**Левина, Елена Олеговна.**

## Особенности электронной (де)локализации и их влияние на макро- и микроскопические свойства молекул, гидратированных и макромолекулярных систем : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 02.00.04 / Левина Елена Олеговна; [Место защиты: ФГАОУ ВО «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»]. - Москва, 2022. - 127 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат наук Левина Елена Олеговна

Введение

Глава 1. Методы расчета электронной структуры

1.1. Теория функционала плотности

1.2. Комбинированный метод молекулярной механики / квантовой механики. 14 Глава 2. Выбор методов исследования особенностей химического связывания

2.1. Локальные дескрипторы химического связывания, основанные на электронной плотности

2.2. Нелокальные дескрипторы химического связывания, основанные на электронной плотности

2.3. Нелокальные дескрипторы химического связывания, основанные на парной электронной плотности

2.4. Одноэлектронные потенциалы и электронная делокализация

2.5. Оценка энергии межатомных взаимодействий

2.6. Заключение

Глава 3. Влияние обменной корреляции электронов на положение равновесия в реакциях таутомерии Р-дикетонов

3.1. Особенности делокализации электронов в енольном остове

3.2. Кросс-конъюгация в рассмотренных енолах

3.3. Заключение

Глава 4. Влияние электронной делокализации на скорость гидролиза цефалоспоринов металло-Р-лактамазой L1

4.1. Роль электронной обменной корреляции в ходе переноса протона в частично гидролизованных цефалоспоринах

4.2. Влияние заместителей в цефалоспоринах на свойства водородной связи №-Н-0

4.3. Роль электронной обменной корреляции в ходе образования двойной связи в тиазиновом кольце цефалоспоринов

4.4. Взаимосвязь между переносом протона и формированием двойной связи 74 в тиазиновом кольце цефалоспоринов

4.5. Чувствительность эффектов электронной делокализации в частично 75 гидролизованных цефалоспоринах к протоколу расчета

4.6. Заключение

Глава 5. Влияние электронной обменной корреляции на микроскопические свойства водородных связей

5.1. Электронная обменная корреляция и влияние донора и акцептора

водородной связи на электронную плотность

5.2. Электронная обменная корреляция и энергия водородной связи

5.3. Заключение

Результаты и выводы

Список литературы

Приложение

Введение