

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 53

Май – июнь

№ 3, 2012

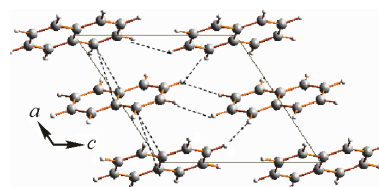
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Журавлев Ю.Н., Фёдоров И.А., Киямов М.Ю.

Первопринципное исследование кристаллической структуры и уравнения состояния нафталина и антрацена

Ключевые слова: нафталин, антрацен, кристаллическая структура, давление, уравнение состояния, модуль объемного сжатия, параметр Грюнайзена



425

Грибов Л.А., Прокофьева Н.И.

Электронно-ядерный гамильтониан для молекул с внутренним вращением

Ключевые слова: квантовая теория молекул, внутренние вращения, электронно-ядерный гамильтониан

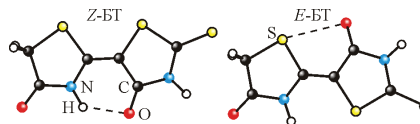
$$\hat{H}_{\text{эя}} = \hat{H}_0(\chi) + \int \Psi_{\text{вр}}^2 V_{\text{эя}}(\chi) d\chi$$

432

Барышников Г.В., Минаев Б.Ф., Минаева В.А., Барышникова А.Т.

Строение и внутримолекулярная стабилизация геометрических изомеров би- и тритиазолидин-4-онов и их метильных производных: DFT и QTAIM исследование

Ключевые слова: теория функционала плотности, метод Бейдера, геометрические изомеры, водородная связь

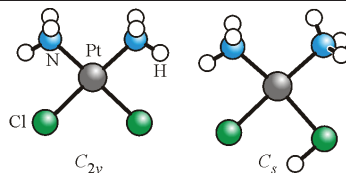


436

Juhász M., Takahashi S., Arulmozhiraja S., Fujii T.

Bond tenegies (Pt–NH₃, Pt–Cl) and proton affinity of cisplatin: a density functional theory approach

Keywords: cis-diamminedichloroplatinum(II), bond strength, cation affinities, B3LYP density functional

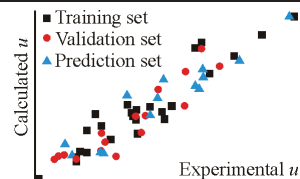


443

Yu X.L., Tan Z.D., Wang X.Y.

Prediction of monomers reactivity parameters using quantum chemical descriptors

Keywords: artificial neural network, density functional theory, monomer, radical copolymerization, QSPR, quantum chemical descriptors



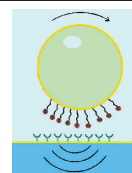
449

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Дульцев Ф.Н.

Измерение силы разрыва связи с помощью кварцевого резонатора

Ключевые слова: кварцевые микровесы, сила разрыва связи

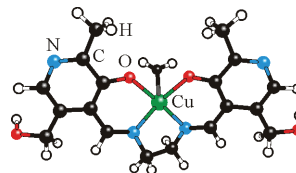


455

Beyramabadi S.A., Morsali A., Vahidi S.H., Khoshkholgh M.J., Esmaeili A.A.

N, N'-dipyridoxyl(ethylenediamine) Schiff-base ligand and its square-pyramidal copper(II) complex: synthesis, experimental and theoretical characterization

Keywords: DFT, IR assignment, NMR, Schiff base, salen, copper(II)



466

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Дубинин Н.Э., Юрьев А.А., Ватолин Н.А.

Псевдопотенциальный расчет структуры и термодинамики жидких щелочных металлов с моделью прямоугольной ямы в качестве системы сравнения

Ключевые слова: жидкий металл, система сравнения, псевдопотенциал, парное межатомное взаимодействие, вариационный метод, структурный фактор, термодинамические свойства

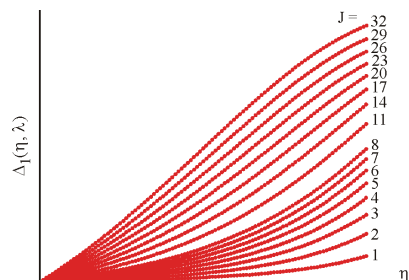
$$\Delta S_{\text{SW-RPA}} = \int \frac{dT}{T} \left(\frac{\partial U_{\text{SW}}}{\partial T} \right)_V^{\text{RPA}}$$

474

Павлюхин Ю.Т.

Термодинамическая теория возмущений простых жидкостей. Моделирование методом Монте-Карло системы твердых сфер и свободная энергия Гельмгольца SW жидкости

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

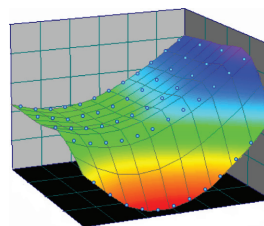


482

Абросимов В.К., Лебедева Е.Ю.

Влияние концентрации электролита, температуры и давления на параметр солевого эффекта Сеченова. Система He–NaCl–H₂O

Ключевые слова: гелий, вода, водные растворы хлорида натрия, растворимость, влияние давления и температуры, параметры Сеченова, параметры парных взаимодействий

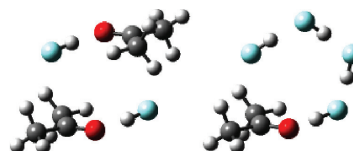


493

Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В.

Строение гетероассоциатов, образующихся в двойной жидкой системе HF–(CH₃)₂CO

Ключевые слова: двойная жидкая система, ИК спектр, квантово-химический расчет, водородная связь, гетероассоциаты, фтористый водород, ацетон



501

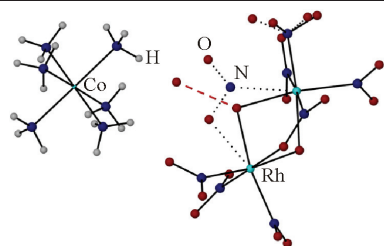
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Губанов А.И., Куратьева Н.В., Филатов Е.Ю., Коренев С.В.

Структура комплексных солей

$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6][\text{Rh}(\text{NO}_2)_6]$ и $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6][(\text{NO}_2)_3\text{Rh}(\mu - \text{NO}_2)_{1+x}(\mu - \text{OH})_{2-x}\text{Rh}(\text{NO}_2)_3] \cdot (2-x)(\text{H}_2\text{O})$, $x = 0,17$

Ключевые слова: родий, кобальт, комплексная соль, монокристалл, рентгенографическое исследование, стабилизация координационного иона

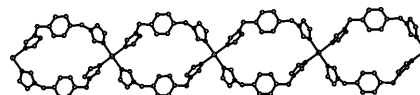


508

Cui G.-H., Geng J.-C., Liu T.-F., Peng X., He C.-H., Jiao C.-H.

Structure and characterization of A 1D double chain copper(II) complex $\{[\text{Cu}(\text{BIX})_2(\text{H}_2\text{O})_2](\text{PhCOO})_2\}_n$

Keywords 1,4-bis(imidazole-1-methyl)benzene, benzoate, coordination polymers, copper complex



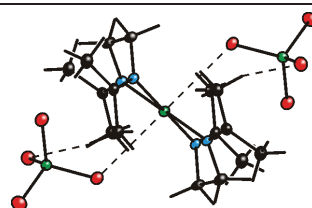
515

Храненко С.П., Быкова Е.А., Алексеев А.В., Громилов С.А.

Кристаллические структуры

$[\text{Pd}(\text{En})_2](\text{ReO}_4)_2$, $[\text{Pd}(\text{En})_2](\text{NO}_3)_2$ и $[\text{PdL}_2](\text{ReO}_4)_2$ ($\text{L} - \text{N}, \text{N}'$ -диизопропилиденэтан-1,2-диамин)

Ключевые слова: палладий, рений, этилендиамин, нитрат, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ

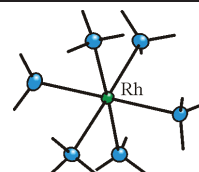


520

Храненко С.П., Быкова Е.А., Алексеев А.В., Тютюнник А.П., Громилов С.А.

Комплексные соли с участием катионов $[\text{Rh}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$

Ключевые слова: родий, рений, молибден, вольфрам, комплексная соль, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ

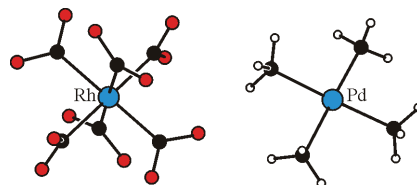


527

Рыбинская А.А., Плюснин П.Е., Быкова Е.А., Громилов С.А., Шубин Ю.В., Коренев С.В.

Двойные комплексные соли $[\text{Pd}(\text{NH}_3)_4][\text{Rh}(\text{NO}_2)_6]_2$, $[\text{Pd}(\text{NH}_3)_4][\text{Rh}(\text{NO}_2)_6]_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ – перспективные предшественники для получения наносплавов Pd–Rh

Ключевые слова: родий, палладий, двойные комплексные соли, PCA, термический анализ, наносплав

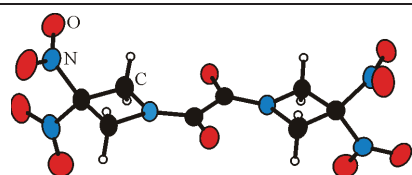


534

Ma H.X., Zhao N.N., Yan B., Guan Y.L., Li J.F., Song J.R.

Molecular structure, quantum chemical investigation and thermal behavior of $(\text{DNAZ-CO})_2$

Keywords: bis-(3,3-dinitroazetidiny)-oxamide $((\text{DNAZ-CO})_2)$, molecular structure, quantum chemical investigation, thermal behavior



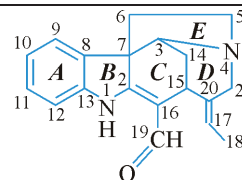
540

Ташходжаев Б., Мирзаева М.М., Юлдашев П.Х.

Кристаллическая структура

солей индольного алкалоида норфлуорокурарина

Ключевые слова: индольный алкалоид, норфлуорокурарин, солевые формы, PCA



548