

CONTENTS

<i>Editorial</i>	204
<i>B. Schrader, Professor Bojidar Jordanov In memoriam</i>	205
List of publications of Prof. Dr. B. Jordanov	207
<i>M. Rogojerov, G. Keresztury, D. Tsankov, G. Andreev, E. H. Korte, B. Schrader, Infrared and Raman polarization spectroscopy of molecules aligned in nematic liquid crystals: results from cooperation with Bojidar Jordanov</i>	213
<i>M. G. Arnaudov, Solid-state infrared linear-dichroic (IR-LD) spectral analysis of samples oriented as a suspension in a nematic liquid crystal</i>	230
<i>M. K. Georgieva, N. B. Nedelchev, I. N. Juchnovski, Experimental and computational studies on the IR spectral and structural variations arising from the conversion of (2,4,6-trimethylphenyl)acetonitrile into carbanion</i>	235
<i>M. L. Krasteva, D. Tsankov, J. H. van de Sande, H. Wieser, Synthetic DNA and RNA octamers as single strands, double strands and hybrids by vibrational circular dichroism and infrared absorption spectroscopy</i>	243
<i>N. G. Vassilev, Fully automatic first-order multiplet analysis (FAFOMA)</i>	256
<i>V. T. Stoyanova, A. H. Koedjikov, N. G. Vassilev, I. B. Blagoeva, I. G. Pojarlieff, σ_1 Values for 3-aryldureido groups. Transmission of inductive effects by the ureido group</i>	260
<i>Y. Dimitrova, Theoretical study of the hydrogen-bonded vitamin C (L-ascorbic acid)–water system</i>	267
<i>Y. Dimitrova, L. I. Daskalova, Changes in the vibrational characteristics arising from the hydrogen bonding between 2-hydroxybenzonitrile (<i>o</i>-cyanophenol) and CO. <i>Ab initio</i> and DFT studies</i>	277
<i>M. G. Arnaudov, B. B. Ivanova, The effectiveness of the reducing-difference procedure as a tool for an IR-LD spectra interpretation of solids</i>	283
<i>B. A. Stamboliyska, A computational study on the changes in energy, IR spectra, and structures of aromatic nitriles caused by their conversions into radical-anions</i>	289
<i>B. A. Stamboliyska, T. M. Kolev, Vibrational and quantum chemical study of benzamidine and its cation</i>	295
<i>V. Enchev, M. Rogojerov, S. Angelova, N. Markova, <i>Ab initio</i> study of 2,4-substituted azolidines. III. Theoretical and experimental IR study of pseudothiohydantoin in water solution</i>	302
<i>N. Tyutyulkov, F. Dietz, Symmetry instabilities of 1-D polymers</i>	307
<i>P. J. Vassileva-Bojadjieva, E. A. Velcheva, Y. I. Binev, 4- and 3-hydroxyacetophenones: experimental and computational studies on their conversions into oxyanions</i>	313
<i>L. T. Tu, C. Brygger, C. Overgaard, A. Søderman, E. W. Thulstrup, Vibrational spectroscopy of phenanthrene: linear dichroism spectra and new assignments</i>	321
<i>G. Keresztury, M. Rogojerov, Polarized infrared spectra of <i>p</i>-Cl-acetophenone in nematic liquid crystal solution: testing a recently introduced method for determination of transition moment directions</i>	327
<i>A. Horn, P. Klaeboe, C. J. Nielsen, S. Samdal, G. A. Guirgis, W. A. Witkowski, Conformational equilibrium of ethoxytrichloro-silane investigated by infrared and Raman spectroscopy and by <i>ab initio</i> calculations</i>	332
<i>V. Delchev, D. Hristozova, A. Terziyski, J. Petrov, Thermodynamic analysis of the stable isomers of adamantylidene-[1-(2,5-dimethyl-3-furyl)ethylidene]succinic anhydride: a DFT level study</i>	344
<i>M. Gensch, K. Hinrichs, A. Röseler, E. H. Korte, P. Angelova, D. Tsankov, IR ellipsometry of thin molecular films: the NO₂ group as an orientation-indicative marker</i>	350
<i>V. Dimitrova, S. Ilieva, B. Galabov, A quantitative characterisation of the reactivity of substituted phenols for the proton transfer reaction</i>	356
<i>J. A. Tsenov, S. S. Stoyanov, I. G. Binev, Experimental and computational studies on the IR spectra and structures of the free tricyanomethanide carbanion and its potassium ion-pair</i>	361
<i>M. K. Georgieva, P. J. Vassileva-Bojadjieva, P. N. Angelova, An experimental and DFT study on the IR spectra and structure of menthyl isovalerate (validol)</i>	366
<i>L. I. Daskalova, I. G. Binev, Computational and experimental studies on energies, structures and IR spectra of tautomers and conformers of ascorbic acid (Vitamin C), its anion and dianion</i>	374

<i>P. M. Ivanov, M. G. Gotsev, C. Jaime</i> , Molecular dynamics study of the structure and energetics of the large-ring cyclodextrins CD35 and CD40	380
<i>N. D. Yordanov, A. Dimitrova</i> , EPR study of the ligand-exchange reaction of bis(diselenocarbamato)copper(II) with bis(dithiocarbamato)copper(II) or bis(dithiocarbonato)copper(II) complexes. Influence of electronic structure on the products in different solvents	390
Press release	395
Author Index	396
Subject Index	399

СЪДЪРЖАНИЕ

<i>М. Рогожеров, Г. Керестури, Д. Цанков, Г. Андреев, Е. Х. Кортс, Б. Шрадер</i> , Инфрачервена и Раманова поляризационна спектроскопия на молекули ориентирани в течни кристали: резултати от сътрудничество с Божидар Йорданов	229
<i>М. Г. Арnaudов</i> , Линейно-дихроичен ИЧ-спектрален анализ на ориентирани в твърдо състояние съединения като суспензия в нематичен течен кристал	234
<i>М. К. Георгиева, Н. Б. Неделчев, И. Н. Юхновски</i> , Експериментални и теоретични изследвания на ИЧ спектралните и структурните изменения предизвикани от превръщането на (2,4,6-триметилфенил)ацетонитрила в карбанион	242
<i>М. Кръстева, Д. Цанков, Й. Х. ван де Санде, Х. Визер</i> , Инфрачервени абсорбционни и кръгово-дихроични изследвания на структурата на ДНК и РНК октамери като единични нишки, двойни спирали и хибриди	255
<i>Н. Г. Василев</i> , Напълно автоматичен анализ на мултиплети от първи порядък (FAFOMA)	259
<i>В. Т. Стоянова, А. Х. Коеджиков, Н. Г. Василев, И. Б. Благоева, И. Г. Пожарлиев</i> , σ_1 стойности за 3-арилуреидо групи. Проводимост на индукционни ефекти чрез уреидо групата	266
<i>Й. Димитрова</i> , Теоретично изследване на водородно-свързаната система витамин С (l-аскорбинова киселина)–вода	276
<i>Й. Димитрова, Л. И. Даскалова</i> , Промени във вибрационните характеристики произтичащи от водородното свързване между 2-хидроксибензонитрил (<i>o</i> -цианофенол) и СО. Изследвания <i>ab initio</i> и с ТФП	282
<i>М. Г. Арnaudов, Б. Б. Иванова</i> , Ефективност на редуциращо-диференциалната процедура при линейно-дихроичен ИЧ-спектрален анализ на съединения в твърдо състояние	288
<i>Б. А. Стамболийска</i> , Теоретично изследване на промените в енергиите, ИЧ спектри и структурите, съпътстващи превръщането на ароматни нитрили в радикал-аниони	294
<i>Б. А. Стамболийска, Ц. М. Колев</i> , Вибрационно и квантовохимично изследване на бензамидина и неговия катион	301
<i>В. Енчев, М. Рогожеров, С. Ангелова, Н. Маркова</i> , <i>Ab initio</i> изследване на 2,4-заместени азолидини. III. Теоретично и експериментално ИЧ изследване на псевдотиохидантоин във воден разтвор	306
<i>Н. Тютюлков, Ф. Диц</i> , Симетрична нестабилност на еднодименсионални полимери	312
<i>П. Ж. Василева-Бояджиева, Е. А. Велчева, Ю. И. Бинев</i> , 4- и 3-хидроксиацетофенони: опитно и теоретично изследване на превръщането им в оксаниони	320
<i>Л. Т. Ту, К. Бригер, К. Овергаард, А. Зодерман, Е. Тулструп</i> , Вибрационна спектроскопия на фенантрен: линейно-дихроични спектри и нови отнасяния	326
<i>Г. Керестури, М. Рогожеров</i> , Поларизационни инфрачервени спектри на <i>P</i> -хлороацетофенон в разтвор на нематичен течен кристал: изпробване на скоро въведен метод за определяне на посоките на моментите на преход	331
<i>А. Хорн, П. Клебо, К. Ниелсен, С. Самдал, Г. Гюрчис, В. Витковски</i> , Конформационно равновесие на етокситрихлоросилан изследван с инфрачервена и Раманова спектроскопия и чрез <i>ab initio</i> пресмятания	343
<i>В. Делчев, Д. Христовова, А. Терзийски, Ж. Петров</i> , Термодинамичен анализ на стабилните изомери на адамантилиден-[1-(2,5-диметил-3-фурил)етилиден]сукцин анхидрид: изследване с ТФП	349
<i>М. Гени, К. Хинрихс, А. Рьозелер, Е.-Х. Кортс, П. Ангелова, Д. Цанков</i> , ИЧ елипсометрия на тънки молекулни филми: NO ₂ групата като индикативен маркер за ориентацията на филма	355
<i>В. Димитрова, С. Илиева, Б. Гълъбов</i> , Количествено охарактеризиране на реактивоспособността на заместени феноли при реакцията на протонен трансфер	360
<i>Й. А. Ценов, С. С. Стоянов, И. Г. Бинев</i> , Експериментални и теоретични изследвания на ИЧ спектри и структурата на свободния трицианометаниден карбанион и неговата йонна двойка	365
<i>М. К. Георгиева, П. Ж. Василева-Бояджиева, П. Н. Ангелова</i> , Експериментално и ТФП изследване на ИЧ спектри и строежа на ментилизовалерата (валидола)	373

<i>Л. И. Даскалова, И. Г. Бинев</i> , Теоретично и експериментално изследване на енергията, строежа и ИЧ спектри на тавтомери и конформери на аскорбиновата киселина (витамин С), нейният анион и дианион	379
<i>П. М. Иванов, М. Г. Гоцев, К. Хайме</i> , Изследване с молекулна динамика на структурата и енергетичните характеристики на циклодекстрини с голям пръстен: CD35 и CD40	389
<i>Н. Д. Йорданов, А. Димитрова</i> , ЕПР изследване на реакцията на лиганден обмен на бис(дисуленокарбамато)мед(II) с бис(дитиокарбамато)мед(II) и бис(дитиокарбонато)мед(II). Влияние на електронната структура на продуктите в различни разтворители	394
Авторен указател	405
Предметен указател	409