



Ректору СГУ,
доктору географических наук,
А.Н.Чумаченко

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное
автономное образовательное
учреждение высшего
профессионального образования
«Национальный исследовательский
университет «МИЭТ»

Проезд 4806, д.5, Зеленоград, Москва, 124498
Тел.: (499) 731 44 41 Факс: (499) 710 22 33
E-mail: netadm@miet.ru <http://www.miet.ru>

ОГРН 1027739615584

19.03.2015 № 98-800/3-70
на № _____

Письмо
об использовании в научно-исследовательской деятельности МИЭТ, программного
модуля "KVAZAR"

При проведении работ по проекту *«Функциональные молекулярные системы с переключаемыми транспортными свойствами на основе органических молекул и одномерных проводников»* в рамках выполнения гранта Российского научного фонда по приоритетному направлению деятельности Российского научного фонда «Проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований отдельными научными группами» (Соглашение № 14-19-01308, руководитель, д.т.н. И.И. Бобринецкий) был использован программный модуль "KVAZAR" для расчета структуры молекулярного перехода в углеродных наноструктурах с внесенным дефектом.

Рассчитанные с помощью "KVAZAR" спектры ИК и КР для углеродных фрагментов существенно дополняют полученные экспериментальные данные по оптическим свойствам молекулярных переходов в углеродных нанотрубках, что позволяет прогнозировать свойства функциональных элементов при контролируемом создании атомарных неоднородностей в структуре.

Проректор по научной работе,
д.т.н., профессор

Руководитель проекта,
д.т.н.



С.А. Гаврилов

И.И. Бобринецкий

008294