

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 51

Март – апрель

№ 2, 2010

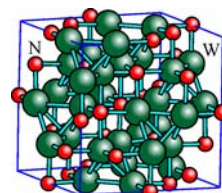
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Суетин Д.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л.

Электронная структура кубического субнитрида вольфрама W_2N в сравнении с гексагональным и кубическим моонитридами вольфрама WN

Ключевые слова: кубический субнитрид вольфрама W_2N , электронные свойства, FLAPW-GGA, моделирование

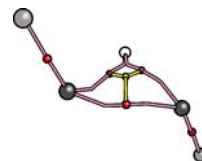


213

Ghiasi R.

Theoretical insights into the properties of the $XY\equiv YX\cdots M^{n+}$ complexes ($X=H, F, Cl$; $Y=C, Si$; M =alkaline and alkaline earth metals)

Keywords: disilyne, disilyne complexes, interaction energy, NBO, AIM



218

Сырлыбаева Р.Р., Вакулин И.В., Талипов Р.Ф.

Изучение факторов, влияющих на точность комбинированных методов расчета

Ключевые слова: комбинированные методы расчета, расчет полной энергии, неэмпирические методы

$$\begin{aligned} E[\text{MP4/6-311+G}(\text{fd,p})] &= \\ &= E[\text{MP4/6-311G}(\text{d,p})] + \\ &+ \Delta(+, f) + K \\ E[\text{MP4/aug-cc-pvTZ}] &= \\ &= E[\text{MP4/cc-pvTZ}] + \Delta(\text{aug}) + K \end{aligned}$$

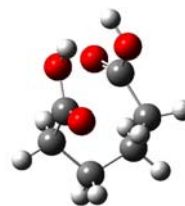
225

Красных Е.Л.

Прогнозирование энтальпии испарения на основе модифицированных индексов Рандича.

III. Карбоновые кислоты

Ключевые слова: энтальпия испарения, топологический индекс, индекс связанности, карбоновые кислоты, энергия водородных связей, QSPR-методы



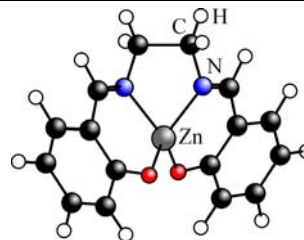
231

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Гиричев Г.В., Гиричева Н.И., Твердова Н.В., Симаков А.О., Кузьмина Н.П., Котова О.В.

Геометрическое и электронное строение молекулы N,N' -этиленбис(салицилальдимината)цинка(II), $ZnO_2N_2C_{16}H_{14}$

Ключевые слова: строение молекул, основание Шиффа, $ZnO_2N_2C_{16}H_{14}$, $Zn(\text{salen})$, электронография, квантово-химические расчеты



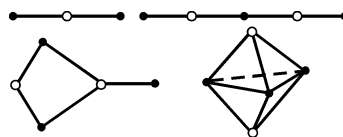
237

Погребная Т.П., Погребной А.М., Кудин Л.С.

246

Структурные и термодинамические характеристики ионных ассоциатов в парах над бромидом и иодидом натрия

Ключевые слова: ионные ассоциаты в парах над бромидом и иодидом натрия, неэмпирический расчет, геометрическая конфигурация, изомеры, геометрические параметры, колебательные спектры, ионно-молекулярные реакции, энтальпии образования ионов

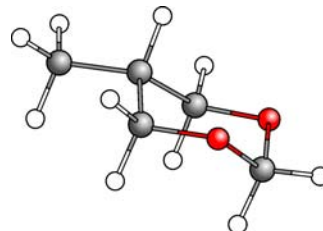


Мамлеев А.Х., Гундерова Л.Н., Галеев Р.В., Шапкин А.А.,
Файзуллин М.Г., Никитина А.П., Шорников Д.В.

253

Структура и спектры 1,3-диоксанов. Микроволновый спектр, структурные параметры и расчеты *ab initio* 5-метил-1,3-диоксана

Ключевые слова: 5-метил-1,3-диоксан, микроволновый спектр, структура, квантово-химические расчеты



Бадмаева И.А., Суровцев Н.В., Малиновский В.К.,
Свешникова Л.Л.

259

Исследование методами ИК и КР спектроскопии фотополимеризации пленок Ленгмюра—Блоджетт ацетиленовой кислоты

Ключевые слова: ИК, КР спектроскопия, пленки Ленгмюра—Блоджетт, соль Pb 2-докозиновой кислоты, фотополимеризация

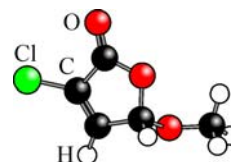


Barhoumi-Slimi T.M., Ben Dhia M.T., Nsangou M.,
El Gaied M.M., Khaddar M.R.

266

Characterization and stereochemistry of alkyl 2-chloro-3-formylacrylates: experimental NMR and theoretical DFT studies

Keywords: synthesis, Vilsmeier reaction, stereoisomerism, stereoselectivity, cyclization, NMR, NOEDIFF, B3LYP

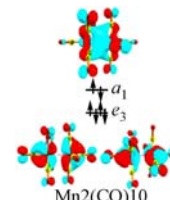


Власенко В.Г., Шуваев А.Т., Зарубин И.А.

272

Квантово-химический расчет методом функционала плотности рентгеновских флуоресцентных спектров димерного карбонила марганца $Mn_2(CO)_{10}$

Ключевые слова: рентгеновская флуоресцентная спектроскопия, теория функционала плотности, декакарбонил марганца



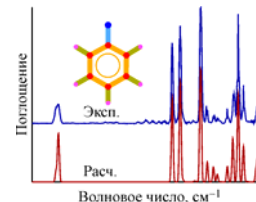
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Павлюхин Ю.Т.

280

Вероятность флуктуаций числа ближайших соседей в жидкости твердых сфер: вероятности больших отклонений

Ключевые слова: жидкость твердых сфер, жидкость с SW-потенциалом взаимодействия, простые жидкости



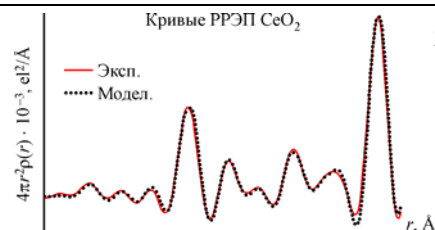
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Пахарукова В.П., Мороз Э.М., Зюзин Д.А.

288

Построение модельных кривых радиального распределения электронной плотности с учетом особенностей рентгенографического эксперимента

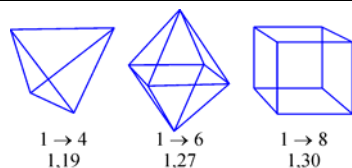
Ключевые слова: радиальное распределение электронной плотности, высокодисперсные материалы, локальная структура, диоксид церия



Бацанов С.С.

Зависимость длин связей в молекулах и кристаллах от координационных чисел атомов

Ключевые слова: межатомное расстояние, фазовый переход, координационное число, порядок связи



295

Чижев Д.Л., Хмара Е.Ф., Слепухин П.А., Филякова В.И., Чарушин В.Н.

Строение комплексов Ni(II), Pd(II) и Cu(II) с 1,2-бис(5,5,5-трифтор-4-оксопент-2-ен-2-амино)бензолом

Ключевые слова: комплексы Ni(II), Pd(II) и Cu(II), 1,2-бис(5,5,5-трифтор-4-оксопент-2-ен-2-амино)бензол, синтез, РСА

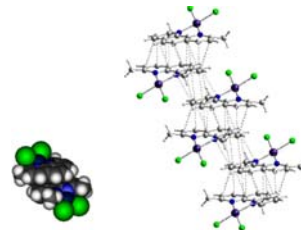


301

Демидов В.Н., Симанова С.А., Савинова А.И., Зинченко А.В., Пахомова Т.Б., Александрова Е.А.

Молекулярная и кристаллическая структура стерически искаженного комплекса Pd(II) с 2,9-диметил-1,10-фенантролином [Pd(2,9-Me₂-phen)Cl₂]

Ключевые слова: комплексы палладия(II), 2,9-диметил-1,10-фенантролин, молекулярная и кристаллическая структуры



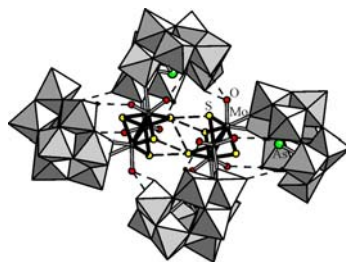
309

Калинина И.В., Соколов М.Н., Чубарова Е.В., Пересыпкина Е.В., Федин В.П.

Кристаллическая структура новых комплексов арсенитовольфраматов с треугольными сульфидными кластерами молибдена и вольфрама:

Cs_{5,6}K_{4,4}[{Mo₃S₄(H₂O)₅}(H₂AsW₉O₃₃)₂]·19,15H₂O и K_{6,35}(NH₄)_{2,65}[{W₃S₄(H₂O)₅}(H₂AsW₉O₃₃)(HAsW₉O₃₃AsOH)] · 23,7H₂O

Ключевые слова: молибден, вольфрам, сера, халькогенидный кластер, полиоксовольфрамат, арсенит, рентгеноструктурный анализ

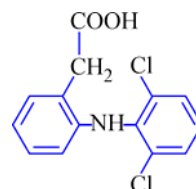


316

Суров А.О., Перлович Г.Л.

Термодинамика сублимации, термофизические и структурные аспекты молекулярных кристаллов фенаматов

Ключевые слова: фенаматы, термодинамика сублимации, энергия кристаллической решетки, кристаллическая структура, рентгеноструктурный анализ, ДСК



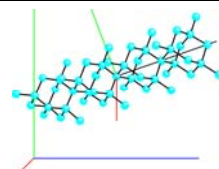
322

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Грибов Л.А., Дементьев В.А.

Волновые движения в молекулярных наноструктурах: результаты компьютерных экспериментов

Ключевые слова: механохимия, волновые процессы, молекулярные наноструктуры

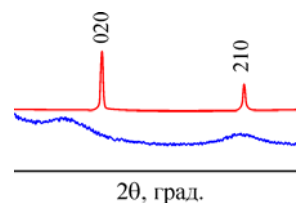


331

Шефер К.И., Яценко Д.А., Цыбуля С.В., Мороз Э.М., Герасимов Е.Ю.

Структурные особенности высокодисперсного псевдобемита, полученного золь-гель методом

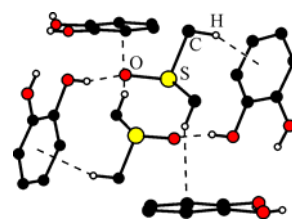
Ключевые слова: псевдобемит, гидроксид алюминия, структура, моделирование дифракционных картин, радиальное распределение электронной плотности



337

Полянская Т.М., Халдояниди К.А., Смоленцев А.И.
Супрамолекулярная архитектура пирокатехина и его комплекса 2:1 с диметилсульфоксидом

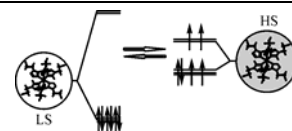
Ключевые слова: пирокатехин, дигидроксибензол, диметилсульфоксид, структура, монокристалл, диаграмма, молекулярный комплекс, межмолекулярное взаимодействие, водородная связь



342

ОБЗОРЫ

Кудрявцев А.Б., Линерт В.
Спиновый переход — необычное химическое равновесие
Ключевые слова: спиновый переход, теоретические модели

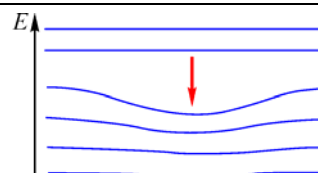


350

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Грибов Л.А.
Ангармоническая задача без ангармонического потенциала

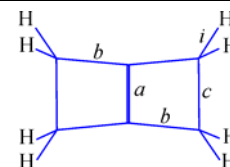
Ключевые слова: ангармонизм, энергетическая матрица, электронно-колебательные функции



379

Калниньш К.К., Семенов С.Г.
Структура бицикло[2.2.0]гекс-1(4)-ена и его димеров: квантово-химическое исследование

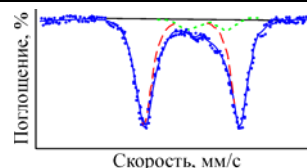
Ключевые слова: напряженные полициклические углеводороды, структура, RHF, B3LYP, PBE0, 6-311G**



383

Бекешев В.Г., Кильянов Ю.Н., Стукан Р.А.
Фаза состава CaBaLaCu₂FeO_{7.5}: синтез, структура, мессбауэровские спектры

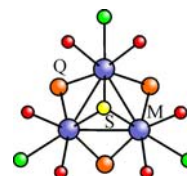
Ключевые слова: высокотемпературные сверхпроводники, системы 123, мессбауэровская спектроскопия ⁵⁷Fe, рентгеновский анализ



387

Абрамов П.А., Гущин А.Л., Соколов М.Н., Федин В.П.
Новые супрамолекулярные соединения хлороаквакомплексов [M₃(μ₃-S)S_{3-x}Se_xCl_y(H₂O)_{9-y}]^{(4-y)+} (M = Mo, W) с кукурбит[6]урилом

Ключевые слова: кластеры, сера, селен, хлороаквакомплексы, кукурбитурил, супрамолекулярные комплексы, кристаллическая структура

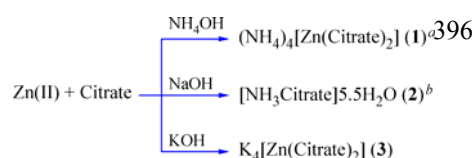


391

Kim Y., Koo H.G., Shin D.H., Park L.O., Lee J.H., Jang H.G., Kim C.

Zinc citrate with alkali metal and ammonium cations: crystal structure of K₄[Zn(Citrate)₂]

Keywords: zinc citrate, synthesis, crystal structure, citric acid

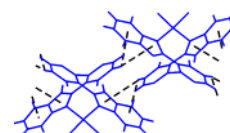


396

Miao S.B., Ji B.M., Deng D.S., Xu C., Ma N.

Crystal structures and luminescence of two zinc(II) complexes with benzimidazole ligands

Keywords: crystal structure, fluorescence, dimethylformamide

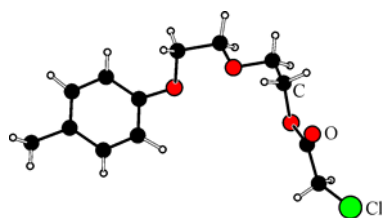


399

Фосс Л.Е., Воронина Ю.К., Грязнов П.И., Губайдуллин А.Т.,
Фахретдинов П.С., Литвинов И.А., Романов Г.В.

**Молекулярная и кристаллическая структура
2-(2-*p*-толилоксиэтокс)этилхлорацетата**

Ключевые слова: 2-(2-*p*-толилоксиэтокс)этилхлорацетат,
кристаллическая и молекулярная структура,
рентгеноструктурный анализ

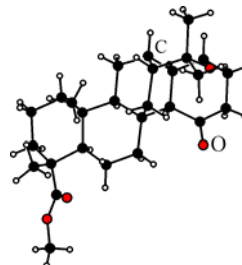


404

Смирнова И.Е., Третьякова Е.В., Казакова О.Б.

Молекулярная структура метил-10,14,19,19-тетраметил-4-оксо-20-оксагексацикло[15.3.1.1^{6,18}.0^{6,15}.0^{9,14}.0^{17,21}]докозан-10-карбоксилата

Ключевые слова: метил-10,14,19,19-тетраметил-4-оксо-20-оксагексацикло[15.3.1.1^{6,18}.0^{6,15}.0^{9,14}.0^{17,21}]докозан-10-карбоксилат,
синтез, рентгеноструктурный анализ

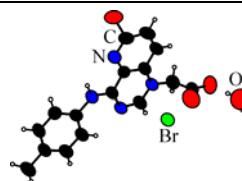


407

Shen L., Zhang F.L.

**Crystal structure of 2-(6-chloro-4-(*p*-tolylamino)pyrido
[3,2-*d*]pyrimidin-1-ium-1-yl)acetate oxonium bromide**

Keywords: pyridopyrimidine derivatives, quaternary ammonium salts,
crystal structure, hydrogen bond



Содержание следующего номера — в конце журнала