

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 54

Июль-август

№ 4, 2013

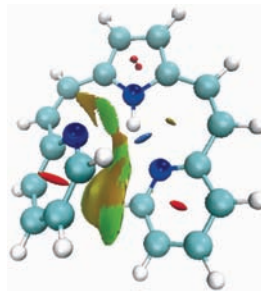
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Ващенко А.В., Афонин А.В.

Особенности трехцентрового водородного связывания в ди(винилпирролил)пиридине и ди(винилпиридил)пирроле по данным *ab initio* расчета и QTAIM анализа

Ключевые слова: трехцентровая водородная связь, маятниковые колебания, *ab initio* расчёты, QTAIM, 2,6-бис-[2-(1*H*-пиррол-2-ил)-винил]-пиридин, 2,5-бис-[2-(пиридин-2-ил)-винил]-1*H*-пиррол

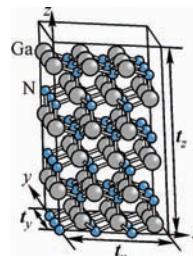


605

Литинский А.О., Новиков С.И., Попов Д.С.

Электронно-энергетическая структура GaN при замещении атомов галлия атомами титана или цинка

Ключевые слова: энергетический спектр электронов, DFT-расчеты, гексагональный нитрид галлия, структуры Ti/GaN- и Zn/GaN-, разбавленные магнитные полупроводники

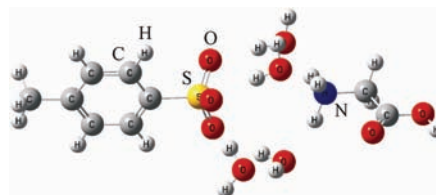


615

Нечаева Л.С., Бутырская Е.В., Шапошник В.А., Селеменев В.Ф.

Структурный анализ сульфокатионообменника в форме глицина

Ключевые слова: структурный анализ, квантово-химический расчет, молекулярно-динамическое моделирование, сульфокатионообменник, глицин

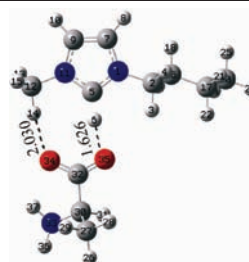


623

Li Z.W., Wu W.S., Du Z.Y., Hao X.Y.

Structure and interaction between anion and cation in the ion pairs of 1-butyl-3-methylimidazolium cation and alanine anion [BMIM][Ala]

Keywords: amino acid ionic liquids (AAILs), density functional theory (DFT), natural bond orbital (NBO), second order interaction energy



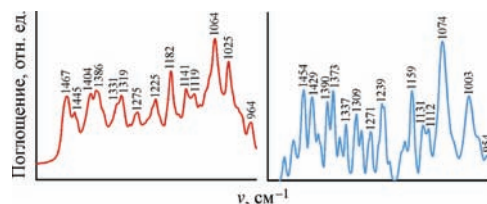
631

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Андрианов В.М., Королевич М.В.

Расчет и сравнительный анализ ИК спектров (22S,23S)-24-эпибрассинолида и (22S,23S)-28-гомобрассинолида

Ключевые слова: ИК спектроскопия, анализ нормальных колебаний, абсолютные ИК интенсивности, характеристические частоты, интерпретация ИК спектра, брассиностероиды, брассинолиды



639

Годнева М.М., Залкинд О.А., Беляевский А.Т.

Исследование строения фторофосфатоцирконатов (гафнатов) щелочных металлов методами ИК спектроскопии и кристалломофологии

Ключевые слова: фторофосфатоцирконаты, фторофосфатогафнаты, калий, рубидий, цезий, химические связи, слоистые кристаллы

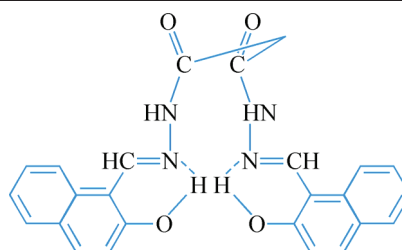


651

Kumar A., Chanu O.B., Koch A., Lal R.A.

Heterobimetallic dioxomolybdenum(VI) complexes derived from bis(2-hydroxy-1-naphthaldehyde) malonoyldihydrazone: synthesis and characterization

Keywords: bis(2-hydroxy-1-naphthaldehyde) malonoyldihydrazone, heterobimetallic, dioxomolybdenum, dioxouranium, magnetic moment, spectroscopic studies

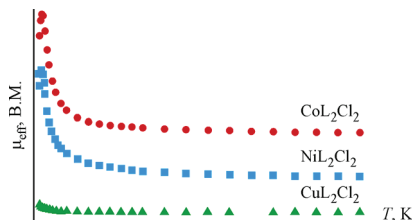


657

Лавренова Л.Г., Жилин А.С., Богомяков А.С., Шелудякова Л.А., Алексеев А.В., Василевский С.Ф.

Магнитные свойства комплексов хлоридов 3d-металлов с 3-амино-4-этоксикарбонилпиразолом

Ключевые слова: синтез, комплексы, 3d-металлы, 3-амино-4-этоксикарбонилпиразол, магнетохимия, электронная и ИК спектроскопия

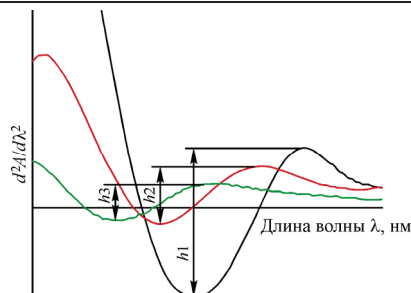


668

Биглова Ю.Н., Крайкин В.А., Михеев В.В., Торосян С.А., Колесов С.В., Мустафин А.Г., Мифтахов М.С.

Количественное определение методом УФ спектроскопии производных метанофуллеренов с различной степенью замещения

Ключевые слова: фуллерен, метанофуллерены, УФ спектроскопия, спектры поглощения, производная спектроскопия второго порядка



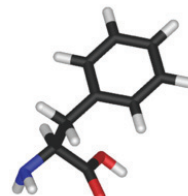
674

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Абросимов В.К., Лебедева Е.Ю.

Хиральный эффект в параметрах Сеченова растворимости аргона в водных растворах α-валина и α-фенилаланина

Ключевые слова: аргон, вода, водные растворы аминокислот, растворимость, влияние температуры, параметры Сеченова, параметры парных взаимодействий



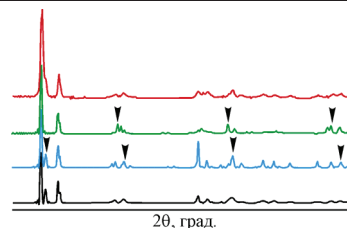
679

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Шефер К.И., Черепанова С.В., Цыбуля С.В.,
Исупов В.П., Мороз Э.М.

Влияние нарушений структуры и упаковки слоев на дифракционную картину гиббсита и байерита

Ключевые слова: гиббсит, байерит, гидроксиды алюминия, интеркаляция, структура, дефекты, дефекты упаковки, моделирование дифракционных картин

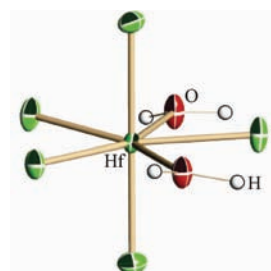


685

Давидович Р.Л., Пушилилин М.А., Логвинова В.Б.,
Герасименко А.В.

Мономерный комплексный анион $[\text{HfF}_5(\text{H}_2\text{O})_2]^-$ в кристаллической структуре тригидрата пентафторогафната 4-амино-1,2,4-триазолия: синтез и рентгеноструктурное исследование

Ключевые слова: синтез, пентафторогафнат, 4-амино-1,2,4-триазолий, кристаллическая структура, мономерный комплексный анион

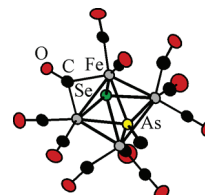


696

Баширов Д.А., Куратьева Н.В., Смоленцев А.И.,
Конченко С.Н.

Строение новых карбонильных кластерных комплексов с остовом $[\text{Fe}_4(\mu_4\text{-Q})(\mu_4\text{-AsCH}_3)(\text{CO})_{11}]$

Ключевые слова: карбонильный кластер, железо, синтез, кристаллическая структура

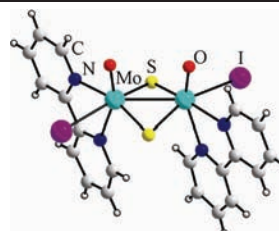


702

Гущин А.Л., Ларичева Ю.А., Алфёрова Н.И.,
Вировец А.В., Соколов М.Н.

Биядерные кластерные комплексы молибдена, содержащие 2,2'-бипиридил или 1,10-фенантролин: синтез и строение

Ключевые слова: биядерные кластеры, молибден, полипиридинные лиганды, кристаллическая структура

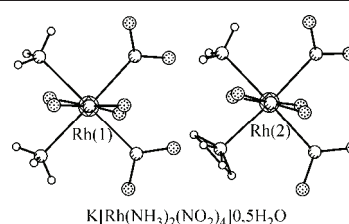


707

Байдина И.А., Беляев А.В., Корольков И.В.,
Воробьева С.Н.

Влияние природы внешнесферного катиона на кристаллическую структуру солей аниона $\text{cis-}[\text{Rh}(\text{NH}_3)_2(\text{NO}_2)_4]^-$

Ключевые слова: родий, *cis*-диамминтетранитриты, соли, кристаллическая структура

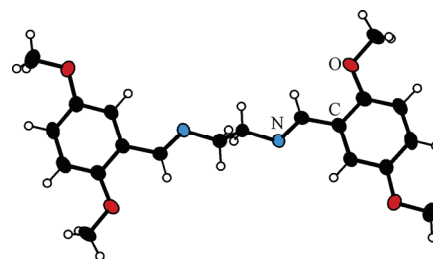


714

Khalaji A.D., Mighani H., Gholinejad M., Grivani G.,
Jalali Akerdi S., Fejfarova K., Dusek M.

Characterization and computational studies of zinc(II)-halide complexes with bidentate Schiff base ligand (2,5-MeO-ba)₂En: crystal structure of (2,5-MeO-ba)₂En

Keywords: zinc(II) halides, Schiff base, crystal structure, density functional theory



721