

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 51

Июль – август

№ 4, 2010

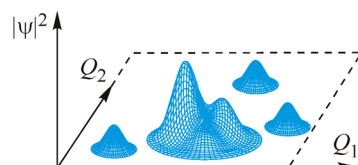
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Грибов Л.А.

**О некоторых базовых положениях при постановке
квантовых задач в теории строения молекул
и молекулярных превращений**

Ключевые слова: многоатомные молекулы, квантовые задачи,
дополнительность, уравнение Шредингера, матрицы

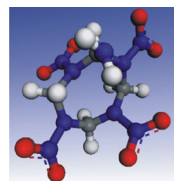


631

Tan B., Peng R., Li H., Jin B., Chu S., Long X.

**Molecular design and properties prediction
of cyclotetramethylene tetranitramine (HMX)
derivatives with amido groups**

Keywords: octogen, bond dissociation energy, enthalpy of formation,
bond order

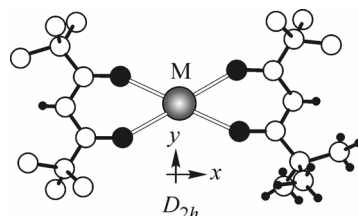


644

Слизнев В.В., Белова Н.В., Гиричев Г.В.

**Неэмпирическое исследование электронного
и геометрического строения бис-комплексов
дипивалоилметана с марганцем, железом и кобальтом**

Ключевые слова: квантовая химия, неэмпирические расчеты,
геометрическое строение, β-дикетонаты, переходные металлы,
энергии электронных переходов,
возбужденные электронные состояния

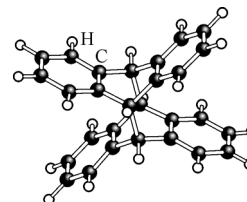


650

Тапилин В.М., Булгаков Н.Н., Чупахин А.П., Политов А.А.,
Друганов А.Г.

**К механизму механохимической димеризации антрацена.
Различные возможные пути реакции**

Ключевые слова: антрацен, димер, электронная структура,
механохимия, высокое давление, сдвиг

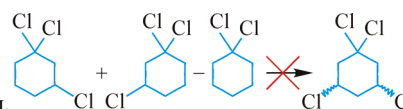


664

Зенкевич И.Г., Уколов А.И.

**Кодирование особенностей структуры органических
соединений для оценки хроматографических индексов
удерживания с использованием аддитивных схем**

Ключевые слова: органические соединения, особенности структуры,
кодирование, хроматографические индексы удерживания,
аддитивные схемы расчета



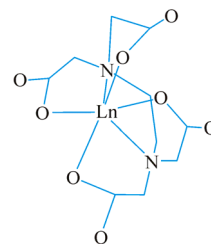
671

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Бабайлов С.П., Коковкин В.В., Стабников П.А.

Парамагнитные свойства и кинетика комплексообразования EDTA с катионами празеодима и гольмия(III) в водном растворе

Ключевые слова: лантанид-индуцированные сдвиги в спектрах ЯМР, EDTA, водные растворы, кинетика, химический обмен, молекулярная динамика, ЯМР-термосенсоры, медицинская магниторезонансная томография

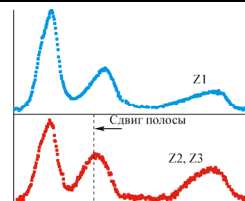


682

Щапова Ю.В., Вотяков С.Л., Кузнецов М.В., Ивановский А.Л.

Влияние радиационных дефектов на электронную структуру циркона по данным рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии

Ключевые слова: минерал циркон, радиационные дефекты, электронное строение, РФЭС

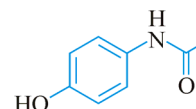


687

Khanmohammadi M., Garmarudi A.B., Moazzen N., Ghasemi K.

Qualitative discrimination between paracetamol tablets made by near infrared spectroscopy and chemometrics with regard to polymorphism

Keywords: paracetamol, classification, polymorphism, chemometrics, Fourier transform, near infrared spectroscopy

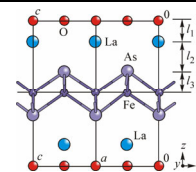


693

Gao L., Xu Y., Qu N., Gao F.

Theoretical study on Mössbauer isomer shift of layered compounds

Keywords: Mössbauer isomer shift, chemical bond parameters, layered structure



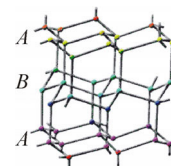
699

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Шабловский Я.О.

Полиморфизм соединений с неполярной структурой низкотемпературных модификаций

Ключевые слова: полиморфизм, неполярная кристаллическая структура

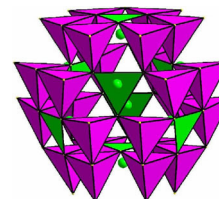


705

Первухина Н.В., Борисов С.В., Магарилл С.А., Васильев В.И., Куратьева Н.В.

Уточнение и кристаллографический анализ структуры Sb-содержащего лаффиттита AgHg(As,Sb)S₃ из Чаувая (Киргизия)

Ключевые слова: Sb-лаффиттит, сульфосоли, структурный тип PbS, кристаллография катионных и анионных матриц

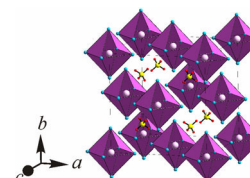


712

Belgaroui H., Loukil M., Karray R., Ben Salah A., Kabadou A.

Structure and characterization of the [Rb_x(NH₄)_{1-x}]₂TeCl₆ tellurate family at room temperature

Keywords: antifluorite type, dynamic motion, substitution, Raman and IR spectroscopy



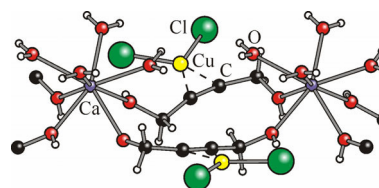
717

Сливка Ю.И., Кинжибало В.В., Лис Т., Мыхаличко Б.М., Мыськив М.Г.

723

Влияние природы внешнесферного катиона на архитектуру кристаллических π -комплексов $\text{Ca}[\text{CuCl}_2(\text{HOCH}_2\text{C}\equiv\text{CCH}_2\text{OH})]_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ и $(\text{C}_7\text{H}_5\text{N}_2\text{H}_2)[\text{CuCl}_2(\text{HOCH}_2\text{C}\equiv\text{CCH}_2\text{OH})]$

Ключевые слова: медь(I), π -комплексы, 2-бутин-1,4-диол, кристаллическая структура

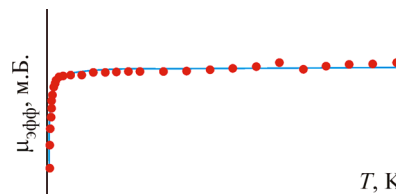


Шакирова О.Г., Куратьева Н.В., Лавренова Л.Г., Богомяков А.С., Петкевич С.К., Поткин В.И.

730

Структура и магнитные свойства нового комплекса хлорида меди(II) с 3-(гидроксииминометил)-5-(2,5-диметилфенил)изоксазолом

Ключевые слова: комплекс меди(II), 3-(гидроксииминометил)-5-(2,5-диметилфенил)изоксазол, кристаллическая структура, эффективный магнитный момент

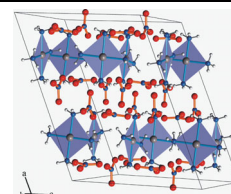


Смоленцев А.И., Губанов А.И., Задесенец А.В., Плюснин П.Е., Байдина И.А., Корнев С.В.

736

Структура тетраамминных солей — $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4](\text{NO}_3)_2$, $[\text{Pd}(\text{NH}_3)_4](\text{NO}_3)_2$ и $[\text{Pd}(\text{NH}_3)_4]\text{F}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: платина, палладий, нитрат, фторид, кристаллическая структура, амминные комплексы

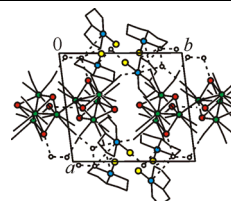


Макотченко Е.В., Миронов Ю.В., Байдина И.А.

742

Кристаллическая структура $[\text{Au}(\text{Dien})\text{Cl}]_2[\text{Re}_4\text{Te}_4(\text{CN})_{12}] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: золото, рений, тетраэдрические халькоцианидные кластеры, координационные полимеры, полидентатные полиамины, кристаллическая структура

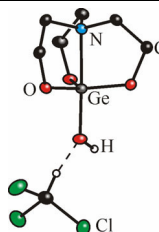


Воронков М.Г., Корлюков А.А., Зельбст Э.А., Князев С.П., Васильев И.М., Чернышев Е.А., Антипин М.Ю.

747

Молекулярная структура 1-герматранола и его комплекса с хлороформом

Ключевые слова: молекулярная структура, герматраны, герматранол, водородные связи, сокращенные межмолекулярные контакты

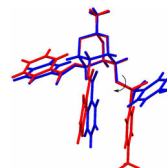


Manoj K., Gonnade R.G., Bhadbhade M.M., Shashidhar M.S.

753

Conformational polymorphism in racemic 2,4-Di-O-benzoyl-6-O-tosyl myo-inositol 1,3,5-orthoacetate

Keywords: conformation, crystal structure, dipolar interactions, inositol, non-covalent interactions, polymorphism, sulfonyl-carbonyl contact



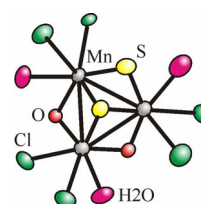
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Абрамов П.А., Адонин С.А., Пересыпкина Е.В., Соколов М.Н., Федин В.П.

759

Супрамолекулярные системы с участием Ca^{2+} , $[\text{Mo}_3\text{O}_2\text{S}_2\text{Cl}_6(\text{H}_2\text{O})_3]^{2-}$, $[\text{Mo}_3\text{S}_4\text{Cl}_{6.75}\text{Br}_{0.25}(\text{H}_2\text{O})_2]^{3-}$ и кукурбит[6]урилы

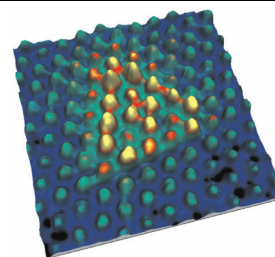
Ключевые слова: кальций, кластеры, молибден, сера, аквакомплексы, кукурбитурил, кристаллическая структура



Разинкин А.С., Еняшин А.Н., Кузнецова Т.В., Титов А.Н., Кузнецов М.В., Ивановский А.Л.

Атомные дефекты поверхности квазидвумерных слоистых дихалькогенидов титана: СТМ-эксперимент и квантово-химическое моделирование

Ключевые слова: дихалькогениды титана, атомные дефекты поверхности, СТМ-микроскопия, квантово-химические моделирование



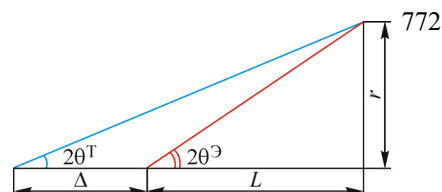
765

ОБЗОРЫ

Алексеев А.В., Громилов С.А.

Рентгенодифрактометрическое исследование поликристаллических образцов, представленных в микроколичествах

Ключевые слова: метод Дебая – Шеррера, CCD-детектор, эталон, точность, параметры элементарной ячейки, преимущественная ориентация

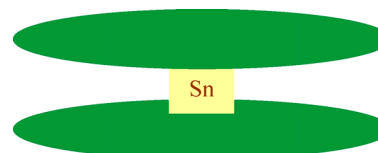


КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Семёнов С.Георг., Бедрина М.Е.

Фталоцианинат олова(II) и бис-фталоцианинат олова(IV): квантовохимическое исследование

Ключевые слова: фталоцианинат олова(II), бис-фталоцианинат олова(IV), структура, потенциалы ионизации, (U)B3LYP/SDD, (U)PBE0/SDD

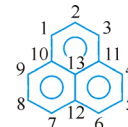


772

Гилинская Л.Г.

Стабильный перинафтенильный радикал (CH₃)₃ в природных апатитах

Ключевые слова: перинафтенильный радикал, спектр ЭПР, природные островные апатиты

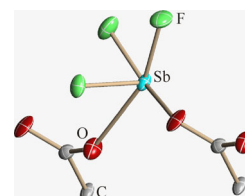


777

Удовенко А.А., Макаренко Н.В., Давидович Р.Л., Земнухова Л.А., Ковалёва Е.В.

Кристаллическая структура молекулярного комплексного соединения фторида сурьмы(III) с L-лейцином

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, кристаллическая структура, фторид сурьмы(III), L-лейцин, молекулярное комплексное соединение

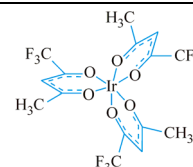


785

Жерикова К.В., Куратъева Н.В., Байдина И.А., Морозова Н.Б.

Кристаллическая структура транс-трифторацетилацетоната иридия(III)

Ключевые слова: иридий(III), β-дикетонаты, транс-изомер, рентгеноструктурный анализ

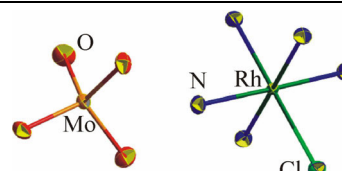


788

Громилов С.А., Шушарина Е.А., Плюснин П.Е., Храненко С.П.

Строение и термические свойства [Rh(NH₃)₅Cl](WO₄)_x(MoO₄)_{1-x} (x = 0, 0,5, 1)

Ключевые слова: молибден, родий, вольфрам, комплексная соль, рентгеноструктурный анализ, рентгенофазовый анализ, термический анализ

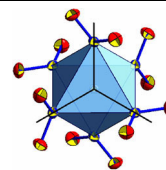


792

Храненко С.П., Шушарина Е.А., Громилов С.А.

Уточнение кристаллической структуры $(\text{NH}_4)_2\text{Na}[\text{Rh}(\text{NO}_2)_6]$

Ключевые слова: родий, гексанитритный комплекс, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ

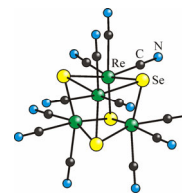


805

Ефремова О.А., Миронов Ю.В., Куратьева Н.В., Ванг К.-К., Фёдоров В.Е.

Кристаллическая структура $(\text{H}_2\text{O})_4[(\text{C}_2\text{H}_5)_4\text{N}]_6[\text{Th}_2\text{Cl}_4(\text{H}_2\text{O})_{12}\text{O}]_3[\text{Re}_4\text{Se}_4(\text{CN})_{12}]_4$

Ключевые слова: кластер, рений, халькоцианидный комплекс, мостиковый атом кислорода, торий, кристаллическая структура

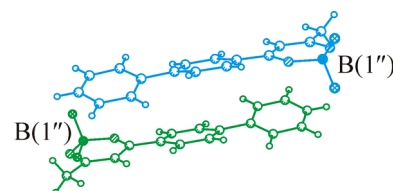


809

Буквешкий Б.В., Федоренко Е.В., Мирочник А.Г.

Кристаллическая структура и люминесценция 2,2-дифтор-4-(4'-фенилфенил)-6-метил-1,3,2-диоксаборина $(\text{C}_6\text{H}_5\text{C}_6\text{H}_4\text{COCHCOCH}_2\text{BF}_2)$

Ключевые слова: β-дикетонаты дифторида бора, 2,2-дифтор-4-(4'-фенилфенил)-6-метил-1,3,2-диоксаборин, 1-(4'-фенилфенил)пропан-1,3-дионат дифторида бора, кристаллическая структура, эксимеры, люминесценция

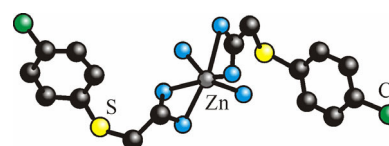


812

Воронков М.Г., Фундаменский В.С., Зельбст Э.А., Кашаев А.А., Мирскова А.Н., Адамович С.Н.

Кристаллическая и молекулярная структура дигидрата ди(4-хлорфенилтиоацетата) цинка

Ключевые слова: молекулярная структура, дигидрат ди(хлорфенилтиоацетат) цинка, протатраны, биологически активные производные

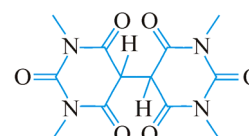


816

Sweidan K., Al-Sheikh A., Maichle-Mößmer C., Steimann M., Kuhn N.

Novel synthetic routes to 1,3,1',3'-tetramethylhydrylic acid and tetramethylalloxantine (amalic acid) and their crystal structures

Keywords: 1,3-dimethylbarbituric acid, 5,5'-bibarbituric acid, hydrylic acid, alloxantine, heterocycles, synthesis, crystal solvate

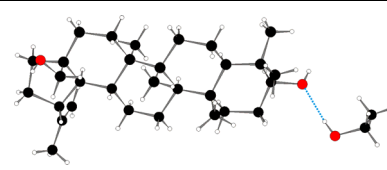


819

Дребущак Т.Н., Михайленко М.А., Брезгунова М.Е., Шахтшнейдер Т.П., Кузнецова С.А.

Кристаллическая структура сольвата бетулина с этанолом

Ключевые слова: бетулин, сольваты, водородные связи, рентгеноструктурный анализ

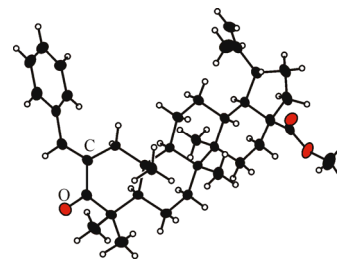


823

Казакова О.Б., Медведева Н.И., Салимова Е.В., Супоницкий К.Ю.

Молекулярная структура метил 1-изопропенил-5a,5b,8,8,11a-пентаметил-9-оксо-10-[(e)-1-фенилметилен]пергидроциклопента[a]хризен-3a-карбоксилата

Ключевые слова: метил 1-изопропенил-5a,5b,8,8,11a-пентаметил-9-оксо-10-[(E)-1-фенилметилен]пергидроциклопента[a]хризен-3a-карбоксилат, рентгеноструктурный анализ



827

Содержание следующего номера — в конце журнала