

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 53

Ноябрь-декабрь

№ 6, 2012

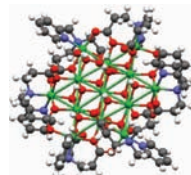
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Пестов А.В., Слепухин П.А., Пермяков А.Е.,
Ятлук Ю.Г.

Синтез и строение дископодобного кластера
 $C_{72}H_{102}Ni_{12}Ni_{13}O_{40}$

Ключевые слова: дископодобный кластер Ni_{13}

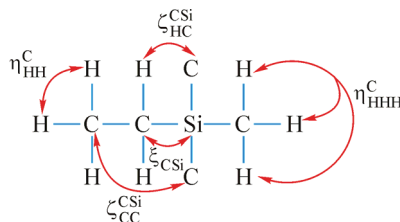


1045

Нилов Д.Ю., Смоляков В.М.

Модель прогнозирования свойств алкилсиланов
на основе аддитивности энергетических вкладов

Ключевые слова: феноменологическая модель,
аддитивные схемы, алкилсиланы, энтальпия образования,
невалентные взаимодействия, многоугольные числа,
треугольник Паскаля

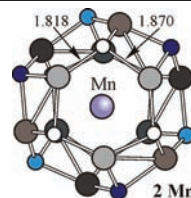


1052

Zhang C.-Y., Cui L.-Y., Wang B.-Q., Zhang J., Lu J.

Encapsulation of transition metals in aluminum nitride
fullerene: TM@ (AlN)₁₂ (TM= Ti, Mn, Fe, Co, Ni)

Keywords: density functional theory,
endohedral complexes, inclusion energy, energy gap,
deformation energy

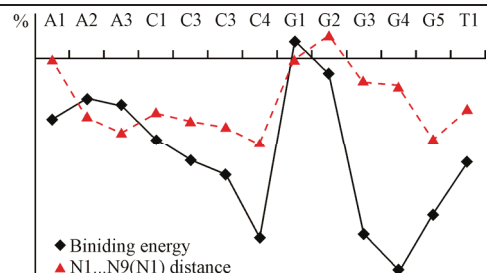


1059

Qiu Z.M., Cai H.Z., Wang H.L., Xia Y.M., Wang H.J.

DFT and MP2 investigations on the hydrogen bonding
interaction between 5,6-dihydrothymine and DNA
bases: A,C,G,T

Keywords: DNA bases, hydrogen bond, 5,6-dihydrothymine



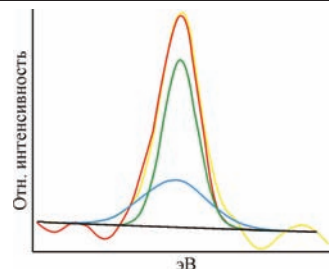
1065

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Мазалов Л.Н., Сёмушкина Г.И., Лаврухина С.А.,
Коротаев Е.В., Боронин А.И., Гуляев Р.В., Басова Т.В.

**Рентгеноспектральное и рентгеноэлектронное
изучение электронного строения фталоцианина меди
и его фторзамещенного аналога**

Ключевые слова: фталоцианины,
рентгеновская эмиссионная спектроскопия,
фотоэлектронная спектроскопия, модель переноса заряда

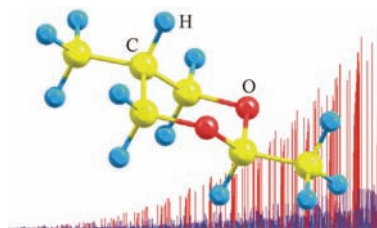


1074

Мамлеев А.Х., Галеев Р.В., Файзуллин М.Г.

**Микроволновый спектр, вращательные параметры
и ТФП расчеты геометрии *транс*- и *цис*-изомеров
2,5-диметил-1,3-диоксана**

Ключевые слова: *транс*- и *цис*-изомеры 2,5-диметил-1,3-
диоксан, микроволновый спектр, конформация,
дипольный момент, квантово-химические расчеты

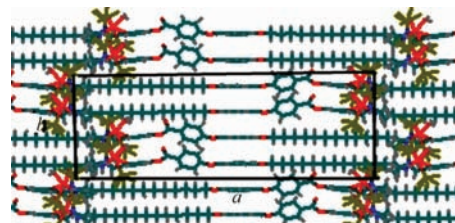


1084

Груздев М.С., Домрачева Н.Е., Александров А.И.,
Осипова В.П., Червонова У.В., Колкер А.М.,
Пашкова Т.В., Барахтенко Д.В.

**Конверсия низкоспиновых состояний
в монохелатном комплексе Fe(III)
с асимметричным азометиновым
тридентатным лигандом**

Ключевые слова: комплексы Fe(III), основание Шиффа,
электронный парамагнитный резонанс, строение,
масс-спектрометрия, ИК спектроскопия, димер,
водородная связь, надмолекулярная упаковка

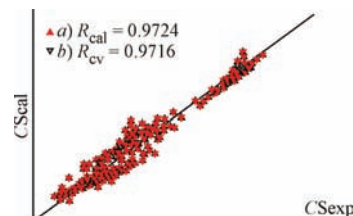


1090

Tong J., Chen Y., Liu S., Xu X., Cheng F.

**Estimation and prediction of ^{13}C NMR chemical shifts
of carbon atoms in both alcohols and thiols**

Keywords: quantitative structure-spectrum relationship,
 ^{13}C NMR chemical shifts of alcohols and thiols,
atomic ionicity index, polarizability effect index,
stereoscopic effect parameters (ϵ)

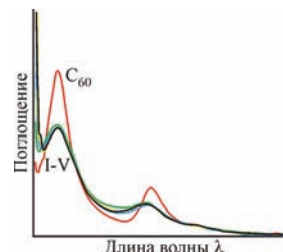


1102

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

**УФ спектроскопия монозамещенных производных
1,2-дигидро- C_{60} -фуллеренов**

Ключевые слова: фуллерен,
монозамещенные 1,2-дигидро- C_{60} -фуллерены,
УФ спектроскопия, коэффициенты экстинкции



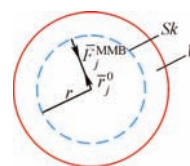
1107

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Карцев В.Н., Штыков С.Н., Панкин К.Е., Батов Д.В.

**Межмолекулярные силы и внутреннее давление
жидкостей**

Ключевые слова: межмолекулярные силы,
внутреннее давление

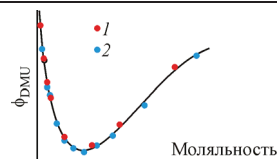


1113

Королёв В.П.

Как растворитель управляет процессом гидратации?

Ключевые слова: мочевины, монометилмочевина, 1,3-диметилмочевина, водные растворы, парциальные объемы, гидратные числа



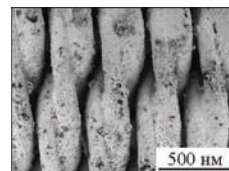
1119

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Громилов С.А., Алексеев А.В., Кинеловский С.А.

Структура кумулятивных покрытий, содержащих карбиды молибдена

Ключевые слова: молибден, карбид, кумулятивный синтез, покрытие, рентгенофазовый анализ

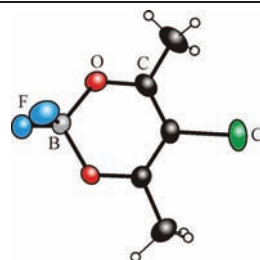


1125

Свистунова И.В., Герасименко А.В., Короченцев В.В., Шапкин Н.П., Вовна В.И.

Исследование кристаллической структуры хлор- и бромзамещенных ацетилацетонатов дифторида бора

Ключевые слова: β -дикетонаты дифторида бора, хлорацетилацетонат, бромацетилацетонат, кристаллическая структура, распределение зарядов

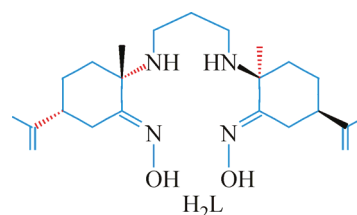


1129

Глинская Л.А., Савельева З.А., Бизяев С.Н., Ткачёв А.В., Ларионов С.В.

Кристаллическая и молекулярная структура соединения $[Zn(HL)Cl] \cdot EtOH$ (H_2L = хиральный бис(ментановый) пропилендиаминдиоксим)

Ключевые слова: комплекс, сольват, цинк(II), бис(ментановый) пропилендиаминдиоксим, структура



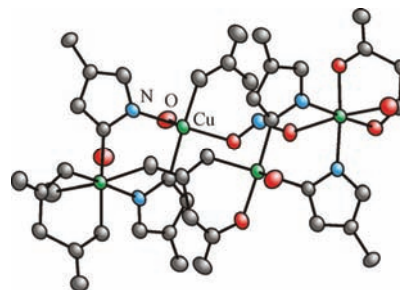
1135

Nfor E.N., Eno E.A., Foba-Tendo J.N., Iniama G.E., Duke E.O., Offiong O.E.

Copper(II) malonate coordination frameworks with amino-1,2,4-triazole: crystal structures and magnetic properties of

$[Cu_2(mal)_2(datz)_2(H_2O)] \cdot 5H_2O$ and $[Cu_2(mal)_2(atz)_2(H_2O)] \cdot 3H_2O$

Keywords: malonate, 1,2,4-triazole, carboxylate, crystal structures, magnetic properties

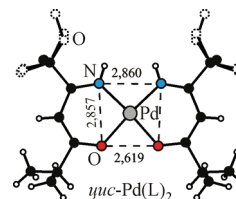


1141

Байдина И.А., Жаркова Г.И., Корольков И.В.

Рентгеноструктурное исследование летучего комплекса *транс*-бис-(2-метокси-2,6-диметил-3-иминогептан-5-онато)Pd(II)

Ключевые слова: β -иминокетонаты Pd(II), прекурсор для MOCVD, летучесть, кристаллическая структура

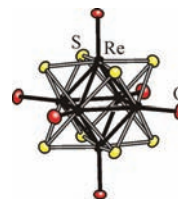


1148

Брылёв К.А.

Новые кристаллические структуры калиевых солей халькогидроксидных кластерных комплексов $[Re_6Q_8(OH)_6]^{4-}$ ($Q = S$ или Se)

Ключевые слова: октаэдрический кластер, рений, синтез, кристаллическая структура



1154