

Квантовая химия кукурбит[*n*]урилов и соединений включения на их основе

© Гришаева Татьяна Николаевна,¹ Маслий Алексей Николаевич,^{1*}
Баковец Владимир Викторович² и Кузнецов Андрей Михайлович^{1*†}

¹ Кафедра неорганической химии. Казанский государственный технологический университет.
Ул. К.Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: (843) 231-41-22. E-mail: am_kuznetsov@kstu.ru.

² Лаборатория синтеза и роста монокристаллов соединений РЗЭ. Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН. Пр. ак. Лаврентьева, 3. г. Новосибирск, 630090. Россия.

Тел.: (383) 33-08-465. E-mail: becambe@che.nsk.su.

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: кукурбит[*n*]урилы, квантовая химия, квантово-химические расчеты, супрамолекулярная химия.

Аннотация

В работе приведен краткий обзор работ, посвященных изучению химии семейства кукурбит[*n*]урилов с помощью методов квантовой химии. В частности рассмотрены работы по исследованию структуры макроциклов, специфики механизмов их формирования, а также структурных и других характеристик некоторых соединений включения на их основе.