

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 52

Июль – август

№ 4 2011

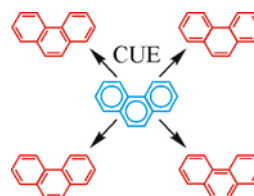
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Захаров А.Б., Иванов В.В.

Простой орбитальный базис для π -электронных расчетов поляризуемостей и гиперполяризуемостей сопряженных систем

Ключевые слова: поляризуемость, гиперполяризуемость, метод CCSD, метод FCI

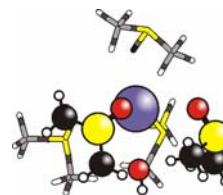


667

Витковская Н.М., Ларионова Е.Ю., Кэмпф Н.В., Кобычев В.Б., Трофимов Б.А.

Взаимодействие метанола с гидроксидами калия и рубидия в диметилсульфоксиде

Ключевые слова: метанол, гидроксид щелочного металла, винилирование, механизмы реакций, квантово-химические расчеты

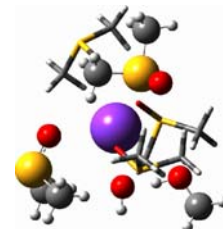


674

Витковская Н.М., Ларионова Е.Ю., Кэмпф Н.В., Кобычев В.Б., Скитневская А.Д., Орел В.Б., Трофимов Б.А.

Взаимодействие метанола, метантиола и ацетоксима с гидроксидами калия и рубидия в диметилсульфоксиде

Ключевые слова: метанол, метантиол, ацетоксим, гидроксид щелочного металла, винилирование, механизмы реакций, квантово-химические расчеты

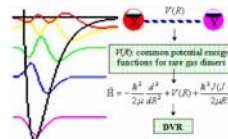


681

Islampour R., Gharibi M., Khavaninzadeh A.

A comparative study of intermolecular potential energy functions proposed for the rare gas dimers

Keywords: rare gas dimers, DVR method, vibration-rotation energy levels

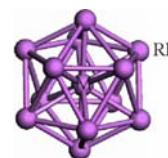


686

Kuang X., Wang X., Liu G.

First-principles study on the MRh_{12} ($M=Rh, Fe, Co$, and Ni) clusters

Keywords: MRh_{12} cluster, geometrical structure, electronic and magnetic properties



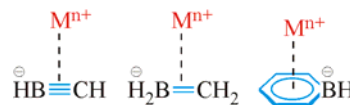
696

Ghiasi R., Moghimi A.

704

A theoretical study of the interaction between $[\text{HB}\equiv\text{CH}]^-$, $[\text{H}_2\text{B}=\text{CH}_2]^-$ and boratabenzene anion with alkaline and alkaline earth metals: properties and structures

Keywords: metals- π interaction energy, natural bond orbital (NBO), atoms in molecules methodology (AIM)



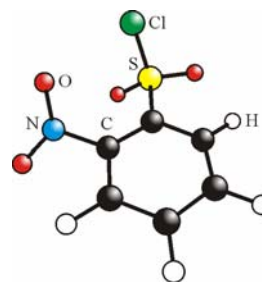
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Петров В.М., Гиричева Н.И., Гиричев Г.В., Бардина А.В., Петрова В.Н., Иванов С.Н.

711

Электроннографическое и квантово-химическое исследование строения молекулы 2-нитробензолсульфонилхлорида

Ключевые слова: 2-нитробензолсульфонилхлорид, конформер, молекулярная структура, внутреннее вращение, потенциальные функции, газовая электронография, квантово-химические расчеты, масс-спектрометрия

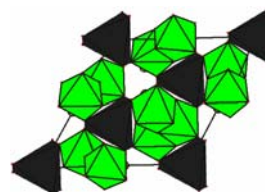


Куражковская В.С., Добрецова Е.А., Боровикова Е.Ю., Мальцев В.В., Леонюк Н.И.

721

Инфракрасная спектроскопия и строение редкоземельных хромовых боратов $\text{RCr}_3(\text{BO}_3)_4$ ($\text{R} = \text{La} - \text{Er}$)

Ключевые слова: ИК спектроскопия, фактор-групповой анализ, редкоземельные хромовые бораты

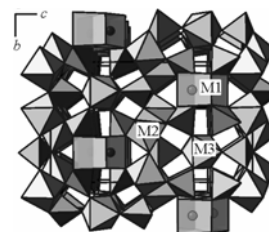


Надолинный В.А., Павлюк А.А., Солодовников С.Ф., Солодовникова З.А., Золотова Е.С., Небогатикова Н.А., Плюснин В.Ф., Рядун А.А.

730

Структура и свойства кристаллов $\text{Li}_2\text{Zn}_2(\text{MoO}_4)_3$, активированных ионами меди и хрома

Ключевые слова: ЭПР ионов переходных металлов, сцинтилляторы, люминесценция, время жизни люминесценции, кристаллы двойного молибдата



Najafi N.M., Alizadeh R., Talebpour Z., Ghassempour A.R.

735

^{31}P NMR and computer simulations of the structure of trichlorfon and its derivatives

Keywords: Trichlorfon derivatives, dichlorvos, phosphorus-31 nuclear magnetic resonance (^{31}P NMR), theoretical study

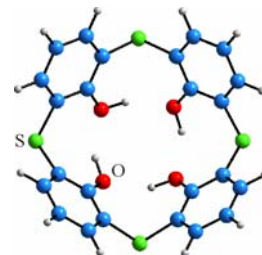


Торгов В.Г., Мазалов Л.Н., Костин Г.А., Ус Т.В., Корда Т.М., Крючкова Н.А., Коротаев Е.В., Федоренко А.Д., Драпайло А.Б.

740

Тиаликс[4]арены: экстракция палладия и электронное строение

Ключевые слова: тиаликс[4]арены, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, рентгеновская эмиссионная спектроскопия, метод DFT, экстракция, палладий, азотно-кислые растворы



СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРА

Павлюхин Ю.Т.

748

Термодинамическая теория возмущений простых жидкостей. Цепочка уравнений для коэффициентов разложения

$$V \frac{\partial A_0}{\partial V} = -p \frac{\partial A_0}{\partial p} = -\frac{1}{3} \sum_k \zeta_k u'_k A_{k0}$$

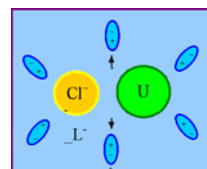
Ключевые слова: простые жидкости, термодинамическая теория возмущений, теория WCA простых жидкостей, жидкость твердых сфер

Королёв В.П.

759

Гидратные числа ионов Na^+ и Cl^- в водном растворе мочевины

Ключевые слова: мочевины, электролиты, водные растворы, парциальные объёмы, гидратные числа



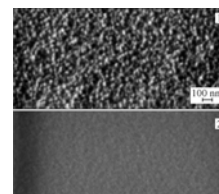
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Яковкина Л.В., Смирнова Т.П., Борисов В.О., Джонг-Хванг С., Морозова Н.Б., Кичай В.Н., Смирнов А.В.

764

Структура и свойства пленок на основе двойных оксидов $\text{HfO}_2\text{—Sc}_2\text{O}_3$

Ключевые слова: тонкие пленки, двойные оксиды, осаждение из газовой фазы

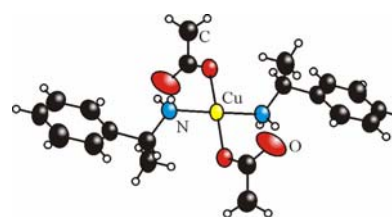


Mei L., Jie C., Yang H.B., Ming Z.S., Hao Yi., Ming T.H.

769

Synthesis of $(\text{C}_8\text{H}_{11}\text{N})_2\cdot\text{Zn}(\text{OAc})_2$, $(\text{C}_8\text{H}_{11}\text{N})_2\cdot\text{Cu}(\text{OAc})_2$, and $(\text{C}_8\text{H}_{11}\text{N})_2\cdot\text{CuCl}_2$ complexes and application to the Henry reaction

Keywords: $(\text{C}_8\text{H}_{11}\text{N})_2\cdot\text{Zn}(\text{OAc})_2$, $(\text{C}_8\text{H}_{11}\text{N})_2\cdot\text{Cu}(\text{OAc})_2$, and $(\text{C}_8\text{H}_{11}\text{N})_2\cdot\text{CuCl}_2$ complexes, crystal structures, catalysts, Henry reaction

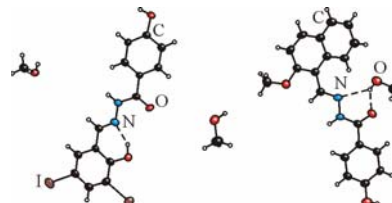


Wei Y.-J., Wang F.-W.

776

Crystal structures of new 4-hydroxy- N' -(3,5-diiodo-2-hydroxybenzylidene)benzohydrazide methanol and 4-hydroxy- N' -(2-methoxynaphth-1-yl)-methylene)benzohydrazide dimethanol solvates

Keywords: hydrazone, crystal structure, hydrogen bonding



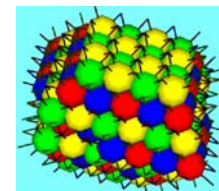
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Рай В.Г., Скворцов К.В., Потехин К.А., Малеев А.В.

781

Геометрический анализ моделей молекулярных нанокластеров серы (S_8)_x в компьютерном эксперименте

Ключевые слова: разбиения Вороного—Дирихле, послойно-секториальный рост, молекулярные кластеры, наноструктуры, координационные сферы

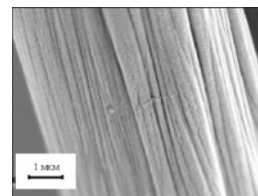


Морозова Н.Б., Гельфонд Н.В., Сысоев С.В., Бакланова Н.И., Ляхов Н.З.

787

Формирование тугоплавких покрытий из летучих Hf-содержащих прекурсоров на углеродных волокнах

Ключевые слова: модифицирование поверхности УВ, МOCVD процессы, летучие β-дикетонаты гафния(IV)

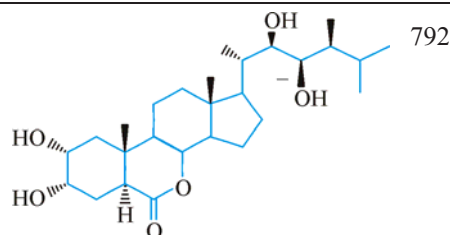


СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Андрианов В.М.

Теоретические исследования молекулярной структуры ряда синтетических и природных brassinosteroidов в связи с их биологической активностью

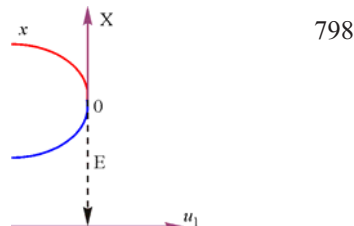
Ключевые слова: brassinosteroidы, brassinolidы, конформеры, биологическая активность, конформационный анализ, боковая цепь, водородная связь



Аскарров Б., Оксенгендлер Б.Л., Тураева Н.Н., Рашидова С.Ш.

Топологическое моделирование реакционной способности и биологической активности некоторых аминополисахаридов

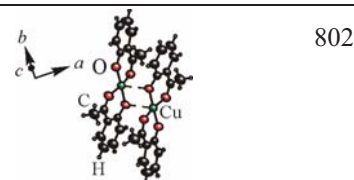
Ключевые слова: вибронное взаимодействие, эффект Яна—Теллера, потенциальный рельеф химической реакции, топология, динамическая система, электронная структура



Wang W., Zhou X., Ma Yu.-Sh., Zhang Zh.-Ch., Wang G.-J., Yuan R.-X., Zhao B.-G., Xu L.

Crystal structure and activity of a new Cu(II) complex with O...Cu weak interaction

Keywords: Cu(II) complex, structure, square-planar geometry, dimer



ОБЗОРЫ

Медведева Н.И., Еняшин А.Н., Ивановский А.Л.

Моделирование электронного строения, химической связи и свойств тройного силикокарбида Ti_3SiC_2

Ключевые слова: электронная структура, квантово-химическое моделирование, тройные слоистые соединения $M_{n+1}AX_n$, силикокарбид титана

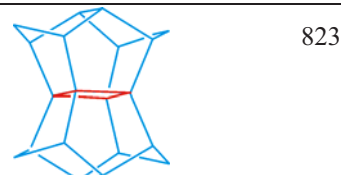


КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Семенов С.Г., Соловьева А.Г.

Квантово-химическое исследование [1.1.1]пагодана и родственных соединений

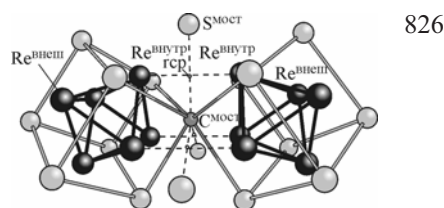
Ключевые слова: [1.1.1]пагодан, [1.1.1]пагодадиен, дирадикал, дикатион, симметрия, структура, изомерия, PBE0/6-31G**



Козлова С.Г., Габуда С.П., Фёдоров В.Е., Наумов Н.Г., Миронов Ю.В.

Многоцентровое взаимодействие в 12-ядерных ренийевых углерод-центрированных халькоцианидных кластерах

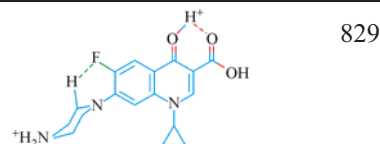
Ключевые слова: внутримолекулярные взаимодействия, 12-ядерные кластерные комплексы рения, квантово-химический метод AIM

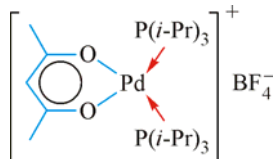
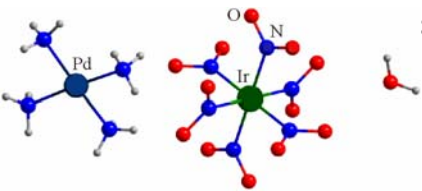
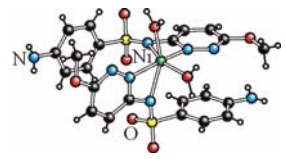
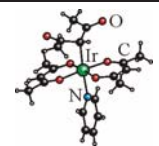
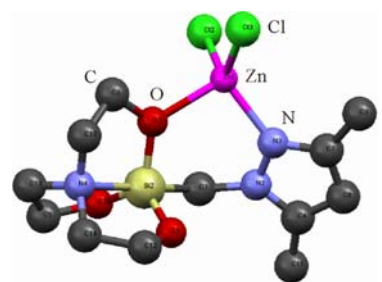
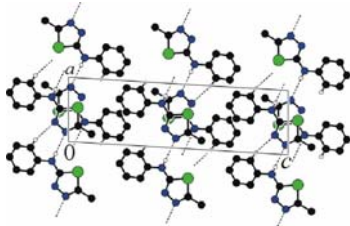
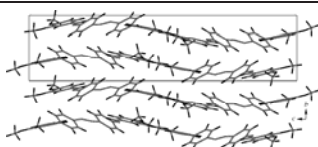


Васильев А.Д., Головнев Н.Н.

Кристаллическая структура $C_{17}H_{20}FN_3O_3^{2+} \cdot CuBr_4^{2-} \cdot H_2O$

Ключевые слова: фторхинолоны, ципрофлоксацин, бромид, медь(II), кристаллическая структура, водородные связи



<p>Куратьева Н.В., Ткач В.С., Суслов Д.С., Быков М.В., Громилов С.А.</p> <p>Кристаллическая структура $[(acac)Pd(P(i-Pr)_3)_2]BF_4$</p> <p>Ключевые слова: палладий, ацетилацетонат, три-<i>изо</i>-пропилфосфин, рентгеноструктурный анализ</p>		833
<p>Рыбинская А.А., Шушарина Е.А., Плюснин П.Е., Шубин Ю.В., Коренев С.В., Громилов С.А.</p> <p>Кристаллическая структура $[Pd(NH_3)_4][Ir(NO_2)_6] \cdot 2H_2O$</p> <p>Ключевые слова: палладий, иридий, двойная комплексная соль, рентгеноструктурный анализ, рентгенофазовый анализ, термический анализ</p>		836
<p>Миминошвили Э.Б., Беридзе Л.А., Зазашвили С.Р.</p> <p>Кристаллическая структура <i>цис</i>-диаквабис(сульфапиридазинато)никеля(II)</p> <p>Ключевые слова: комплексные соединения, структурный анализ, сульфониламиды, сульфопиридазин</p>		840
<p>Chang Q., Chen J., Xie M., Liu W., Yu Y., Ye Q., Chen X.</p> <p>Crystal structure of $Ir(acac-O,O)_2(acac-C^3)(pyridine)$</p> <p>Keywords: iridium, acetylacetone, pyridine, γ-C-bonded β-diketone complexes, crystal structure</p>		844
<p>Воронков М.Г., Зельбст Э.А., Фундаменский В.С., Брусков В.А., Кашаев А.А., Солдатенко А.С., Болгова Ю.И., Трофимова О.М.</p> <p>Необычная кристаллическая и молекулярная структура комплекса 1-(1-силатранилметил)-3,5-диметилпиразола с дихлоридом цинка</p> <p>Ключевые слова: комплекс 1-(1-силатранилметил)-3,5-диметилпиразола с дихлоридом цинка, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ</p>		847
<p>Чумаков Ю.М., Цапков В.И., Антосяк Б.Я., Гуля А.П., Паломарес-Санчес С.А.</p> <p>Кристаллическая структура 5-метил-N-фенил-1,3,4-тиадиазол-2-аминна</p> <p>Ключевые слова : тиадиазол, тиосемикарбазон пировиноградной кислоты, биологическая активность</p>		850
<p>Khalaji A.D., Fejfarova K., Dusek M.</p> <p>Molecular and crystal structure of (E)-4-chloro-<i>N</i>-(3,4-dimethoxybenzylidene)aniline</p> <p>Keywords: single crystals, grown, spectroscopy, crystallography</p>		854

Содержание следующего номера — в конце журнала