

**Л.А. Грибов**

# **БИБЛИОГРАФИЯ**



**Москва, 2013**



**РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК**

**Институт геохимии и аналитической химии  
им. В.И. Вернадского**

---

**Л.А. Грибов**

**БИБЛИОГРАФИЯ**



## ОГЛАВЛЕНИЕ

Сам о себе	5
Индекс цитирования	29
Диссертации, монографии, монографические статьи, учебники, учебные пособия	33
Статьи к юбилеям	37
Список статей	39
Сборники программ для ЭВМ	111
Публицистические статьи	113
Газетные статьи	115
Диссертации, защищенные под руководством проф. Л.А. Грибова	117



## **САМ О СЕБЕ**

### **Personal narrative**

Благосклонному вниманию коллег предлагается краткая справка о том, что автору удалось сделать в науке и список публикаций, как доказательство истинности изложенного.

Автор вовремя вспомнил К. Пруткова и его глубокое замечание: «Что скажут о тебе другие, коли ты сам о себе ничего сказать не можешь?» После совета с самим собой было решено написать немного о жизни и о том, как развивалась логика научных исследований и что являлось причиной появления той или иной работы, тем более, что «герой» никогда не принадлежал к уже сложившейся научной школе и никогда не имел научного руководителя. Как известно, и то, и другое часто на длительное время определяет тематику научных исследований даже достаточно крупных ученых. Автор, работавший в ряде научных направлений, имевших иногда, на первый взгляд, мало общего, и самостоятельно без существенного внешнего воздействия выбиравший эти направления, подчинялся, в основном, некоторому внутреннему чувству, которое иногда называют логикой научного развития. Именно поэтому авторский рассказ о последовательности научных поисков может оказаться интересным.

Итак, начну рассказ «от первого лица».

Я родился в 1933 г. в Москве, где и прожил всю жизнь за исключением 2,5 лет эвакуации во время Войны. В 1951 г. я с золотой медалью окончил в Москве обычную школу № 529. Здесь в 10-м классе у меня произошло столкновение с комсомолом, которое едва не стоило мне не только медали, но и кое-чего, гораздо более существенного. Спасло то, что я был первым учеником и кандидатом на золото, что тогда ещё не так легко раздавалось. Причина состояла в том, что я оказался одним из главных инициаторов переизбрания, без согласования с райкомом комсомола, комсорга школы. Это было воспринято как ниспровержение основ. Опасность ситуации я осознал после того, как мой отец мне объяснил, что я могу поехать в Магадан. В результате я сразу поумнел и в дальнейшем от всего "руководящего и направляющего" старался держаться подальше.

Это не избавило меня, однако, от лицемерия карикатур на себя в МГУ (по случаю моего сомнения в целесообразности соревнования в скорости собирания комсомольских членских взносов) и, далее, в Институте физической химии АН (первое место моей работы после окончания МГУ), когда я с целью сохранения своих единственных в то время штанов запросил спецодежду при направлении на воскресник в метро. Вообще, я, как написал поэт И. Губерман, "не вставал в ряды борцов, но жил я – поперёк, мой вклад в историю – лицо, которое сберёг".

Вот это "поперечное положение" активные борцы за коммунизм всегда нюхом чувствовали, что и приводило к следствиям.

После защиты докторской диссертации началась компания по вовлечению меня в партию. Я избрал средством защиты утверждение, что это, конечно, моя заветная мечта, но я ещё не чувствую себя достойным и т.д. Подобные разговоры в партбюро всегда напоминали мне сцену дискуссии Кутузова и австрийского генерала из "Войны и мира" о нежелании первого наступать. Толстой так выразил мысль Кутузова: "Вы имеете полное право не верить мне, и даже мне совершенно всё равно верите ли Вы мне или нет, но Вы не имеете повода сказать это". Сближение позиций не происходило, но от меня, в конце концов, отстали.

Базовое естественно-научное образование я получил на физическом факультете Московского университета, куда поступил в сентябре 1951 г. и который окончил в декабре 1956 г. Интересно, что я, вопреки общей моде того времени, никогда не хотел специализироваться в области ядерной физики и сделал всё возможное, чтобы уйти с соответствующего отделения, когда без своего согласия (тогда его никто и не спрашивал) был на него зачислен. Это было не просто. Совсем вырваться всё же не удалось, и я попал на кафедру оптики, которая числилась в составе ядерного блока.

Состав профессоров на физфаке был очень сильным. На лекции проф. Ефимова по матанализу ходили даже больные. Прекрасными лекторами были проф. Власов, акад. Леонтович и др. Слушая курс квантовой механики акад. Тамма, мы никак не могли понять, когда сложное-то начнётся, т.к. заранее были уверены, что усвоить этот предмет нормальный здоровый студент в принципе не может.

Лазерный бум был ещё впереди, и на кафедре оптики изучались главным образом спектры атомов и молекул. Это в дальнейшем и привело меня в «молекулярный мир». Занимался я экспериментом и ни о какой теории не помышлял, тем более, что теоретическая физика в тот период ассоциировалась опять-таки главным образом с ядерной.



В те далекие времена на физическом факультете был семестровый курс химии, что было, как я уже потом сообразил, абсолютно правильным. Тогда же мы с энтузиазмом пели: «Только физика – соль! Остальное всё – ноль!» Вполне возможно, что в наказание за юношеское недомыслие, Господь на всю жизнь связал меня именно с химией, а, точнее, с необъятным и в высшей степени интересным миром молекул. Курьёзно, что на экзамене по химии в конце первого семестра мне достался вопрос о комплексных соединениях. Я знал о них только то, что при записи их формул используются квадратные скобки. Так случилось, однако, что, когда в феврале 1957 г. я начал работать в Институте физической химии АН, то мне пришлось исследовать спектральными методами именно комплексные соединения платины!

То, что я кончал экспериментальную кафедру, имело большое значение: я на всю жизнь усвоил, во-первых, как надо эксперименты производить, а во-вторых, понял разницу между наблюдаемыми характеристиками и используемыми в различных теориях. Этим я всегда отличался от многих «чистых» теоретиков, которые нередко так любят теории и модели, что забывают о необходимости соответствия их практике!

Первая моя научная работа была выполнена и опубликована, когда я был ещё студентом. При этом делал её не на своей кафедре, а в лаборатории в то время ещё доцента И.А. Яковлева. Работа была посвящена изучению фазовых переходов в кристаллах. За неё я получил грамоту и премию МГУ.

Наступило время дипломной работы. Мне было предложено попытаться зарегистрировать и изучить ИК спектры веществ, удерживающихся на сорбентах при хроматографическом анализе. После полугодовой работы я не сумел обнаружить ни одного спектра сорбируемого вещества. Кроме того, у меня вышел из строя прибор – ИКС–2. Обращения к руководителю ни к чему не привели. Надо было спасаться! Я обошел весь МГУ и нашел исправный ИКС–2 в Астрофизическом институте, где мне разрешили работать. Далее, я напрямую связался с химиками из Института физической химии АН, которые дали мне довольно большое число разнообразных образцов. В-третьих, боясь, что в эксперименте вообще ничего не получится, я занялся теорией действия инфракрасных двухлучевых спектрометров и вообще действием следящих систем.

В результате всего этого искомые спектры обнаружились, а занятия собственно приборной частью привели к публикации моих первых совершенно самостоятельных работ. Таким образом, дипломная работа была выполнена мною, фактически, без руководителя. Это «везение» продолжалось и дальше.

Много лет спустя я использовал свое знакомство с теорией следящих систем в учебнике «Основы физики» для того, чтобы объяснить, с одной стороны, физику прямохождения человека, а, с другой, неизбежность экономического провала социалистической системы.

Работая в области прикладной ИК спектроскопии, я довольно быстро почувствовал дискомфорт от того, что вижу я одно – положения полос поглощения и их интенсивности, а вывод должен быть о другом – что же делается внутри молекулы или комплекса? Я понял, что для эффективного применения ИК-спектроскопии как метода изучения строения и свойств молекул необходимо установить однозначную физическую связь между характеристиками, описывающими модель молекулы, и их, как теперь говорят, спектральными отображениями на классе измеряемых величин.

Эта связь устанавливается соответствующей теорией. Так я пришел к выводу о необходимости эту теорию знать и научиться делать соответствующие расчеты. Высший уровень теории в то время был изложен в классической двухтомной монографии М.В. Волькенштейна, М.А. Ельяшевича и Б.И. Степанова «Колебания молекул» (Изд. 1949 г.). Эта монография была отмечена Государственной премией (тогда Сталинской).

Все последующие отечественные спектроскописты–теоретики на этой книге выросли!

При изучении теории колебаний молекул я обнаружил, что если проблема расчёта частот колебаний разработана достаточно хорошо, то теория интенсивностей полос поглощения в инфракрасных (ИК) спектрах и линий в спектрах комбинационного рассеяния, выглядит значительно хуже, особенно в смысле математического оформления. Я начал думать над тем как этот недостаток устранить. В результате в 1959 г. в ДАН СССР по представлению акад. А.Н. Теренина была опубликована моя статья, где впервые была приведена удобная для практических расчетов и общих исследований формула для интенсивностей полос в ИК спектрах. Эта формула оказалась очень удачной и иногда цитируется в монографической литературе как формула Грибова. Так началась моя работа в области теории колебательных спектров сложных молекул. В дальнейшем я получил целый ряд следствий из этой общей формулы. Одна за другой стали выходить из печати мои статьи по разным вопросам теории интенсивностей в ИК спектрах. В 1960 г. я решил оформить всё это в виде кандидатской диссертации. Писал я её 22 дня. При этом я не был в аспирантуре и не имел руководителя. Это последнее привело к тому, что мне никак не удавалось пристроить работу где-нибудь в Москве, несмотря на десяток публикаций в самом престижном журнале

«Оптика и спектроскопия». Везде все «увядали», как только узнавали, что я, подобно кошке, хожу сам по себе.

Здесь уместно вспомнить и то, что моя "поперечность" не только привела к карикатуре в стенгазете, но и к тому, что мне было запрещено сдавать кандидатский минимум как соискателю. Это был, я думаю, единственный случай в истории АН! Более того, меня собирались уволить по сокращению штатов, хотя у меня уже было более десятка публикаций в научных журналах. Помог случай. Директор Института геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского АН академ. А.П. Виноградов хотел завести у себя группу по молекулярной спектроскопии. Узнав о том, что физхимия как раз от такой группы хочет избавиться, А.П., пользовавшийся в АН очень большим влиянием, просто перевёл нашу группу к себе. Так в феврале 1960 г. я оказался в ГЕОХИ, где и проработал более 50-ти лет. С самого начала А.П. относился ко мне очень хорошо, несмотря на то, что парторг физхимии срочно прибежал к парторгу ГЕОХИ и предупредил его, с каким ужасным сотрудником придётся иметь дело. Впоследствии зам. директора Д. Рябчиков рассказал мне, что А.П.отреагировал, сказав "Про плохого человека столько не наговорят!" Мне кажется, что моё поведение ему импонировало.

Никаких препятствий в ГЕОХИ со сдачей минимума, конечно, не было, но руководитель у меня не появился.

В том же 1960 г. я написал письмо акад. А.Н. Теренину, где нахально изложил свой взгляд на то, что без теории не проживешь, что этим работам надо уделить внимание и т.д. Нормальный ученый с положением А.Н. Теренина в науке повесил бы мое письмо на гвоздик в комнате уединения. Академик А.Н. Теренин нормальным ученым, к счастью, не был, а просто имел мировую известность. Он, поэтому, направил мое письмо в Минск, в то время Мекку теоретической молекулярной спектроскопии, где работали основатели и лидеры этой области науки – переехавшие из Ленинграда академики АН БССР М.А. Ельяшевич и Б.И. Степанов, который был директором Института физики, теперь названного его именем. А.Н. Теренин не только написал письмо М.А. Ельяшевичу, но и посоветовал ему «обратить внимание на этого молодого человека, у которого, кажется, есть будущее!». М.А. Ельяшевич потом много раз рассказывал мне об этом.

М.А. Ельяшевич пошел со всей перепиской к Б.И. Степанову, и они решили провести в феврале 1961 г. в узком кругу совещание по теории молекулярных спектров, куда пригласили и меня. Я привез с собой диссертацию и просил М.А. Ельяшевича её прочитать. М.А. Ельяшевича вопрос о том есть ли у меня руководитель или нет не волновал. Через два дня он сказал мне, что работа ему понравилась.

Он даже сговорился с Б.И. Степановым, чтобы предзащиты вообще не устраивать, т.к. мне лишний раз приезжать в Минск трудно. Дальше всё пошло как по маслу, и в июне 1961 г. в Минске я диссертацию защитил. При этом выступавший оппонентом М.А. Ельяшевич в отзыве отметил, что поставил бы вопрос о защите сразу докторской, если бы было побольше примеров расчетов. С этого времени началась моя длительная научная и дружеская связь с минской школой теоретической спектроскопии, что сыграло в моей жизни колоссальную роль.

Один интересный момент: всем участникам совещания были заказаны люксы в гостинице "Минск". Платить мне было нечем. Я обратился к Б.И. и сказал, что в феврале ночевать на улице как-то некомфортно. Никаких других мест, как и всегда и во всех советских гостиницах не было. Б.И. умел искать нестандартные решения. Мне поставили раскладушку в кабинете зам. директора, где я и ночевал. Тогда зам директора был ныне академик РАН Н.А. Борисевич, в прошлом ещё и Президент АНБ. Он против моего вторжения тоже не возразил. Могу сказать, что с тех пор всю жизнь нас связывают дружеские чувства.

Вскоре после защиты диссертации я был приглашен читать лекции по теории колебательных спектров на кафедре оптики МГУ, что и делал несколько лет. Это оказалось для меня чрезвычайно полезным, т.к. заставило заниматься всей теорией, а не только тем её разделом, который посвящен интенсивностям полос и линий в молекулярных спектрах. Постепенно я переработал всю теорию.

В 1963 г. вышла из печати в издательстве АН СССР моя первая монография «Теория интенсивностей в ИКС многоатомных молекул». Она, как и все последующие, была целиком построена на оригинальном материале и настолько «попала в точку», что уже через год с дополнениями была переведена и издана в США. До сих пор на неё ссылаются во всех монографиях, изданных в мире по теории молекулярных спектров. Успех монографии имел и то следствие, что меня пригласили с пленарным докладом на Гордоновские чтения в США, куда меня партбюро не пустило. В 1967 г. мне было предложено выступить с пленарным докладом на Европейском конгрессе по молекулярной спектроскопии, что, благодаря вмешательству в дела партии академика А.П. Виноградова, удалось. Это, конечно, было большой честью.

В 1963 г. проф. В.М. Чулановский – в то время глава ленинградских спектроскопистов–молекулярщиков – пригласил меня прочесть годовой цикл лекций по теории спектров на физическом факультете Ленинградского университета. А.П. Виноградов на это согласился сразу, хотя я целый учебный год не был в ГЕОХИ. Проф.

В.М. Чулановский сам прослушал все лекции и рекомендовал обработать курс и издать в ЛГУ. В результате в 1965 г. появилась моя третья монография.

Ещё в 1964 г. я решил, что можно защищать докторскую диссертацию. С этой идеей я явился к Б.И. Степанову. Он отреагировал так: «Да Вы же только что кандидатскую защищали! Впрочем, кто сказал, что нужно ждать 10 лет? Что войдет в Вашу новую диссертацию?» Заручившись одобрением, я стал писать диссертацию, что и заняло у меня 18 дней. Может возникнуть сомнение в том, что сроки 22 и 18 дней нереальны. Всё зависит от того, что понимать под писанием. Я собирал диссертации тогда, когда было несколько статей или, как в докторской, книг. Применялся метод «режь – клей», что и обеспечивало скорость. Введения, заключения и литобзоры меня никогда не затрудняли, хотя в моих собственных монографиях литобзоры вообще отсутствуют. В январе 1965 года я защитил докторскую диссертацию, снова в Минске. Мне было 31.5 лет.

Разумеется, не принадлежа к влиятельному клану, я своей активностью нажил себе сильных врагов. Не поддержки меня М.А. Ельяшевич и Б.И. Степанов, мне пришлось бы трудно.

В середине 60-тых годов авторам «Колебаний молекул» пришла в голову мысль подготовить новое издание, но осовремененное. Они просили меня сделать это. Я сказал, что времени прошло много и просто косметики недостаточно. Тогда они предложили мне стать соавтором нового издания с тем, чтобы я делал, что хочу. Я начал работу над книгой в середине 60-тых и занимался этим года три-четыре. Когда рукопись была готова, то мы все собрались в Минске, чтобы обсудить, что получилось. Здесь возникла совершенно необычная ситуация. Проводивший совещание Б.И. Степанов заявил, что получилась совершенно новая книга и что Грибов может её издать и один. Есть, однако, известная преемственность в идеях, плане и т.д. Предлагается отметить в предисловии особый вклад Грибова. Когда оно было написано, то тот же Б.И. Степанов, поддержанный сразу же М.А. Ельяшевичем и М.В. Волькенштейном, сказал, что предисловие подпишут только три классика, т.к. из-за весьма лестных слов в мой адрес, «Вам, Лев Александрович, такое предисловие подписывать неудобно!»

Я думаю, что в науке и научных публикациях это совершенно уникальный случай. Мне аналог неизвестен. Это предмет моей гордости в течение всей жизни и важнейший урок. Трое блестящих ученых, признанных классиков большой области науки, обладавших громадным научным авторитетом, этим актом как бы объявляли меня своим преемником и наследником и рекомендовали меня в этом

качестве научной общественности. Интересно, что во втором издании «Колебаний молекул», общим объемом 700 стр., нет в тексте ни одной ссылки на работы других авторов, кроме перечисленных на титульном листе, поскольку всё, что там написано, было сделано ими, все формулы и вычислительные приемы были вполне оригинальными и в привлечении чужих работ для «заполнения дыр» или воздания должного первенству не было никакой необходимости.

Могу отметить, что второе издание «Колебаний молекул» в течение многих лет играло ту же роль, какую в свое время первое.

В этот же период и даже несколько ранее начали складываться и мои дружеские отношения с М.А. Ельяшевичем и Б.И. Степановым. По возрасту нас разделяло целое поколение. Учеником в обычном понимании этого слова ни у одного из них я не был. Я никогда не работал в руководимых ими коллективах, и они не подсказывали мне, чем надо заниматься. Но это были очень крупные личности, и они научили меня большему, чем науке – человеческим отношениям!

Очень рано я понял, что без широкого привлечения тогда ещё только что появившихся ЭВМ (я начал работать на ЭВМ «Стрела», которая имела «бешеную» скорость – 2500 операций в секунду!) ни о каких практических приложениях развиваемой, в частности и мною, теории не может быть и речи. Я пользовался тогда программами проф. А.М. Богомолова, в дальнейшем известного ученого и ректора Саратовского университета. Я, однако, с самого начала выработал для себя некоторые общие принципы, которых неуклонно придерживался в дальнейшем. Принципы эти следующие: программное обеспечение должно быть максимально сервисным, чтобы пользоваться им могли физики, химики, биологи и др. т.е. исследователи, для которых важен результат, а не процесс его получения; всё, что позволяет делать теория должны «уметь» делать и программы; только то математическое оформление теории имеет право на существование, которое «удобно для ЭВМ»; все, что можно автоматизировать и делать без участия оператора, должно быть автоматизировано; каждый новый шаг не должен «зачеркивать» предыдущие.

Такой взгляд на вещи привел к определенному стилю всех наших теоретических работ: сразу же за получением нового теоретического результата следовала стадия написания соответствующей программы и эффективность предлагаемого вычислительного приема проверялась «реакцией ЭВМ». Исследователь «воздействовал на ЭВМ», но и общение с ЭВМ и попытка создать универсальное и удобное программное обеспечение приводило к «обратной связи» ЭВМ – исследователь, заставляя создавать новые алгоритмы, искать взаимосвязи между этапами вычислений и т.д. Человек «учил» компьютер, но и компьютер «учил»

человека. К счастью, при развитии этого направления я нашел прекрасного помощника, в дальнейшем доктора и профессора – В.А. Дементьева, – который и принял на себя труд создания программного комплекса.

Развитие теории колебательных спектров и параллельное создание сервисного программного обеспечения для ЭВМ полностью избавило отечественных ученых на многие годы от зависимости от состояния этой области науки в развитых странах. Более того, мы явно опережали мировой уровень. Опыт разработки специальных алгоритмов и комплекса взаимосвязанных программ, обеспечивающих при минимальном участии оператора возможность массовых расчетов ИК спектров сложных молекул произвольного строения был в дальнейшем обобщен в монографии «Методы и алгоритмы вычислений в теории колебательных спектров молекул» (1983 г.).

В ГЕОХИ я впервые столкнулся с проблемами, выдвигаемыми аналитической химией. Вначале я принимал участие в решении довольно большого числа, но все же частных задач. Принципиально новое началось после моего сближения с ныне широко известным «мистером арсеназо» – профессором С.Б. Саввиным. Он обратил мое внимание на органические реагенты, действие которых основано на изменении электронного спектра в видимой или ближней ультрафиолетовой (УФ) области при комплексообразовании. К этому времени я уже был внутренне готов «расширить свой спектральный диапазон» от ИК до ультрафиолета и перейти от движения ядер к движению электронов.

У нас с С.Б. появился совместный аспирант – Э.Л. Кузин, – и в 1967 г. была опубликована первая в литературе работа, где теория спектров и квантовая химия были применены для решения «чисто аналитических» проблем. В дальнейшем такой подход был подхвачен и развит другими исследователями. В результате квантовая химия и теория электронных спектров стали достаточно привычными методами в важном разделе аналитической химии.

Сотрудничество с С.Б. Саввиным продолжалось много лет. Это сотрудничество и «научная жадность» и привели к тому, что я «всерьез влез» в обширную область науки, которая и называется квантовой химией. Этому способствовало и мое участие как лектора в регулярно проводившихся в то время летних школах по квантовой химии и чтение в продолжении ряда лет по приглашению академика И.П. Алимарина курса лекций по квантовой химии на факультете повышения квалификации при Химическом факультете Московского университета.

Как и лекции по теории спектров, такая преподавательская деятельность заставила взглянуть на всю область в целом и попытаться найти такие методические приемы и стиль изложения, которые позволили бы донести понятия, выводы и вычислительную сторону этого направления теоретической физики до аудитории, не обладавшей профессиональной общезначимой и математической подготовкой. К собственным научным достижениям в квантовой химии я отношу, во-первых, детальное рассмотрение вопроса о внутримолекулярных влияниях и физических причинах воздействия удаленных от реакционных центров полярных заместителей на вероятность ион-молекулярных реакций протонирования и комплексообразования и, во-вторых, подход к анализу характера химических связей произвольного типа на универсальном языке электро-ядерных взаимодействий. Это позволило с одной и той же точки зрения дать наглядную картину физической природы не только простейших типов химических связей, но и весьма сложных, например, в ферроцене и фуллеренах.

Как опыт преподавания, так и полученные оригинальные научные результаты в дальнейшем вошли в написанные мною совместно с моей ученицей – проф. С.П. Муштаковой – учебник для вузов «Квантовая химия». Интересно, что проф. С.П. Муштакова – химик-аналитик по образованию – начала применять методы квантовой химии как раз для анализа строения и действия органических реагентов, но затем настолько «вошла во вкус», что поставила и много лет читает на химическом факультете Саратовского университета регулярный курс квантовой химии, сопровождающийся соответствующим практикумом.

В 1967 г. я был приглашен занять кафедру физики в Московской сельскохозяйственной Академии им. К.А. Тимирязева. Через год мне присвоили звание профессора. Замечу, что лабораторию в ГЕОХИ я получил лишь в 1977 г.

Основал кафедру и много лет возглавлял её очень известный физик – В.А. Михельсон. При нем кафедра почиталась второй после МГУ. К тому времени, когда я оказался заведующим, кафедра пришла в абсолютный упадок. Мне пришлось целиком сменить два состава (из первого уцелел лишь проф. В.А. Дементьев), подготовить и удержать целый ряд учеников, чтобы постепенно кафедра стала моим рабочим инструментом. Достаточно долгое время я пользовался полной поддержкой ректоров. Довольно рано я получил возможность заключать хоздоговора, в основном с «ящиками», что обеспечило, во-первых, финансовую независимость и, во-вторых, возможность найма сотрудников по моему усмотрению. Выделялось довольно много аспирантских единиц, которые я и занимал, естественно, не



выпускниками Сельхозакадемии. В результате образовалась структура, практически аналогичная наиболее эффективной структуре научных подразделений в развитых странах: постоянный состав лидеров или просто квалифицированных специалистов в отдельных направлениях и непрерывный проходящий поток аспирантов, стажеров и соискателей, подобно свежей крови омывавших «центральный орган» и не позволявший ему «заснуть». Возникшей в ТСХА научной базе я обязан по меньшей мере половине всех результатов, которые я считаю своими достижениями. Об уровне кафедры как научного подразделения объективно свидетельствует тот факт, что в течение почти 20 лет мы проводили ежегодно Всесоюзные конференции по теории строения и спектров сложных систем, участие в которых считалось престижным и на которых в качестве приглашенных пленарных докладчиков выступали все ведущие в стране специалисты в области теории молекулярных спектров, квантовой химии и смежных наук. Стиль этих конференций, оказавшийся очень удачным, был перенесен на конференции по молекулярному моделированию, которые также начали регулярно организовываться в последние годы в ГЕОХИ. К сожалению, после моего и моих сотрудников ухода с кафедры она быстро вернулась к исходному состоянию.

Работа на кафедре имела для меня ещё то значение, что направления научных исследований, темы для диссертаций и др. избирались только мною под воздействием того, что и называется логикой научного развития. Моде я никогда не следовал и «бежать в толпе» за лидерами никогда не стремился. Может быть, поэтому группа окружавших меня ученых всегда занимала в науке свое место, причем не в ряду других, а несколько впереди. Могу сказать, что такой стиль работы вполне себя оправдал. Трудность здесь состоит в том, что для этого надо было иметь свои научные идеи, а не выуживать их со стороны путем заглядывания за забор!

Моя докторская диссертация подводила некоторый итог моим теоретическим работам в области колебаний сложных молекул. После её защиты я, естественно, задал себе вопрос: а что дальше-то делать? Наиболее тематически близким был путь от сложных молекул к полимерам и кристаллам. Я этим и стал заниматься, вначале вместе с появившейся в это время моей аспиранткой – Т.С. Абиловой. Теория колебаний полимерных цепей в это время уже существовала. Но обладала двумя крупными недостатками. Во-первых, она была сформулирована только для бесконечно длинных регулярных цепей, что приводило к логическому разрыву при анализе конечных объектов и бесконечных. Напомню шутку: когда теоретика просят решить задачу об устойчивости стула на четырех ножках, то он довольно

быстро приносит решения об устойчивости объекта на одной ножке и на бесконечном числе ножек, а всю остальную жизнь ищет ответ на изначально поставленный вопрос. Во-вторых, в теории ИК спектров полимеров не была решена задача об интенсивностях полос.

В результате целенаправленных исследований и использования свойств кронекеровских произведений матриц и ранее развитого в теории ИК спектров сложных молекул подхода к вычислению интенсивностей отмеченные два недостатка существовавшей теории были устранены и появилась новая теория и расчетная схема достаточно замкнутая и пригодная как для работы с олигомерами с учетом концевых групп, так и с длинными полимерными цепями, а также кристаллами и молекулами, находящимися на поверхности кристалла. В 1977 г., когда вся работа приобрела более или менее законченный вид и была «обкатана» на ЭВМ, вышла моя монография «Теория ИКС полимеров».

В дальнейшем необходимость усовершенствования некоторых математических аспектов этой теории привели, на мой взгляд, к очень интересному общему результату: было показано, что широко применяющаяся в теоретической физике теория возмущений в форме рядов является следствием метода вращений Якоби при малых углах поворотов. Была предложена новая формула, удобная для вычислений и адекватная решаемой задаче.

В разрабатываемом нами программном обеспечении появился достаточно эффективный «полимерный» блок, непосредственно связанный с базовой частью и позволяющий решать задачи о периодических структурах независимо от их длины. В результате был создан теоретический фундамент для применения ИК-спектроскопии при изучении процессов роста цепей при полимеризации. К сожалению, после отъезда некоторых основных действующих лиц за границу работы в этом направлении прекратились, и ряд математических моментов оказались незавершенными.

Все годы моей работы на кафедре продолжалось дальнейшее развитие как теории колебательных спектров, так и программного обеспечения.

Задача перехода к массовым расчетам с учетом «истории» изучения своего класса соединений в конкретной химической лаборатории требовала таких методов, которые позволяли бы при переходе к новому соединению в полной мере учесть уже накопленный опыт расчетов предшествующих. Это привело нас к созданию так называемого фрагментного метода расчета спектров молекул и формированию соответствующих банков параметров молекулярных моделей. Как метод, так и банк данных о параметрах были реализованы в форме специального программного обеспечения

и оказались очень эффективными. Современный банк позволяет оперировать с молекулами, относящимися к самым разнообразным классам и содержащими не только типичные для органических соединений атомы, но и целый ряд важнейших гетероатомов. В результате, опираясь на относительно небольшое число молекул, можно, комбинируя их фрагменты, создавать практически неограниченное число структур и рассчитывать их свойства.

Проблема дальнейшего совершенствования программ, их тестирования и сравнения, когда работа производится в разных центрах, естественно потребовала такого издания, в котором содержались бы все необходимые исходные данные для абсолютно точного воспроизведения результатов ранее выполненных расчетов спектров сложных молекул произвольной структуры. Такой материал в мировой литературе отсутствовал.

Этот пробел был заполнен нами в трех монографиях «Интерпретированные колебательные спектры ...» (1986, 1987 и 1988 г.г., общий объем более 1300 стр.), вышедших в Изд. «Наука».

В 1967 г. ко мне обратился М.Е. Эляшберг – сейчас профессор и ведущий специалист в области экспертных систем для диагностики и исследования сложных соединений. Он просил меня поставить ему тему кандидатской диссертационной работы и быть её руководителем. Я в это время думал как раз о новых задачах и возможности привлечения к их решению идей и методов таких областей как теория информации и др. В частности, хотелось формализовать типично спектральную задачу – структурно–групповой анализ.

Как это сделать – было совершенно неясно. Я предложил М.Е. Эляшбергу подумать об этом. Через некоторое время М.Е. пришел ко мне с предложением использовать для формализации задачи о структурно–групповом анализе аппарат дискретной математики – булевой алгебры. Первая работа в развитие этой идеи была опубликована нами в 1968 г. В 1970 г. в «J. Molec. Struct.» появилась наша большая статья о применении символической логики в спектрохимии. Прошло много лет, но до сих пор эта статья как основополагающая цитируется практически во всех монографиях о математизации химии, т.к. она явилась вообще одной из первых, наряду с опубликованными в это же время учеными из США и Японии, где было обращено внимание на эффективность методов дискретной математики в химии как науке, базирующейся на утверждениях «если ..., то ...», или «черных ящиках». Решение упомянутой задачи и последующие работы в том же направлении позволили мне выступить в 1971 г. на организованной акад. В.А. Коптюгом I-й Всесоюзной конференции с проблемным пленарным докладом «О возможности автоматизации исследования

строения и свойств молекул по их спектрам». Это было началом целого нового направления – создания теории и действующих версий так называемых экспертных систем. Через полтора года в Портороше (Словения) я делал аналогичный пленарный доклад уже на I-й Международной конференции по компьютеризации химических исследований и обучения.

Это было международным признанием нашего первенства.

История развития теории и практической реализации экспертных систем была довольно длительной. Происходило становление совершенно новой области, где было много неясного даже и по постановке задач. Обдумывание этого выводило нередко на проблемы совершенно общего характера. Например, при формировании так называемых баз знаний возник вопрос о том, можно ли сформировать такой материал, который являлся бы совершенно объективным. Выяснилось, что достичь полной объективности нельзя в принципе, что и пришлось учитывать при разработке всей архитектуры системы. Более того, необъективность эта оказалась связанной не с недостатком наших знаний, а с фундаментальными особенностями самого процесса познания и построения обобщений – теорий, диктуемыми великим принципом дополнительности Н. Бора. Это стимулировало ряд моих работ, посвященных общей методологии исследований микромира, некоторые выводы из которых я использовал, в частности, при написании учебника для вузов «Основы физики».

В дальнейшем мои соображения составили содержание специальной главы коллективной монографии «Философия естественных наук» (2006 г.), рекомендованной в качестве учебного пособия для студентов и аспирантов.

Интересно отметить, что сам термин – экспертные системы – с самого начала не употреблялся. Лишь потом это направление выделилось в целом ряде наук, в частности, в медицине. Мы вовремя начали то, что «носилось в воздухе!»

Сейчас экспертные системы «ушли в практику» и достигли по своим возможностям такого уровня, о каком не подозревалось в начале пути. Громадную роль здесь сыграл теперь профессор М.Е. Эляшберг. Мне приятно, однако, что предыдущая, уже довольно развитая система, получила в зарубежных монографиях название «системы Грибова». Обобщение работ первого периода становления экспертных систем было дано в 1979 г. в моей с М.Е. Эляшбергом статье, которая была написана по инициативе редколлегии журнала «Crit. Rev. in Anal. Chem.» и которая полностью заняла целый выпуск журнала. Через год вышла наша монография «Молекулярный

спектральный анализ и ЭВМ», построенная как и все остальные мои монографии, целиком на оригинальном материале.

В 1977 г. ко мне в аспирантуру ТСХА поступил В.И. Баранов. В это время для меня было ясно, что вслед за теорией колебательных спектров сложных молекул и созданием методов их расчета и теорией чисто электронных спектров должны последовать теория и методы расчетов электронно-колебательных спектров. Начать решение этой задачи и было рекомендовано В.И. Баранову, который в дальнейшем тоже стал профессором и лидером соответствующего направления в учении о спектрах и способах их расчета. С физической точки зрения все было ясным, но предстояло сообразить, откуда брать характеристики потенциальных поверхностей электронно-возбужденных состояний, как вычислять в разных приближениях нужные матричные элементы, ввести в теорию переносимые параметры и др. Вся проблема в целом оказалась столь сложной, что и до сих пор есть чувство неудовлетворенности состоянием некоторых важных аспектов. Тем не менее, многое удалось сделать и довести методы вычисления тонкой структуры электронных полос поглощения и люминесценции в спектрах сложных молекул до степени более или менее рутинных операций. Как и всегда, все разрабатываемые вычислительные приемы создавались так, чтобы обеспечить полную взаимосвязь с ранее развитой теорией молекулярных спектров и уже существующим программным обеспечением. Итог работам в этом направлении был поведен в двух монографиях о теории и методах расчетов электронно-колебательных спектров многоатомных молекул, изданных в 1984 и 1997 г.г.

Уже неоднократно говорилось о том, что все работы по теории оптических молекулярных спектров проводились практически параллельно с созданием и развитием программных комплексов для ЭВМ. В результате появилось несколько версий программ, которые получили обозначение LEV. По своей алгоритмической базе, разнообразию решаемых задач и внутренним связям между отдельными блоками комплекс сейчас вряд ли имеет равные в мире. Принципиально важно, что комплекс легко достраивается, если в самой теории возникают новые возможности.

Так случилось, например, когда мы начали работы по созданию методов решения ангармонических задач. С самого начала ставилась цель создать пригодные для работы с достаточно крупными системами произвольной структуры вычислительные алгоритмы, удобные, к тому же, для программирования на ЭВМ. При этом было ясно, что традиционный основанный на использовании теории возмущений в форме рядов метод для реальных крупных систем непригоден. Исходная идея нового подхода была изложена мною в

статье, опубликованной в 1971 г. Однако прорыв в этом направлении произошел гораздо позже, когда в «игру вступил» теперь профессор, а ранее мой соискатель А.И. Павлючко. Именно ему принадлежит заслуга не просто реализации моих идей, но создание уникального и сейчас наиболее мощного программного комплекса для решения ангармонических задач для достаточно крупных молекул. Проведение серии конкретных расчетов подтвердило эффективность развиваемого подхода и позволило сделать целый ряд интересных выводов о характере ангармонических колебаний и колебаний большой амплитуды сложных молекул. Тем самым подведена теоретическая база для внедрения в спектроскопическую практику обертоновой спектроскопии и спектроскопии высоковозбужденных колебательных состояний. Полученные результаты были также обобщены в монографии о методах решения ангармонических задач, опубликованной в издательстве «Наука» в 1998 г.

К сожалению, остались программно не реализованными также развитые с участием моего аспиранта М.Р. Расовского общие методы вычислений спектров, появляющихся в результате внутренних вращений в молекулах.

В целом результатом многолетних работ явилось создание пригодной для работы с крупными молекулами и проникнутой единой идеологией теории и методов расчета оптических спектров разной природы в диапазоне от далекой инфракрасной области до ближней ультрафиолетовой, т.е. во всем диапазоне, который обычно используется для спектроскопических исследований. Создание эффективных вычислительных алгоритмов позволяет решать так называемые прямые спектральные задачи. Напомним, что под прямыми понимаются такие, когда по заданным моделям молекул, полимеров и кристаллов и их характеристикам вычисляются спектральные отображения, что и позволяет сопоставлять ненаблюдаемые непосредственно параметры моделей с экспериментом. При этом нет никаких ограничений на структуры систем и их размеры.

Более или менее полный итог наших теоретических работ был подведен в обширной (630 стр.) монографии, написанной совместно с проф. Orville-Thomas (но целиком по нашим материалам) по предложению издательства Wiley and Sons и изданной в Англии и США в 1988 г.

Возможность решения прямых задач позволяет решать и обратные, а именно определять внутренние характеристики микрообъектов по наблюдаемым спектрам разной природы и в разных спектральных диапазонах. Тем самым обеспечены условия массового изучения микромира на основе спектров и приемов молекулярного

моделирования. Появление таких условий чрезвычайно важно в связи с резко возрастающим интересом к нанобъектам и соответствующим технологиям.

Очень важно, что в результате логически взаимосвязанных действий, в конечном счете, направленных к одной цели – построению общей теории оптических молекулярных спектров – была выработана методология создания практически пригодных для количественного прогноза теорий и методов расчета свойств объектов микромира и установлена связь этой методологии с фундаментальным принципом познания – принципом дополнительности Н. Бора. Была в деталях осознана дополнительность математического оформления и модельного описания, что получило практическое отражение как в общей теории спектров, так и в архитектуре и принципах работы экспертных систем.

Моей величайшей гордостью является то, что работы этого цикла в 1999 г. были отмечены высшей научной наградой России – Государственной премией – с формулировкой: «За цикл работ по созданию теории и методов расчета оптических молекулярных спектров и разработку экспертной системы для идентификации и анализа сложных соединений». Вместе со мной эту премию получили мои ученики – главные деятели отдельных составляющих – доктора наук и профессора В.И. Баранов, В.А. Дементьев, М.Е. Эляшберг.

Большую роль в моем научном становлении сыграло то, что много лет мне пришлось преподавать общий курс физики. Простой пересказ сильно упрощенных учебников меня с самого начала не удовлетворял. Под воздействием собственно научной работы в достаточно широкой научной области и необходимости отбора материала и поиска методических приемов изложения сложных понятий студентам, я, во-первых, стал задумываться над вопросами о месте физики в системе естественно–научного знания и общечеловеческой культуре, о её методологии, о трансформации некоторых впервые открытых в физике законов на области, от физики далеких и т.д. Все это очень расширило мой кругозор и нашло отражение в учебнике «Основы физики» (совместно с Н.И. Прокофьевой), изданном в 1995 г. и переизданном в 1998 г. Кажется, впервые в нашей учебной литературе была сделана попытка представить физику как открытый предмет, выводы которого не только необходимы для развития техники, но помогают понять, например, общие законы развития общества, экономики и т.д.

Успехи в направлении развития теории и методов расчетов стационарных состояний и спектров дали возможность в последние годы поставить и решить задачу о расчетах спектров люминесценции с временным разрешением (пико и фемтосекундная спектроскопия). В

результате была развита эффективная техника, впервые позволившая рассчитать на количественном уровне трехмерные спектры реальных достаточно сложных молекул в координатах интенсивность линии – волновое число – время. Удалось показать также, что спектры с временным разрешением могут быть использованы для количественных анализов индивидуальных веществ и малокомпонентных смесей без использования эталонов, т.е. образцов стандартного состава.

С проблемой безэталонных спектральных анализов мы встретились уже при работе над экспертными системами. В них отсутствуют с самого начала сведения о спектрах большого числа индивидуальных веществ, как это принято в так называемых информационно–поисковых системах. Сравнимые с экспериментом спектры генерируются в самом процессе работы экспертной системы. Это и обеспечивает возможность проведения безэталонных качественных спектральных анализов.

Отказ от использования натуральных образцов стандартного состава при проведении спектральных анализов является задачей принципиальной важности для аналитической спектроскопии, особенно в тех случаях, когда не требуется высокая точность, но зато возникает громадное разнообразие анализируемых объектов. Такая ситуация как раз характерна для мониторинга окружающей среды.

Нами была выдвинута идея о замене данных, получаемых при использовании натуральных эталонов при проведении количественных анализов, математическими эталонами, т.е. теми величинами, которые непосредственно могут быть получены при расчетах вероятностей переходов между различными энергетическими уровнями сложной молекулы. Эта идея была реализована и предложен метод количественного спектрального анализа на основе стационарных спектров поглощения излучения, а также меняющихся во времени спектров для изучения кинетики реакции. Оказалось, что для этого надо принципиально изменить как набор измеряемых характеристик, так и средства статистической обработки.

Полученные в этом направлении результаты также были обобщены в виде специальной монографии. Многие новые были сделаны уже в последующие годы.

Молекулярные спектры возникают при переходах между уровнями энергии сложной системы. Поэтому создание методов расчета спектров подразумевает, во-первых, отбор наиболее удобных для решения различных задач молекулярных моделей, обладающих общностью, а, во-вторых, разработку способов решения квантовых уравнений для состояний всех таких моделей. Другими словами, решается несравненно более общая проблема, чем собственно



спектроскопическая. Решение такой проблемы создает базу для перехода к задачам следующего уровня – описанию химических превращений. Наиболее простыми являются структурные изомер–изомерные превращения, которые могут возникать как в результате электромагнитных, так и температурных воздействий.

Впервые о теории таких превращений я задумался в 1985 г., а в 1986 г. вышла моя статья, где была приведена важная формула для соотношения между нормальными координатами двух сильно различающихся по структуре состояниями молекул. Вопрос этот уже возникал в теории электронно-колебательных спектров, т.к. потенциальные поверхности двух комбинирующих электронных состояний отличаются друг от друга. Отличия эти, однако, были невелики. Мне удалось решить задачу для произвольного случая. Долгое время этот результат не был востребован. Я вернулся к нему через 10 лет, когда «созрел» для «расширения» теории спектров до теории химических превращений.

Существовавшее состояние теории химических превращений, инициируемых различными внешними воздействиями или происходящих спонтанно, меня не удовлетворяло по многим причинам. Например, до сих пор базовой является модель «перевала через барьер», предложенная несколько десятков лет назад. Главным недостатком модели является отсутствие временного фактора, хотя очевидно, что все химические превращения развиваются во времени. Кроме того, в рамках этой теории не описываются фотохимические реакции, реакции при сверхнизких температурах и целый ряд других молекулярных процессов.

Поэтому следующий шаг в развитии теории химических превращений требовал прежде всего создания таких физических моделей, которые позволили бы, исходя из небольшого числа первых базовых принципов и фундаментальных положений, получить выводы, согласующиеся как можно с большим числом важнейших общих закономерностей молекулярных процессов различной природы (спектральные, структурные превращения и др.). Задачи компьютерного моделирования требовали также, чтобы были указаны способы количественного описания хода таких процессов.

Оказалось, что для получения выводов «из первых принципов» достаточно исходить из немногих базовых утверждений.

1. Локализованная в ограниченном пространстве совокупность атомов может находиться в стационарных состояниях, отвечающих структурным изомерным формам (долгоживущие состояния) или слабо связанным комплексам. Эти состояния характеризуются точками в пространстве в нормальных координатах.

2. При обычных оптических процессах переходы между такими точками (например, изомер-изомерные переходы) не происходят.
3. Химическому превращению любого типа сопоставляется переход от одной точки к другой в пространстве состояний. Такой переход возникает при резонансе уровней энергий комбинирующих подструктур.

Математическим отображением структурного превращения является движение максимума волнового пакета от исходной пространственной формы системы к последующей. Этот процесс можно описать зависящим от времени уравнением Шредингера с матрицей, включающей соответствующие недиагональные матричные элементы взаимодействия комбинирующих подструктур. Значения матричных элементов связываются с интегралами перекрывания электронно-ядерных собственных функций резонирующих состояний. Возникает зависимость миграции волнового пакета от времени, что и позволяет обоснованно ввести понятие вероятности хода химических превращений.

Видно, что все базовые положения достаточно просты и наглядны. В частности, резонанс примечателен тем, что даже при очень малом коэффициенте связи можно полностью передать энергию одной подсистемы другой. Разной будет скорость реакции.

Вся теория, как и обычная теория ЛКАО, базируется на ЛК базисных функций, но уже электронно-колебательных, отвечающих комбинирующим состояниям молекулярной системы. В результате на основе достаточно разумных допущений удалось объединить в одной энергетической матрице электронно-колебательные состояния всех возможных изомерных состояний и, более того, первых стадий мономолекулярных реакций разложения и бимолекулярных реакций присоединения. Это позволило в рамках одного подхода описать как процессы внутри одной изомерной структуры, так и процессы химических изомер-изомерных и более сложных превращений и связать теорию с экспериментальными наблюдениями методом фемтосекундной спектроскопии. Удалось также сформулировать ряд простых и наглядных правил химических превращений и предложить методы расчетов их вероятностей. Была выяснена физическая природа передачи сигналов и энергии внутри сложных молекулярных систем, объяснен механизм распознавания образов в молекулярном мире и др. Тем самым появилась перспектива выхода в область принципиально новых проблем, связанных с необычными внутримолекулярными процессами, с созданием молекулярных машин и устройств, молекулярных приемников и преобразователей информации и т.д.

Сознавая высокую актуальность поставленных проблем, я решил обобщить уже первые результаты в виде монографии, опубликованной в 2001 г. Важно было показать связь нового подхода с ранее развитой теорией колебательных и электронно-колебательных состояний и спектров, преимущество вычислительных процедур, обосновать саму формулировку предлагаемой теории и т.д. Значительно более детальное изложение новой теории с учётом уже и результатов более поздних работ было дано в обширной монографии «Теория и методы расчётов молекулярных процессов», опубликованной в 2006 г. Большое участие в этих исследованиях принял В.И. Баранов – соавтор монографии. Конечно, многое осталось ещё не решенным, но я считал, что только в монографическом изложении, а не серией статей, новый подход можно донести до широких кругов исследователей.

Работы в области общей теории строения молекул и молекулярных процессов естественно привели к необходимости вернуться к казалось бы установившимся проблемам постановки задач о молекулах. В результате были не только уточнены базовые положения традиционных подходов в квантовой химии, но и предложены новые варианты постановки задач с учётом, в частности, квантовой "размазанности" состояний ядер. Это может быть очень важным при изучении так называемых "нагретых" молекул, когда велики энергии колебаний ядер.

Считаю необходимым специально остановиться на исследованиях моего многолетнего сотрудника д-ра Б. К. Новосадова. Моё личное участие в его исследованиях было незначительным, но я всегда придавал им большое значение и всемерно поддерживал, вполне допуская не только кошачий принцип "хождения самой по себе", но и периодически поглаживая шёрстку. В результате была проделана большая и очень важная работа, итог которой Б.К. Новосадов подвёл в монографии "Методы математической физики молекулярных систем" (2009 г.)

Монография посвящена последовательному изложению квантовой теории молекулярных систем, а также решению волновых уравнений в релятивистской квантовой механике молекул. Многие затрагиваемые в книге вопросы рассматриваются на основе оригинальных работ автора. Большое внимание уделяется симметрии фазового пространства молекулярных систем и дополнительным интегралам движения Лапласа–Рунге–Ленца. Дано решение проблемы движения одного электрона в кулоновском поле многих неподвижных ядер, которая сводится к анализу интегрального волнового уравнения Шрёдингера и Дирака. Показано, что точная волновая функция (биспинор) представляется в виде линейной комбинации атомных

орбиталей также в виде биспиноров. Изучены решения уравнения Шрёдингера с многоцентровым потенциалом Юкавы. Изложена матричная теория многоэлектронных конфигураций атомов и молекул для решения нерелятивистских и релятивистских многочастичных волновых уравнений.

Значительное место в книге занимает теория многоцентровых матричных элементов квантовой химии в базисе электронных функций с экспоненциальным убыванием на бесконечном радиусе. Отдельная глава посвящена теории возмущений в квантовой механике; подробно исследуется случай наличия линейной оболочки вырожденных состояний в невозмущенном спектре.

Полученные результаты естественно дополнили другие наши достижения, так что всё вместе составило некоторое единое целое по разнообразию затронутых проблем, не имеющих аналога в литературе.

В последние годы я в существенно переработанном виде подготовил 3-е издание монографии «Колебания молекул». Материал этой монографии также целиком оригинален и содержит много нового по сравнению с 2-ым.

Читатель, наверное, обратил внимание на непрерывное упоминание монографий. Написание их было принципом. Я всегда считал, что «сто зайцев ещё не делают одного слона». Поэтому, когда было видно, что работы в определенном направлении приобретают более или менее полный вид и могут привести к общим рекомендациям – как решать колебательные задачи, электронно-колебательные, какова должна быть архитектура и алгоритмическая база экспертных систем и т.д. – производилась ревизия того, что стало известным и что еще надо сделать. Тогда начиналось целенаправленное «заполнение пустот» до тех пор, пока раздел не казался нам на данном этапе завершенным. Вот тогда все важнейшие результаты и обобщались в форме книги. Именно поэтому все наши монографии базировались лишь на оригинальных материалах и все вместе образуют изложенную во многих томах общую теорию и алгоритмы расчетов оптических молекулярных спектров сложных систем и теорию молекулярных процессов. При этом мы развивались достаточно независимо, обгоняя как по постановке проблем, так и по их исполнению работы других исследовательских групп.

Некоторые из моих работ находятся «в стороне» от генеральной линии, но представляются мне также достаточно интересными. Например, появилось квантовое обоснование феноменологического метода атом–атомных потенциалов. Это не было сделано за 40 лет использования метода, хотя он получил широкое распространение. Было предложено новое уравнение для состояния реального газа,

впервые позволившее связать результаты квантовых оценок характеристик молекулярных потенциалов с макроповедением газа. Решён ряд и других вопросов.

Разумеется, сделать все вышеописанное я бы не смог без помощи моих учеников и сотрудников, которым я глубоко благодарен. У меня защитилось более 60 аспирантов и соискателей. Десять моих учеников стали докторами наук и профессорами. Многие работают в ВУЗ'ах и передают наш опыт преподавания новым поколениям. Не все, конечно, были одинаковыми, но целый ряд были очень талантливыми и способными стать крупными учеными. Некоторых я потерял из-за существовавшего при советской власти крепостного права и прикрепления людей к месту жительства. Некоторые с готовыми докторскими работами уехали за границу. Рыба ищет, где глубже, а человек – где лучше, и я не в обиде.

Есть международное признание. Я уже упоминал, что первое приглашение сделать доклад на самом важном форуме спектроскопистов–молекулярщиков – Европейском конгрессе – я получил в 1967 г. Это был, если не ошибаюсь, всего второй случай, когда приглашались советские ученые. Я имел подобные приглашения трижды. В дальнейшем я много раз выступал с пленарными докладами на престижных научных собраниях, в том числе на Гордоновских чтениях в США. Я читал курсы лекций в Варшавском, Белградском, Лионском, Иерусалимском, Стамбульском и других университетах по их приглашениям.

В 1991 г. я был избран действительным членом Российской Академии естественных наук, где сейчас являюсь почётным вице-президентом и председателем секции физики. В 1993 г. получил звание «Заслуженный деятель науки РФ». В 1997 г. я был избран членом-корреспондентом РАН. В 2003 г. я был избран почётным профессором Саратовского университета. Индекс цитирования моих работ довольно высок.

Читатели этого очерка могут счесть нескромным с моей стороны подчеркивание своих заслуг. В свое оправдание сошлюсь на слова Г. Нельсона перед Трафальгарским сражением. В ответ на рекомендацию Харди – капитана флагманского корабля «Виктори» – не надевать парадный мундир со всеми орденами, чтобы не привлекать внимания снайперов вражеских кораблей, Нельсон ответил: «Я честно заслужил эти награды». Конечно, выстрел снайпера мне не грозит, но «злые языки страшнее пистолета!»

Не все, конечно, удалось дотянуть до желаемого уровня. Многие эффективные алгоритмы и вычислительные возможности не доведены до удовлетворительного по современным меркам состояния. Не все задуманные блоки введены в общий комплекс LEV.

Обнаружились трудности там, где вначале не ожидалось. Так всегда бывает в науке: с покоренной вершины видны новые, «на которых еще не бывал».

Занятия наукой были для меня главными в жизни, но всегда интересовало и другое, особенно литература и история. Я много думал о судьбах своей страны, где «черт догадал меня родиться», но которую я очень люблю! Некоторые свои взгляды я изложил в серии статей, которые отношу к публицистическим. В 2002 г. я собрал их, многое добавил и изложил в специальной книге «Ума холодных наблюдений...».

Я прожил долгую жизнь в науке. Мне удалось кое-что сделать, удалось использовать почти все шансы, которые предоставила мне судьба. Никто не стоял за моей спиной, я сам создал условия для своей работы и воспользовался этим.

*Feci quod potui, faciant meliora potentes!*

Надеюсь, что удастся сделать кое-что ещё, если Господь позволит!

# ИНДЕКС ЦИТИРОВАНИЯ

## Citation Index

(по данным Science Citation Index of Institute for Scientific Information, Philadelphia, PA 19104, USA)

В разделе «Сам о себе» я писал о том, что мои работы вызывали интерес специалистов в соответствующих областях. Следствием этого были приглашения на разного рода конференции, причем с пленарными докладами, в Университеты и т.д. Это, так сказать, «качественные» признаки полезности изысканий автора для развития «своих» областей науки. Конечно, хочется иметь и «количественные» оценки. При всех своих недостатках, больше всего на такую оценку может претендовать индекс цитирования. Я им интересовался очень давно. Ниже приводятся данные о цитированиях по пятилетиям, начиная с 1959 г. Сведения до 1990 г. «вручную» собрала по моей просьбе одна из моих сотрудниц.

Годы	Общее число ссылок	Работы, цитированные наибольшее число раз	Число ссылок
1959-1964	363	Успехи физ. наук, 1961, т. 75, с. 527.	240
1965-1969	113	Оптика и спектроскопия, 1968, т. 24, с.34.	24
1970-1974	307	Введение в теорию RAS. 1965. Доклады АН СССР, 1962, т. 145, с. 761. J. Molecular Structure, 1974, v. 22, p. 161.	35 31 30
1975-1979	570	CR ANC, 1979, v. 8, p. 111. J. Anal. Chem., 1977, v. 32, p. 1609. Ж. анал. химии, 1977, т. 32, с. 2025. Analyt. Chim., 1977, v. 95, p. 75. Ж. анал. химии, 1978, т. 33, с. 586.	92 73 72 45 38
1980-1984	446	J. Molecular Structure, 1980, v. 67, p. 1-28. Ж. структурной химии, 1979, т. 20, с. 890. Оптика и спектроскопия, 1981, т. 51, с. 627. Ж. физической химии, 1980, т. 54, с. 2010.	53 27 25 24
1985-1989	450	Theochem., 1986, v. 33, p. 1-23. Theochem., 1985, v. 23, p. 15. J. Molecular Structure, 1989, v. 198, p. 93.	55 41 27
1990	94	J. Molecular Structure, 1990, v. 224, p. 45. J. Molecular Structure, 1990, v. 216, p. 241.	18 13

Итого: за 1959-1990 гг. индекс цитирования = 2343.

По уточненным данным по списку цитирования [www.Scientific.ru](http://www.Scientific.ru), основанному на базе данных Института информации (ISI), "Web of Science", полное число цитирований, начиная с 1986 г., составляет 4498, включая самоцитирования. Средний индекс цитирования за год в последнее время составляет более 100 ссылок.

Обращает на себя внимание «пик» цитирований в самом начале. Это вызвано большим интересом в то время к расчетам интенсивностей полос поглощения в ИКС. Только один обзор в журнале «Успехи физических наук» (1961, т. 75) дал 240 ссылок. Приглашение сделать пленарный доклад на Европейском конгрессе по молекулярной спектроскопии (Мадрид, 1967 г.) было не случайным.

Следующее существенное возрастание числа цитирований приходится на конец семидесятых годов. Это время начала работ по теории экспертных систем.

Конечно, цитируются в основном работы, опубликованные в международных журналах на английском языке. При этом многие из них были напечатаны в «Journal of Molecular Structure». Это хороший журнал, хотя и не самый престижный. Я, однако, долгие годы был членом редколлегии этого журнала и, поэтому, считал необходимым печатать свои работы именно в нем. К тому же, в отличие, например, от «Physical Review», за публикации не надо было платить. В индексе цитирований не учитываются ссылки в монографиях. Между тем в них, как правило, ссылаются именно на наиболее фундаментальные работы и обобщения в виде также монографий. Таких цитирований может быть много. Например, в обширной монографии N.A.V. Gray, одного из ведущих деятелей знаменитого проекта DENDRAL в США, цитируются все опубликованные к этому времени наши работы (более 20) по экспертным системам и некоторые другие (N.A.V. Gray. Computer –Assisted Structure Elucidation. Wiley and Sons, 1986, 536 p.p.).

В монографии B.S. Galabov и T. Dudev "Vibrational Intensities" (Elsevier, 1996, 265 p.p.) имеется около 30 ссылок на наши работы.

Публикация монографий, как правило, «поглощает» оригинальные работы и, соответственно, уменьшает число ссылок. Например, никто сейчас не цитирует работы, составившие содержание книги L.A. Gribov. Intensity Theory for IRS of Polyatomic Molecules. С.В., N.-Y., 1964. Ссылки на нее, однако, есть практически во всех монографиях по теории спектров молекул. Не анализируются, разумеется, и ссылки в отечественных диссертациях. Между тем именно в них чаще всего упоминаются монографические обобщения,



т.к. «входящие в науку» главным образом с помощью таких источников и обучаются.

Если принять, что только по молекулярной спектроскопии и близким проблемам защищалось в год в среднем 10 кандидатских диссертаций, и в них было всего по 5 ссылок на монографии автора, то за 40 лет получится 2000 ссылок.

В приведенном выше индексе цитирования не учтено самоцитирование. В моих статьях я почти всегда ссылаюсь на предшествующие свои же работы. Однако этим не злоупотребляю. Читатель мне поверит, по-видимому, что «самоцитироваться» хотя бы 1000 раз затруднительно!

Вызвано это не чрезмерной самовлюбленностью, а тем, что важнейшие работы опирались, как правило, не на чужие идеи и разработки, а на свои собственные, хотя бы немного опережавшие других исследователей, и в этом смысле самодостаточные. В оправдание приведу пример монографии «Колебания молекул» (Изд. 2, 1972 г.). В ее тексте вообще нет ни одной ссылки. В предисловии же просто приведен список всех оригинальных работ авторов, на основании которых и написана книга.

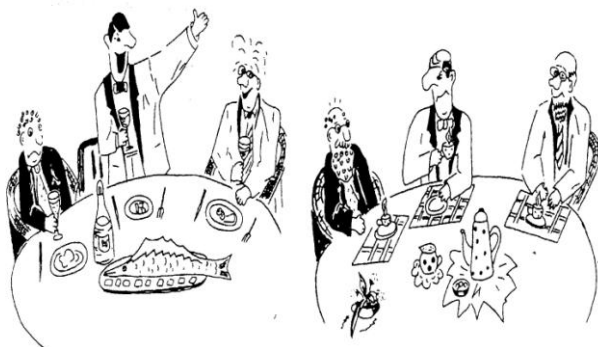
Я всегда излагал свой взгляд на вещи и свои подходы и методы вычислений и не особенно стремился «раздать всем сестрам по серьгам». Если я провожу в новой статье какую-нибудь свою же формулу без доказательства, то я должен сообщить читателю, где это доказательство он может найти. Самоцитирование становится естественным и неизбежным. Оно, кстати, в этом случае является, в известной степени, и показателем оригинальности исследований автора.

В заключение заметим, что и абсолютные цифры цитирований и сравнения на этой основе вкладов отдельных исследователей в развитие науки хотя и показательны, но не являются главными критериями. Индекс очень зависит от общего числа людей, работающих в данной области. Можно сказать, что это, в свою очередь, также есть показатель актуальности направления. Это верно, но лишь с оговорками. Большое число исследователей появляется тогда, когда явно обозначается прикладная сторона. На первых же этапах, даже при бесспорной фундаментальности результата, на него может обратить внимание лишь очень небольшой круг лиц. Этот начальный период иногда продолжается довольно долго.

Конечно, если индекс цитирования за десяток лет близок к нулю, то это означает, что ценность работ автора, если он «не закрыт», также к этому показателю приближается.

Заканчивая, прошу читателей обратить внимание на рисунки. Они отражают жизненные пути автора и его сверстников и

займствованы из статьи, написанной для «Золотого выпуска» (№ 200)  
«Journal of Molecular Structure».



# ДИССЕРТАЦИИ, МОНОГРАФИИ, МОНОГРАФИЧЕСКИЕ СТАТЬИ, УЧЕБНИКИ И УЧЕБНЫЕ ПОСОБИЯ

## List of Monographs

1. Л.А. Грибов.  
Некоторые вопросы теории интенсивностей и поляризаций в инфракрасных спектрах поглощения основных колебаний многоатомных молекул.  
Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук (рукопись), 1961.
2. Л.А. Грибов.  
Некоторые вопросы теории колебательных спектров многоатомных молекул.  
Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук (рукопись), 1963.
3. Л.А. Грибов.  
Теория интенсивностей в инфракрасных спектрах многоатомных молекул.  
АН СССР, Москва, 1963, 154 с.
4. Lev A. Gribov.  
Intensity theory for infrared spectra of polyatomic molecules.  
Consultants bureau, New York, 1964, 113 p.
5. Л.А. Грибов.  
Введение в теорию и расчет колебательных спектров многоатомных молекул.  
Изд. ЛГУ, Ленинград, 1965, 123 с.
6. М.В. Волькенштейн, Л.А. Грибов, М.А. Ельяшевич, Б.И. Степанов.  
Колебания молекул.  
Изд. 2, Наука, Главн. ред физ.-мат., Москва, 1972, 699 с.
7. Л.А. Грибов.  
Введение в молекулярную спектроскопию.  
Наука, Главная редакция физ.-мат. литературы, Москва, 1976, 400 с.
8. Л.А. Грибов.  
Теория инфракрасных спектров полимеров.  
Наука, Главная редакция физ.-мат. литературы, Москва, 1977, 240 с.

9. L.A. Gribov, M.E. Elyashberg.  
Computer-aided identification of organic molecules by their molecular spectra.  
Critical reviews in analytical chemistry, 1979, v. 8, N 2, p. 111-220.
10. L.A. Gribov, B.I. Sztyepanov, M.A. Jeljasevics, M.V. Volkenstejn.  
Molekularezgesek.  
Akademiai Kiado, Budapest, 1979, 676 p.
11. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.  
Таблицы параметров для расчета колебательных спектров молекул. Выпуск I.  
АН СССР, Научный совет по спектроскопии, Москва, 1979, 93 с.
12. М.Е. Эляшберг, Л.А. Грибов, В.В. Серов.  
Молекулярный спектральный анализ и ЭВМ.  
Наука, Москва, 1980, 307 с.
13. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.  
Методы и алгоритмы вычислений в теории колебательных спектров молекул.  
Наука, Москва, 1981, 356 с.
14. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.  
Таблицы параметров для расчета колебательных спектров молекул. Выпуск 2.  
Научно-информационный центр по молекулярной спектроскопии Сибирского отделения АН СССР, Новосибирск, 1982, 99 с.
15. В.И. Баранов. Ф.А. Савин, Л.А. Грибов.  
Программа расчета электронно-колебательных спектров многоатомных молекул.  
Наука, Москва, 1983, 192 с.
16. Л.А. Грибов, В.И. Баранов, Б.К. Новосадов.  
Методы расчета электронно-колебательных спектров многоатомных молекул.  
Наука, Москва, 1984, 325 с.
17. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев, А.Т. Тодоровский.  
Интерпретированные колебательные спектры алканов, алкенов и производных бензола.  
Наука, Москва, 1986, 495 с.
18. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев, О.В. Новоселова.  
Интерпретированные колебательные спектры углеводов с изолированными и сопряженными кратными связями.  
Наука, Москва, 1987, 471 с.
19. Л.А. Грибов  
Физическая химия. Современные проблемы.  
Ред. Я.М. Колотыркин. Химия, Москва, 1987, с. 211-262.

20. М.Э. Эляшберг, Ю.З. Карасев, В.А. Дементьев, Л.А. Грибов.  
Интерпретированные колебательные спектры углеводов –  
производных циклогексана и циклопентана.  
Наука, Москва, 1988, 375 с.
21. L.A. Gribov, W.J. Orville–Thomas.  
Theory and methods of calculation of molecular spectra.  
John Wiley and Sons, Chichester, New York, 1988, 636 p.
22. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.  
Моделирование колебательных спектров сложных соединений  
на ЭВМ. Учебное пособие.  
Наука, Главн. ред физ-мат. лит., 1989, 158 с.
23. Математические методы и ЭВМ в аналитической химии. Серия:  
Проблемы аналитической химии.  
Ред. Л.А. Грибов. Наука, Москва, 1989, 300 с.
24. Л.А. Грибов. Н.И. Прокофьева.  
Основы физики. Учебник.  
Высшая школа, Москва, 1992, 430 с.
25. Л.А. Грибов. Н.И. Прокофьева.  
Основы физики изд. 2-ое, дополненное. Учебник для  
естественно-научных направлений ВУЗ'ов.  
Наука–Физматлит, Москва, 1995, 552 с.
26. Л.А. Грибов, В.И. Баранов, Д.Ю. Зеленцов.  
Электронно-колебательные спектры многоатомных молекул.  
Теория и методы расчета.  
Наука, Москва, 1997, 475 с.
27. Л.А. Грибов, А.И. Павлючко.  
Вариационные методы решения ангармонических задач в  
теории колебательных спектров молекул.  
Наука, Москва, 1998, 334 с.
28. Л.А. Грибов. Н.И. Прокофьева.  
Основы физики. Учебник для естественно–научных  
направлений ВУЗ'ов. Изд. 3-е.  
Гардарика, Москва, 1998, 557 с.
29. Л.А. Грибов, С.П. Муштакова.  
Квантовая химия. Учебник для студентов химических и  
биологических специальностей ВУЗ'ов.  
Гардарика, Москва, 1999, 387 с.
30. Л.А. Грибов.  
От теории спектров к теории химических превращений.  
Изд. УРСС, Москва, 2001, 365 с.
31. Л.А. Грибов, В.И. Баранов, М.Е. Эляшберг.  
Безэталонный молекулярный спектральный анализ.  
Теоретические основы.

- Изд. Эдиториал УРСС, Москва, 2002, 317 с.
32. Л.А. Грибов.  
Ума холодных наблюдений...  
Ноосфера, Москва, 2002, 146 с.
33. Л.А. Грибов.  
Философия естественных наук. Учебное пособие для вузов. Ред.  
С.А. Лебедев. Глава 2. Принципы формирования научного  
знания на примере физики. С. 35-83.  
Москва, Фонд «Мир», 2006, 550 стр.
34. Л.А. Грибов, В.И. Баранов.  
Теория и методы расчета молекулярных процессов: спектры,  
химические превращения и молекулярная логика.  
М: «КомКнига», 2006, 480 с.
35. S.A. Astakhov, V.I. Baranov, L.A.Gribov.  
Theory and methods of computational vibronic spectroscopy.  
Hauppauge, NY: Nova Science Publishers, 2008, 87 p.
36. Л.А. Грибов.  
Колебания молекул.  
М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2009, 544 с.
37. Л.А. Грибов.  
Элементы квантовой теории строения и свойств молекул.  
Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2010, с. 312.
38. Л.А. Грибов.  
Экспертные системы и спектральный анализ без использования  
стандартных образцов состава.  
В книге "Аналитическая химия и физико-химические методы  
анализа". Ред. А.А. Ищенко в 2-х томах.  
М.: Издательский центр «Академия», 2010, Т. 2, гл. 19, С. 301-  
324.
39. Грибов Л.А., Баранов В.И.  
От молекул к жизни.  
М: КРАСАНД, 2012. 208 с.

## СТАТЬИ К ЮБИЛЕЯМ

1. Лев Александрович Грибов (к 60-летию со дня рождения).  
Журнал прикладной спектроскопии, 1993, т. 58, № 5-6, с. 581-582.
2. Л.А. Грибову – 60 лет.  
Журнал аналитической химии, 1993, т.48, № 5, с. 925-927.
3. Лев Александрович Грибов(к 60-летию со дня рождения).  
Оптика и спектроскопия, 1993, т. 75, № 1, с. 219-220.
4. Льву Александровичу Грибову – 70 лет.  
Журнал аналитической химии, 2003, т. 58, № 5, с. 551-553.
5. Юбилей члена-корреспондента РАН Л.А. Грибова.  
Журнал структурной химии, 2003, т. 44, № 2, с. 380.
6. Члену-корреспонденту РАН Л.А. Грибову – 70 лет.  
Журнал физической химии, 2003, т. 77, № 5, с. 959.
7. Лев Александрович Грибов.  
Оптика и спектроскопия, 2003, т. 94, № 6, с. 1049-1050.
8. Члену-корреспонденту РАН Л.А. Грибову – 70 лет.  
Вестник РАН, 2003, т. 73, № 4, с. 375.
9. Л.А. Грибов. Сам о себе.  
Сборник материалов ИВТН – 2008, с. 6-17.
10. Юбилей Л.А. Грибова.  
Журнал аналитической химии, 2008, т.63, № 5, с. 555-557.
11. Лев Александрович Грибов. (К 75-летию со дня рождения).  
Оптика и спектроскопия, 2008, т. 104, № 5, с. 879.
12. Члену-корреспонденту РАН Л.А. Грибову -75 лет.  
Журнал структурной химии, 2008, т. 49 № 2, с. 72.

13. Юбилей Л.А. Грибова.

Журнал аналитической химии, 2013, т. 68 № 5.

14. Юбилей члена-корреспондента РАН Л.А. Грибова.

Журнал структурной химии, 2013, т. 54 № 2.

15. Члену-корреспонденту РАН Л.А. Грибову -80 лет.

Вестник РАН, 2013, т. 83 № 5.



## СПИСОК СТАТЕЙ

### List of articles

#### 1956

1. К.Н. Баранский, Л.А. Грибов, В.П. Приходько.  
Показатель преломления сегнетовой соли вблизи точки фазового перехода.  
Кристаллография, 1956, т. 1, № 3, с. 368-369.

#### 1958

2. А.А. Бабушкин, Л.А. Грибов, Н.Г. Гусева, В.М. Емельянова.  
Исследование колебательных спектров молекулярных соединений трехфтористого бора с азот- и кислородсодержащими веществами. II. О строении молекулярных соединений трехфтористого бора с метанолом, этанолом и водой.  
Оптика и спектроскопия, 1958, т. 5, № 3, с. 256-263.
3. А.А. Бабушкин, Л.А. Грибов, А.Д. Гельман.  
О характере связи между центральным атомом и некоторыми ненасыщенными молекулами в комплексных соединениях платины.  
Доклады Академии наук СССР, 1958, т. 123, № 3, с. 461-463.
4. Л.А. Грибов.  
Анализ следящей системы двухлучевых инфракрасных спектрометров.  
Приборы и техника эксперимента, 1958, № 2, с. 65-69.

#### 1959

5. Л.А. Грибов.  
Отношение сигнала к шуму в инфракрасных двухлучевых спектрометрах.  
Приборы и техника эксперимента, 1959, № 3, с. 102-105.
6. А.А. Бабушкин, Л.А. Грибов, А.Д. Гельман.  
О характере связи между центральным атомом и олефином комплексных соединениях платины.  
Журнал неорганической химии, 1959, т. 4, № 7, с. 1542-1547.

7. Л.А. Грибов.  
Измененная схема вычисления интенсивностей и поляризаций в инфракрасных спектрах поглощения многоатомных молекул.  
Доклады Академии наук СССР, 1959, т. 127, № 4, с. 788-791.

### 1960

8. Л.А. Грибов.  
Об измерениях на двухлучевых спектрофотометрах.  
Оптика и спектроскопия, 1960, т. 8, с.123.
9. Л.А. Грибов.  
Дискуссия.  
Оптика и спектроскопия, 1960, т. 8, с. 126-127.
10. Л.А. Грибов, А.Д. Гельман, Ф.А. Захарова, М.М. Орлова.  
Исследование некоторых комплексных соединений платины методом инфракрасной спектроскопии.  
Журнал неорганической химии, 1960, т. 5, № 4, с. 987-989.
11. Л.А. Грибов.  
Вычисление интенсивностей и поляризаций в инфракрасных спектрах многоатомных молекул. I.  
Оптика и спектроскопия, 1960, т. 8, № 6, с. 769-776.
12. Л.А. Грибов.  
Вычисление интенсивностей и поляризаций в колебательных спектрах поглощения многоатомных молекул. II.  
Оптика и спектроскопия, 1960, т. 9, № 2, с. 176-183.
13. Л.А. Грибов.  
Интенсивности и поляризации характеристических колебаний в инфракрасных спектрах поглощения многоатомных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 1960, т. 9, № 5, с. 658-663.
14. Л.А. Грибов, А.В. Карякин.  
Интенсивности инфракрасных полос поглощения гидроперекисной группы.  
Оптика и спектроскопия, 1960, т. 9, с. 666-668.

### 1961

15. Л.А. Грибов.  
Новый вывод выражений естественных колебательных координат через смещения атомов в многоатомных молекулах.  
Оптика и спектроскопия, 1961, т. 10, с. 412-414.
16. Л.А. Грибов.  
Зависимость интенсивностей инфракрасных полос поглощения от числа эквивалентных групп в многоатомных молекулах.  
Доклады Академии наук БССР, 1961, т. 5, № 4, с. 151-154.

17. Ю.Н. Чиргадзе, Л.А. Грибов, Н.С. Андреева, Н.Е. Шуцкевер.  
Применение метода инфракрасной спектроскопии к изучению некоторых кристаллических дипептидов, содержащих 1-пролин и глицин.  
Журнал физической химии, 1961, т. 35, № 4, с. 754-760.
18. Л.А. Грибов.  
Некоторые вопросы теории интенсивностей и поляризаций в инфракрасных спектрах поглощения основных колебаний многоатомных молекул.  
Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, Минск, 1961.
19. Л.А. Грибов.  
Теория интенсивностей инфракрасных полос поглощения сложных молекул, содержащих несколько одинаковых групп.  
Оптика и спектроскопия, 1961, т. 11, № 2, с. 146-150.
20. Л.А. Грибов, А.Д. Гельман.  
Применение инфракрасной спектроскопии к изучению строения некоторых комплексных соединений.  
Журнал структурной химии, 1961, т. 2, № 5, с. 569-572.
21. Л.А. Грибов, В.Н. Смирнов.  
Интенсивности в инфракрасных спектрах поглощения многоатомных молекул.  
Успехи физических наук, 1961, т. 75, № 3, с. 527-567.

## 1962

22. Л.А. Грибов.  
Метод расчета интенсивностей и поляризаций в колебательных спектрах поглощения многоатомных молекул.  
Сб. Физические проблемы спектроскопии, изд-во АН СССР, 1962, т. 1, с. 372-375.
23. Л.А. Грибов, Е.М. Попов.  
Электрооптические параметры многоатомных молекул и их вычисление из экспериментальных данных по интенсивностям и поляризациям в инфракрасных спектрах поглощения.  
Оптика и спектроскопия, 1962, т. 12, № 5, с. 546-549.
24. Е.М. Попов, Л.А. Грибов.  
Расчет электрооптических параметров некоторых многоатомных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 1962, т. 12, № 6, с. 703-710.
25. Ю.А. Золотов, И.В. Серякова, А.В. Карякин, Л.А. Грибов, М.Е. Зубрилина.  
Гидратно-сольватный механизм экстракции.

- Доклады Академии наук СССР, 1962, т. 145, № 1, с. 100-103.
26. Л.А. Грибов, Е.М. Попов.  
Валентно-оптическая схема и теоретические исследования интенсивностей и поляризаций в спектрах поглощения основных колебаний многоатомных молекул.  
Доклады Академии наук СССР, 1962, т. 145, № 4, с. 761-763.
27. Л.А. Грибов.  
Расчетные методы в молекулярной спектроскопии.  
Известия Академии наук СССР, серия физическая, 1962, т. 26, № 10, с. 1226-1230.
28. И.В. Серякова, Ю.А. Золотов, А.В. Карякин, Л.А. Грибов, М.Е. Зубрилина.  
О возможности сольватации тетрахлоферриат-иона при экстракции железа из хлоридных растворов.  
Журнал неорганической химии, 1962, т. 7, № 8, с. 2013-2018.
29. Л.А. Грибов.  
Интенсивности в инфракрасных спектрах поглощения и исследование многоатомных молекул.  
Доклады Академии наук СССР, 1962, т. 146, № 1, с. 69-71.
30. Л.А. Грибов, Е.М. Попов.  
Определение электрооптических параметров и вычисление интенсивностей в инфракрасных спектрах поглощения метана и этана.  
Оптика и спектроскопия, 1962, т. 13, № 5, с. 663-667.
31. Л.А. Грибов.  
Общая формула для интенсивностей обертонов и составных частот в инфракрасных спектрах многоатомных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 1962, т. 13, с. 594-597.

## 1963

32. Л.А. Грибов.  
Характеристические интенсивности и поляризация первых обертонов и составных частот в инфракрасных спектрах поглощения многоатомных молекул. Зависимость интенсивности обертонов и составных частот от числа одинаковых групп в молекуле.  
Сб. Оптика и спектроскопия. II. Молекулярная спектроскопия, изд-во Академии наук СССР, Москва–Ленинград, 1963, с. 94-98.
33. Е.М. Попов, Л.А. Грибов.  
Электрооптические параметры галогенометанов.  
Сб. Оптика и спектроскопия. II. Молекулярная спектроскопия, изд-во Академии наук СССР, Москва–Ленинград, 1963, с. 82-86.

34. Л.А. Грибов, Е.М. Попов.  
Вычисление интенсивности и поляризации в инфракрасных спектрах многоатомных молекул.  
Сб. Оптика и спектроскопия. II. Молекулярная спектроскопия, изд-во Академии наук СССР, Москва–Ленинград, 1963, с. 87-94.
35. И.В. Серякова, Ю.А. Золотов, А.В. Карякин, Л.А. Грибов.  
О гидратации и сольватации экстрагирующихся сильных кислот.  
Журнал неорганической химии, 1963, т. 8, № 2, с. 474-480.
36. Ю.А. Золотов, И.В. Серякова, А.В. Карякин, Л.А. Грибов, М.Е. Зубрилина.  
Инфракрасные спектры некоторых сильных кислот, экстрагирующихся кислородсодержащими растворителями.  
Журнал неорганической химии, 1963, т. 8, № 2, с. 481-486.
37. Л.А. Грибов.  
О вычислении электрооптических параметров этана и метана.  
Оптика и спектроскопия, 1963, т. 15, № 3, с. 429-431.
38. Л.А. Грибов.  
К вопросу о физическом смысле силовых постоянных и построении потенциальной функции многоатомных молекул.  
Доклады Академии наук СССР, 1963, т. 151, № 3, с. 612-615.

## 1964

39. Л.А. Грибов.  
К вопросу о физическом смысле силовых постоянных многоатомных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 1964, т.16, № 1, с. 22-29.
40. Л.А. Грибов.  
О построении потенциальной функции многоатомной молекулы.  
Оптика и спектроскопия, 1964, т.16, № 2, с. 216-222.
41. Л.А. Грибов.  
Простой способ вычисления коэффициентов симметрии в теории колебаний многоатомных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 1964, т.16, с. 714-716.
42. Л.А. Грибов.  
Некоторые вопросы теории колебательных спектров многоатомных молекул.  
Автореферат диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, Минск, 1964.
43. Л.А. Грибов, В.В. Жогина.  
Решение задач о колебаниях многоатомных молекул на электронно-вычислительных машинах.  
Оптика и спектроскопия, 1964, т.17, № 6, с. 832-837.

44. Л.А. Грибов.

Замечание к статье Л.М. Свердлова «Формулы для интенсивностей составных частот и обертонов в спектрах комбинационного рассеяния и инфракрасного поглощения многоатомных молекул». Оптика и спектроскопия, 1964, т.17, № 5, с. 802.

### 1965

45. Л.А. Грибов.

Инфракрасная спектроскопия как метод исследования строения многоатомных молекул.  
Современные методы анализа, Москва, «Наука», 1965, с. 168-184.

### 1966

46. Л.А. Грибов, Е.М. Попов.

О применении колебательных спектров для исследования строения многоатомных молекул.  
Успехи химии, 1966, т. 35, № 6, с. 531-562.

47. М.А. Ельяшевич, Л.А. Грибов.

О точных и приближенных естественных координатах в теории колебаний многоатомных молекул.  
Доклады Академии наук СССР, 1966, т. 166, № 5, с. 1080-1083.

48. Л.А. Грибов, В.В. Жогина, С.Ф. Архипова.

Использование электронных вычислительных машин в практике расчетов колебательных спектров.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1966, т. 5, №3, с. 403-409.

### 1967

49. С.Б. Саввин, Э.Л. Кузин, Л.А. Грибов, В.П. Дедкова.

Механизм второго азосочетания моноазопроизводных хромотроповой кислоты, взятых в виде циклических солей.  
Известия Академии наук СССР, серия химическая, 1967, т. II, с. 2389-2395.

50. Л.А. Грибов, Э.Л. Кузин, С.Б. Саввин.

Электронное строение азосоединений и их комплексов с элементами. I. Применение квантово-механических расчетов для изучения  $\pi$ -электронной структуры и физико-химических свойств органических реагентов.  
Журнал аналитической химии, 1967, т. 22, № 12, с. 1790-1796.

51. Л.А. Грибов.  
Об одной возможности применения метода теории возмущений при вычислении частот колебаний многоатомных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 1967, т. 22, с. 976-979.
52. Л.А. Грибов, Т.С. Абилова.  
Некоторые вопросы теории колебательных спектров периодических молекул конечной длины и полимеров. 1. Частоты колебаний.  
Оптика и спектроскопия, 1967, т. 23, № 3, с. 374-383.
53. Л.А. Грибов, Т.С. Абилова.  
Некоторые вопросы теории колебательных спектров периодических молекул конечной длины и полимеров. 2. Интенсивности в инфракрасных спектрах и влияние концевых групп.  
Оптика и спектроскопия, 1967, т. 23, № 4, с. 535-542.

## 1968

54. Т.С. Абилова, Л.А. Грибов.  
Расчет частот нормальных колебаний полииновых цепей разной длины по методу возмущений для периодических молекул.  
«Ученые записки» Азербайджанского государственного университета, серия физико-математических наук, 1968, № 3, с. 86-92.
55. Л.А. Грибов.  
О некоторых вопросах, связанных с использованием зависимых координат в теории колебаний многоатомных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 1968, т. 24, № 1, с. 67-71.
56. Л.А. Грибов.  
О построении параметрической теории интенсивностей в инфракрасных спектрах многоатомных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 1968, т. 25, № 1, с. 53-57.
57. М.Е. Эляшберг, Л.А. Грибов.  
Формально-логический метод интерпретации ИК спектров по характеристическим частотам.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1968, т. 8, № 2, с. 296-301.
58. Л.А. Грибов, Ю.М. Дедков, А.В. Котов.  
Исследование таутомерного равновесия некоторых бензолафтолов.  
Теоретическая и экспериментальная химия, 1968, т. 4, № 3, с. 316-321.
59. Л.А. Грибов, Ю.А. Золотов, М.П. Носкова.  
Исследование строения ацетилацетонатов методом инфракрасной спектроскопии.

- Журнал структурной химии, 1968, т. 9, № 3, с. 448-457.
60. С.Б. Саввин, Э.Л. Кузин, Л.А. Грибов.  
Электронное строение азосоединений и их комплексов с элементами. 2. Изучение ионного состояния арсеназо 1 методом молекулярных орбит Хюккеля.  
Журнал аналитической химии, 1968, т. 23, № 1, с. 5-12.
61. Э.Л. Кузин, С.Б. Саввин, Л.А. Грибов.  
Электронное строение азосоединений и их комплексов с элементами. 3. Изучение строения комплексов бериллия и скандия с арсеназо 1 МО ЛКАО.  
Журнал аналитической химии, 1968, т. 23, № 4, с. 490-499.
62. А.В. Котов, Л.А. Грибов.  
Интерпретация колебательного спектра уксусной кислоты и ее иона.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1968, т. 9, № 5, с. 848-853.

## 1969

63. А.В. Котов, Л.А. Грибов.  
Исследование колебательных спектров ионов некоторых карбоновых кислот.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1969, т. 10, № 1, с. 103-108.
64. Л.А. Gribov.  
The theory of intensities in the infrared spectra of polyatomic molecules.  
Pure and applied chemistry, 1969, v. 18, p. 339-351.
65. Л.А. Грибов.  
О постановке и решении обратной спектральной задачи в теории частот колебаний многоатомных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 1969, т. 26, № 1, с. 50-54.
66. М.П. Носкова, Л.А. Грибов, Ю.А. Золотов.  
Исследование строения  $\beta$ -дикетонатов методом инфракрасной спектроскопии. 2. Дибензоилметанаты и теоилтрифторацетонаты.  
Журнал структурной химии, 1969, т. 10, № 3, с. 474-480.
67. Л.А. Грибов, Т.С. Абилова.  
Некоторые вопросы теории колебательных спектров периодических молекул конечной длины и полимеров.  
Оптика и спектроскопия, 1969, т. 26, № 6, с. 915-922.
68. Л.А. Грибов, М.Е. Эляшберг.  
Применение алгебры логики в спектрохимических исследованиях.  
Известия ТСХА, 1969, № 3, с. 182-197.



69. Л.А. Грибов, С.Б. Саввин, Э.Л. Кузин.  
Электронное строение азосоединений и их комплексов с элементами. Сообщение 4.  
Труды комиссии по аналитической химии, т. 17, Органические реагенты в неорганическом анализе, 1969, с. 36-42.
70. Э.Л. Кузин, С.Б. Саввин, Л.А. Грибов.  
Электронное строение азосоединений и их комплексов с элементами. Сообщение 5.  
Труды комиссии по аналитической химии, т. 17, Органические реагенты в неорганическом анализе, 1969, с. 42-53.
71. С.Б. Саввин, Э.Л. Кузин, Л.А. Грибов.  
Электронное строение азосоединений и их комплексов с элементами. Сообщение 6.  
Труды комиссии по аналитической химии, т. 17, Органические реагенты в неорганическом анализе, 1969, с. 53-61.

## 1970

72. L.A. Gribov, M.E. Elyashberg.  
Symbolic logic methods for spectrochemical investigations.  
Journal of molecular structure, 1970, v. 5, p. 179-198.
73. М.П. Носкова, Ю.А. Золотов, Л.А. Грибов.  
Исследование строения экстрагирующих смешанных внутрикомплексных соединений методом инфракрасной спектроскопии.  
Журнал аналитической химии, 1970, т. 25, № 2, с. 220-225.
74. Л.А. Грибов, Б.К. Новосадов, В.Н. Тимонин.  
Об одной возможности квантовомеханического расчета силовых постоянных насыщенных соединений с варьируемыми волновыми функциями. Молекула ацетилена.  
Оптика и спектроскопия, 1970, т. 29, № 4, с. 671-675.
75. Л.А. Грибов.  
Теория колебаний связанных полимерных цепей и кристаллов.  
Оптика и спектроскопия, 1970, т. 29, № 5, с. 876-883.
76. В.А. Дементьев, О.И. Кондратов, Л.А. Грибов.  
Программа решения задач о колебаниях многоатомных молекул на электронно-счетной машине "Минск-22".  
Известия ТСХА, 1970, № 2, с. 203-214.
77. Л.А. Грибов.  
О применении колебательных спектров для исследования строения комплексов металлов с органическими лигандами.  
Колебательные спектры в неорганической химии, Москва, «Наука», 1970, с. 5-11.

78. Л.А. Грибов, В.П. Круглов.  
Измерение абсолютных интенсивностей в инфракрасных спектрах газов в кювете высокого давления.  
Известия ТСХА, 1970, № 6, с. 194-199.
79. Л.А. Грибов, Ю.М. Дедков, А.В. Котов.  
Исследование электронных спектров некоторых фенолазонафтолов в видимой области.  
Строение молекул и квантовая химия, Киев, «Наукова думка», 1970, с. 150-157.

## 1971

80. В.П. Круглов, Л.А. Грибов.  
Кювета высокого давления для измерения абсолютных интенсивностей в инфракрасных спектрах газов.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1971, т. 14, № 1, с. 161-162.
81. С.П. Муштакова, Н.С. Фрумина, Л.А. Грибов.  
Электронное строение замещенных дифениламина. Сообщение I.  
Журнал аналитической химии, 1971, т. 26, № 3, с. 430-436.
82. В.А. Дементьев, Л.А. Грибов.  
Программа решения обратной задачи теории колебательных спектров многоатомных молекул на ЭЦВМ «Минск-22».  
Известия ТСХА, 1971, № 2, с. 220-230.
83. В.А. Дементьев, Л.А. Грибов.  
О решении обратной спектральной задачи теории частот колебаний многоатомных молекул с помощью метода наименьших квадратов.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1971, т. 14, № 5, с. 889-897.
84. L.A. Gribov, M.E. Elyashberg, L.A. Moskovkina.  
Solution of spectral problems by methods of symbolic logic.  
Journal of molecular structure, 1971, v. 9, p. 357-382.
85. М.Е. Эляшберг, Л.А. Московкина, Л.А. Грибов.  
О применении математической логики для установления характеристических частот в колебательных спектрах.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1971, т. 15, № 4, с. 706-712.
86. М.Е. Эляшберг, Л.А. Московкина, Л.А. Грибов.  
О применении математической логики для установления структуры сложных молекул по колебательным спектрам.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1971, т. 15, № 5, с. 843-853.
87. Г.В. Ховрин, И.В. Житлова, Л.А. Грибова.  
Расчет колебательных спектров фенантрена и 5-5-дигидросилоксарофенантрена.  
Известия ТСХА, 1971, № 5, с. 172-178.

88. С.Б. Саввин, Л.А. Грибов, В.Л. Лебедев, Е.А. Лихонина.  
Электронное строение азосоединений и их комплексов с элементами. Сообщение 10.  
Журнал аналитической химии, 1971, т. 26, № 11, с. 2108-2120.
89. Л.А. Грибов, В.В. Васьков.  
К вопросу о вычислении многоцентровых интегралов в квантовой химии.  
Теоретическая и экспериментальная химия, 1971, т. 7, № 6, с. 822-824.
90. Л.А. Грибов.  
Решение задачи об ангармонических колебаниях и колебаниях большой амплитуды многоатомных молекул в точных естественных колебательных координатах.  
Оптика и спектроскопия, 1971, т. 31, с. 842-844.
91. О.И. Кондратов, Л.А. Грибов, В.В. Жогина.  
Программа вычисления частот колебаний многоатомных молекул по методу Фредгольма (без учета вырождения).  
Известия ТСХА, 1971, № 6, с. 177-181.
92. В.А. Коптюг, Л.А. Грибов.  
Использование вычислительных машин в спектроскопии молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1971, т. 15, № 6, с. 1128-
93. С.П. Муштакова, Н.С. Фрумина, Л.А. Грибов.  
Электронное строение замещенных дифениламина. Сообщение 2.  
Журнал аналитической химии, 1971, т. 26, № 12, с. 2300-2306.

## 1972

94. В.П. Круглов, Л.А. Грибов.  
Автоматизация определения параметров спектральных полос на базе ЭЦВМ.  
Известия ТСХА, 1972, № 1, с. 212-219.
95. В.Г. Рыбальченко, А.В. Котов, Л.А. Грибов.  
Расчет двухэлектронных интегралов для элементов 2 и 3 периодов.  
Известия ТСХА, 1972, № 2, с. 216-217.
96. О.Б. Зубкова, Л.А. Грибов, А.Н. Шабадаш.  
О возможности использования расчетов интенсивностей полос поглощения в ИК спектрах для исследования поворотной изомерии.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1972, т. 16, № 2, с. 306-312.
97. Л.А. Грибов, Ю.В. Лазарев, Г.В. Ховрин.  
Усовершенствование полуэмпирического метода расчета конформаций многоатомных молекул.  
Журнал структурной химии, 1972, т. 13, № 3, с. 536-538.

98. В.П. Круглов, Л.А. Грибов.  
Комплекс программ для ЭЦВМ по обработке инфракрасных спектров многоатомных молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1972, т. 16, № 5, с. 855-858.
99. В.Н. Тимонин, Л.А. Грибов.  
Квантовомеханические расчеты с варьируемыми волновыми функциями силовых постоянных СН – и СС – связей.  
Оптика и спектроскопия, 1972, т. 33, с. 181-182.
100. Л.А. Грибов, М.П. Носкова.  
Исследование влияния вариации числа звеньев и конформации полиэтиленполиаминной цепи на положение частот в ИК-спектре.  
Журнал структурной химии, 1972, т. 13, № 4, с. 730-734.
101. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев, М.Е. Эляшберг.  
О возможности автоматизации исследования строения и свойств молекулы по ее молекулярным спектрам.  
Автометрия, 1972, № 4, с. 109-117.
102. Л.А. Грибов, О.Б. Зубкова, О.И. Кондратов.  
Теоретический анализ инфракрасных спектров поглощения олигомеров и полимеров произвольной длины и конформации.  
Доклады Академии наук СССР, 1972, т. 205, № 5, с. 1121-1123.
103. М.П. Носкова, Л.А. Грибов, Г.Д. Асамбадзе, В.Д. Копылова.  
Исследование строения комплексных соединений некоторых двухвалентных металлов с полиэтиленполиаминами методами колебательной спектроскопии.  
Журнал структурной химии, 1972, т. 13, №5, с. 829-836.
104. М.И. Клима, А.В. Котов, Л.А. Грибов.  
Анализ колебательного спектра азобензола.  
Журнал структурной химии, 1972, т. 13, № 6, с. 1060-1064.
105. В.П. Круглов, Л.А. Грибов, А.В. Чекунов.  
О численном определении моментов спектральных полос на ЭЦВМ «Минск-22».  
Известия ТСХА, 1972, № 4, с. 177-181.
106. О.И. Кондратов, Л.А. Грибов.  
Комплекс программ вычисления частот колебаний периодических молекул.  
Известия ТСХА, 1972, № 5, с. 204-215.
107. L.A. Gribov, V.V. Zhogina, B.K. Novosadov, V.N. Timonin.  
An effective method of computing multicenter quantum-chemical integrals and some matrix elements.  
Chemical physics letters, 1972, v. 16, № 2, p. 289-291.
108. В.А. Дементьев, М.П. Носкова, Л.А. Грибов.  
Расчет интегральных интенсивностей полос поглощения колебательного спектра молекулы диэтиламина.

- Оптика и спектроскопия, 1972, т. 33, с. 1004-1006.
109. С.А. Степанян, Н.Н. Молоткова, А.Н. Шабдаш, Л.А. Грибов.  
Спектроскопическое изучение конформационных превращений в атактических полистироле и полиметилметакрилате.  
Высокомолекулярные соединений, 1972, т. (Б) 14, № 11, с. 802-803.
110. В.А. Дементьев, Л.А. Грибов.  
Автоматизация учета симметрии при решении задач о колебаниях многоатомных молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1972, т. 16, № 6, с. 1046-1051.
111. Л.А. Грибов, О.И. Кондратов.  
Расчет частот колебаний периодических молекул конечной длины с использованием метода возмущений.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1972, т. 17, № 1, с. 132-137.
112. Л.А. Грибов, О.И. Кондратов, М.И. Клима, А.В. Котов, В.В. Жогина.  
Расчет частот и форм колебаний многоатомных молекул с применением метода возмущений.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1972, т. 17, № 2, с. 329-334.
113. А.В. Чекунов, В.П. Круглов, Л.А. Грибов.  
Исследование формы контура ИК полос поглощения в растворах методом моментов.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1972, т. 17, № 5, с. 898-900.
114. Л.А. Грибов, О.И. Кондратов, А.В. Котов.  
Анализ колебательного спектра полистирола.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1972, т. 17, № 6, с. 1074-1079.

### 1973

115. Л.Г. Алехина, М.В. Ахманова, Л.А. Грибов, О.И. Кондратов, К.И. Тобелко.  
Об исследовании изоморфизма методом колебательной спектроскопии на примере циркона.  
Геохимия, 1973, № 1, с. 105-115.
116. С.П. Муштакова, Н.С. Фрумина, Л.А. Грибов.  
Электронное строение замещенных дифениламина. Сообщение 3.  
Электронное строение замещенных фенилантраниловой кислоты.  
Журнал аналитической химии, 1973, т. 28, № 1, с. 13-18.
117. Л.А. Грибов, О.Б. Зубкова.  
Общая постановка задачи о теоретическом анализе ИК спектров поглощения олигомеров и полимеров в зависимости от их длины и конформации цепи.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1973, т. 18, № 1, с. 101-106.

118. Л.А. Грибов, О.И. Кондратов.  
Расчет частот нормальных колебаний концевых групп периодических молекул конечной длины.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1973, т. 18, № 2, с. 289-292.
119. Л.А. Грибов, О.Б. Зубкова.  
Влияние длины цепи и конформации олигомеров и полимеров на их ИК спектры.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1973, т. 18, № 5, с. 879-882.
120. Л.А. Грибов, О.Б. Зубкова, А.Н. Шабадаш.  
Расчет спектральных кривых ИК поглощения полиэтиленгликолей разной длины и конформации.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1973, т. 18, № 6, с. 1028-1030.
121. М.И. Клима, А.В. Котов, Л.А. Грибов.  
О применимости формул Коулсона и Лонге–Хиггинса для оценки силовых постоянных ароматических молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1973, т. 18, № 6, с. 1080-1081.
122. М.И. Клима, А.В. Котов, Л.А. Грибов.  
Интерпретация колебательных спектров моногалогензамещенных азобензола.  
Журнал физической химии, 1973, т. 47, № 4, с. 1015-1018.
123. Л.А. Грибов, В.В. Жогина, Б.К. Новосадов, В.Н. Тимонин.  
Расчет многоцентровых квантовохимических интегралов и матричных элементов на ЭЦВМ. I.  
Журнал структурной химии, 1973, т. 14, № 3, с. 536-540.
124. Л.А. Грибов, В.В. Жогина, Б.К. Новосадов, В.Н. Тимонин.  
Расчет многоцентровых квантовохимических интегралов и матричных элементов на ЭЦВМ. II.  
Журнал структурной химии, 1973, т. 14, № 5, с. 893-897.
125. Л.А. Грибов, Б.К. Новосадов.  
Программа вычисления сил, действующих на ядра атомов в многоатомной молекуле.  
Журнал структурной химии, 1973, т. 14, № 6, с. 1117-1118.
126. В.А. Дементьев, В.И. Смирнов, Л.А. Грибов.  
Комплекс Алгол–программ для расчета колебательных спектров многоатомных молекул на машине БЭСМ-6.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1973, т. 19, № 6, с. 1087-1091.
127. L.A. Gribov.  
The problem of the complex automation of the spectrochemical research.

International Conference on Computers in Chemical Research and Education. Ljubljana, Zagreb, 12–17 July 1973, p. 3/81-3/108.

### 1974

128. Л.А. Грибов.  
О возможности полной автоматизации исследования строения и свойств многоатомной молекулы по ее колебательным спектрам.  
Сб. Прикладная спектроскопия, 1974, Минск, 5–9 июля 1974 г. с. 121-130.
129. В.А. Дементьев, В.И. Смирнов, Л.А. Грибов.  
Вычисление электрооптических параметров многоатомных молекул по методу наименьших квадратов с помощью ЭВМ.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1974, т. 20, № 2, с. 261-267.
130. Б.К. Новосадов, Л.Г. Алёхина, Л.А. Грибов.  
Квантовомеханическое вычисление силовой постоянной Si–O связи SiO<sub>4</sub> – иона.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1974, т. 20, № 3, с. 500-503.
131. Л.А. Грибов, Б.К. Новосадов.  
К вопросу о физическом смысле силовых постоянных и возможности их описания с помощью упрощенных волновых функций.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1974, т. 20, № 4, с. 655-663.
132. В.А. Дементьев, В.И. Смирнов, Л.А. Грибов.  
Метод задания геометрии и естественных координат при расчете колебаний многоатомной молекулы.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1974, т. 20, № 4, с. 696-702.
133. Л.А. Грибов, Г.В. Ховрин.  
Определение потенциальной поверхности и анализ ангармонических колебаний молекулы воды.  
Оптика и спектроскопия, 1974, т. 36, № 3, с. 475-480.
134. Л.А. Грибов, А.В. Ниукканен.  
Адиабатический принцип для рутановской секулярной проблемы.  
Журнал структурной химии, 1974, т. 15, № 3, с. 529-534.
135. Л.А. Грибов, И.В. Житлова, О.И. Кондратов.  
Расчет кривой инфракрасного спектра поглощения полиэтиленгликольадипата.  
Оптика и спектроскопия, 1974, т. 36, № 5, с. 911-915.
136. Л.А. Грибов.  
Применение электронно-вычислительных машин в аналитической химии.

- Успехи аналитической химии, Москва, «Наука», 1974, с. 346-352.
137. Л.А. Грибов, Г.В. Ховрин.  
Определение колебательной ангармонической потенциальной функции молекулы двуокиси серы.  
Известия ТСХА, 1974, № 4, с. 203-205.
138. А.В. Ниукканен, Л.А. Грибов.  
Параметризация сжимающего отображения в рутановской секулярной проблеме.  
Теоретическая и экспериментальная химия, 1974, т. 10, № 3, с. 377-380.
139. L.A. Gribov, V.A. Dementyev, M.E. Elyashberg, E.Z. Yakupov.  
Automation of spectrochemical investigations.  
Journal of Molecular Structure, 1974, v. 22, p. 161-172.
140. L.A. Gribov.  
Calculation of the spectral distribution of absorption coefficients in vibrational spectra of complicated molecules, polymers and crystals.  
Journal of Molecular Structure, 1974, v. 22, p. 353-360.
141. Л.А. Грибов, И.В. Рыбальченко, О.Б. Зубкова, О.И. Кондратов.  
Расчет спектрального распределения коэффициентов поглощения в колебательном спектре кристалла полиэтилена.  
Доклады Академии наук СССР, 1974, т. 216, № 1, с. 59-62.
142. М.Е. Elyashberg, L.A. Gribov.  
The problem of standardization and accumulation of parameters for molecular spectra calculations.  
4 CODATA Bulletin. Tsakhcadzor, USSR, 24-27 June 1974, p. 116-119.
143. Т.М. Зайцева, А.В. Котов, Л.А. Грибов.  
Особенности процесса окисления соединений фенотиазинового ряда. Известия ТСХА, 1974, № 5, с. 195-201.
144. Л.А. Грибов, И.В. Рыбальченко, О.Б. Зубкова, О.И. Кондратов.  
Расчет кривой спектрального распределения коэффициентов поглощения в сополимерах. Полиоктенамер.  
Доклады Академии наук СССР, 1974, т. 216, № 6, с. 1315-1318.
145. Л.А. Грибов, Г.В. Ховрин.  
Решение ангармонической задачи в теории многоатомных молекул методом разложения по гармоническим базисным функциям.  
Доклады Академии наук СССР, 1974, т. 217, № 2, с. 307-310.
146. Л.А. Грибов, Г.В. Ховрин.  
Расчет потенциальных поверхностей молекул  $H_2S$  и  $CO_2$ .  
Оптика и спектроскопия, 1974, т. 36, № 6, с. 1098-1102.



147. Т.П. Климова, Л.А. Грибов, В.И. Станко.  
Расчет и интерпретация инфракрасных спектров орто- и мета-дикарбоклизододекарборанов.  
Оптика и спектроскопия, 1974, т. 36, № 6, с. 1112-1117.
148. Ю.Ф. Барбалат, В.М. Пашкова, Л.А. Грибов.  
ИК–спектроскопическое исследование самоассоциации моноокислов  $\alpha$ -дикарбонильных соединений в органических растворителях.  
Вестник Московского университета, серия химия, 1974, № 3, с. 376-377.
149. Л.А. Грибов.  
Теория колебаний трехмерных упорядоченных структур. Полимерные кристаллы.  
Оптика и спектроскопия, 1974, т. 37, № 1, с. 67-71.
150. Л.А. Грибов, Г.В. Ховрин.  
Анализ ангармонических колебаний и потенциальной поверхности молекулы аммиака.  
Оптика и спектроскопия, 1974, т. 37, № 3, с. 453-457.
151. М.И. Клима, А.В. Котов, Л.А. Грибов.  
Анализ колебательных спектров монозамещенных азобензола.  
Журнал физической химии, 1974, т. 48, № 9, с. 2185-2189.
152. Т.П. Климова, В.И. Станко, Л.А. Грибов.  
Инфракрасные спектры и структура В и С–галогензамещенных карборанов (12).  
Журнал прикладной спектроскопии, 1974, т. 20, № 6, с. 1049-1053.
153. Л.А. Грибов, М.П. Носкова, И.Н. Крупенникова.  
Расчет кривой инфракрасного спектра поглощения этиламина.  
Оптика и спектроскопия, 1974, т. 36, с. 801-803.
154. В.И. Перевозчиков, Л.А. Грибов.  
Программа *ab initio* расчета электронных оболочек молекул с приближенной оценкой интегралов.  
Журнал структурной химии, 1974, т. 15, № 5, с. 958-960.
155. Ч. Ибраимов, Ш.Т. Талипов, Л.А. Грибов, Р.Х. Джиянбаева.  
Исследование состояния комплексов некоторых анабазиновых азокрасителей с индием и цирконием в растворах.  
Журнал аналитической химии, 1974, т. 29, № 12, с. 2309-2316.
156. Ч. Ибраимов, Ш.Т. Талипов, Л.А. Грибов, Е.А. Лихонина.  
Комплексообразование N–метиланабазин– $\alpha'$ –азо– $\beta$ –нафтола с индием.  
Журнал аналитической химии, 1974, т. 29, № 12, с. 2316-2323.

157. Л.А. Грибов, И.Н. Крупенникова, М.П. Носкова.  
Расчет кривой распределения спектрального коэффициента поглощения триэтиламина.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1974, т. 22, № 6, с. 1027-1030.

### 1975

158. В.И. Перевозчиков, Л.А. Грибов.  
Сравнение различных приближений при расчете электронных оболочек молекул методом *ab initio*.  
Теоретическая и экспериментальная химия, 1975, т. 11, № 3, с. 369-372.
159. Ч. Ибраимов, Ш.Т. Талипов, Л.А. Грибов, Р.Х. Джиянбаева.  
Исследование реагента состояний на основе N-метиланабазина в средах различной кислотности методом МО ЛКАО Хюккеля.  
Журнал аналитической химии, 1975, т. 30, № 5, с. 865-873.
160. Л.Г. Алёхина, М.В. Ахманова, В.А. Дементьев, Л.А. Грибов.  
Решение обратной спектральной задачи для  $\text{SiO}_4$  – группы.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1975, т. 22, № 4, с. 720-724.
161. В.И. Смирнов, В.А. Дементьев, А.А. Прошкин, Л.А. Грибов.  
Графическое представление результатов расчета колебаний молекул с помощью ЭВМ.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1975, т. 22, № 5, с. 947-948.
162. А.В. Ниукканен, В.И. Перевозчиков, Л.А. Грибов.  
Приближенные *ab initio* МО ЛКАО ССП расчеты электронных состояний молекул с дифференцированной оценкой интегралов.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1975, т. 22, № 6, с. 1082-1085.
163. С.А. Степанян, Е.М. Попов, Л.А. Грибов.  
Расчет спектрального распределения коэффициента поглощения поли-L-аланина.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1975, т. 23, № 1, с. 169-170.
164. Л.А. Грибов, А.В. Ниукканен, В.И. Перевозчиков.  
*Ab initio* расчеты электронной структуры молекул с дифференцированной оценкой интегралов.  
Доклады Академии наук СССР, 1975, т. 221, № 5, с. 1104-1106.
165. Е.С. Стоянов, И.И. Антипова-Каратаева, Б.Я. Спиваков, Л.А. Грибов, Ю.А. Золотов.  
Метод построения кривых образования комплексов в водных растворах и экстрактах и его использование для описания системы висмут–соляная кислота–трибутилфосфат.  
Доклады Академии наук СССР, 1975, т. 221, № 6, с. 1344-1347.

166. В.В. Серов, М.Е. Эляшберг, Л.А. Грибов.  
Система математического синтеза и анализа всех структурных формул органических соединений, соответствующих заданной брутто формуле.  
Доклады Академии наук СССР, 1975, т. 224, № 1, с. 109-111.
167. Л.А. Грибов, И.В. Житлова, О.Б. Зубкова, О.И. Кондратов.  
Расчет спектрального распределения коэффициентов поглощения в колебательном спектре кристалла полиэтилена.  
Оптика и спектроскопия, 1975, т. 38, № 3, с. 554-560.
168. Л.А. Грибов, И.В. Рыбальченко, О.Б. Зубкова, О.И. Кондратов.  
Расчет кривой спектрального распределения коэффициента поглощения в сополимере. Полиоктенамер.  
Оптика и спектроскопия, 1975, т. 39, № 3, с. 497-503.
169. Е.С. Стоянов, Б.Я. Спиваков, Ю.А. Золотов, Л.А. Грибов.  
Изучение механизма экстракции висмута (III) трибутилфосфатом из хлоридных растворов с использованием лазерной спектроскопии комбинационного рассеяния.  
Координационная химия, 1975, т. 1 № 1, с. 59-65.
170. Е.С. Стоянов, Б.Я. Спиваков, Л.А. Грибов, Ю.А. Золотов.  
Изучение хлоридных комплексов висмута (III) в водных растворах и экстрактах на основе триоктиламина с использованием лазерной спектроскопии комбинационного рассеяния.  
Координационная химия, 1975, т. 1 № 2, с. 228-233.
171. С.А. Степанян, А.М. Наумова, Л.А. Грибов.  
Теоретический анализ колебательных спектров изомеров N-метил-диацетимида.  
Известия ТСХА, 1975, № 1, с. 198-202.
172. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев, А.И. Тищенко, М.Е. Эляшберг, Э.З. Якупов.  
О возможности структурно-группового анализа вещества по его молекулярным спектрам с применением машинных корреляционных таблиц.  
Автометрия, 1975, № 1, с. 3-10.
173. А.В. Ниукканен, В.Н. Тимонин, Л.А. Грибов.  
Приближенные оценки квантовохимических интегралов.  
Журнал структурной химии, 1975, т. 16, № 1, с. 104-111.
174. Л.А. Грибов.  
Рецензия на монографию П. Хедвика «Экспериментальная квантовая химия»  
Журнал аналитической химии, 1975, т. 30, № 11, с. 2281.

175. Л.А.Грибов.  
Рецензия на монографию и атлас ИК спектров С. Холли и П. Сохора.  
Журнал аналитической химии, 1975, т. 30, № 12, с. 2471.
176. В.И. Перевозчиков, Л.А. Грибов.  
Ab initio расчет силовых постоянных некоторых двухатомных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 1975, т. 38, № 3, с. 510-512.
177. М.А. Elyashevich, L.A. Gribov.  
Problems of Realization of Automated Systems for Treatment of Molecular Spectral Data.  
18 Colloquium Spectroscopicum International, Grenoble, 1975, v. 3, p. 987-992.

### 1976

178. Г.В. Ховрин, Г.Ф. Лозенко, М.В. Расовский, Ю.И. Пономарев, Л.А. Грибов.  
Решение ангармонической задачи для молекулы воды посредством прямой численной диагонализации колебательного гамильтониана.  
Известия ТСХА, 1976, № 4, с. 201-206.
179. В.И. Перевозчиков, Л.А. Грибов.  
Неэмпирические расчеты силовых постоянных двухатомных молекул методом Хартри–Фока–Рутана с дифференцированной оценкой интегралов.  
Оптика и спектроскопия, 1976, т. 41, с. 332-334.
180. Л.А. Грибов, С.Б. Саввин, М.М. Райхштат.  
Конформационный анализ органических реагентов. Расчет пространственного строения органических реагентов группы арсеназо III методом атом–атомных потенциалов.  
Журнал аналитической химии, 1976, т. 31, № 8, с. 1504-1512.
181. V.V. Serov, M.E. Elyashberg, L.A. Gribov.  
Mathematical synthesis and analysis of molecular structures.  
Journal of Molecular Structure, 1976, v. 31, p. 381-397.
182. С.П. Муштакова, Л.А. Грибов, Б.К. Новосадов.  
О некоторых возможностях выбора параметров при решении электронной задачи по методу Хюккеля.  
Органические реактивы в анализе, издательство Саратовского университета, 1976, т. 2, № 4, с. 11-17.
183. Е.С. Стоянов, Б.Я. Спиваков, Л.А. Грибов, Ю.А. Золотов.  
Комплексы сурьмы (III) в растворах соляной кислоты.  
Координационная химия, 1976, т. 2, № 11, с. 1466-1470.

184. С.Б. Саввин, М.М. Райхштат, Л.А. Грибов.  
Конформационный анализ органических реагентов.  
Конформационные возможности реагентов группы арсеназо III  
с различными функционально–аналитическими группировками.  
Журнал аналитической химии, 1976, т. 31, № 10, с. 1869-1878.
185. В.В. Серов, М.Е. Эляшберг, Л.А. Грибов.  
Алгоритм и программа проверки наличия или отсутствия  
заданных фрагментов в структурных формулах химических  
соединений, представляемых графами.  
Журнал структурной химии, 1976, т. 17, № 6, с. 1090-1095.
186. Ч. Ибраимов, Ш.Т. Талипов, Л.А. Грибов.  
Улучшение контрастности аналитической реакции индия с 4–  
(2–N–метиланабазин– $\alpha'$ –азо) – резорцином.  
Журнал аналитической химии, 1976, т. 31, № 6, с. 1128-1132.

### 1977

187. И.Н. Крупенникова, М.М. Райхштат, Л.А. Грибов.  
Расчет электронных спектров полиаценов.  
Известия ТСХА, 1977, № 1, с. 196-204.
188. В.В. Серов, М.Е. Эляшберг, Л.А. Грибов.  
Математический «синтез» всех топологических изомеров  
бензола.  
Известия ТСХА, 1977, № 1, с. 215-216.
189. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.  
К вопросу об ангармоничности колебаний в полимерах и  
кристаллах. Интенсивности обертонов и составных частот.  
Оптика и спектроскопия, 1977, т. 42, № 1, с. 100-107.
190. Л.А. Грибов.  
Об одной возможности решения электронных задач для  
полимеров и кристаллов методом самосогласованного поля.  
Оптика и спектроскопия, 1976, т. 42, № 2, с. 295-299.
191. В.И. Перевозчиков, Л.А. Грибов.  
Расчет силовых постоянных малых многоатомных молекул  
методом *ab initio* с дифференцированной оценкой интегралов.  
Оптика и спектроскопия, 1977, т. 42, с. 203-204.
192. Л.Г. Алёхина, М.В. Ахманова, Л.А. Грибов.  
Исследование методом ИК–спектров замещения  $\text{SiO}_4$  –  
тетраэдров на  $(\text{OH})_4$  – в силикатах.  
Геохимия, 1977, № 5, с. 797-802.
193. В.В. Серов, М.Е. Эляшберг, Л.А. Грибов.  
Алгоритм и программа идентификации многоатомных молекул  
по оптическим спектрам.

- Доклады Академии наук СССР, 1977, т. 232, № 3, с. 592-595.
194. Т.В. Петрова, С.Б. Саввин, Л.А. Грибов, М.М. Райхштат, Т.Г. Джераян.  
Влияние растворителей на азо–хинонгидразонное равновесие в растворах 2,7–бисазозамещенных хромотроповой кислоты.  
Журнал аналитической химии, 1977, т. 32, № 2, с. 250-259.
195. М.Е. Эляшберг, В.В. Серов, Л.А. Грибов.  
Распознавание химических соединений по их молекулярным спектрам с применением программы построения структурных формул из атомов и фрагментов.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1977, т. 26, № 2, с. 313-318.
196. Л.А.Грибов, В.И. Перевозчиков, Б.К. Новосадов, А.В. Ниукканен.  
Приближенные *ab initio* расчеты силовых постоянных двухатомных и малых многоатомных молекул.  
Физика молекул, 1977, № 5, с. 45-52.
197. Л.А. Грибов, М.И. Годнева, В.Н. Виноградова, И.Н. Годнев.  
О применении действительных координат симметрии в случае групп, имеющих не вещественные представления.  
Оптика и спектроскопия, 1977, т. 43, № 4, с. 631-635.
198. Л.А. Грибов, М.Е. Эляшберг.  
Качественный молекулярный спектральный анализ с применением ЭВМ.  
Журнал аналитической химии, 1977, т. 32, № 10, с. 2025-2043.
199. В.А. Дементьев, О.Б. Зубкова, А.Т. Тодоровский, Л.А. Грибов.  
Расчет колебательных спектров молекул с автоматическим учетом структуры и свойств молекулярных фрагментов.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1977, т. 27, № 3, с. 494-501.
200. Л.А. Грибов.  
Состояние и перспективы развития теории колебательных спектров многоатомных молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1977, т. 27, № 4, с. 599-612.
201. Л.А. Грибов, О.Б. Зубкова, И.В. Рыбальченко.  
Об одной возможности приближенного расчета колебательных спектров кристаллов.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1977, т. 27, № 6, с. 1038-1041.
202. L.A. Gribov, M.E. Elyashberg, V.V. Serov.  
Computer system for structure recognition of polyatomic molecules by i.r., n.m.r., u.v. and m.s. methods.  
Analitica Chimica Acta, 1977, v. 95, p. 75-96.
203. Ю.Ф. Барбалат, В.М. Пешкова, Л.А. Грибов.

Электронная структура, свойства и реакционная способность карбонилосимов.

Вестник Московского университета, серия химия, 1977, т. 18, № 4, с. 436-442.

204. Ч. Ибраимов, Л.А. Грибов, Ш.Т. Талипов, Е.А. Лихонина.  
Изучение состояния N-метиланабазин- $\alpha'$ -азо-3,4-диметилфенола и его комплекса с индием в растворах.  
Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология, 1977, т. 20, № 4, с. 485-488.
205. М.И. Годнева, Л.А. Грибов.  
Построение координат симметрии в случае неплоских колебаний.  
Доклады ТСХА, 1977, № 223, с. 159-162.

### 1978

206. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
К вопросу о вычислении интегралов Франка-Кондона.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1978, т. 28, № 1, с. 117-124.
207. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев, А.Т. Тодоровский.  
Определение электрооптических параметров парафинов, бензола, и его алкилзамещенных на основе интенсивностей в ИК спектрах.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1978, т. 28, № 2, с. 295-301.
208. А.Т. Тодоровский, В.А. Дементьев, Л.А. Грибов.  
Расчет спектральных кривых ИК поглощения алкенов на базе машинной библиотеки стандартных фрагментов.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1978, т. 29, № 1, с. 97-100.
209. М.И. Годнева, В.Н. Виноградова, Л.А. Грибов.  
Таблицы матриц неприводимых представлений групп симметрии квазитвердых молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1978, т. 29, № 2, с. 369.
210. Л.А. Грибов, С.Б. Саввин.  
Применение квантовохимических методов для исследования органических реагентов. Успехи, ограничения, перспективы.  
Журнал аналитической химии, 1978, т. 33, № 3, с. 586-598.
211. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.  
К вопросу о построении гамильтониана для ядерных движений в многоатомных молекулах.  
Оптика и спектроскопия, 1978, т. 44, с. 1032-1035.
212. А.Т. Тодоровский, В.А. Дементьев, Л.А. Грибов.

- О возможной переносимости полуширин полос инфракрасного поглощения в ряду родственных молекул при построении теоретических спектральных кривых.  
Оптика и спектроскопия, 1978, т. 44, №.6, с. 1096-1098.
213. В.И. Перевозчиков, Л.А. Грибов.  
Расчет квадратичных–квартичных силовых постоянных двухатомных молекул методом *ab initio* с дифференцированной оценкой интегралов.  
Оптика и спектроскопия, 1978, т. 45, № 2, с. 401-402.
214. В.И. Баранов, Л.А. Грибов  
Об одном возможном методе расчета колебательной структуры электронных спектров.  
Оптика и спектроскопия, 1978, т. 45, № 3, с. 463-471.
215. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.  
Алгоритм вычисления поправок на кинематическую ангармоничность в теории колебаний многоатомных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 1978, т. 45, № 5, с. 899-902.
216. Г.П. Дорошина, А.В. Котов, Л.А. Грибов.  
Об электронной структуре диоксиазосоединений в нейтральном и ионизированном состояниях.  
Известия ТСХА, 1978, № 6, с. 190-196.
217. Л.А. Грибов, Т.П. Климова, М.М. Райхштат.  
Об особенностях химической связи в карборанах (12).  
Доклады Академии наук СССР, 1978 т. 243, № 1, с. 137-140.
218. L.A. Gribov, V.A. Dementiev, A.T. Todorovsky.  
Calculation of spectral absorption curves for polyatomic molecules.  
Journal of Molecular Structure, 1978, v. 50, p. 389-396.
219. Л.А. Грибов.  
Рецензия на монографию «Колебательная спектроскопия – современные тенденции».  
Журнал аналитической химии, 1978, № 10.
220. Л.А. Грибов, А.Н. Горностаев.  
Простая демонстрация законов Ньютона.  
Успехи физических наук, 1978, т. 124, № 4, с. 717-718.
221. Ч. Ибраимов, Ш.Т. Талипов, Л.А. Грибов, А.Х. Рахимов, Ю.А. Коробкова.  
Исследование состояния N–метиланабазин– $\alpha'$ –азо–n–крезола и его комплекса с индием в растворах.  
Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология, 1978, т. 21, № 1, с. 85-88.
222. В.И. Перевозчиков, Л.А. Грибов.



- Использование аппроксимации потенциальной кривой функцией Морзе при квантовых расчетах силовых постоянных двухатомных молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1978, т. 29, № 5, с. 927-928.
223. L.A. Gribov, M.E. Elyashberg, V.V. Serov.  
On the solution of one classical problem in vibrational spectroscopy.  
Journal of Molecular Structure, 1978, v. 50, p. 371-387.
224. Л.А. Грибов, М.А. Ельяшевич.  
Кодировка эмпирических параметров в теории колебательных спектров многоатомных молекул и алгоритм построения их таблиц на ЭВМ.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1978, т. 24, № 6, с. 1024-1028.
225. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.  
Методика проведения практических занятий по физике в привлечением демонстраций.  
Сборник научно-методических статей по физике. Высшая школа, 1978, № 6, с. 24-27.

## 1979

226. Yu.A. Zolotov, B.Ya. Spivakov, E.S. Stoyanov, L.A. Gribov.  
Studies of bismuth (111)-halogen acid-extractant systems by laser raman spectroscopy.  
J. inorg. nucl. Chem., 1979, v. 41, p. 365-376.
227. B.Ya. Spivakov, E.S. Stoyanov, L.A. Gribov, Yu.A. Zolotov.  
Raman laser spectroscopic studies of bismuth (111) halide complexes in aqueous solutions.  
J. inorg. nucl. Chem., 1979, v. 41, p. 453-455.
228. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
Программа расчета колебательной структуры электронных спектров многоатомных молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1979, т. 30, № 1, с. 164-166.
229. L.A. Gribov, T.P. Klimova, M.M. Raichstatt.  
Volume conjugation in electron-deficient polyhedral molecules.  
Journal of Molecular Structure, 1979, v. 56, p. 125-138.
230. Л.А. Грибов.  
Элементы теории молекулярных спектров.  
Издательство Института космических исследований АН СССР, Москва, 1979, с. 1-42.
231. L.A. Gribov, M.E. Elyashberg, M.M. Raikhshtat.  
A new approach to the determination of molecular spatial structure based on the use of spectra and computers.

- Journal of Molecular Structure, 1979, v. 53, p. 81-96.
232. С.А. Степанян, Л.А. Грибов, Е.М. Попов.  
Расчет инфракрасных спектров дипептидов.  
Известия ТСХА, 1979, № 3, с. 149-160.
233. Г.П. Дорошина, Л.А. Грибов.  
Конформационный анализ азобензола и его  
диоксипроизводного методом атом-атомного потенциала.  
Известия ТСХА, 1979, № 3, с. 175-182.
234. Л.А. Грибов, С.Д. Демухамедова.  
Метод расчета колебательных спектров привитых и  
блоксополимеров. Спектры системы кристалл-адсорбированная  
молекула.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1979, т. 30, № 3, с. 503-507.
235. С.А. Степанян, Л.А. Грибов.  
Построение спектральной кривой инфракрасного поглощения  
полиглицина и его дейтерозамещенных.  
Доклады Академии наук СССР, 1978 т. 246, № 6, с. 1418-1420.
236. L.A. Gribov.  
The perspective of artificial intellect systems for molecular  
spectroscopy.  
Vestnik Slobenskega kemijskega drustva, 1979, z. 26, p. 55-60.
237. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
Расчет электронно-колебательного спектра  
дифенилгексатриена.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1979, т. 31, № 3, с. 476-479.
238. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
Расчеты электронно-колебательных спектров многоатомных  
молекул в франк-кондоновском и герцберг-теллеровском  
приближениях.  
Оптика и спектроскопия, 1979, т. 47, № 1, с. 91-99.
239. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
Расчет электронно-колебательного спектра молекулы  
бензонитрила.  
Оптика и спектроскопия, 1979, т. 47, № 2, с. 255-260.
240. С.А. Степанян, Л.А. Грибов.  
Расчет инфракрасного спектра полиглицина.  
Оптика и спектроскопия, 1979, т. 47, № 2, с. 291-296.
241. Ю.Ф. Барбалат, В.М. Пешкова, Л.А. Грибов.  
Анализ колебательных спектров диацетилмонооксима и  
альдоксима фенилглиоксаля.  
Вестник МГУ, серия химия, 1979, т. 20, № 3, с. 265-270.
242. В.Л. Кофман, О.И. Кондратов, Л.А. Грибов.

- Анализ колебательных спектров 1,4-полиизопренов разных структур.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1979, т. 31, № 1, с. 85-90.
243. Ч. Ибраимов, Л.А. Грибов, Ш.Т. Талипов.  
Чувствительность аналитических реакций некоторых пиридилоксиазореагентов с индием.  
Журнал аналитической химии, 1979, т. 34, № 8, с. 1647-1650.
244. М.М. Райхштат, С.Б. Саввин, Л.А. Грибов.  
Теоретическое описание тонких особенностей электронной структуры органических реагентов.  
Журнал аналитической химии, 1979, т. 34, № 10, с. 1886-1891.
245. Л.А. Грибов, Т.Т. Ельменева, И.С. Перельгин.  
Исследование природы межмолекулярных и ион-молекулярных взаимодействий в комплексах, образуемых гидроксилосодержащими соединениями.  
Журнал структурной химии, 1979, т. 20, № 6, с. 1038-1046.
246. Л.А. Грибов, Г.П. Дорошина, В.А. Дементьев.  
О некоторых возможных причинах усложнений контуров полос поглощения в электронных спектрах органических реагентов.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1979, т. 31, № 5, с. 864-871.
247. Л.А. Грибов, А.И. Павлючко, Г.В. Ховрин.  
Некоторые вопросы решения ангармонической задачи в теории колебаний многоатомных молекул методом прямой диагонализации гамильтониана.  
Оптика и спектроскопия, 1979, т. 47, № 3, с. 478-481.
248. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.  
Алгоритм вариационного решения электронно-колебательной задачи в теории молекулярных спектров.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1979, т. 31, № 6, с. 1054-1059.

## 1980

249. Д.И. Мустафин, Л.А. Грибов, О.В. Сиванова.  
Расчет пространственного строения некоторых ксантеновых соединений, четвертичных пиридиниевых солей и продуктов их взаимодействия.  
Журнал структурной химии, 1980, т. 21, № 3, с. 62-70.
250. Л.А. Грибов, Т.Т. Мерзляк, И.С. Перельгин.  
Исследование взаимовлияния партнеров при образовании гидроксилсодержащими соединениями межмолекулярных и ион-молекулярных Н-комплексов.  
Журнал физической химии, 1980, т. 54, № 8, с. 2010-2016.

251. L.A. Gribov, T.T. Merzlyak, I.S. Perelygin.  
Interactions in H-complexes of some alcohols and the anharmonic calculation of the vibration frequencies of A-H and X ... H bonds.  
Chemical Physics Letters, 1980, v. 74, p. 196-200.
252. Л.А. Грибов.  
Международная конференция «Аналитическая химия, базирующаяся на ЭВМ».  
Журнал аналитической химии, 1980, т. 35, № 5, с. 1045-1046.
253. L.A. Gribov.  
Tobbatomos molekulak rezgesi es rezgesi-elektrongerjesztesi szinkepeinek korszeru szamitasi lehetosegei.  
Kemiai Kozlemenyek 53, kotet 1980 p. 163-184.
254. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
Точный метод вычисления интегралов наложения колебательных волновых функций.  
Оптика и спектроскопия, 1980, т. 49, с. 198-199.
255. Л.А. Грибов, С.Б. Саввин, М.М. Райхштат.  
Влияние заместителей в молекуле органического реагента на его электронное строение и реакционную способность.  
Журнал аналитической химии, 1980, т. 35, № 8, с. 1469-1477.
256. Л.А. Грибов, Т.Т. Ельменева, И.С. Перельгин.  
Исследование потенциальных функций валентных, деформационных, крутильных колебаний O-H – связи спиртов в межмолекулярных и ион-молекулярных H – комплексах.  
Журнал структурной химии, 1980, т. 21, № 4, с. 97-100.
257. L.A. Gribov.  
Application of artificial intelligence systems in molecular spectroscopy.  
Analitica Chimica Acta, 1980, v. 122, p. 249-256.
258. L.A. Gribov, T.T. Merzlyak, I.S. Perelygin.  
Investigation into the nature of intermolecular and ion-molecular interactions in H-groups of hydroxylcontaining compounds and calculation of vibration frequencies for A-H and H ... X bonds using the anharmonic approach.  
Journal of Molecular Structure, 1980, v. 67, p. 1-28.
259. Л.А. Грибов.  
О неким могућностима квантитативних израчунавња вибрационих и електронско-вибрационих спектра вишеатомских молекула и полимера.  
Гласник хемиоског друштва Београд, 1980, т. 45, № 7-8, с. 221-250.
260. А.И. Павлючко, Л.А. Грибов.  
Программы для расчетов ангармонических колебаний молекул.

1981

261. В.В. Фомичев, В.А. Гагарина, О.И. Кондратов, Л.А. Грибов, К.И. Петров.  
Исследование колебательных спектров молибдатов и вольфраматов лантанидов.  
Журнал неорганической химии, 1981, т. 26, № 7, с. 1775-1781.
262. V.I. Baranov, L.A. Gribov, B.K. Novosadov.  
Calculation of vibronic spectra of polyatomic molecules in the Franck–Condon and Herzberg–Teller approximations. I. Methods for calculating matrix elements.  
Journal of Molecular Structure, 1981, v. 70, p. 1-29.
263. V.I. Baranov, L.A. Gribov.  
Calculation of vibronic spectra of polyatomic molecules in the Franck–Condon and Herzberg–Teller approximations. II. Spectral distribution curves of absorption coefficients.  
Journal of Molecular Structure, 1981, v. 70, p. 31-47.
264. L.A. Gribov, S.B. Savvin.  
The mechanism of the distant substituent effect on molecule reactivity.  
Journal of Molecular Structure, 1981, v. 71, p. 263-278.
265. И.И. Антипова–Каратаева, Л.А. Грибов.  
Международная конференция «Применение ЭВМ в аналитике».  
Журнал аналитической химии, 1981, т. 36, № 2, с. 420-421.
266. Н.Н. Гусакова, А.Н. Панкратов, Е.Е. Федоров, С.П. Муштакова, Л.А. Грибов.  
Расчет конформации дифениламина и его орто- и пара-нитропроизводных методом атом–атомных потенциалов.  
Журнал структурной химии, 1981, т. 22, № 3, с. 37-41.
267. В.Л. Кофман, О.И. Кондратов, Л.А. Грибов.  
Анализ колебательных спектров полихлоропрена, полибромопрена и поли-1,1,2-трихлорбутадиена.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1981, т. 34, № 3, с. 456-463.
268. В.Л. Кофман, О.И. Кондратов, Л.А. Грибов.  
Анализ колебательных спектров полипентадиенов–1,3.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1981, т. 34, № 6, с. 1052-1057.
269. М.В. Ахманова, Л.А. Грибов, С.Г. Иванов, Н.С. Строганова.  
Разрешение структуры электронных полос поглощения в жидкости методом внутрирезонаторной лазерной спектроскопии.

- Журнал прикладной спектроскопии, 1981, т. 34, № 5, с. 866-871.
270. Л.А. Грибов, Т.Т. Мерзляк, И.С. Перельгин.  
Ангармонический анализ колебаний А–Н и Н...Х связей в ион–молекулярных и межмолекулярных Н–комплексах гидроксилсодержащих соединений.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1981, т. 35, № 4, с. 688-698.
271. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.  
Метод наложения электронно-колебательных конфигураций в теории спектров многоатомных молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1981, т. 35, № 5, с. 827-833.
272. А.И. Павлючко, Г.Ф. Лозенко, Л.А. Грибов.  
Интерпретация состояний и анализ изменений геометрии молекул при ангармонических колебательных возбуждениях.  
Оптика и спектроскопия, 1981, т. 50, № 3, с. 450-457.
273. Л.А. Грибов.  
Колебания простых молекул со связями Si–O.  
Оптика и спектроскопия, 1981, т. 50, № 3, с. 616-617.
274. О.В. Новоселова, Л.А. Грибов.  
Параметры для расчетов инфракрасных спектров молекул ацетиленового ряда.  
Известия ТСХА, 1981, № 6, с. 162-169.
275. Н.Н. Казанова, Л.А. Грибов.  
Исследование пространственной структуры молекулы экстрагента LIX 65N методом атом–атомных потенциалов.  
Журнал структурной химии, 1981, т. 22, № 5, с. 3-7.
276. А.Б. Болотин, В.А. Болотин, Л.А. Грибов, Ю.А. Тищенко.  
Влияние внутренних вращений в молекулах дипиридилов на способность к протонированию.  
Литовский физический сборник, Вильнюс, 1981, 34 с., депонировано в ЛитНИИТИ 10 апреля 1981 г., № 712–81.
277. Л.А. Грибов.  
Международная школа «Обработка данных в химии».  
Журнал аналитической химии, 1981, т. 36, № 7, с. 1447-1448.
278. Н.Н. Казанова, Л.А. Грибов, Ю.А. Золотов.  
Распределение электронной плотности и электростатического поля в молекулах салицилальдоксима и соединений, моделирующих экстрагент LIX 65N.  
Журнал аналитической химии, 1981, т. 36, № 11, с. 2124-2131.
279. Л.А. Грибов, М.Р. Расовский.  
Вариационный метод решения задачи о произвольных внутренних движениях в многоатомной молекуле. Внутреннее вращение и гармонические колебания.  
Оптика и спектроскопия, 1981, т. 51, № 4, с. 627-632.

280. Л.А. Грибов, М.Р. Расовский.  
Вариационный метод решения задачи о произвольных внутренних движениях в многоатомной молекуле. Внутреннее вращение и ангармонические колебания.  
Оптика и спектроскопия, 1981, т. 51, № 5, с. 794-797.
281. L.A. Gribov.  
Basic problems of computation of molecular optical spectra.  
Data Processing in Chemistry PWN–Polish Scientific Publishers, Elsevier Scientific Publishing Company, 1981, p. 32-55.

## 1982

282. А.И. Павлючко, Г.Ф. Лозенко, Г.В. Ховрин, Л.А. Грибов.  
Решение ангармонической колебательной задачи для молекул  $H_2O$ ,  $H_2Se$ ,  $NO_2$ ,  $O_3$  вариационным методом.  
Оптика и спектроскопия, 1982, т. 52, № 1, с. 64-70.
283. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.  
О возможности определения полной системы электрооптических параметров многоатомных молекул с помощью квантовомеханических расчетов.  
Оптика и спектроскопия, 1982, т. 52, № 5, с. 928-931.
284. Л.А. Грибов, А.И. Павлючко, Г.Ф. Лозенко.  
Исследование возбужденных колебательных состояний малых многоатомных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 1982, т. 53, № 5, с. 812-816.
285. L.A. Gribov, N.I. Prokofieva.  
The theory of intensities in the infrared spectra of polyatomic molecules.  
Journal of Molecular Structure, 1982, v. 84, p. 39-48.
286. L.A. Gribov.  
On the separation of motions in the theory of polyatomic molecules spectra.  
Journal of Molecular Structure, 1982, v. 87, p. 133-139.
287. L.A. Gribov, S.B. Savvin, M.M. Reichstat, M.Yu. Orlov.  
The mechanism of the remote polar substituents effect on formation of ion–molecular complexes.  
Journal of Molecular Structure, 1982, v. 88, p. 171-182.
288. D. Racovic, S.A. Stepanyan, L.A. Gribov, Yu.N. Panchenko.  
The solution of the inverse spectroscopic problem for the IR spectra of trans– and cis–hexatrienes.  
Journal of Molecular Structure, 1982, v. 90, p. 363-377.

289. D. Racovic, S.A. Stepanyan, L.A. Gribov.  
I.R. study of poly(2-phenylvinyl ethyl ether)-co maleic anhydride. I. Solution of the inverse spectroscopic problem for succinic anhydride. Bulletin de la societie chimique, Beograd, 1982, v. 47, No 6, p. 261-272.
290. D. Racovic, S.A. Stepanyan, L.A. Gribov.  
I.R. study of poly(2-phenylvinyl ethyl ether)-co maleic anhydride. II. Calculation of the spectral distribution curve of absorption coefficients. Bulletin de la societie chimique, Beograd, 1982, v. 47, No. 6, p. 273-282.
291. Л.А. Грибов, Г.Ф. Лозенко.  
Решение ангармонических колебательных задач для молекул  $CF_4$  и  $C_2H_4$  вариационным методом. Журнал прикладной спектроскопии, 1982, т. 36, № 6, с. 976-980.
292. D. Racovic, I. Vozovic, S.A. Stepanyan, L.A. Gribov.  
IR spectra and structure of poly(p-phenylene). A theoretical study. Solid State Communication, 1982, v. 43, No. 2, p. 127-129.
293. Л.А. Грибов, Ю.А. Золотов, В.И. Калмановский, Л.Л. Кунин, Ю.М. Лужков, А.А. Попов, В.С. Тороцов.  
Универсальная система химического анализа. Журнал аналитической химии, 1982, т. 37, № 6, с. 1104-1121.
294. О.В. Новоселова, Л.А. Грибов.  
Расчет интенсивностей в инфракрасных спектрах кумуленов. Известия ТСХА, 1982, № 5, с. 167-173.
295. Л.А. Грибов, В.И. Баранов.  
О возможности построения общей полуэмпирической теории колебательных и электронно-колебательных спектров многоатомных молекул. Журнал прикладной спектроскопии, 1982, т. 37, № 6, с. 1016-1022.
296. М.Е. Эляшберг, Л.А. Грибов, В.Н. Колдашов, И.В. Плетнев.  
Диалоговая система распознавания структуры молекул по их спектрам. Доклады Академии наук СССР, 1982, т. 268, № 1, с. 112-115.
297. Л.А. Грибов, Т.Т. Мерзляк, Г.Ф. Лозенко.  
Изучение вклада механической ангармоничности в интенсивность обертонов и составных частот в ИК спектрах на примере расчета молекул  $H_2O$ ,  $CO_2$ , и  $HCN$ . Известия ТСХА, 1982, № 3, с. 136-138.
298. Л.А. Грибов, А.И. Павлючко, Г.Ф. Лозенко.  
Вариационное решение ангармонической задачи для молекул  $CO_2$  и  $HCN$ .



- Журнал прикладной спектроскопии, 1982, т. 36, № 1, с. 87-92.
299. Л.А. Грибов, А.И. Павлючко, Г.Ф. Лозенко.  
Решение прямых и обратных ангармонических механических спектральных задач для молекул  $\text{H}_2\text{CO}$ ,  $\text{D}_2\text{CO}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2$ ,  $\text{C}_2\text{D}_2$ .  
Журнал прикладной спектроскопии, 1982, т. 36, № 2, с. 274-276.
300. М.И. Синюков, В.А. Тюльдюков, Л.А. Грибов, В.И. Баранов.  
Составление экзаменационных билетов для абитуриентов на ЭВМ. Сборник научно-методических статей по физике. Высшая школа, 1982, с. 29-32.

### 1983

301. Л.А. Грибов, М.Р. Расовский.  
Валентнооптическая теория интенсивностей в инфракрасных спектрах молекул с внутренним вращением.  
Оптика и спектроскопия, 1983, т. 55, № 2, с. 268-272.
302. О.В. Новоселова, В.А. Дементьев, Л.А. Грибов.  
Расчет кривых спектрального распределения коэффициента поглощения в колебательных спектрах ряда диенов с изолированными двойными связями.  
Известия ТСХА, 1983, № 6, с. 171-175.
303. Л.А. Грибов, М.М. Райхштат, С.Б. Саввин.  
Силы в молекулах и химическая связь.  
Координационная химия, 1983, т. 9, № 9, с. 1192-1200.
304. Д.И. Мустафин, Н.А. Костромина, О.В. Сиванова, Л.А. Грибов.  
Исследование реакции взаимодействия бромпиригаллолового красного с хлоридом цетилпиридиния.  
Теоретическая и экспериментальная химия, 1983, т. 20, № 1, с. 20-25.
305. Л.А. Грибов, И.Г. Каплан.  
Математические методы в химии.  
В книге «Очерки развития математики в СССР», Наукова думка, Киев, 1983, с. 663-681.
306. А.Б. Болотин, В.А. Болотин, Л.А. Грибов, Ю.А. Тищенко.  
Полуэмпирическое исследование изомеризации относительно  $\text{C}=\text{C}$  связи и ее влияния на сродство к протону.  
Литовский физический сборник, 1983, т. 23, № 1, с. 109.
307. Л.А. Грибов, С.Д. Демухамедова, О.Б. Зубкова.  
Теоретический анализ и интерпретация колебательных спектров изотактического полимера. Поли-4-метил-пентен-1.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1983, т. 38, № 2, с. 230-236.
308. В.В. Фомичев, В.А. Гагарина, О.И. Кондратов, Л.А. Грибов, К.И. Петров.

- Исследование колебаний  $\text{KSm}(\text{WO}_4)_2$   
Журнал неорганической химии, 1983, т. 28, № 1, с. 112-117.
309. Л.А. Грибов, М.Е. Elyashberg, V.N. Koldashov, I.V. Pletnjov.  
A dialogue computer program system for structure recognition of complex molecules by spectroscopic methods.  
Analytica Chimica Acta, 1983, v. 148, p. 159-170.
310. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
Вариационный метод решения неадиабатической электронно-колебательной задачи в модифицированном базисе.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1983, т. 38, № 3, с. 418-423.
311. Л.А. Грибов, С.Д. Демухамедова, О.Б. Зубкова.  
Теоретический анализ и интерпретация колебательных спектров полиакрилонитрила и полиметакрилонитрила.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1983, т. 38, № 4, с. 605-613.
312. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.  
Новый вывод выражения для оператора кинетической энергии в теории колебаний многоатомных молекул.  
Известия ТСХА, 1983, № 2, с. 174-182.
313. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.  
Метод наложения конфигураций в теории электронных спектров полимеров и кристаллов.  
Известия ТСХА, 1983, № 3, с. 170-172.
314. Н.Н. Гусакова, С.П. Муштакова, Л.А. Грибов.  
Исследование электронного строения и распределения электростатических потенциалов некоторых замещенных дифениламина.  
Журнал структурной химии, 1983, т. 24, № 2, с. 12-16.
315. А.Н. Калинин, Л.А. Грибов.  
Расчеты ИК спектров поливинилацетата, поливинилформиата, полиакриловой и полиметакриловой кислот.  
Известия ТСХА, 1983, №5, с. 150-154.
316. Б.Л. Файфель, Л.А. Грибов.  
Расчет электронных состояний периодических структур методом РМХ.  
Журнал структурной химии, 1983, т. 24, № 3, с. 3-9.
317. С.Б. Саввин, Л.А. Грибов, М.Ю. Орлов, М.М. Райхштат.  
Влияние заместителей в органическом реагенте на прочность связи металл – лиганд.  
Журнал аналитической химии, 1983, т. 38, № 5, с. 773-778.
318. А.И. Павлючко, Л.А. Грибов.  
О возможности решения ангармонических колебательных задач для молекул среднего размера вариационным методом в базисе гармонических колебательных функций.

- Оптика и спектроскопия, 1983, т. 54, № 4, с. 644-649.
319. Л.А. Грибов, М.Р. Расовский.  
Вариационное решение задачи о внутреннем вращении для ряда многоатомных молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1983, т. 39, № 2, с. 278-283.
320. D. Racovic, I. Vozovic, S.A. Stepanyan, L.A. Gribov.  
Theoretical study of infrared absorption in trans – (CH)<sub>x</sub> and trans – (CD)<sub>x</sub>.  
Physical Review B, 1983, v. 28, N 4, p. 1997-2000.
321. А.Н. Калинин, Л.А. Грибов.  
Расчеты колебаний кристалла льда.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1983, т. 39, № 3, с. 463-468.
322. L.A. Gribov.  
Towards numerical vibrational spectroscopy.  
Journal of Molecular Structure, 1983, v. 100, p. 13-39.
323. V.I. Baranov, L.A. Gribov.  
Some aspects of the solution of the nonadiabatic electron-vibration problem.  
Journal of Molecular Structure, 1983, v. 104, p. 267-285.
324. A.W. Niukkanen, L.A. Gribov.  
Σ – Factorization method: a new development of molecular–orbital theories based on one–centre approximation of atomic and molecular densities.  
Theoret. Chim. Acta, 1983, v. 62, p. 443-460.

## 1984

325. Л.А. Грибов, Т.Т. Мерзляк, И.С. Перельгин.  
О механизме взаимовлияния ион-молекулярных связей, образуемых гидроксильной группой.  
Журнал физической химии, 1984, т. 58, № 7, с. 1687-1693.
326. А.Н. Калинин, Л.А. Грибов.  
Расчеты ИК спектров 1,2–полибутадиена, полиизобутилена и полибутена–I.  
Известия ТСХА, 1984, №6, с. 168-171.
327. Д.И. Мустафин, О.В. Сиванова, Л.А. Грибов.  
Электронная структура, электростатические потенциалы и реакционная способность ксантеновых соединений.  
Известия ТСХА, 1984, №5, с. 160-164.
328. И.В. Плетнев, Ю.А. Золотов, Л.А. Грибов.  
О теоретическом исследовании пространственной структуры комплексов макроциклов с металлами.  
Доклады АН СССР, 1984, т. 266, № 5, с. 1144-1147.

329. А.Н. Панкратов, С.П. Муштакова, Л.А. Грибов.  
Квантовохимическое изучение окислительной димеризации соединений дифениламинового ряда.  
Теоретическая и экспериментальная химия, 1984, т. 20, № 2, с. 202-206.
330. А.Н. Панкратов, Н.Н. Сорокин, С.П. Муштакова, Л.А. Грибов.  
Химические сдвиги в спектрах ЯМР  $^{13}\text{C}$  как мера распределения электронной плотности в молекулах дифениламина и его производных.  
Журнал общей химии, 1984, т. 54, № 7, с. 1640-1645.
331. Л.А. Грибов, А.И. Павлючко.  
Проблема инверсии в молекуле аммиака и решения прямых и обратных ангармонических механических задач вариационным методом.  
Оптика и спектроскопия, 1984, т. 56, № 6, с. 1015-1019.
332. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
Вычисление структуры электронных спектров многоатомных молекул с учетом ангармонизма колебаний и внутренних вращений.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1984, т. 41, № 1, с. 97-102.
333. С.П. Муштакова, Н.Н. Гусакова, А.Н. Панкратов, Е.Е. Федоров, Л.А. Грибов.  
Пространственное, электронное строение реагентов дифениламинового ряда и их практическое использование в спектрофотометрии.  
Журнал аналитической химии, 1984, т. 39, № 6, с. 1010-1018.
334. Л.А. Грибов, Т.Т. Мерзляк, О.Б. Зубкова, М.М. Райхштат, А.А. Попов.  
Молекулярные механизмы действия пленочного газоанализатора, чувствительного к аминам. I. Взаимодействие молекулярного иода с поливиниловым спиртом.  
Журнал физической химии, 1984, т. 58, № 10, с. 2529-2533.
335. L.A. Gribov.  
The problem of spectroscopic study of polyatomic molecules based on computers.  
Modern trends in analytical chemistry, 1984, part B, p. 59-73.
336. L.A. Gribov.  
Computational spectroscopy: status of problem.  
Journal of Molecular Structure, 1984, v. 113, p. 11-23.
337. А.Н. Панкратов, Е.Е. Федоров, С.П. Муштакова, Л.А. Грибов.  
Конформационный анализ некоторых производных анилина.  
Журнал физической химии, 1984, т. 58, № 2, с. 476-477.

338. D. Racovic, I. Bozovic, L.A. Gribov, S.A. Stepanyan, V.A. Dementiev.  
Vibrational spectra of cis-(OH)<sub>x</sub> and cis-(OD)<sub>x</sub>: A theoretical study.  
Physical Review B, 1984, V. 29, № 6, p. 3412-3415.
339. L.A. Gribov.  
The quantum theory of electro-optical parameters.  
Journal of Molecular Structure, 1984, v. 117, p. 129-140.
340. L.A. Gribov.  
The valency-optics theory of intensities in the electron-vibrational spectra of polyatomic molecules.  
Journal of Molecular Structure (Theochem), 1984, v. 110, p. 61-72.
341. Л.А. Грибов, М.Р. Расовский.  
Вариационный метод решения задачи о произвольных внутренних движениях в многоатомной молекуле при наличии нескольких внутренних вращений.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1984, т. 40, № 2, с. 284-290.
342. А.Н. Калинин, Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.  
Уточнение частот колебаний при расчете колебательных спектров полимеров.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1984, т. 40, № 3, с. 404-409.
343. А.Н. Калинин, Л.А. Грибов.  
Расчеты спектральной кривой поливинилового спирта.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1984, т. 40, № 4, с. 588-592.
344. Л.А. Грибов, М.Р. Расовский.  
Теория интенсивностей в инфракрасных спектрах для молекул с несколькими внутренними вращениями.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1984, т. 40, № 5, с. 843-846.
345. О.В. Новоселова, Л.А. грибов.  
Расчет кривых спектрального распределения коэффициента поглощения полиацетиленов.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1984, т. 40, № 6, с. 988-993.
346. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.  
О дедуктивном и индуктивном методах изложения общего курса физики в вузах.  
Сборник научно-методических статей по физике. Высшая школа, 1984, с. 17-24.
347. Д.И. Мустафин, Н.А. Костромина, О.В. Сиванова, Л.А. Грибов.  
Исследование реакции взаимодействия бромпиригаллолового красного с хлоридом цетилпиридиния.  
Теоретическая и экспериментальная химия, 1984, т. 20, № 1, с. 20-25.

## 1985

348. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.  
О некоторых методических вопросах исследования поворотной изомерии.  
Журнал структурной химии, 1985, т. 26, № 1, с. 49-54.
349. С.А. Степанян, Л.А. Грибов.  
Анализ колебательного спектра поли-L-аланина.  
Известия ТСХА, 1985, № 1, с. 175-180.
350. Б.Л. Файфель, Л.А. Грибов.  
Электронная структура проводящих углеводородных полимеров.  
Известия ТСХА, 1985, № 2, с. 165-168.
351. В.В. Жогина, Л.А. Грибов.  
Программа для расчетов электронной структуры полимеров приближенным методом самосогласованного поля.  
Известия ТСХА, 1985, № 4, с. 170-173.
352. Х.Х. Холиддинов, Л.А. Грибов.  
Использование метода ИК – спектроскопии при определении содержания сухих веществ в виноградных винах.  
Известия ТСХА, 1985, № 5, с. 192-195.
353. Х.Х. Холиддинов, Л.А. Грибов.  
Использование электронных спектров поглощения и люминесценции при изучении качества виноградных вин.  
Известия ТСХА, 1985, № 6, с. 179-182.
354. Л.А. Грибов, Т.Т. Мерзляк, О.Б. Зубкова, М.М. Райхштат, А.А. Попов.  
Молекулярные механизмы действия пленочного газоанализатора, чувствительного к аминам. 2. Молекулярная структура пленочного элемента и возможные центры сорбции.  
Журнал физической химии, 1985, т. 59, № 3, с. 697-702.
355. С.А. Шатохин, Л.А. Грибов, И.С. Перельгин.  
Алгоритм определения равновесной геометрии многоатомных молекул с автоматическим исключением зависимых координат.  
Журнал структурной химии, 1985, т. 26, № 4, с. 42-47.
356. Л.А. Грибов, С.В. Котов, Ю.М. Лужков, А.А. Попов, С.К. Сергеев, М.Е. Эляшберг.  
Выбор технических средств при реализации универсальной системы химического анализа.  
Журнал аналитической химии, 1985, т. 40, № 7, с. 1325-1332.
357. В.К. Novosadov, L.A. Gribov.  
The matrix theory of electron spin multiplets for atoms and molecules.

- Theoret. Chim. Acta, 1985, v. 67, p. 449-460.
358. V.V. Serov, L.A.Gribov, M.E. Elyashberg.  
Elements of the applied theory of solving qualitative problems of molecular spectroscopy.  
Journal of Molecular Structure, 1985, v. 129, p. 183-214.
359. L.A.Gribov, M.R. Rasovsky.  
Variational solving of the problems of arbitrary internal motions in polyatomic molecules.  
Journal of Molecular Structure, 1985, v. 122, p. 15-34.
360. Л.Р. Пирожная, О.Б. Зубкова, Л.А. Грибов.  
Расчет частот и интенсивностей поглощения в колебательных спектрах перфторпарафинов. Молекулы  $C_2F_6$  и  $C_3F_8$ .  
Журнал прикладной спектроскопии, 1985, т. 43, № 3, с. 440-446.
361. Л.А. Грибов.  
Параметрическая теория интенсивностей линий в спектрах спонтанного комбинационного рассеяния многоатомных молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1985, т. 43, № 4, с. 594-600.
362. А.И. Павлючко, Г.Ф. Лозенко, Л.А. Грибов.  
Возможности применения вариационного метода для расчета высоковозбужденных колебательных уровней энергии многоатомных молекул и оценки барьеров диссоциации вдоль концевых связей.  
Оптика и спектроскопия, 1985, т. 58, № 5, с. 1175-1178.
363. А.И. Павлючко, Л.А. Грибов.  
Соотношение решений ангармонических колебательных задач в криволинейных и линейных колебательных координатах.  
Оптика и спектроскопия, 1985, т. 58, № 6, с. 1247-1250.
364. С.А. Шатохин, Л.А. Грибов, И.С. Перельгин.  
Квантово-химический метод определения силовых постоянных многоатомных молекул в системе зависимых координат.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1985, т. 43, № 2, с. 259-265.
365. L.A. Gribov, Ivan Vozovic, Dejan Racovic.  
Planar versus helical cis-polyacetylene.  
Physical Review B, 1985, V. 32, № 6, p. 4286-4288.
366. Л.А. Грибов, О.Б. Зубкова, Т.Т. Мерзляк, А.А. Попов.  
Молекулярные механизмы действия пленочного газоанализатора, чувствительного к аминам. III. Роль иода и дитизона в процессах взаимодействия аминов с пленочным элементом поливиниловый спирт -  $I_2$  - дитизон.  
Журнал физической химии, 1985, т. 59, № 9, с. 2311-2314.
367. Л.А. Грибов, Р.Г. Жбанков, К.В. Нельсон.  
II координационное совещание по спектроскопии полимеров.

- Журнал прикладной спектроскопии, 1985, т. 43, № 4, с. 691-695.
368. М.М. Райхштат, С.Б. Саввин, Л.А. Грибов.  
Влияние структуры органического лиганда на прочность комплексов бериллия с ароматическими  $\alpha$ -оксикарбоновыми кислотами.  
Координационная химия, 1985, т. 11, № 11, с. 1483-1489.
369. Л.А. Грибов.  
Метод вычисления вероятностей оптических электронно-колебательных переходов между состояниями молекулы с сильно различающимися геометрическими конфигурациями.  
Оптика и спектроскопия, 1985, т. 59, № 6, с. 1337-1341.
370. Л.А. Грибов.  
По поводу заметки Б.С. Авербуха «К вопросу о вычислении электрооптических параметров».  
Оптика и спектроскопия, 1985, т. 59, № 6, с. 1359-1360.
371. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев, В.В. Жогина.  
Автоматизированная публикация результатов интерпретации колебательных спектров сложных соединений.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1985, т. 43, № 6, с. 967-971.
372. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.  
Программа курса физики.  
Вышая школа, М. 1985.
373. Dejan Rasovic, Ivan Bozovic, Seda A. Stepanyan, Lev.A. Gribov.  
Infrared absorption puzzles in polyacetylene and poly-(pyrrole).  
Mol. Cryst. Lig. Cryst., 1985, v. 117, p. 299-302.

## 1986

374. Л.А. Грибов, О.Б. Зубкова, Т.Т. Мерзляк, Л.Б. Файфель, А.А. Попов.  
Исследование электронной структуры модели пленочного элемента, чувствительного к аминам.  
Журнал физической химии, 1986, т. 60, № 11, с. 2767-2771.
375. А.И. Павлючко, Л.А. Грибов.  
Анализ локализованных колебаний высоковозбужденных ангармонических колебаний многоатомных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 1986, т. 60, № 3, с. 491-496.
376. Л.Б. Файфель, Л.А. Грибов.  
Электронная структура полиацетилена.  
Известия ТСХА, 1986, № 4, с. 160-162.
377. С.А. Шатохин, Л.А. Грибов, И.С. Перельгин.



- Фрагментарный способ определения силовых постоянных молекул с использованием экспериментальных и квантово-механических данных.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1986, т. 44, № 5, с. 849-853.
378. С.А. Шатохин, Л.А. Грибов, И.С. Перельгин.  
Расчет частот нормальных колебаний многоатомных молекул полуэмпирическим методом МЧПДП/3.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1986, т. 45, № 1, с. 88-93.
379. Л.А. Грибов, Т.Т. Мерзляк, О.Б. Зубкова, М.М. Райхштат, А.А. Попов.  
Исследование механизма взаимодействия азот- и кислородсодержащих доноров электронов с комплексом поливинилового спирта – I<sub>2</sub> – дитизон.  
Журнал физической химии, 1986, т. 60, № 4, с. 927-930.
380. С.А. Шатохин, Л.А. Грибов, И.С. Перельгин.  
Эффективный алгоритм квантово-механического поиска значений параметров потенциальной функции многоатомных молекул в произвольной системе.  
Доклады Академии наук СССР, 1986, т. 289, № 1, с. 150-154.
381. Л.А. Грибов, С.В. Котов.  
О понятии дипольного момента связи и метода вычисления этой величины.  
Журнал структурной химии, 1986, т. 27, № 3, с. 13-18.
382. С.В. Котов, В.Л. Степаньян, Л.А. Грибов.  
Алгоритм вычисления дипольных моментов связей сложных соединений.  
Журнал структурной химии, 1986, т. 27, № 3, с. 19-24.
383. Л.А. Грибов, В.И. Баранов.  
По поводу одного метода определения потенциальных поверхностей и соотношения Душинского в теории электронно-колебательных спектров молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1986, т. 44, № 2, с. 341-343.
384. С.В. Котов, Л.А. Грибов.  
Квантовохимические вычисления электрооптических параметров сложных молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1986, т. 45, № 3, с. 443-449.
385. Л.А. Грибов, М.А. Ковнер.  
Вибронные спектры и интенсивности в спектрах комбинационного рассеяния сложных молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1986, т. 45, № 5, с. 721-737.
386. С.В. Котов, Л.А. Грибов.  
Результаты квантовых расчетов электрооптических параметров циклических и полициклических молекул.

- Журнал прикладной спектроскопии, 1986, т. 45, № 6, с. 980-984.
387. С.В. Котов, Л.А. Грибов.  
Прямые квантовые расчеты дипольных моментов связей некоторых молекул.  
Журнал структурной химии, 1986, т. 27, №5, с. 136-138.
388. V.I. Baranov, G.N. Ten, L.A. Gribov.  
Electron-vibrational spectra of pyridine, pyrazine and pyrimidine. Molecular structure in excited electron states.  
Journal of Molecular Structure, 1986, v. 137, p. 91-111.
389. L.A. Gribov, V.I. Baranov, Yu.V. Nefedov.  
Semi-quantative investigation of a nonadiabatic problem in the theory of electron-vibrational states of polyatomic molecules.  
Journal of Molecular Structure, 1986, v. 148, p. 1-23.
390. D. Rakovic, L.A. Gribov.  
Polyacetylene as a material for molecular solution switches.  
MIEL-86, Belgrad, p. 404-408.
391. В.Л. Файфель, Л.А. Грибов, А.О. Дмитриенко, А.Ф. Большаков.  
Электронная структура литиевых интеркалатов графита и нитрида бора.  
Кристаллография, 1986, т. 31, № 5, с.837-843.
392. С.Б. Саввин, Л.А. Грибов, М.М. Райхштат.  
Метод молекулярной механики в теоретическом исследовании конформаций комплексов металлов с полидентатными органическими лигандами.  
Координационная химия, 1986, т. 12, № 8, с.1044-1050.
393. А.И. Павлючко, Л.А. Грибов.  
Анализ локализованных высоковозбужденных ангармонических колебаний многоатомных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 1986, т. 60, № 3, с.491-496.
394. Б.К. Новосадов, О.Ю. Никитин, Л.А. Грибов.  
Новый вариант матричной теории возмущений в квантовой механике.  
Известия ТСХА, 1986, № 2, с.180-182.
395. О.Ю. Никитин, Б.К. Новосадов, Л.А. Грибов.  
Рекуррентные формулы для вычисления поправок любого порядка в квантовой теории возмущений.  
Известия ТСХА, 1986, № 3, с.178-180.
396. И.В. Плетнев, Ю.А. Золотов, Л.А. Грибов.  
Влияние пространственного фактора на взаимодействие 2N, 20-макроциклического реагента с металлами.  
Координационная химия, 1986, т. 12, № 2, с.185-193.
397. И.В. Плетнев, Ю.А. Золотов, Л.А. Грибов, М.М. Райхштат.

- Конформационный анализ комплексов металлов с полиидентатными лигандами на примере динитро-(1,4,7,10-тетраазациклододекан) кобальта (III) и 2,2'-бис-(салицилальдиминато)-6,6'-диметилдифенилкобальта (II).  
Координационная химия, 1986, т. 12, № 2, с.216-226.
398. С.А. Шатохин, Л.А. Грибов, И.С. Перельгин.  
Квантово-механический расчет равновесной геометрии и силовых постоянных сложных полициклических молекул.  
Журнал структурной химии, 1986, т. 27, №2, с. 22-27.
399. А.Н. Панкратов, В.А. Шеенсон, С.П. Муштакова, Л.А. Грибов.  
Конформационный анализ дифенилфосфина и трифенилфосфина.  
Журнал структурной химии, 1986, т. 27, № 2, с. 28-32.
400. L.A. Gribov, B.K. Novosadov.  
Use of overcomplete basis sets in quantum-chemical calculations.  
Journal of Molecular Structure, 1986, v. 136, p. 387-389.
401. L.A. Gribov, S.V. Kotov.  
General formula for computing electro-optical parameters (bond dipole moments) from the distribution of charge within polyatomic molecules as obtained through quantum calculations.  
Journal of Molecular Structure, 1986, v. 136, p. 391-393.
402. L.A. Gribov.  
General theory of parameters methods designed for calculations of optical spectra of large molecules.  
Journal of Molecular Structure, 1986, v. 141, p. 127-135.

## 1987

403. М.Е. Elyashberg, V.V. Serov, L.A.Gribov.  
Artificial intelligence systems for molecular spectral analysis.  
Talanta, 1987, v. 34, № 1, p. 21-30.
404. Л.А. Грибов.  
Метод вычисления вероятностей оптических переходов между топологически – изомерными состояниями многоатомных молекул.  
Доклады Академии наук СССР, 1987, т. 292, № 5, с. 1161-1165.
405. А.Н. Панкратов, С.П. Муштакова, Л.А. Грибов.  
Направления окислительной димеризации соединений дифениламинового ряда.  
Журнал аналитической химии, 1987, т. 43, № 2, с. 352-357.
406. Л.А. Грибов, Ю.М. Лужков, А.А. Попов.  
Некоторые формализованные понятия и количественные оценки в химическом анализе, основанном на ЭВМ.

- Журнал аналитической химии, 1987, т. 43, № 4, с. 741-750.
407. Ю.В. Нефедов, В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
О некоторых вопросах влияния неадиабатичности на электронно-колебательные спектры молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1987, т. 46, № 2, с. 246-251.
408. Л.Н. Пирожная, О.Б. Зубкова, Л.А. Грибов.  
Расчет частот и интенсивностей в ИК-спектре поглощения политетра – фторэтилена.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1987, т. 46, № 3, с. 442-446.
409. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.  
Теория дипольных переходов между изомерными состояниями многоатомных молекул, принадлежащими одной потенциальной поверхности.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1987, т. 46, № 4, с. 603-608.
410. Л.А. Грибов, Л.И. Рейтблат.  
Новый метод уточнения частот и форм колебаний при расчете колебательных спектров полимеров.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1987, т. 46, № 5, с. 766-772.
411. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.  
Описание изменений геометрии молекул в спектроскопии внутреннего вращения.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1987, т. 46, № 6, с. 949-953.
412. Т.Т. Мерзляк, И.В. Рыбальченко, Л.А. Грибов.  
Квантово-химический расчет силовых полей молекул ряда альдегидов и кетонов в системе зависимых естественных координат.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1987, т. 47, № 1, с. 89-96.
413. Т.Т. Мерзляк, И.В. Рыбальченко, Л.А. Грибов.  
Расчет частот колебаний многоатомных молекул методом комбинированного силового поля.  
Известия ТСХА, 1987, № 3, с.181-184.
414. А.Н. Панкратов, С.П. Муштакова, Л.А. Грибов.  
Квантово-химическое изучение реакции окисления дифениламина: стадии протонизации амина и димеризации его катион-радикала.  
Журнал аналитической химии, 1987, т. 43, № 8, с. 1396-1400.
415. А.П. Гуменюк, С.П. Муштакова, Л.А. Грибов.  
Особенности окисления N-метилдифениламин-4-сульфо кислоты в слабых кислотах.  
Журнал аналитической химии, 1987, т. 43, № 10, с. 1769-1772.
416. S.A. Stepanyan, L.A. Gribov, U.B.Miос, S.V. Rubnikar.  
Infrared spectra of aliphatic amine carbamates and the solution of the inverse spectroscopic problem.

- J. Serb. Chem. Soc., 1987, v. 52, № 5, p. 271-278.
417. Л.А. Грибов, Д. Ракович, В.А. Дементьев.  
Валентно-оптическая теория интенсивностей электронно-колебательных спектров полимеров.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1987, т. 47, № 4, с. 613-619.
418. М.М. Райхштат, В.В. Жогина, С.Б. Саввин, Л.А. Грибов.  
Взаимное влияние лигандов и характер связей металл–лиганд в комплексах гидратах магния  $[\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})\text{X}]^{2+}$ .  
Координационная химия, 1987, т. 13, № 8, с. 1030-1034.
419. Л.А. Грибов.  
От спектра к структуре. Состояние и перспективы оптической молекулярной спектроскопии.  
Сб. Физическая химия. Современные проблемы, 1987, Москва, Химия, с. 211-263.
420. А.И. Павлючко, Л.А. Грибов.  
Влияние недифференциального кинематического оператора на вычисление значений уровней энергии при решении ангармонической колебательной задачи в криволинейных колебательных координатах.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1987, т. 46, № 1, с. 100-104.
421. С.А. Степанян, М.М. Райхштат, Л.А. Грибов.  
Квантово-химический расчет геометрических параметров и электронных спектров  $\alpha$ ,  $\beta$ -ненасыщенных оксимов.  
Известия ТСХА, 1987, № 1, с. 165-169.

## 1988

422. Л.Н. Пирожная, О.Б. Зубкова, Л.А. Грибов.  
Колебательные спектры полимеров и сополимеров, состоящих из  $\text{CH}_2$  – и  $\text{CF}_2$  – групп.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1988, т. 48, № 1, с. 65-70.
423. Х.Ш. Абдулов, Л.А. Грибов, К.В. Нельсон, Х. Хабибуллоев.  
Расчет спектральных кривых ИК–поглощения ТРАНС–1,4-полиизопрена разных конформаций.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1988, т. 48, № 4, с. 621-625.
424. Л.А. Грибов, С.В. Котов.  
Опыт решения обратных электрооптических задач с нулевым приближением ЭОП из квантовых расчетов.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1988, т. 48, № 5, с. 805-811.
425. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
О возможности построения полуэмпирической адиабатической теории электронно-колебательных спектров многоатомных молекул.

- Журнал прикладной спектроскопии, 1988, т. 48, № 6, с. 963-967.
426. О.А. Фонтанов, В.А. Дементьев, Л.А. Грибов.  
Диалоговая система подготовки данных для расчета ИК спектров полимеров.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1988, т. 49, № 1, с. 46-49.
427. Л.А. Грибов.  
Правила вычисления дипольных моментов связей в кристаллах.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1988, т. 49, № 6, с. 1025-1026.
428. Л.А. Грибов, С.В. Котов.  
Квантовая теория и расчеты электрооптических параметров.  
Доклады Академии наук СССР, 1988, т. 300, № 5, с. 1103-1108.
429. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.  
Валентно-оптическая теория интенсивностей полос поглощения в колебательных спектрах молекулярных ионов.  
Оптика и спектроскопия, 1988, т. 64, № 4, с. 930-934.
430. V.V. Serov, M.E. Elyashberg, L.A. Gribov.  
System-related matters in the theory of solving qualitative problems of molecular spectroscopy.  
Journal of Molecular Structure, 1988, v. 178, p. 1-21.
431. Л.А. Грибов, М.М. Райхштат.  
Метод плотности силы в исследовании характера химической связи.  
Журнал структурной химии, 1988, т. 29, № 6, с. 32-41.
432. Л.А. Грибов, М.М. Райхштат, В.В. Жогина.  
Электронная структура бериллоцена и химическая связь в сэндвичевых комплексах.  
Координационная химии, 1988, т. 14, № 10, с. 1368-1371.
433. Л.А. Грибов, О.Б. Зубкова, Б.Л. Файфель.  
Природа проводящих свойств полимерно-пленочного детектора на основе поливинилового спирта с низкомолекулярными добавками молекул йода и дитазона.  
Журнал физической химии, 1988, т. 62, № 6, с. 1687-1689.

## 1989

434. М.Е. Эляшберг, Л.А. Грибов.  
Экспертные системы в молекулярной спектроскопии.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1989, т. 51, № 3, с. 429-433.
435. L.A. Gribov, S.V. Kotov.  
The quantum theory, calculation method and properties of electro-optical parameters of some polyatomic organic compounds.  
Journal of Molecular Structure, 1989, v. 198, p. 93-122.

436. L.A.Gribov, A.T. Todorovsky, S.Ya. Plotkin.  
Calculations of the spectral absorption curves for nitrogen-bearing compounds based on a computer library.  
Journal of Molecular Structure, 1989, v. 212, p. 1-12.
437. L.A. Gribov.  
Optimist and pessimist again, or six years after.  
Journal of Molecular Structure (Theochem), 1989, v. 200, p. 149-168.
438. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
К вопросу о точности расчета частот колебаний многоатомных молекул *ab initio* методами.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1989, т. 51, № 6, с. 981-985.
439. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
К вопросу о построении полуэмпирической неадиабатической теории электронно-колебательных спектров сложных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 1989, т. 67, № 1, с. 32-38.
440. А.В. Кузнецов, Э.Р. Мартиросян, А.Е. Платонов, Л.А. Грибов, А.В. Давыдов.  
Анализ многокомпонентных газовых смесей методом лазерной оптико-акустической спектроскопии с использованием математического аппарата преобразования проектирования.  
Журнал аналитической химии, 1989, т. 44, № 9, с. 1559-1567.
441. Б.К. Новосадов, О.Ю. Никитин, Л.А. Грибов.  
Принципы пофрагментного метода расчета электронной структуры многоатомных молекул.  
Известия ТСХА, 1989, № 1, с. 197-203.
442. А.В. Ниукканен, Л.А. Грибов.  
Мозаичные атомные орбитали.  
Журнал структурной химии, 1989, т. 30, № 1, с. 3-10.
443. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.  
Правило построения координат внутреннего вращения в многоатомных молекулах.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1989, т. 50, № 4, с. 688-691.
444. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
О постановке и решении обратной электронно-колебательной задачи.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1989, т. 51, № 4, с. 80-86.
445. L.A. Gribov, M.M. Reichstat.  
Force density method for chemical bond characterization.  
Journal of Molecular Structure, 1989, v. 183, p. 121-133.
446. L.A. Gribov, B.K. Novosadov, O.Yu. Nikitin, L.I. Raitblat.  
An improved perturbation theory and its application to the spectral theory of polyatomic molecules.

- Journal of Molecular Structure, 1989, v. 188, p. 175-191.
447. В.Ф. Груздева, Г.Н. Бондаренко, Н.И. Прокофьева, Л.А. Грибов.  
Анализ колебательных спектров полифенилацетилена.  
Высокомолекулярные соединения, 1989, т. (А)31, № 4, с. 748-755.
448. Л.А. Грибов.  
Математика и аналитическая химия.  
Сб. Математические методы и ЭВМ в аналитической химии,  
Наука, 1989, с. 5-25.

## 1990

449. L.A. Gribov, I.E. Davidova, R. Kostic, D. Rakovic.  
Calculation and interpretation of infrared spectra of poly (phenylene vinylene): analysis of the character of chemical bonds and conformational states.  
Journal of Molecular Structure, 1990, v. 216, p. 241-254.
450. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.  
Естественные колебательные координаты для относительных движений атомных групп.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1990, т. 52, № 6, с. 1020-1023.
451. Л.А. Грибов, Т.Т. Мерзляк.  
Теоретическая модель процессов в проявительной хроматографии.  
Журнал физической химии, 1990, т. 64, № 3, с. 747-754.
452. L.A. Gribov, V.I. Baranov.  
A non-adiabatic semi-empirical method for calculating the electron-vibrational spectra of large molecules. A possible approach for future studies.  
Journal of Molecular Structure, 1990, v. 224, p. 45-60.
453. D. Rakovič, R. Kostič, L.A. Gribov, I.E. Davidova.  
Theoretical study of the vibrational spectra in poly (p-phenylene vinylene).  
Physical Review B, 1990, v. 41, № 15, p. 10744-10746.
454. Radmila Kostič, Irena E. Davidova, Lev A. Gribov, and Dejan Rakovič.  
Solution of the inverse spectroscopic problem of diphenilamine and N, N' – diphenil-p-phenylene-diamine.  
Journal of Serbian Chemical Society, 1990, v. 55, № 11, p. 617-625.



## 1991

455. D. Rakovich, R. Kostich, L.A. Gribov, S.A. Stepanyan and I.E. Davidova.  
Vibrational spectroscopy and comparative study of trans-polyacetylene, poly (p-phenylene vinylene).  
Synthetic Metals, 1991, № 41-43, p. 275-278.
456. D. Rakovič, R. Kostič, S. Kristič, I.E. Davidova, B.I. Fayfel, L.A. Gribov.  
A modified extended Huckel calculations for QID-grafites.  
Optical and Electrical Properties of Polymers. Materials Research Society Pittsburgh, Pennsylvania, 1991, p. 183-188.

## 1992

457. L.A. Gribov, K.A. Zinovyev.  
Engineering calculations of IR spectra of complex molecules.  
Journal of Molecular Structure, 1992, v. 268, p. 191-221.
458. B.K. Novosadov, O.Yu. Nikitin, L.A. Gribov.  
A general approach for calculating the electronic states of large molecular systems.  
Journal of Molecular Structure, 1992, v. 268, p. 223-235.
459. O.Yu. Nikitin, B.K. Novosadov, L.A. Gribov.  
An approximate method of computing electronic characteristics of large molecular systems in the ground electronic state.  
Journal of Molecular Structure, 1992, v. 268, p. 237-247.
460. В.Ф. Груздева, Г.Н. Бондаренко, Н.И. Прокофьева, Л.А. Грибов.  
Идентификация различных конформеров полифенилацетилена методами колебательной спектроскопии.  
Высокомолекулярные соединения, 1992, т. (А)34, № 1, с. 99-108
461. Radmila Kostič, Dejan Rakovič, Irena E. Davidova, Lev A. Gribov.  
Vibrational spectroscopy of the leucoemeraldine form of polyaniline: Theoretical study.  
Physical Review B., 1992, v. 45, № 2, p. 728-733.
462. S.A. Stepanyan, L.A. Gribov, S.V. Ribnicar, U.B. Mioch.  
Infrared spectra of aliphatic amine carbamates and the solution of the inverse spectroscopic problem. Part II.  
Journal of Molecular Structure, 1992, v. 266, p. 177-182.
463. L.A. Gribov.  
Engineering calculation of optical spectra of large molecules and polymers.  
Journal of Molecular Structure, 1992, v. 272, p. 111-131.
464. Л.А. Грибов.

- Еще раз о выводе выражения для кинетической части гамильтониана для совокупности материальных точек при использовании криволинейных координат.  
Журнал структурной химии, 1992, т. 33, № 3, с. 164-167.
465. Л.А. Грибов.  
О связи валентно–оптических теорий ИКС и СКР.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1992, т. 57, № 1-2, с. 30-32.
466. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.  
Об одной возможной постановке обратной спектральной задачи и ее решении.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1992, т. 56, № 5-6, с. 709-714.
467. L.A. Gribov.  
Expert systems: what we have taught them and what they have taught us.  
Spectroscopy and Spectral Analysis. (China), 1992, v. 12, № 5, p. 15-20.

### 1993

468. Т.Т. Мерзляк, Л.А. Грибов.  
Прямой квантовый расчет электрооптических и структурных параметров молекул ряда насыщенных альдегидов.  
Журнал структурной химии, 1993, т. 34, № 1, с. 157-168.
469. Л.А. Грибов, О.Б. Зубкова, А.А. Сигарев.  
Теоретический анализ ИК–спектров 9, 10 – антрахинона.  
Журнал структурной химии, 1993, т. 34, № 1, с. 169-178.
470. Л.А. Грибов, О.Б. Зубкова, А.А. Сигарев, В.А. Быков.  
Изучение основных закономерностей спектральных проявлений колебаний молекулы индатрона.  
Журнал структурной химии, 1993, т. 34, № 1, с. 179-189.
471. Л.А. Грибов, О.Б. Зубкова, А.А. Сигарев, В.А. Быков.  
Изучение ИК–спектра 3,3' – дихлориндантрона.  
Журнал структурной химии, 1993, т. 34, № 1, с. 190-196.
472. О.В. Новоселова, Л.А. Грибов.  
Состав и опыт эксплуатации библиотеки молекулярных структур для обеспечения массовых расчетов ИК–спектров органических соединений.  
Журнал структурной химии, 1993, т. 34, № 1, с. 197-201.
473. В.И. Баранов, Л.А. Грибов, Д.Ю. Зеленцов.  
Вариационный метод расчета колебательной структуры электронных спектров многоатомных молекул. Сообщение I.  
Журнал структурной химии, 1993, т. 34, № 1, с. 141-148.

474. В.И. Баранов, Л.А. Грибов, Д.Ю. Зеленцов.  
Вариационный метод расчета колебательной структуры электронных спектров многоатомных молекул. Сообщение II. Журнал структурной химии, 1993, т. 34, № 1, с. 149-156.
475. L.A. Gribov, I.E. Davidova, F. Bayard, C. Decoret, J. Royer.  
Calculations of vibrational frequencies of  $\alpha$ -para-dichlorobenzene crystals.  
Spectrochem. Acta A, 1993, v. 49A, № 3, p. 425-433.
476. Л.А. Грибов.  
Физика (примерная программа) для с.-х. ВУЗов.  
Изд. МСХА, М., 1993, 10 с.
477. D. Rakovich, R. Kostich, I.E. Davidova, L.A. Gribov.  
Infrared spectroscopy and stereochemical structure of poly (p-phenylene vinylene).  
Synthetic Metals, 1993, v. 55-57, p. 541-544.
478. R. Kostich, S.A. Stepanyan, D. Rakovich, , I.E. Davidova, L.A. Gribov.  
Solution of inverse spectroscopic problem for IR spectra of pyrrole.  
Journal Serb. Chemical Society, 1993, v. 58(9), p. 659-667.
479. L.A. Gribov.  
Certain questions of principle. Connected with general methods of analysis molecular world.  
Journal of Molecular Structure, 1993, v. 300, p. 415-423.
480. Л.А. Грибов.  
Инфракрасные спектры. От эксперимента – к структуре.  
Заводская лаборатория, 1993, № 12, с. 20-24.

## 1994

481. Л.А. Грибов, В.И. Баранов, В.А. Дементьев, Н.И. Прокофьева.  
Физика (примерная программа для с.-х. направлений ВУЗов).  
Госкомвуз, М., 1994.
482. О.Ю. Никитин, Л.А. Грибов.  
Информационно-поисковая система с самокоррекцией.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1994, т. 60, № 1-2, с. 180-184.
483. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.  
Об одном возможном способе введения понятия энтропии в курсе общей физики.  
Известия ВУЗов, 1994, № 7, с. 125-126.
484. I.V. Maslov, A.W. Niukkanen, L.A. Gribov.  
A Simplified  $\Sigma$ -separation method: multicenter integrals and test calculations of small molecules.

- Journal of Molecular Structure. (TEOCHEM), 1994, v. 304, p. 69-84.
485. L.A. Gribov, I.V. Maslov, A.W. Niukkanen.  
Relaxation of electron charge distribution and force constants in polyatomic molecules.  
Journal of Molecular Structure. (TEOCHEM), 1994, v. 304, p. 85-92.
486. L.A. Gribov.  
The integrated inverse spectral problem.  
Journal of Molecular Structure. (TEOCHEM), 1994, v. 327, p. 257-278.
487. V.I. Baranov, L.A. Gribov, D.Yu. Zelent'sov.  
Methods for calculation of electronic-vibrational spectra of polyatomic molecules. Part 2. Vibrational solution of the electronic-vibrational problem.  
Journal of Molecular Structure, 1994, v. 328, p. 189-197.
488. R. Kostich, S.A. Stepanyan, D. Rakovich, I.E. Davidova, L.A. Gribov.  
IR study of 1-methylpyrrole and 2,5-dimethylpyrrole.  
Journal Serb. Chemical Society, 1994, v. 59(8), p. 547-550.
489. Л.А. Грибов.  
Дополнительность и доказательность в науке, или о некоторых фундаментальных понятиях и проблемах теории и методов исследования строения и свойств сложных молекул и молекулярных систем.  
Журнал структурной химии, 1994, т. 35, № 4, с. 123-134.

## 1995

490. Л.А. Грибов.  
О построении параметрической теории и метода расчета интенсивностей в спектрах КР многоатомных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 1995, т.78, № 2, с. 217-220.
491. К. Kostich, B. Rakovich, S.A. Stepanyan, I.E. Davidova, L.A. Gribov.  
Vibrational spectroscopy of polypyrrole. Theoretical study.  
Journal Chem. Phys., 1995, v. 102(8), p. 3104-3109.
492. Л.А. Грибов.  
Безэталонный количественный молекулярный анализ объектов окружающей среды по ИК спектрам.  
Журнал аналитической химии, 1995, т.50, № 6, с. 589-594.
493. L.A. Gribov, M.E. Elyashberg, Yu.Z. Karasev.

Quantitative molecular analysis by infrared spectrometry without standard materials.

*Analytica Chimica Acta*, 1995, v. 316, p. 217-224.

494. Л.А. Грибов.

К вопросу о введении понятия потенциальной поверхности многоатомной молекулы и адиабатического приближения.

*Журнал структурной химии*, 1995, т. 36, № 6, с. 1142-1144.

495. Л.А. Грибов.

Изотопический эффект в колебательных спектрах молекул при наличии ангармонизма.

*Журнал структурной химии*, 1995, т. 36, № 6, с. 1144-1146.

### 1996

496. С.В. Труханов, Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.

Комбинированный метод расчёта интенсивностей линий комбинационного рассеяния с учётом зависимости тензора КР от частоты возбуждающего света.

*Журнал структурной химии*, 1996, т. 37, № 2, с. 241-249.

497. V.I. Baranov, I.A. Gribov, D.Yu. Zelent'sov.

Refined approach for matrix element calculation in the theory of electronic-vibrational spectra of polyatomic molecules.

*Journal of Molecular Structure*, 1996, v. 376, p. 475-493.

498. В.И. Баранов, Л.А. Грибов, В.О. Дженжер.

Параметрический полуэмпирический метод в теории электронно-колебательных спектров многоатомных молекул.

*Журнал структурной химии*, 1996, т. 37, № 3, с. 419-431.

499. Л.А. Грибов.

К вопросу об адиабатической теории электронно-колебательных состояний топологически-изомерных молекулярных структур и о вычислении оптимальных путей оптической стимуляции изомерных перестроек.

*Журнал структурной химии*, 1996, т. 37, № 6, с. 994-1005.

500. В.И. Баранов, Л.А. Грибов, В.О. Дженжер, Д.Ю. Зеленцов.

Параметрический метод расчёта электронно-колебательных спектров сложных молекул. Дифенилполиены.

*Журнал структурной химии*, 1996, т. 37, № 6, с. 1041-1049.

501. С.В. Труханов, Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.

Исследование влияния составляющих тензора комбинационного рассеяния на интенсивности линий.

**1997**

502. С.В. Труханов, Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.  
Зависимость интенсивностей линий комбинационного  
рассеяния второго порядка от частоты возбуждающего света.  
Журнал структурной химии, 1997, т. 38, № 3, с. 466-469.
503. Л.А. Грибов.  
Новая постановка обратной спектральной задачи в теории  
колебательных спектров многоатомных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 1997, т. 82, № 1, с. 23-25.
504. M.E. Elyashberg, L.A. Gribov, Yu.Z. Karasev, E.R. Martirosian.  
Quantitative analysis of organic mixtures without any calibration.  
Analytica Chimica Acta, 1997, v. 353, p. 105-114.
505. V.I. Baranov, L.A. Gribov, V.O. Djenjer, D.Yu. Zelent'sov.  
Adiabatic semi-empirical parametric method for computing  
electronic-vibrational spectra of complex molecules. Part I. Polyenes  
and diphenylpolyenes.  
Journal of Molecular Structure, 1997, v. 407, p. 177-198.
506. V.I. Baranov, L.A. Gribov, V.O. Djenjer, D.Yu. Zelent'sov.  
Adiabatic semi-empirical parametric method for computing  
electronic-vibrational spectra of complex molecules. Part 2. Acenes.  
Journal of Molecular Structure, 1997, v. 407, p. 199-208.
507. V.I. Baranov, L.A. Gribov, V.O. Djenjer, D.Yu. Zelent'sov.  
Adiabatic semi-empirical parametric method for computing  
electronic-vibrational spectra of complex molecules. Part 3. Azines.  
Journal of Molecular Structure, 1997, v. 407, p. 209-216.

**1998**

508. I.E. Davidova, L.A. Gribov, I.V. Maslov, V. Dufaud, G.P. Niccolai,  
F. Bayard, J.M. Basset.  
Theoretical study of silsesquioxane organometallic complex  
structure and IR spectrum. I. Object of investigation, implemented  
approaches and construction of molecular models.  
Journal of Molecular Structure, 1998, v. 443, p. 67-88.

509. I.E. Davidova, L.A. Gribov, I.V. Maslov, V. Dufaud, G.P. Niccolai, F. Bayard, J.M. Basset.  
Theoretical study of silsesquioxane organometallic complex structure and IR spectrum. II. Interpretation of IR spectrum.  
Journal of Molecular Structure, 1998, v. 443, p. 89-106.
510. Л.А. Грибов, Д.И. Сиделов, И.В. Маслов.  
Ab initio расчёты абсолютных интенсивностей полос поглощения в ИКС и метод бутстрепа в количественном анализе индивидуальных веществ и малокомпонентных смесей на основе математических эталонов.  
Журнал аналитической химии, 1998, т. 53, № 7, с. 706-712.
511. Л.А. Грибов, Д.И. Сиделов.  
Закономерности в спектральном распределении коэффициента поглощения сложных органических молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1998, т. 65, № 4, с. 491-496.
512. С.В. Труханов, Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.  
Об одной возможности получения выражения для тензора комбинационного рассеяния.  
Оптика и спектроскопия, 1998, т. 85, № 4, с. 547-553.
513. Л.А. Грибов, В.И. Баранов.  
О сопоставлении экспериментальных и вычисленных оптических молекулярных спектров и о постановке обобщенной обратной спектральной задачи.  
Оптика и спектроскопия, 1998, т. 85, с. 46-52.
514. Lev A. Gribov.  
Book review.  
Vibrational Spectroscopy, 1998, v. 16, p. 185-187.

### 1999

515. Л.А. Грибов, Б.К. Новосадов.  
Об особенностях химической связи в объемных карбофуллеренах.  
Журнал структурной химии, 1999, т. 40, № 3, с. 582–585.
516. Л.А. Грибов.  
Нобелевские премии по химии 1998 г.  
Природа, 1999, № 1, с. 94–96.
517. Л.А. Грибов, Д.И. Сиделов, И.В. Маслов.  
Определение ЭОП молекул с применением квантово-химических расчетов абсолютных интенсивностей полос поглощения.  
Журнал прикладной спектроскопии, 1999, т. 66, № 1, с. 19–23.
518. Л.А. Грибов.

- О возможности существования «изомерного» КР.  
Оптика и спектроскопия, 1999, т. 87, № 2, с. 209-212.
519. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
О возможности анализа вещества методами спектроскопии в ультрафиолетовой и видимой областях без использования образцов стандартного состава.  
Журнал аналитической химии, 1999, т. 54, № 4, с. 350-358.

## 2000

520. L.A. Gribov, I.V. Maslov.  
Method of estimation of probabilities of photoinduced isomer-isomer structural transformations of polyatomic molecules.  
Journal of Molecular Structure, 2000, v. 521, p. 107-120.
521. Л.А. Грибов, И.В. Маслов.  
Об одном возможном подходе к моделированию бимолекулярных химических реакций.  
Журнал физической химии, 2000, т. 74, №3, с. 441-448.
522. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев, И.В. Маслов.  
Использование координат центров масс атомных группировок при анализе колебаний крупных молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2000, т. 67, № 1, с. 42-47.
523. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
К теории безызлучательных переходов при оптическом возбуждении газовых сред.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2000, т. 67, № 3, с. 289-295.
524. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.  
Решение обобщенной обратной спектральной задачи.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2000, т. 67, № 6, с. 789-793.
525. Л.А. Грибов, В.И. Баранов, С.А. Астахов.  
О возможности безэталонного анализа вещества методами спектроскопии с временным разрешением в УФ– и видимой областях.  
Доклады АН, 2000, т. 374, № 4, с. 493-498.
- 525\*. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.  
Физика снова присматривается к основам химии.  
Математическое образование, 2000, №1(12), с. 68-75.

## 2001

526. Л.А. Грибов.  
К вопросу о поиске путей химических реакций изомеризации и энергий их активации.



- Журнал физической химии, 2001, т. 75, № 1, с. 83-88.
527. Л.А. Грибов.  
Колебания молекул и изомеризация бензола в ациклические структуры.  
Журнал физической химии, 2001, т. 75, № 2, с. 290-293.
528. Л.А. Грибов.  
Возможные направления изомеризации и образования разветвленных структурных форм ненасыщенных соединений.  
Журнал физической химии, 2001, т. 75, № 3, с. 573–576.
529. Л.А. Грибов.  
Высшие приближения в теории изомер–изомерных фотопревращений молекул.  
Журнал физической химии, 2001, т. 75, № 4, с. 679–684.
530. Л.А. Грибов.  
Колебания молекул и определение путей реакций присоединения и разложения.  
Журнал физической химии, 2001, т. 75, № 8, с. 1403-1408.
531. Л.А. Грибов.  
Колебания молекул и изомеризация.  
Журнал физической химии, 2001, т. 75, № 9, с. 1638-1641.
532. Л.А. Грибов.  
Колебания большой амплитуды и химические превращения молекул. Журнал физической химии, 2001, т. 75, № 10, с. 1775-1781.
533. С.А. Астахов, В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
О безэталонном анализе многокомпонентных смесей веществ методами вибронной спектроскопии с временным разрешением.  
Журнал аналитической химии, 2001, т. 56, № 7, с. 703-713.

## 2002

534. Л.А. Грибов.  
К вопросу о направленной передаче сигналов и энергии в молекулярных системах.  
Известия Академии наук, Серия химическая, 2002, № 2, с. 213-219.
535. Л.А. Грибов.  
Теоретические модели для расчета кинетики спектров люминесценции с учетом эффекта квантовых биений при изомеризации молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2002, т. 69, № 3, с. 312–317.
536. Л.А. Грибов.

Молекулы как информационные приемно-преобразующие системы.

Вестник РАН, 2002, т. 72, № 7, с. 611-617.

### 2003

537. Л.А. Грибов, Е.В. Алексеев.  
Расчеты интенсивностей полос поглощения в ИК спектрах методами Хартри-Фока (*ab initio*) и функционала плотности.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2003, т. 70, № 3, с. 293–296.
538. Л.А. Грибов, С.К. Сударушкин.  
О возможности создания органических реагентов принципиально нового типа.  
Журнал аналитической химии, 2003, т. 58, № 5, с. 480–485.
539. Л.А. Грибов.  
Возможный механизм распознавания образов молекулами и проектирование приемно–преобразующих систем.  
Известия Академии наук. Серия химическая, 2003, № 4, с. 756–762.
540. Sergey A. Astakhov, Victor I. Baranov, Lev A. Gribov.  
Standardless spectrochemical analysis and direct simulations of time-resolved vibronic spectra of polyatomic molecules isomers and mixtures.  
Journal of Molecular Structure, 2003, v. 655, p. 97-123.
541. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
Температурная зависимость вероятности структурных межизомерных переходов молекул.  
Известия Академии наук. Серия химическая, 2003, № 4, с. 763–770.
542. П.Е. Кузнецов, Л.А. Грибов.  
Введение в молекулярное моделирование. *Учебное пособие*.  
Изд-во Саратовского университета, 2003, 49 с.
543. Л.А. Грибов.  
Сдавать или не сдавать – вот в чем вопрос!  
Высшее образование в России, 2003, № 2, с. 108-110.
544. В.И. Баранов, М.В. Завалий, Л.А. Грибов.  
Моделирование и расчет динамики спектров с учетом изомеризации сложных молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2003, т. 70, № 5, с. 628-634.
545. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
Вычисление вероятностей переходов молекул при моделировании межизомерных структурных преобразований.

- Журнал прикладной спектроскопии, 2003, т. 70, № 6, с. 735-743.
546. S.A. Astakhov, V.I. Baranov, L.A. Gribov.  
Advances in the theory and methods of computational vibronic spectroscopy.  
Physics, abstract physics / 0312147, 2003, p. 1-56.
547. Л.А. Грибов, И.А. Новаков, А.И. Павлючко, И.О. Кулаго, Б.С. Орлинсон.  
«Спектроскопическое» вычисление энергии диссоциации СН–связей этана, пропана, бутана, изобутана, пентана, гексана и неопентана по частотам фундаментальных колебаний.  
Журнал структурной химии, 2003, т. 44, № 6, с. 1042-1051.
548. Л.А. Грибов, И.А. Новаков, А.И. Павлючко, Б.С. Орлинсон.  
О возможности «спектроскопического» вычисления энергии диссоциации ХН–связей многоатомных молекул по частотам фундаментальных колебаний на основе ангармонической молекулярной модели.  
Журнал структурной химии, 2003, т. 44, № 6, с. 1031-1041.

## 2004

549. Л.А. Грибов, С.К. Сударушкин.  
Особенности структур и действия логических молекулярных элементов.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2004, т. 71, № 2, с. 264-266.
550. Л.А. Грибов.  
Принципы приема и переработки информации молекулярными системами.  
Журнал физической химии, 2004, т. 78, № 1, с. 123-132.
551. Л.А. Грибов.  
Некоторые общие закономерности процессов распознавания образов сложными молекулярными системами.  
Журнал физической химии, 2004, т. 78, № 2, с. 295-299.
552. В.И. Баранов, М.В. Завалий, Л.А. Грибов.  
Моделирование процессов изомеризации и спектров с временным разрешением сложных молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2004, т. 71, № 3, с. 295-301.
553. Л.А. Грибов, В.И. Баранов, М.В. Завалий.  
Моделирование кинетики внутримолекулярных превращений и спектров сложных систем с учетом межизомерных переходов.  
Доклады Академии Наук, 2004, т. 397, № 6, с. 758-761.

- 554 В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
Моделирование кинетики внутримолекулярных процессов и нестационарных спектров с учетом безызлучательных переходов.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2004, т. 71, № 4, с. 421-428.
555. Л.А. Грибов, Е.В. Алексеев.  
Точность вычисления интенсивностей полос поглощения в ИК спектрах прямыми квантово-химическими методами.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2004, т. 71, № 5, с. 579-583.
556. Е.В. Алексеев, Л.А. Грибов, С.Г. Иванов.  
Оценка возможностей применения метода функционала плотности в задачах «безэталонного» количественного спектрального анализа.  
Журнал аналитической химии, 2004, т. 59, № 5, с. 460-465.
557. И.А. Новаков, В.В. Корольков, А.И. Павлючко, Б.С. Орлинсон, Л.А. Грибов.  
*Ab initio* исследование ассоциатов анилина и *n*-пропиламина с нитробензолом и *m*-крезолом.  
Журнал структурной химии, 2004, т. 45, № 4, с. 595-601.
558. Л.А. Грибов, С.К. Сударушкин.  
Прогноз возможности создания специфических реагентов, одновременно взаимодействующих с несколькими элементами.  
Журнал аналитической химии, 2004, т. 59, № 4, с. 343-348.
559. Л.А. Грибов.  
Почему молекулы?  
Вестник РАН, 2004, № 2, с. 11-21.
560. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.  
Программный комплекс для прямого расчета колебательных состояний кристаллических структур в молекулярном приближении.  
Кристаллография, 2004, т. 49, № 5, с. 1-8.
561. S.A. Astakhov, V.I. Baranov, L.A. Gribov.  
Advances in the theory and methods of computational vibronic spectroscopy. In "Advances in Laser and Optics Research", ed. Frank Columbus, Nova Science Publishers, 2004, No 4; e-print: [arxiv.org/physics/03112147](http://arxiv.org/physics/03112147).
562. Л.А. Грибов, И.В. Михайлов.  
Теоретическое моделирование спектра флуоресценции одиночной молекулы.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2004, т. 71, № 6, с. 740-744.

563. Л.А. Грибов, И.А. Новаков, А.И. Павлючко, В.В. Корольков, Б.С. Орлинсон.  
Спектроскопическое вычисление энергии диссоциации связей СН ряда алифатических нитрилов.  
Журнал структурной химии, 2004, т. 45, № 5, с. 816-821.
564. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
Моделирование кинетики внутримолекулярных процессов температурной изомеризации.  
Журнал физической химии, 2004, т. 78, № 12, с. 2180-2187.
565. Л.А. Грибов.  
Национальная идея: выучить русский язык.  
Высшее образование в России, 2004, № 12, с. 135-138.
566. L.A. Gribov, V.A. Dement'ev.  
On the selection of the potential and wave functions for solving the problem of bimolecular reactions.  
Russian Journal of Physical Chemistry, 2004, v. 1, Supple. 1, p. S99-S102.
567. Л.А. Грибов, И.А. Новаков, А.И. Павлючко, В.В. Корольков, Б.С. Орлинсон.  
«Спектроскопическое» вычисление энергии диссоциации связей СН и NH ряда первичных аминов.  
Журнал структурной химии, 2004, т. 45, № 6, с. 999-1007.

## 2005

568. И.А. Новаков, В.В. Корольков, А.И. Павлючко, Л.А. Грибов.  
*Ab initio* исследование ассоциатов анилина и *n*-пропиламина с диметилсульфоксидом, изобутиронитрилом и *N*-метилпиперидоном.  
Журнал структурной химии, 2005, т. 46, № 1, с. 161-165.
569. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.  
Соотношение между нормальными координатами изомерных молекулярных структур.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2005, т. 72, № 1, с. 28-33.  
(Есть английская версия.)
570. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев, М.В. Завалий, В.И. Баранов.  
Компьютерное моделирование изомеризации сложных молекул с использованием суперкомпьютера типа МВС 1000.  
Журнал структурной химии, 2005, т. 46, № 2, с. 303-310.  
(Есть английская версия.)
571. Л.А. Грибов.  
К обоснованию феноменологического метода атом-атомных потенциалов.

- Журнал структурной химии, 2005, т. 46, № 2, с. 311-313.  
(Есть английская версия.)
572. Л.А. Грибов.  
Простая схема вычисления уровней энергии и спектров молекулярных кристаллов.  
Журнал структурной химии, 2005, т. 46, № 5, с. 949-951.
573. Л.А. Грибов, В.И. Баранов.  
Низкочастотные периодические процессы в спектроскопии и химических превращениях.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2005, т. 72, № 3, с. 325-329.  
(Есть английская версия.)
574. Л.А. Грибов.  
Полуэмпирика и *ab initio* – антагонизм или дополнительность?  
Журнал физической химии, 2005, т. 79, № 4, с. 688-692.  
(Есть английская версия.)
575. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
Расчет вероятностей безызлучательных межизомерных переходов сложных молекул.  
Журнал физической химии, 2005, т. 79, № 7, с. 1265-1273.
576. L.A. Gribov.  
Calculation of the overlap integral of the vibrational functions of combined states in the theory of chemical transformations.  
Doklady Physical Chemistry, 2005, v. 404, Part 1, p. 162-164.  
(Есть русская версия.) Л.А. Грибов. О вычислении интеграла перекрытия колебательных функций комбинирующих состояний в теории химических превращений.  
Доклады Академии наук, 2005, т. 404, № 1 с. 54-56.
577. Л.А. Грибов  
Молекулярная логика: комплементарность, обучение и сравнение образов в молекулярном мире.  
БИОФИЗИКА, 2005, т. 50, вып. 4, с. 581-584.
578. L.A. Gribov, V.I. Baranov, M.V. Zavalii.  
Computer modeling of photochemical processes.  
Russian Journal of Physical Chemistry, 2005, v. 79, Supple. 1, p. S154-S160.
579. L.A. Gribov, V.A. Dement'ev.  
Molecular logic: "clever" triggers.  
Russian Journal of Physical Chemistry, 2005, v. 79, Supple. 1, p. S161-S165.
580. Л.А. Грибов.  
Модели, математика и понятие точности в квантовой химии.  
Рос. хим. ж., 2005, т. XLIX, № 2, с. 137.

581. Л.А. Грибов.  
О вычислении момента вибронного перехода при сильном геометрическом различии комбинирующих состояний молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2006, т. 73, № 3, с. 290-293.
582. В.А. Дементьев, Л.А. Грибов.  
Поиск и исключение зависимостей между колебательными координатами при моделировании спектров больших молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2006, т. 73, № 5, с. 561-565.
583. Л.А. Грибов.  
К вопросу о безызлучательных переходах в электронно-возбужденных зонах молекулярных кристаллов.  
Журнал структурной химии, 2006, т. 47, № 2, с. 209-214.
584. Л.А. Грибов.  
Простая модель состояния реального газа и жидкости, связывающая микро- и макроописания.  
Журнал структурной химии, 2006, т. 47, № 2, с. 291-294.
585. Б.Ф. Мясоедов, Л.А. Грибов, А.И. Павлючко, И.В. Рыбальченко, Г.И. Сигейкин, А.Ф. Киреев, В.Н. Суворкин.  
Фрагментарные методы расчета ИК спектров фосфорорганических соединений.  
Журнал структурной химии, 2006, т. 47, № 3, с. 449-456.
586. Л.А. Грибов, И.А. Новаков, А.И. Павлючко, Е.В. Васильев.  
Спектроскопическое вычисление энергий диссоциации связей СН в ряде хлорпроизводных метана, этана и пропана.  
Журнал структурной химии, 2006, т. 47, № 4, с. 654-660.
587. Л.А. Грибов, А.И. Павлючко, И.В. Рыбальченко, Г.И. Сигейкин, В.Н. Суворкин, академик Б.Ф. Мясоедов.  
Спектральная идентификация высокотоксичных фосфорорганических соединений.  
Доклады Академии наук, Физическая химия, 2006, т. 410, № 2, с. 1-4.
588. Л.А. Грибов.  
Философия естественных наук. Учебное пособие под ред. С.А. Лебедева. Глава 2.  
Москва, Фонд «Мир», 2006, 555 стр.
589. Л.А. Грибов.  
Простая модель эффекта редупликации как следствие первых принципов.  
Биофизика, 2006, т. 51, № 4, с. 761-764.
590. Л.А. Грибов, И.А. Новаков, А.И. Павлючко, И.В. Кучуров.

- Спектроскопическое вычисление энергий диссоциации связей СН алифатических производных ряда этилена.  
Журнал структурной химии, 2006, т. 47, № 4, с. 648-653.
591. Л.А. Грибов, И.В. Михайлов.  
Характеристики фотохимических процессов в спектрах с временным разрешением.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2006, т. 73, № 4, с. 426-430.
592. Л.А. Грибов, В.И. Баранов, В.А. Дементьев.  
К вопросу о теории процессов в реакционных центрах многоатомных молекул.  
Известия Академии наук. Серия химическая, 2006, № 8, с. 1267-1273.

## 2007

593. Л.А. Грибов.  
О некоторых закономерностях формирования органического вещества на ранних стадиях геохимической эволюции.  
Геохимия, 2007, № 1, с. 89-93.
594. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.  
Простая модель описания ангармонических колебаний многоатомных молекул.  
Журнал структурной химии, 2007, т. 48, № 1, с. 10-14.
595. Л.А. Грибов, И.В. Михайлов.  
Разделение переменных и алгоритм поиска координат внутреннего вращения и кинетических коэффициентов в теории ядерных движений в многоатомных молекулах.  
Журнал структурной химии, 2007, т. 48, № 1, с. 159-162.
596. Л.А. Грибов, В.И. Баранов, В.А. Дементьев.  
Некоторые особенности проявления изотопного эффекта при структурных превращениях молекул.  
Журнал структурной химии, 2007, т. 48, № 3, с. 439-444.
597. Л.А. Грибов, И.А. Новаков, А.И. Павлючко, О.Ю. Шумовский.  
Спектроскопическое вычисление энергии диссоциации связей СН во фторпроизводных метана, этана, этена, пропена и бензола.  
Журнал структурной химии, 2007, т. 48, № 3, с. 445-451.
598. Л.А. Грибов.  
Метод оценки влияния внешнего электрического поля на вероятности фотохимических превращений.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2007, т. 74, № 4, с. 543-545.
599. Л.А. Грибов, И.А. Новаков, А.И. Павлючко, Е.В. Васильев.



- Спектроскопическое вычисление энергии диссоциации связей СН в ряде хлорпроизводных этена, пропена и бензола.  
Журнал структурной химии, 2007, т. 48, № 4, с. 650-656.
600. Л.А. Грибов, И.А. Новаков, А.И. Павлючко, О.Ю. Шумовский.  
Спектроскопическое вычисление энергии диссоциации связей СН и ОН в альдегидах, кетонах, кислотах и спиртах.  
Журнал структурной химии, 2007, т. 48, № 4, с. 657-665.
601. Л.А. Грибов, И.В. Михайлов.  
Этот виртуальный молекулярный мир.  
Российский химический журнал, 2007, т. 51, № 5, с. 18-26.
602. Л.А. Грибов, И.А. Новаков, А.И. Павлючко, Е.В. Васильев.  
Спектроскопическое вычисление энергии диссоциации связей СН в ряде бромпроизводных алканов, алкенов и аренов.  
Журнал структурной химии, 2007, т. 48, № 6, с. 1082-1088.
603. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
Проявление в ИК спектрах структурных изменений молекул при импульсном нагреве.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2007, т. 74, № 6, с. 738-743.

## 2008

604. Л.А. Грибов.  
Фрагментный метод расчёта характеристик электронных состояний очень сложных молекул.  
Журнал структурной химии, 2008, т. 49, № 1, с. 7-12.
605. Л.А. Грибов.  
Метод оценки вероятности структурных изомер-изомерных превращений при наличии большого числа квазивырождений уровней энергий взаимодействующих подсистем.  
Журнал структурной химии, 2008, т. 49, № 2, с. 207-210.
606. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев, И.В. Михайлов.  
Матрицы смежности и графы химических превращений.  
Журнал структурной химии, 2008, т. 49, № 2, с. 211-214.
607. L.A. Gribov, Y.V. Magarshak.  
To the problem of formulation of basic principles in the theory of molecular structure and dynamics.  
Concepts of Physics, 2008, v. 5, No 2, p. 191-202.
608. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.  
Волновые движения атомов в молекулярных наноструктурах.  
Журнал структурной химии, 2008, т. 49, № 4, с. 723-727.
609. Л.А. Грибов.  
Новая модель для описания взаимодействия электромагнитной волны и молекулы.

- Журнал прикладной спектроскопии, 2008, т. 75, № 3, с. 309-318.
610. Л.А. Грибов.  
От фундаментального знания к инженерному умению.  
Труды Третьей Международной конференции, посвящённой 85-летию чл.-кор. РАН, проф. Л.Д. Кудрявцева, М., МФТИ, 2008, с. 90-100.
611. И.Г. Тананаев, А.А.Летюшов, А.М. Сафиуллина, И.Б. Горюнова, О.В. Баулина, В.П. Моргалюк, Е.И. Горюнов, Л.А. Грибов, Э.Е. Нифантьев, Б.Ф. Мясоедов.  
Стратегия поиска новых высокоэффективных фосфорорганических экстрагентов для концентрирования радионуклидов.  
ДАН, 2008, т. 422, № 6, с. 762-766.
612. Л.А. Грибов, В.И. Баранов.  
Молекулы и жизнь.  
Сб. «Проблемы зарождения и эволюции биосферы», под ред. акад. Э.М. Галимова. М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2008, с. 33-56.

## 2009

613. Л.А. Грибов.  
Обобщённый оператор взаимодействия электромагнитного поля и молекулы.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2009, т. 76, № 2, с. 165-169.
614. Л.А. Грибов, В.И. Баранов.  
Общий метод моделирования молекулярных процессов при наличии сложных взаимодействий между комбинирующими подсистемами.  
Журнал структурной химии, 2009, т. 50, № 1, с. 16-23.
615. Л.А. Грибов, В.И. Баранов.  
Внутримолекулярный резонанс как каталитический фактор.  
Журнал структурной химии, 2009, т. 50, № 3, с. 419-424.
616. Л.А. Грибов, В.И. Баранов.  
Дополнительность теории молекулярных спектров и эксперимента как база безэталонных количественных анализов веществ.  
Журнал аналитической химии, 2009, т. 64, № 5, с. 463-466.
617. В.И. Баранов, Л.А. Грибов, В.Е. Дридгер, М.Х. Исхаков, И.В. Михайлов.  
Метод моделирования фотохимических процессов и расчёта квантовых выходов реакций.  
Химия высоких энергий, 2009, т. 43, № 5, с. 416-423.

618. L. Gribov, V. Baranov, Yu. Magarshak.  
Is 'silicate life' possible?  
Proceeding of ARW NATO Environmental and Biological Risks of  
Nanobiotechnology, Nanobionics and Hybrid Organic-Silicon  
Nanodevices (Silicon vs. Carbon).  
Springer, 2009, p. 1-8.
619. В.И. Баранов, Л.А. Грибов, В.Е. Дридгер, М.Х. Исхаков,  
И.В. Михайлов.  
Моделирование фотохимических процессов и расчёт квантовых  
выходов реакций изомеризации замещённых диенов.  
Химия высоких энергий, 2009, т. 43, № 6, с. 545-551.

## 2010

620. Л.А. Грибов.  
Новая постановка квантовой задачи в теории спектров  
многоатомных молекул.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2010, Т. 77, № 1, С. 5-10.
621. Л.А. Грибов.  
Метод расчёта уровней энергии нанообъектов с периодической  
структурой скелета.  
Журнал структурной химии, 2010, Т. 51, № 1, С. 131-136.
622. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.  
Волновые движения в молекулярных наноструктурах:  
результаты компьютерных экспериментов.  
Журнал структурной химии, 2010, Т. 51, № 2, С. 331-336.
623. Л.А. Грибов.  
Ангармоническая задача без ангармонического потенциала  
Журнал структурной химии, 2010, Т. 51, № 2, С. 379-382.
624. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев  
Изоморфизм в минералах и механохимия.  
ГЕОХИМИЯ, 2010, № 4, С. 430-433.
625. А.И. Павлючко, Л.А. Грибов.  
Оценка вклада полос поглощения для обертонов и составных  
частот в области отпечатков пальцев для алканов, нитрилов,  
аминов и нитроалканов.  
Журнал структурной химии, 2010, Т. 51, № 3, С. 466-473.
626. А.И. Павлючко, Е.В. Васильев, Л.А. Грибов.  
Оценка применимости квантовохимического вычисления  
параметров потенциальной и электрооптической функции для  
безэталонного спектрального анализа гетероатомных  
органических соединений.  
Журнал аналитической химии, 2010, Т. 65, № 11, С. 1135-1138.

- 627 А.И. Павлючко, Е.В. Васильев, Л.А. Грибов.  
Оценка вклада полос поглощения для обертонов и составных частот в ИК спектре для непредельных углеводородов и гетероатомных органических соединений.  
Журнал аналитической химии, 2010, Т. 65, № 12, С. 1264-1270.
628. Л.А. Грибов, И.В. Михайлов.  
Стрела эволюции в процессе формирования биосферы.  
ГЕОХИМИЯ, 2010, № 6, С. 646-650.
629. Л.А. Грибов.  
О некоторых базовых положениях при постановке квантовых задач в теории строения молекул и молекулярных превращений.  
Журнал структурной химии, 2010, Т. 51, № 4, С. 631-643.
630. Л.А. Грибов.  
Новая форма электронно-ядерного гамильтониана и энергетической матрицы в теории строения и свойств молекул.  
Журнал структурной химии, 2010, Т. 51, № 5, С. 841-845.
631. В.И. Баранов, Л.А. Грибов, В.Е. Дридгер, И.В. Михайлов.  
Расчёт квантового выхода фотохимической реакции изомеризации метоксибутадиен → метоксициклобутен.  
Химия высоких энергий, 2010, Т. 44, № 3, С. 209-212.
632. В.И. Баранов, Л.А. Грибов, М.Х. Исхаков, И.В. Михайлов.  
Моделирование процессов фотоизомеризации циклопропилкарбоксальдегида и циклопропилэтанона и расчёт квантового выхода реакций.  
Химия высоких энергий, 2010, Т. 44, № 4, С. 307-312.
633. Л.А. Грибов, В.И. Баранов.  
Теория разветвлённых бифуркационных фотохимических реакций.  
Химия высоких энергий, 2010, Т. 44, № 6, С. 496-505.
634. А.И. Павлючко, Е.В. Васильев, Л.А. Грибов.  
Оценка вклада обертонов в ИК спектры галогенпроизводных углеводородов на основе квантово-химических расчётов.  
Журнал структурной химии, 2010, Т. 51, № 6, С. 1084-1090.

## 2011

635. Монахова Ю.Б., Муштакова С.П., Колесникова С.С., Грибов Л.А.  
Спектро-хеометрическое и квантово-химическое изучение системы вода – ацетонитрил.  
Журнал аналитической химии, 2011, Т. 66, № 1, С. 56-62.

636. Грибов Л.А., Баранов В.И., Потешный Д.И.  
Метод компьютерного сопоставления теоретических и экспериментальных молекулярных спектров с помощью интегрального преобразования при решении аналитических задач.  
Журнал аналитической химии, 2011, Т. 66, № 2, С. 116-122.
637. Грибов Л.А.  
Теоретическая физика – аналитике.  
Журнал аналитической химии, 2011, Т. 66, № 3, С. 247-267.
638. Павлючко А.И., Васильев Е.В., Грибов Л.А.  
Оценка вклада полос поглощения для обертонов и составных частот в ИК-спектре бромпроизводных и кислородсодержащих органических соединений.  
Журнал аналитической химии, 2011, Т. 66, № 6, С. 589-596.
639. Павлючко А.И., Васильев Е.В., Грибов Л.А.  
Расчёты ИК спектров молекул в области обертонов и комбинационных частот.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2011, Т. 78, № 5, С. 684-691.
640. Грибов Л.А., Прокофьева Н.И.  
Матричные элементы для дипольных переходов при постановке квантовой задачи для молекул с ограничениями на движения ядер.  
Журнал структурной химии, 2011, Т. 52, № 5, С. 871-878.
641. Грибов Л.А., Прокофьева Н.И.  
Электронно-колебательная задача для молекул с инверсионными движениями.  
Журнал структурной химии, 2011, Т. 52, № 5, С. 1019-1021.
642. Монахова Ю.Б., Астахов С.А., Муштакова С.П., Грибов Л.А.  
Методы декомпозиции спектров различной природы в анализе смесей сложного состава.  
Журнал аналитической химии, 2011, Т. 66, № 4, С. 361-372.
643. Павлючко А.И., Васильев Е.В., Грибов Л.А.  
Расчёт *ab initio* абсолютных интенсивностей полос в ИК спектрах.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2011, Т. 78, № 6, С. 839-843.
644. Баранов В.И., Грибов Л.А., Исхаков М.Х., Михайлов И.В.  
Моделирование фотохимических реакций бутадиена и расчёт квантовых выходов.  
Химия высоких энергий, 2011, Т. 45, № 6, С. 523-528.

645. Баранов В.И., Грибов Л.А., Дридгер В.Е.  
Компьютерное моделирование безэталонного молекулярного спектрального анализа смесей.  
Журнал аналитической химии, 2012, Т. 67, № 2, С. 150-158.
646. Грибов Л.А., Баранов В.И., Михайлов И.В.  
Стрела времени на ранних стадиях эволюции биосферы.  
Детерминизм и множественность.  
ГЕОХИМИЯ, 2012, № 5, С. 435-452.
647. Грибов Л.А., Дементьев В.А.  
Алгоритм определения абсолютных концентраций в смеси веществ по спектральным данным без использования образцов стандартного состава.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2012, Т. 79, № 2, С. 338-346.
648. Грибов Л.А.  
К вопросу о постановке задачи в общей квантовой теории спектров многоатомных молекул.  
Оптика и спектроскопия, 2012, Т. 112, № 5, С. 710-715.
649. Баранов В.И., Грибов Л.А., Исхаков М.Х.  
Общая постановка задачи анализа вещества по продуктам фотохимических реакций.  
Журнал аналитической химии, 2012, Т. 67, № 3, С. 236-244.
650. Грибов Л.А., Дементьев В.А.  
От теории спектров – к безэталонному анализу молекулярных объектов.  
Журнал аналитической химии, 2012, Т. 67, № 5, С. 469-478.
651. Павлючко А.И., Васильев Е.В., Грибов Л.А.  
О точности *ab initio* расчётов абсолютных интенсивностей полос в ИК спектрах молекул.  
Журнал структурной химии, 2012, Т. 53, № 2, С. 278-284.
652. Грибов Л.А., Прокофьева Н.И.  
Электронно-ядерный гамильтониан для молекул с внутренним вращением.  
Журнал структурной химии, 2012, Т. 53, № 3, С. 432-435.
653. Грибов Л.А., Прокофьева Н.И.  
Гамильтониан для электронных состояний молекул при химических превращениях.  
Журнал структурной химии, 2012, Т. 53, № 4, С. 658-661.
654. Грибов Л.А., Дементьев В.А.  
Алгоритм определения состава смеси веществ при наличии примесей.

Журнал прикладной спектроскопии, 2012, Т. 79, № 5, С. 846-849.

655. Грибов Л.А., Дементьев В.А.  
Методика построения банков электрооптических параметров при расчёте спектральных свойств нанобъектов.  
Журнал прикладной спектроскопии, 2012, Т. 79, № 6, С. 959-964.

## 2013

656. Баранов В.И., Грибов Л.А., Михайлов И.В.  
Дополнительность детерминизма и множественности – необходимое условие существования биосферы.  
В сб. «Проблемы зарождения и эволюции биосферы. Ч.2», под ред. акад. Э.М. Галимова. М.: КРАСАНД, 2013. С. 231-246.
657. Баранов В.И., Грибов Л.А., Павлючко А.И.  
Общие принципы постановки и решения задачи прогноза хода фотохимических реакций.  
Химия высоких энергий. 2013. Т. 47. № 1. С. 52-65.
658. Баранов В.И., Грибов Л.А., Эляшберг М.Е.  
Структурная изомеризация и эволюция молекулярного мира на ранних стадиях образования Вселенной.  
Геохимия. 2013. № 3. С.256-261.
659. Грибов Л.А., Новосадов Б.К.  
О численном решении электронно-ядерной задачи для молекул при использовании интегрального оператора электронно-ядерного взаимодействия.  
Журнал структурной химии, 2013, Т. 54, № 2, С. 245-250.
660. Грибов Л.А., Новосадов Б.К., Прокофьева Н.И.  
Постановка квантовых задач для "нагретых" молекул и решение уравнения Шрёдингера для состояний электронов в поле распределённого заряда ядер.  
Химия высоких энергий. 2013. Т. 47. № 3. С. 211-216.





## СБОРНИКИ ПРОГРАММ ДЛЯ ЭВМ

### Collections of Programs for Computers

1. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев, В.И. Смирнов.  
Программа для расчета колебательных спектров молекул.  
ВИНИТИ, 1055–74 деп., 1974, 199 с. РЖ Химия, 1974, № 20, реф. 20Б180.
2. В.В. Серов, М.Е. Эляшберг, Л.А. Грибов.  
Комплекс алгоритмов и программ математического синтеза и анализа структурных формул химических соединений.  
ВИНИТИ, 1464–76 деп., 1976, 117 с. РЖ Химия, 1976, № 16, реф. 16Б3.
3. В.А. Дементьев, В.И. Смирнов, Л.А. Грибов.  
Фортран–программы для расчета колебаний молекул.  
ВИНИТИ, 4018–76 деп., 1976, 197 с. РЖ Химия, 1977, № 5, реф. 5Б59.
4. В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
Алгоритмы и программы вычисления колебательной структуры в электронно-колебательных спектрах.  
ВИНИТИ, 2521–78 деп., 1978, 151 с. «Депонированные рукописи», ВИНИТИ, 1978, № 12, Б/0 336.
5. В.В. Серов, М.Е. Эляшберг, Л.А. Грибов.  
Система программ идентификации химических соединений по молекулярным спектрам.  
ВИНИТИ, 2912–78 деп., 1978, 99 с. «Депонированные рукописи», ВИНИТИ, 1979, № 1, Б/0 204.
6. А.И. Павлючко, Л.А. Грибов.  
Программы для расчета ангармонических колебаний малых многоатомных молекул.  
ВИНИТИ, 2495–81 деп., 1981, 199 с.
7. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев, А.Н. Калинин.  
Программа для расчета колебательных спектров полимеров и кристаллов.  
ВИНИТИ, деп., 4164, 1982, 176 с. Указатель ВИНИТИ «Депонированные рукописи», 1982, № 12, Б/0 457.
8. В.А. Шеенсон, Л.И. Хомутов, Л.А. Грибов.  
Программы расчета конформаций органических молекул методом атом–атомных потенциальных функций.  
ВИНИТИ, деп. № 71144, 1984, 81 с.

9. С.А. Шатохин, Л.А. Грибов, И.С. Перельгин.  
Программа для квантово-химического расчета параметров  
потенциальной поверхности многоатомной молекулы.  
ВИНИТИ, деп. № 3747, 1985, 154 с.
10. Ю.В. Нефедов, В.И. Баранов, Л.А. Грибов.  
Программы диагонализации больших матриц специальной  
структуры методом Ланцоша.  
ВИНИТИ, деп. № 7362, 1985, 45 с.

## ПУБЛИЦИСТИЧЕСКИЕ СТАТЬИ

### General articles

1. L.A. Gribov.  
Professor Michael Elyashevitch – a scientist and a man.  
Journal of Molecular Structure, 1992, v. 272, introduction.
2. Л.А. Грибов.  
Блеск и нищета Большой Академии.  
Химия и жизнь, 1992, № 9, с. 5-7.
3. Л.А. Грибов.  
О доказательности и вере в науке.  
Химия и жизнь, 1993, № 4, с. 4-6.
4. Л.А. Грибов.  
В сб. «И.П. Алимарин» (очерки, воспоминания, материалы).  
Наука, М., 1993, с. 101-104.
5. Л.А. Грибов.  
ВУЗы и высшее образование?  
Высшее образование в России, 1995, № 2, с. 93-96.
6. Л.А. Грибов.  
Интеллигенция и реформы.  
Высшее образование в России, 1995, № 3, с. 131-142.
7. Л.А. Грибов.  
Наука и религия: от конфронтации к дополнителности.  
Высшее образование в России, 1997, № 1, с. 57-66.
8. Л.А. Грибов.  
Оптимизм и история.  
Высшее образование в России, 1997, № 3, с. 65-73.
9. Л.А. Грибов.  
Зачем «лирика» физику?  
Высшее образование в России, 1997, № 4, с. 119-124.
10. Л.А. Грибов.  
Магия простых решений.  
Высшее образование в России, 1999, № 1, с. 52–60.
11. Л.А. Грибов.  
Великая Октябрьская Бюрократическая революция.  
Высшее образование в России, 1999, № 6, с. 136-143.
12. Л.А. Грибов.  
Дополнительность естественно–научного и гуманитарного образования как базовый принцип подготовки бакалавров.

- Труды Международной конференции «Наука в вузах», Изд. РУДР, 2000, с. 154.
13. Л.А. Грибов.  
Реформа образования: литература.  
Высшее образование в России, 2001, № 6, с. 29-32.
14. Л.А. Грибов.  
Особенности национального парламентаризма.  
Высшее образование в России, 2002, № 2, с. 73-79.
15. Л.А. Грибов.  
Как учить истории.  
Высшее образование в России, 2002, № 5, с. 86-91.
16. Л.А. Грибов.  
Сдавать или не сдавать – вот в чем вопрос!  
Высшее образование в России, 2003, № 2, с. 108-110.
17. Л.А. Грибов.  
Век актера, или «хлеба и зрелищ».  
Высшее образование в России, 2004, № 7, с. 129-132
18. Л.А. Грибов.  
Национальная идея: выучить русский язык.  
Высшее образование в России, 2004, №12, с. 135-138.
19. Л.А. Грибов.  
Россия и Европа.  
Высшее образование в России, 2006, № 2, с. 155-158.
20. Л.А. Грибов.  
О случайностях и закономерностях (от «верховников» до олигархов).  
Высшее образование в России, 2007, № 2, с. 160-16.
21. Л.А. Грибов.  
От оврага до революции.  
Высшее образование в России, 2007, № 5, с. 162-164.
22. Л.А. Грибов.  
О некоторых концептуальных проблемах введения бакалавриата.  
Высшее образование в России, 2007, № 8, с. 26-29.

## ГАЗЕТНЫЕ СТАТЬИ

### Articles from newspapers

1. Р. Сагдеев, В. Фабрикант, Л. Грибов, С. Капица.  
Как преподавать физику?  
Известия, №229, сентябрь 1975 г.
2. Л.А. Грибов, И.И. Грандберг, Д.А. Князев, Р.А. Хмельницкий.  
Фундаментальные науки – сельскому хозяйству.  
Тимирязевец, № 29, октябрь 1987 г.
3. Л.А. Грибов.  
Какой быть Тимирязевке?  
Тимирязевец, № 3, январь 1989 г.
4. Л.А. Грибов.  
Косметический ремонт или капитальная перестройка?  
Тимирязевец, № 24, октябрь 1990 г
5. Л.А. Грибов.  
О главном слове и ещё кое о чем.  
Тимирязевец, № 31, декабрь 1990 г.
6. Л.А. Грибов.  
По Святым местам и около.  
Тимирязевец, № 14, октябрь 1991 г.
7. Л.А. Грибов.  
О гуманитарных дисциплинах или какая История нам нужна.  
Тимирязевец, № 9, сентябрь 1992 г.
8. Л.А. Грибов.  
Где ты, Сергей Радонежский?  
Куранты, № 219, ноябрь 1992 г.
9. Л.А. Грибов.  
Рынок науку не погубит.  
Аргументы и факты, 1995, 37.
10. Лайон Машрумов.  
Тайна Бородинской битвы. (Первое апреля).  
Известия, 29.03.2002.
11. Л.А. Грибов.  
На распутьи.  
Поиск, 22 июня 2007 г.



## ДИССЕРТАЦИИ, ЗАЩИЩЕННЫЕ ПОД РУКОВОДСТВОМ ПРОФ. Л.А. ГРИБОВА

### PhD Theses of disciples of Professor Lev Gribov

#### Диссертации кандидатские

1. В.В. Жогина.  
Теория и расчет колебательных спектров многоатомных молекул с применением ЭЦВМ.  
Белорусский государственный университет им. В.И. Ленина, Минск, 1969.
2. Э.Л. Кузин.  
Электронное строение некоторых азопроизводных хромотроповой кислоты и продуктов их аналитических реакций.  
Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского АН СССР, Москва, 1968.
3. А.В. Котов.  
Исследование некоторых мультидентатных лигандов и их комплексов с металлами методами электронов и колебательной спектроскопии.  
Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского АН СССР, Москва, 1969.
4. Т.С. Абилова.  
Приближенный метод расчета колебательных спектров периодических молекул произвольной длины.  
Азербайджанский государственный университет им. С.М. Кирова, Баку, 1969.
5. М.П. Носкова.  
Исследование строения экстрагирующихся бета-дикетонатов методом инфракрасной спектроскопии.  
Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского АН СССР, Москва, 1969.
6. М.Е. Эляшберг.  
О возможности применения методов математической логики в молекулярной спектроскопии.  
Московский государственный педагогический институт им. В.И. Ленина, Москва, 1970.

7. С.П. Муштакова.  
Изучения электронного строения дифениламина и его замещенных методами электронной спектроскопии и квантовой химии.  
Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, 1972.
8. О.Б. Зубкова.  
Исследование инфракрасных спектров поглощения олигомеров и полимеров.  
Институт физики АН БССР, Минск, 1972.
9. М.И. Клима.  
Исследование колебательных спектров и электронной структуры азобензола и ряда его замещенных.  
Днепропетровский государственный университет, Днепропетровск, 1973.
10. В.П. Круглов.  
Исследование методов обработки полос поглощения в инфракрасных спектрах.  
Белорусский государственный университет им. В.И. Ленина, Минск, 1973.
11. Л.Г. Алехина.  
Исследование изоморфизма в силикатах методом ИК-спектроскопии.  
Институт химии силикатов им. Н.В. Гребенщикова АН СССР, Ленинград, 1974.
12. О.И. Кондратов.  
Расчет частот колебаний олигомеров и полимеров.  
Институт физики АН БССР, Минск, 1973.
13. Г.В. Ховрин.  
Решение ангармонической задачи в теории колебаний многоатомных молекул методом разложения по гармоническим базисным функциям.  
Московский государственный педагогический институт им. В.И. Ленина, Москва, 1974.
14. Э.З. Якупов.  
Разработка элементов автоматизированной системы обработки данных молекулярной спектроскопии.  
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, 1974.
15. В.И. Смирнов.  
Применение ЭВМ для теоретического анализа колебательных спектров многоатомных молекул.  
Институт физики АН БССР, Минск, 1975.



16. Ю.А. Барбалат.  
Исследование карбонилосимов и их реакций с медью и никелем методами спектроскопии и экстракции.  
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, 1975.
17. Е.С. Стоянов.  
Изучение галогенидных комплексов висмута (3) и сурьмы (3) в экстрактах и водных растворах и использованием лазерной спектроскопии.  
Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского АН СССР, Москва, 1975.
18. Ч. Ибрагимов.  
Исследование состояния некоторых оксиазореагентов и продуктов их аналитических реакций.  
Ташкентский государственный университет им. В.И. Ленина, Ташкент, 1975.
19. И.В. Рыбальченко.  
Расчет кривых распределения коэффициента поглощения в колебательных спектрах полимеров и полимерных кристаллов.  
Ленинградский государственный университет им. А.А. Жданова, Ленинград, 1976.
20. В.И. Перевозчиков.  
Исследование возможности использования приближенных неэмпирических оценок интегралов в квантовых расчетах некоторых характеристик малых молекул.  
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, 1976.
21. А.Т. Тодоровский.  
Расчет кривых распределения коэффициента поглощения многоатомных молекул на базе машинной библиотеки стандартных фрагментов.  
Московский государственный педагогический институт им. В.И. Ленина, Москва, 1978.
22. В.В. Серов.  
Теория и алгоритмы идентификации структуры многоатомных молекул по их спектрам.  
Московский государственный педагогический институт им. В.И. Ленина, Москва, 1978.
23. С.Д. Демухамедова.  
Спектроскопическое и конформационное исследование полимеров разного строения.  
Московский государственный педагогический институт им. В.И. Ленина, Москва, 1979.

24. В.И. Баранов.  
Новые возможности расчета колебательной структуры в электронных спектрах многоатомных молекул.  
Московский государственный педагогический институт им. В.И. Ленина, Москва, 1979.
25. М.И. Годнева.  
Вопросы неоднозначного построения координат симметрии и их стандартизации в теории колебаний молекул.  
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, 1979.
26. М.М. Райхштат.  
Пространственное и электронное строение и аналитические свойства органических реагентов группы арсеназо 3.  
Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского АН СССР, Москва, 1979.
27. А.В. Ниукканен.  
Улучшение сходимости и упрощение расчета интегралов в приближенном неэмпирическом методе МО ЛКАО ССП на слэтеровском базисе.  
Ленинградский государственный университет им. А.А. Жданова, Ленинград, 1980.
28. В.А. Болотин.  
Квантовохимическое исследование влияния конформации на способность к протонированию органических соединений.  
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, 1980.
29. Д.И. Мустафин  
Физико-химическое исследование хлорида цетилпиридиния и продуктов его взаимодействия с ксатеновыми производными и редкоземельными элементами.  
Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, 1981.
30. В.Л. Кофман.  
Исследование замещенных полидиенов методами колебательной спектроскопии.  
Институт нефтехимического синтеза АН СССР, Москва, 1981.
31. Т.Т. Мерзляк.  
Теоретическое исследование колебательных спектров и механизма образования межмолекулярных и ион-молекулярных Н-комплексов, образуемых гидроксилсодержащими соединениями.  
Белорусский государственный университет им. В.И. Ленина, Минск, 1981.

32. Б.К. Новосадов.  
Некоторые вопросы неэмпирической теории электронных и электронно-колебательных спектров многоатомных молекул.  
Московский государственный педагогический институт им. В.И. Ленина, Москва, 1981.
33. Г.П. Дорошина.  
Пространственная и электронная интерпретация электронных спектров поглощения оксиазосоединений ряда бензола и нафталина.  
Институт физики АН БССР, Минск, 1982.
34. С.А. Степанян.  
Исследование структуры полипептидов методом ИКС.  
Институт физики АН БССР, Минск, 1982.
35. А.И. Павлючко.  
Вариационный метод расчета ангармонических колебаний многоатомных молекул.  
Московский государственный педагогический институт им. В.И. Ленина, Москва, 1982.
36. Г.Ф. Лозенко.  
Исследование особенностей решения задач об ангармонических колебаниях малых молекул вариационным методом.  
Московский государственный педагогический институт им. В.И. Ленина, Москва, 1982.
37. Дейан Ракович.  
Колебательная спектроскопия и структура проводящих полимеров.  
Белградский университет, Белград, 1982.
38. М.Р. Расовский.  
Разработка общей теории и методов расчета уровней энергии в многоатомных молекулах при наличии внутреннего вращения.  
Московский государственный педагогический институт им. В.И. Ленина, Москва, 1982.
39. Н.Н. Гусакова.  
Реакция окисления замещенных дифениламина в кислой среде и применение их в фотометрическом анализе.  
Киевский государственный университет им. Т.Г. Шевченко, Киев, 1982.
40. Е.Е. Федоров.  
Строение некоторых молекул дифениламинового ряда и внутримолекулярная водородная связь.  
Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, 1983.

41. А.Н. Панкратов.  
Пространственное, электронное строение ароматических мостиковых молекул и механизмы реакции окисления соединений дифениламинового ряда в кислой среде.  
Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, 1984.
42. А.Н. Калинин.  
Расчеты инфракрасных спектров полимеров и кристаллов.  
Московский государственный педагогический институт им. В.И. Ленина, Москва, 1984.
43. О.В. Новоселова.  
Определение систем полуэмпирических параметров для расчетов спектральных кривых ИК поглощения некоторых гомологических рядов углеводородов и создания библиотеки стандартных молекулярных фрагментов для ЭВМ единой серии.  
Московский государственный педагогический институт им. В.И. Ленина, Москва, 1984.
44. Т.М. Зайцева.  
Исследование особенностей строения соединений фенотиазинового ряда и связанных с ним окислительно-восстановительных процессов.  
Московская сельскохозяйственная академия им. К.А. Тимирязева, Москва, 1985.
45. С.А. Шатохин.  
Эффективный метод квантово-химического расчета параметров потенциальной функции и колебательных спектров многоатомных молекул в системе зависимых естественных координат.  
Московский государственный педагогический институт им. В.И. Ленина, Москва, 1985.
46. Л.Н. Пирожная.  
Колебательные спектры и строение молекул фторсодержащих сополимеров.  
Ленинградский государственный университет им. А.А. Жданова, Ленинград, 1985.
47. В.Н. Колдашев.  
Диалоговая система установления структуры многоатомных молекул по совокупности их спектров.  
Институт физики АН БССР, Минск, 1986.
48. С.В. Котов.  
Обоснование понятия электрооптические параметры и метод их квантового расчета для произвольных многоатомных молекул в системе зависимых координат.

- Московский государственный педагогический институт им. В.И. Ленина, Москва, 1986.
49. И.В. Плетнев.  
Влияние стерического фактора на взаимодействие макроциклических экстрагентов с металлами.  
Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского АН СССР, Москва, 1986.
50. Г.Н. Тен.  
Полуэмпирический метод оценки параметров потенциальных поверхностей электронно-возбужденных состояний и расчеты тонкоструктурных электронно-колебательных спектров многоатомных молекул.  
Московский государственный педагогический институт им. В.И. Ленина, Москва, 1987.
51. Ю.В. Нефедов.  
Вариационные оценки неадиабатических эффектов в электронно-колебательных спектрах многоатомных молекул.  
Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, 1987.
52. А.П. Гуменюк.  
Реакции окисления N-метилдифениламин-4-сульфо кислоты и N-метил-p-аминофенола в слабых кислотах и их применение в анализе микроколичеств платиновых металлов и железа.  
Киевский государственный университет им. Т.Г. Шевченко, Киев, 1987.
53. А.Н. Соловьев.  
Расчет и интерпретация тонкоструктурных электронно-колебательных спектров некоторых соединений с сопряженными связями.  
Ленинградский государственный университет, Ленинград, 1988.
54. Б.Л. Файфель.  
Реализация квантово-химического метода расчета электронной зонной структуры полимеров, слоистых систем и кристаллов, основанного на свойствах периодических матриц.  
Институт кристаллографии АН СССР, Москва, 1988.
55. К.А. Зиновьев.  
Определение системы параметров для расчета инфракрасных спектров больших полифункциональных азотсодержащих органических молекул.  
Московский государственный педагогический университет, Москва, 1990.

56. О.Ю. Никитин.  
Физические принципы фрагментирования крупных молекулярных систем и метод расчета их электронных оболочек.  
Московский государственный педагогический университет, Москва, 1991.
57. И.В. Маслов.  
Приближенный неэмпирический метод расчета электронных оболочек и анализ корреляции силовых постоянных и вариаций электронной плотности.  
Московский государственный педагогический университет, Москва, 1992.
58. В.О. Дженжер.  
Новый параметрический подход к определению возбужденных состояний в адиабатической теории электронно-колебательных спектров многоатомных молекул.  
Московский государственный педагогический университет, Москва, 1996.
59. Д.И. Сиделов.  
Решение обратных электрооптических спектральных задач и задач количественного анализа веществ по их ИКС с использованием *ab initio* квантово-химических расчетов.  
Московский государственный педагогический университет, Москва, 1998.
60. С.В. Труханов.  
Комбинированный подход в теории интенсивностей линий в спектрах КР.  
Московский государственный педагогический университет, Москва, 2000.
61. С.А. Астахов.  
Основы теории безэталонного спектрального анализа по вибронным молекулярным спектрам с временным разрешением и методы их моделирования.  
Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Москва, 2001.
62. М.В. Завалий.  
Создание средств компьютерного моделирования фотохимических изомерных превращений сложных молекулярных систем.  
Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Москва, 2005.

63. С.К. Сударушкин.  
Анализ особенностей взаимодействия аминов и ионов металлов с органическими реагентами на основе квантово-химических моделей.  
Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Москва, 2005.
64. Х.Ш. Абдулов.  
Расчёт ИКС ориентированных и неориентированных полимеров.  
Физико-технический институт, Душанбе, 2009.
65. М.Х. Исхаков.  
Определение веществ по продуктам фотохимических реакций с использованием молекулярного моделирования. Теоретическое обоснование.  
Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Москва, 2011.
66. В.Е. Дридгер.  
Комбинированный ИК, УФ, фотохимический анализ смесей и изомеров. Теоретическое обоснование и компьютерное моделирование.  
Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Москва, 2011.

