

СОДЕРЖАНИЕ

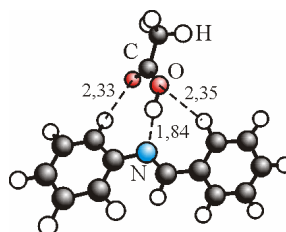
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Журко Г.А., Александровский В.В.,
Бурмистров В.А.

239

**Межмолекулярная водородная связь
в комплексах оснований Шиффа
с уксусной кислотой**

Ключевые слова: основания Шиффа, азометины,
бензилиденанилин, квантовая химия, водородная связь,
ядерный эффект Оверхаузера

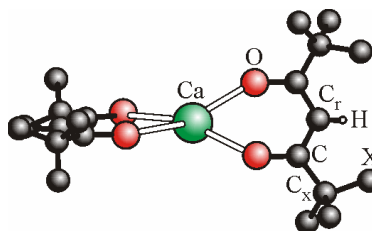


Белова Н.В., Гиричев Г.В., Оберхаммер Х.

246

**Исследование структуры и энергетики β -
дикетонатов. XVII. Внутреннее вращение
радикалов-заместителей в молекулах
 β -дикетонатов по данным
квантово-химических расчетов**

Ключевые слова: β -дикетонаты, ацетилацетонаты,
гексафторацетилацетонаты, дипивалоилметанаты,
внутреннее вращение, квантово-химические расчеты,
электронография

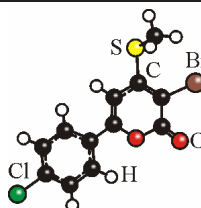


Thul P., Gupta V.P., Chaturvedi D., Tandon P.

259

**Quantum chemical and experimental studies on
the structure and vibrational spectra of substituted
2-pyranones**

Keywords: 2-pyranone, molecular conformation,
infrared spectra, DFT

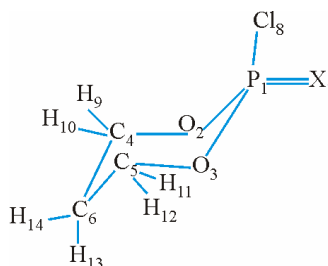


Förner W., Badawi H.M.

269

**Anomeric effect and theoretical vibrational spectra
compared
to the experiment in 2-chloro-1,3,2-
dioxaphosphorinane-2-oxide, -sulfide, and -selenide. I.
Anomeric effect and structures**

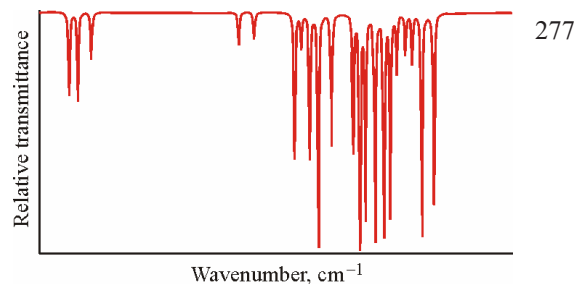
Keywords: anomeric effect,
2-chloro-1,3,2-dioxaphosphorinane-2-oxide, -sulfide,
and -selenide, DFT/B3LYP, 6-311G** basis set



Badawi H.M., Förner W.

Theoretical vibrational spectra compared to the experiment and the anomeric effect in 2-chloro-1,3,2-dioxaphosphorinane-2-oxide, -sulfide, and -selenide. II. Vibrational spectra and assignments

Keywords: vibrational spectra, 2-chloro-1,3,2-dioxaphosphorinane-2-oxide, -sulfide, and -selenide, DFT/B3LYP, 6-311G** basis set

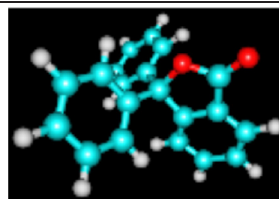


ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Шишлов Н.М., Хурсан С.Л.

Инфракрасные спектры дифенилфталида и полидифениленфталида

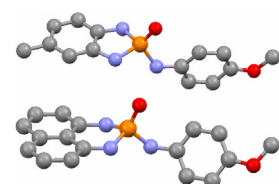
Ключевые слова: колебательные спектры, теория функционала плотности, фталиды, полиарилефталиды, фенолфталеин



Afshar F., Shariatinia Z., Zare K., Ghaziany F.

Spectroscopic characterization and *ab initio* calculations of new diazaphosphole and diazaphosphorinane

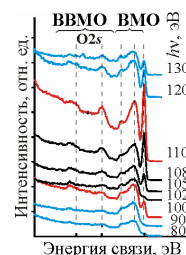
Keywords: diazaphosphole, diazaphosphorinane, ^1H , ^{13}C , ^{31}P NMR, *ab initio* calculations



Тетерин А.Ю., Рыжков М.В., Тетерин Ю.А., Маслаков К.И., Райх Т., Молодцов С.Л.

Резонансная эмиссия валентных электронов UO_2 , U_3O_8 и UO_{2+x} при возбуждении синхротронным излучением вблизи $\text{O}_{4,5}(\text{U})$ -порога поглощения

Ключевые слова: резонансная эмиссия валентных электронов, синхротронное излучение, оксиды урана

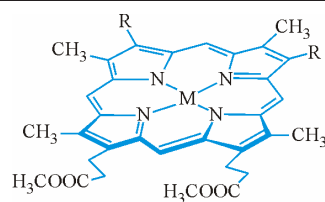


СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Никифоров М.Ю., Голубев В.А., Мамардашвили Г.М., Альпер Г.А.

Растворимость порфириновых макроциклов в смешанных растворителях

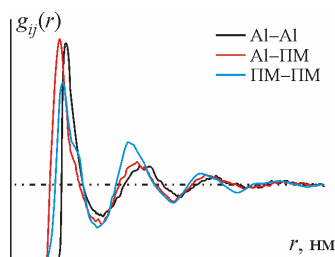
Ключевые слова: растворимость, порфириновые макроциклы, молекулярная ассоциация



Роик А.С., Самсонников А.В., Казимиров В.П., Сокольский В.Э.

Взаимосвязь химического и икосаэдрического локальных упорядочений в расплавах Al-Ni-Fe

Ключевые слова: металлические расплавы, рентгеноструктурный анализ, предпик, икосаэдрический ближний порядок, химический ближний порядок, некристаллические кластеры



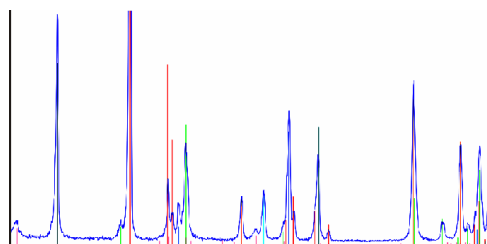
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Якимов И.С., Дубинин П.С., Залога А.Н.,
Пиксина О.Е., Якимов Я.И.

329

Регуляризация методов нестандартного рентгенофазового анализа

Ключевые слова: качественный рентгенофазовый анализ, фазовая идентификация, нестандартный количественный рентгенофазовый анализ, метод ссылочных интенсивностей, метод RIR, регуляризация

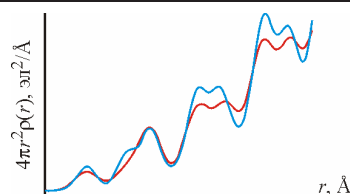


Мороз Э.М., Шефер К.И., Зюзин Д.А., Шмаков А.Н.

336

Исследование локальной структуры оксидов алюминия, полученных различными методами

Ключевые слова: оксид алюминия, метод радиального распределения электронной плотности, локальная структура

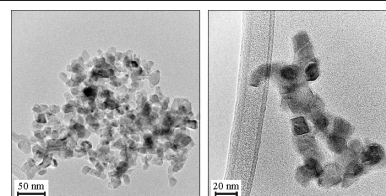


Krалева E., Saladino M.L., Matassa R., Caponetti E.,
Enzo S., Spojakina A.

340

Phase formation in mixed TiO₂—ZrO₂ oxides prepared by sol-gel method

Keywords: TiO₂—ZrO₂ mixed oxides, sol-gel method, srilankite, Rietveld method

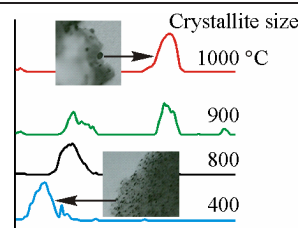


Ávalos-Rendón T., Ortiz-Landeros J., Fetter G.,
Lara V.H., Bosch P., Pfeiffer H.

349

Structure, thermal stability, and catalytic performance of MgO—ZrO₂ composites

Keywords: catalyst supports, ceramic-matrix composites (CMCs), thermal properties, thermal analysis, zirconia

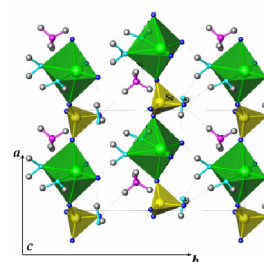


Тютюнник А.П., Зубков В.Г., Красильников В.Н.,
Бергер И.Ф., Переляева Л.А., Бакланова И.В.,
Скрипкин М.Ю., Свенссон Г.

358

Кристаллическая структура и колебательные спектры M[VO₂(SeO₄)(H₂O)₂]·H₂O (M = K, Rb, NH₄)

Ключевые слова: комплексные соединения ванадия, оксоселенованадаты, кристаллическая структура, колебательная спектроскопия

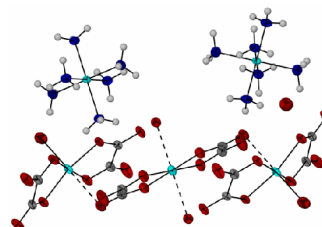


Домонов Д.П., Куратьева Н.В., Печенюк С.И.

365

Строение и свойства двойных комплексных солей [Co(NH₃)₆][Fe(CN)₆] и [Co(NH₃)₆]₂[Cu(C₂O₄)₂]₃

Ключевые слова: двойные комплексные соли, кобальт, железо, медь, рентгеноструктурный анализ, интерметаллид, термическое разложение, лиганды, аммиак, метан

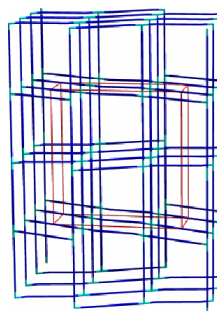


Юткин М.П., Завахина М.С., Самсоненко Д.Г.,
Федин В.П.

372

Кристаллическая структура
металлорганических координационных
полимеров $[\text{Cu}(\text{bpy})_2(\text{H}_2\text{O})_2](\text{NO}_3)_2 \cdot 4,5\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$
и $[\text{Cu}_2(\text{bpy})(\text{H}_2\text{O})(L\text{-pha})_2](\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: медь, кристаллическая структура,
фенилаланин, 4,4'-бипиридил,
координационные полимеры, хиральные комплексы,
металлорганические каркасы

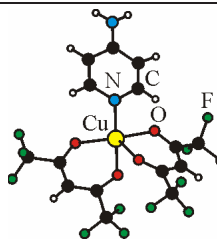


Стабников П.А., Жаркова Г.И., Алфёрова Н.И.,
Зубарева А.П., Шушарина Е.А., Первухина Н.В.

378

Кристаллическая структура аддуктов
ацетилацетоната и гексафторацетилацетоната
меди(II) с 4-аминопиридином

Ключевые слова: β -дикетонаты меди(II),
4-аминопиридин, кристаллическая структура

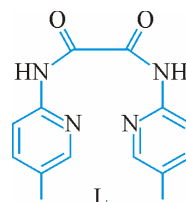


Пирязев Д.А., Жилин А.С., Смоленцев А.И.,
Вировец А.В., Василевский С.Ф., Лавренова Л.Г.

383

Дифракционное исследование продуктов
реакции хлорида меди(II) с N^1, N^2 -бис(5-
метилпиридин-2-ил)оксаламидом

Ключевые слова: N^1, N^2 -бис(5-метилпиридин-
2-ил)оксаламид, комплексы, координационные
полимеры, медь(II), РСА, РФА

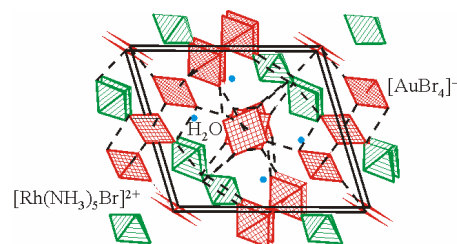


Плюснин П.Е., Семитут Е.Ю., Байдина И.А.,
Коренев С.В.

390

Кристаллические структуры новых двойных
комплексных солей $[\text{M}(\text{NH}_3)_5\text{Br}][\text{AuBr}_4]_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$,
где $\text{M} = \text{Ir}, \text{Rh}$, и комплексной соли
 $[\text{Ir}(\text{NH}_3)_5\text{Br}]\text{Br}_2$

Ключевые слова: иридий, родий, золото,
рентгеноструктурный анализ, двойные комплексные соли

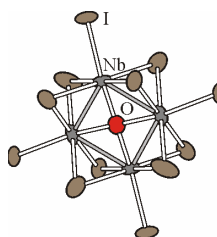


Артёмкина С.Б., Наумов Н.Г., Вировец А.В.,
Козлова С.Г., Фёдоров В.Е.

396

Новый квадратный кластер ниобия $\{\text{Nb}_4(\mu_4\text{-O})\text{I}_8\}^{2+}$. Кристаллическая структура полимера
 $[\text{Nb}_4\text{OI}_8][\text{Mo}_6\text{I}_{14}]_{2\infty}$

Ключевые слова: ниобий, молибден, металлокластер,
синтез, кристаллическая структура,
электронная структура

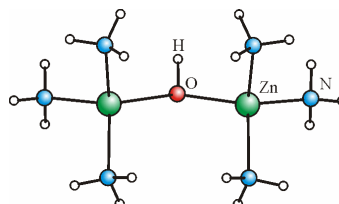


Миронов Ю.В., Шестопалов М.А., Фёдоров В.Е.

402

Кристаллическая структура тетраэдрического
кластерного комплекса $[\text{Zn}_2(\text{NH}_3)_6$
($\mu\text{-OH}$)] $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4]_{0.5}[\text{Re}_4\text{Te}_4(\text{CN})_{12}] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: рений,
тетраэдрические халькогенидные кластеры, цинк,
кристаллическая структура

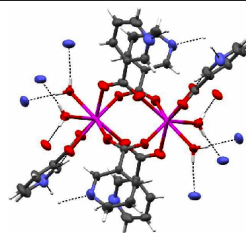


Полищук А.В., Карасёва Э.Т., Пушилилин М.А.,
Кайдалова Т.А., Карасёв В.Е.

406

Строение и спектрально-люминесцентные свойства соединений европия(III) с никотиновой кислотой и энрофлоксацином

Ключевые слова: европий, никотиновая кислота, энрофлоксацин, комплексы, люминесценция, структура

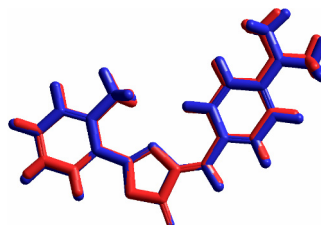


Sevinçek R., Öztürk G., Aygün M., Alp S.,
Büyükgüngör O.

412

Structural and photophysical characterization, topological and conformational analysis of 2-*o*-tolyl-4-(3-*N,N*-dimethylaminophenylmethylene)-oxazol-5-one

Keywords: crystal structure, oxazole-5-one, conformational analysis, topological analysis



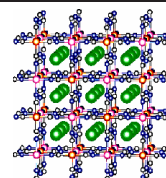
ОБЗОРЫ

Печенюк С.И., Домонов Д.П.

419

Свойства двойных комплексных соединений

Ключевые слова: двойные комплексные соединения, синтез, структура, магнитные свойства, термическое разложение



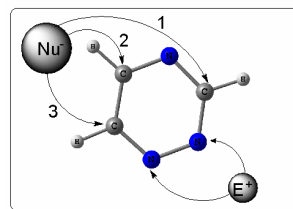
КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Бунев А.С., Стацюк В.Е., Тудакова Я.А.

436

Квантово-химическое исследование реакционной способности 1,2,4-триазина в реакциях с электрофильными и нуклеофильными реагентами

Ключевые слова: 1,2,4-триазин, метод функционала плотности, электронное строение, коэффициенты Фукуи, термодинамические параметры

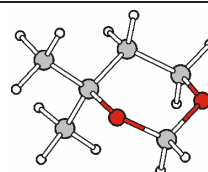


Мамлеев А.Х., Галеев Р.В., Файзуллин М.Г.

440

Микроволновый спектр и ТФП расчеты 4,4-диметил-1,3-диоксана

Ключевые слова: 4,4-диметил-1,3-диоксан, микроволновый спектр, структура, квантовая химия

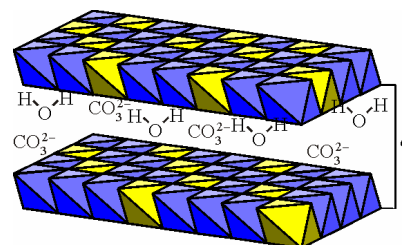


Бутенко Э.О., Капустина Е.В., Капустин А.Е.,
Кравченко В.С., Громилов С.А., Гуеган Р.

444

Изменение структуры слоистых двойных гидроксидов $Mg_xAl_y(OH)_z$ при адсорбции органических соединений

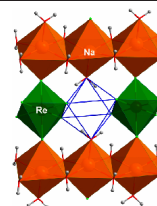
Ключевые слова: слоистые двойные гидроксиды $Mg_xAl_y(OH)_z$, дифрактометрия поликристаллов, удельная поверхность



Шушарина Е.А., Задесенец А.В., Громилов С.А.

Кристаллическая структура и термические свойства $\text{Na}_2[\text{ReCl}_6] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: рений, платина, термолиз, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ, рентгенофазовый анализ

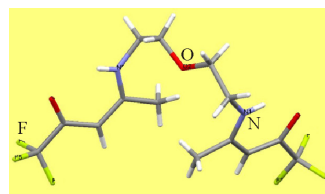


447

Слепухин П.А., Болтачева Н.С., Филякова В.И., Чарушин В.Н.

Рентгеноструктурное исследование 1,5-бис-(4',4',4'-трифтор-1'-метил-3'-оксо-бут-1'-ениламино)-3-оксапентана

Ключевые слова: 1,5-бис-(4',4',4'-трифтор-1'-метил-3'-оксо-бут-1'-ениламино)-3-оксапентан, рентгеноструктурный анализ



451

Содержание следующего номера — в конце журнала