

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 55

Июль-август

№ 4, 2014

СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Ларин А.В., Жидомиров Г.М.

619

Структура биядерных и трехъядерных кластеров ионов алюминия в катионных позициях морденита

Ключевые слова: кластеры алюминия, моделирование, морденит



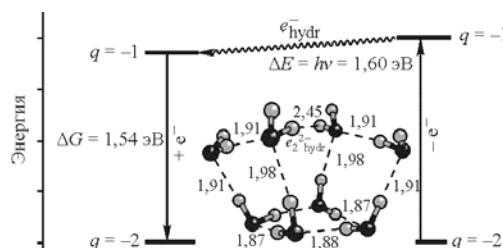
Захаров И.И.

631

Квантово-химические расчеты DFT локальной структуры гидратированного электрона и диэлектрона

Ключевые слова: квантово-химические DFT и PCM расчеты, молекулярные кластеры воды (H₂O)₈, (H₂O)₈⁻ и (H₂O)₈²⁻,

модели гидратированного электрона и диэлектрона, приближение супермолекула-континуум

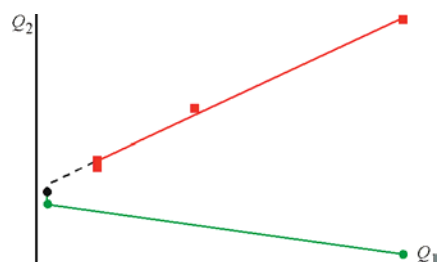


Аверьянов Е.М.

641

Структурные и термодинамические следствия взаимодействия конформационных степеней свободы азометинов в нематической фазе

Ключевые слова: азометины, бензилиденанилин, конформация, стерические эффекты заместителей, переход нематик – изотропная жидкость, конформационный полиморфизм

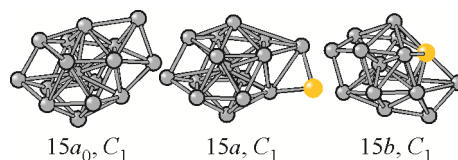


Li S.Y., Guo L., Zhang R.J., Zhang X.

648

Structures, stabilities, and electronic properties for Al_nAu (n = 1–15) clusters: A density functional study

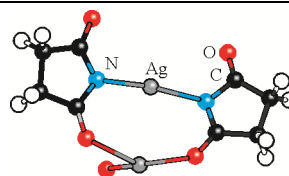
Keywords: Al_nAu bimetallic clusters, DFT calculations, relative stability, electronic structure



Stashans A., Castillo D.

Properties of silver cyclic amide $\text{Ag}_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})$ crystal from the periodic DFT computations

Keywords: crystal structure, chemical bonding, electronic properties, magnetism, DFT

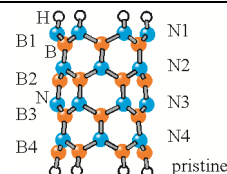


656

Arshadi S., Bekhradnia A.R., Mohammadi E., Asghari A.

Disilene-doped boron nitride nanotubes: A computational study

Keywords: DFT, disilene, GIAO, chemical shielding, IGAIM, isotropic, anisotropic



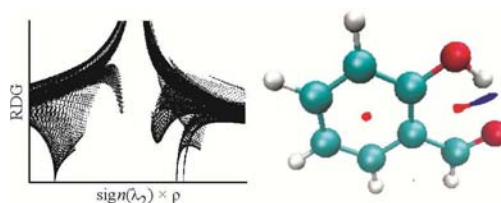
664

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Ващенко А.В., Афонин А.В.

Сравнительная оценка энергий внутримолекулярных водородных связей $\text{C}-\text{H}\cdots\text{O}$, $\text{N}-\text{H}\cdots\text{O}$ и $\text{O}-\text{H}\cdots\text{O}$ по данным QTAИМ анализа и ЯМР спектроскопии

Ключевые слова: внутримолекулярная водородная связь, MP2, QTAИМ, RDG

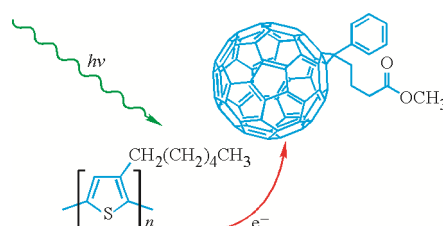


671

Уваров М.Н., Попов А.Г., Лукина Е.А., Кулик Л.В.

Спиновая релаксация и структура светоиндуцированных спин-коррелированных радикальных пар РСВМ/РЗНГ⁺

Ключевые слова: спин-коррелированная радикальная пара, фуллерены, проводящие полимеры, электронный парамагнитный резонанс, электронное спиновое эхо



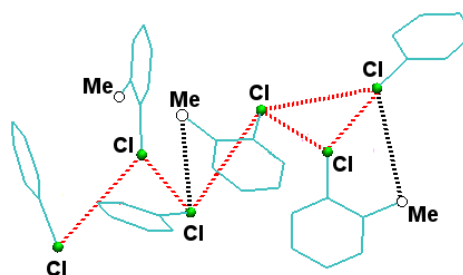
679

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Абрамович А.И., Алексеев Е.С., Богдан Т.В., Ланшина Л.В.

Роль хлор-агрегации в растворах хлорбензол–*o*-хлортолуол

Ключевые слова: растворы хлорбензол–*o*-хлортолуол, молекулярное рассеяние света, скорость звука, избыточные функции: молярного объема, адиабатической сжимаемости, молярной рефракции, молекулярно-динамическое моделирование, хлор-агрегация, контакты Cl...Me

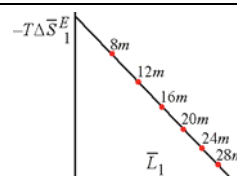


686

Королёв В.П.

Система $\text{H}_2\text{O}-\text{NH}_4\text{Cl}$. Термодинамика и структура пересыщенных $(8+28m)$ растворов при 298,15 К

Ключевые слова: термодинамика, водный раствор, хлорид аммония



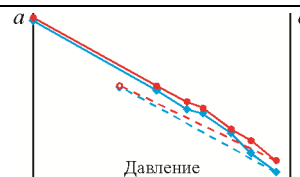
695

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Серёткин Ю.В., Бакакин В.В., Пеков И.В.

Поведение микропористого цирконосилката илерита при высоком давлении

Ключевые слова: цирконосилкат, илерит, кристаллическая структура, высокое давление

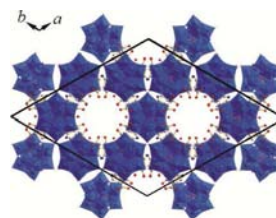


700

Казиев Г.З., Кириченко О.А., Шаш А.И.,
Киньонес Сауль О., Соловьева Е.А., Чен Ю-Щ.

Исследование кислого додекавольфрамфосфата пиридин-3-карбоновой кислоты состава $(C_6NO_2H_5)_2 H[PW_{12}O_{40}] \cdot 2H_2O$

Ключевые слова: гетерополисоединения, рентгеноструктурный анализ, физико-химические свойства

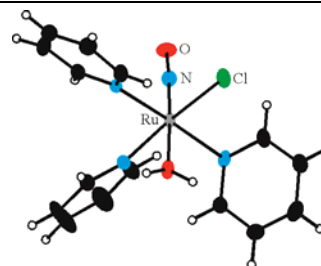


708

Махиня А.Н., Ильин М.А., Байдина И.А.,
Плюснин П.Е., Галлямов М.Р.

Строение и свойства нитрозокомплексов рутения трипиридинового ряда $os-[Ru(NO)Py_3Cl(OH)]Cl \cdot 1,5H_2O$ и $os-[Ru(NO)Py_3Cl(H_2O)]Cl_2 \cdot 2H_2O \cdot 0,5HCl$

Ключевые слова: нитрозокомплексы, рутений, аминок комплексы, пиридин, рентгеноструктурный анализ, ИК спектроскопия, ЯМР, термогравиметрия

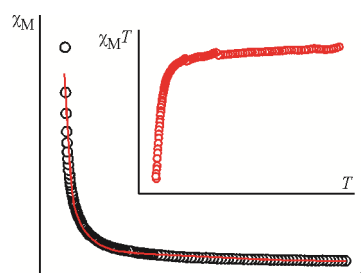


716

Ye H.-Q., Li Y.-Y., Huang R.-K., Liu X.-P., Chen W.-Q.,
Zhou J.-R., Yang L.-M., Ni C.-L.

Unusual layer structure in an ion-paired compound containing tetra(isothiocyanate)cobalt(II) dianion and 4-nitrobenzylpyridinium: crystal structure and magnetic properties

Keywords: 1-(4'-nitrobenzyl)pyridinium, tetra(isothiocyanate)cobalt(II) anion, layer structure, magnetic properties

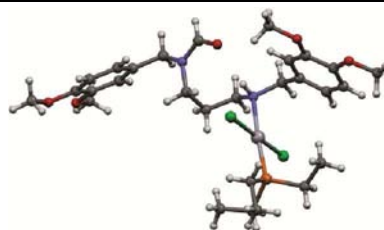


725

Şahin O., Özcan E.Ö., Gürbüz N., Özdemir İ.,
Büyükgüngör O.

Dichlorotriethylphosphine-[N-formyl-N,N'-bis(3,4-dimethoxy)benzyl-trimethylenediamine]platinum(II)

Keywords: tetrahydropyrimidine, N-formyl-N,N'-bisaryltrimethylenediamine, Pt(II) complex, X-ray diffraction analysis

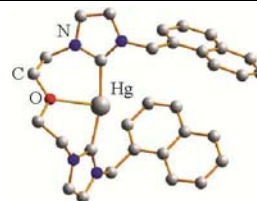


731

Wang J.-W., Zhang M.-C.

Fluorescence and crystal structures of new mercury(II) macrocyclic N-heterocyclic carbene complexes with ether chains

Keywords: mercury, N-heterocyclic carbene, fluorescent, X-ray structure

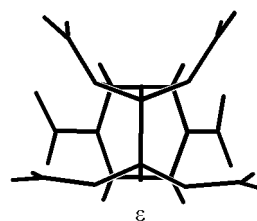


737

Алдошин С.М., Алиев З.Г., Гончаров Т.К.

Кристаллическая структура сольвата 2,4,6,8,10,12-гексанитро-2,4,6,8,10,12-гексаазаизовюрцитан с ϵ -капролактамом

Ключевые слова: 2,4,6,8,10,12-гексанитро-2,4,6,8,10,12-гексаазаизовюрцитан, полициклический нитроамин, ϵ -капролактан, рентгеноструктурный анализ, кристаллическая и молекулярная структура



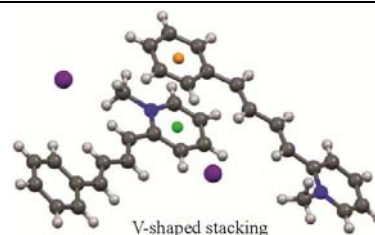
743

Chantrapromma S., Boonnak N., Kaewmanee N.,
Ruanwas P., Fun H.-K.

747

**1-methyl-2-((1*e*,3*e*)-4-phenylbuta-1,3-dienyl)pyridinium
iodide: synthesis, characterization and X-ray analysis**

Keywords: crystal structure, pyridinium,
quaternary ammonium compound (QAC), π stacking,
 π - π interaction



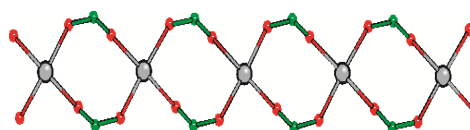
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Ma D.-Y., Guo H.-F., Qin L.

751

**Structure and characterization of a 2D cobalt(II)
complex [Co(L)₂]_n (L = 3-nitro-5-(pyridin-4-yl)benzoate)**

Keywords: cobalt(II) coordination polymer,
hydrothermal synthesis, crystal structure, thermal behavior



СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Нетреба Е.Е., Папаянина Е.С.

756

**Исследование новых молекулярно-кристаллических
структур 4,4,10,10-тетраметил-1,3,7,9-
тетраазаспиро[5.5]ундекан-2,8-диона и его солей:
моноклорида, моонитрата, тетраиодотеллурата**

Ключевые слова: спиробисмочевина, спирокарбон,
моногидрат, моноклорид, моонитрат, тетраиодотеллурат,
ЯМР ¹H, ИК, структура, PCA, РФА



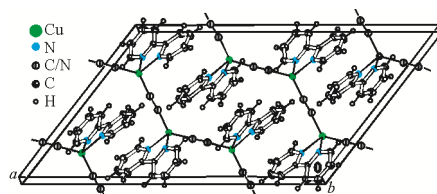
КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Ермолаев А.В., Смоленцев А.И., Миронов Ю.В.

765

**Кристаллическая структура новой модификации
циано-мостикового координационного комплекса
меди(I) [CuCN(bpy)]_n**

Ключевые слова: цианидный комплекс, медь(I),
гидротермальный синтез, кристаллическая структура

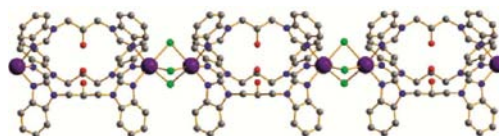


Du X., Wang Y.Y., Zhao Y.Q., Cui G.H.

768

**Crystal structure, thermal and fluorescent properties
of a 1D Cd(II) coordination polymer based
on the bis(benzimidazole) ligand**

Keywords: cadmium(II), bis(benzimidazole), hydrogen bond,
fluorescent property

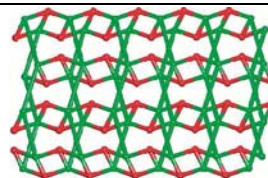


Du X., Wang Y.Y., Zhao Y.Q., Cui G.H.

773

**Crystal structure and fluorescent properties
of a 2D cadmium coordination polymer**

Keywords: Cd(II), 1,3,5-benzenetricarboxylic acid,
binodal(3,5)-connected, π - π stacking interactions



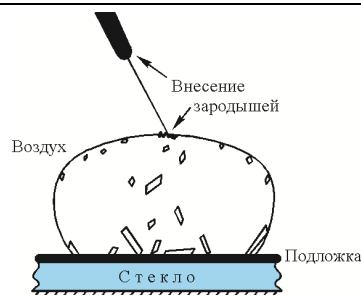
**МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ
«МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ СОСТАВА И СТРУКТУРЫ
ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ»,
НОВОСИБИРСК, 21–25 ОКТЯБРЯ 2013 г.**

Архипов С.Г., Болдырева Е.В.

778

Алгоритм обнаружения существования и воспроизводимого получения монокристаллов солей и смешанных кристаллов аминокислот, пригодных для рентгеноструктурных и КР спектроскопических экспериментов

Ключевые слова: аминокислоты, смешанные кристаллы, получение монокристаллов, «streak seeding», рентгеноструктурный анализ, КР спектроскопия



Ларичев Ю.В., Коскин А.П., Елецкий П.М.,
Полуянов С.А., Тузиков Ф.В., Ищенко А.В., Зюзин Д.А.

784

Изучение особенностей наноструктуры высокозольных углеродных материалов методом малоуглового рентгеновского рассеяния

Ключевые слова: углерод-кремнеземные композиты, просвечивающая электронная микроскопия, рентгеновская дифрактометрия, малоугловое рентгеновское рассеяние, контрастирование

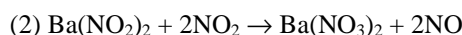
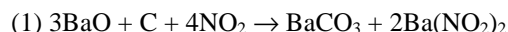


Смирнов М.Ю., Калинин А.В., Назимов Д.А.,
Бухтияров В.И., Вовк Е.И., Ozensoy E.

791

Исследование методом РФЭС взаимодействия модельных NSR катализаторов Ba/TiO₂ и Ba/ZrO₂ с NO₂

C/BaO/MO₂ (M = Ti, Zr) + NO₂:



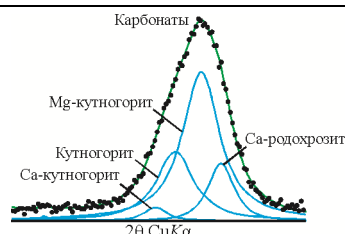
Ключевые слова: модельные NSR катализаторы, реакция с NO₂, нитрит бария, нитрат бария, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия

Пальчик Н.А., Мороз Т.Н., Григорьева Т.Н.

798

Особенности состава и структурных преобразований марганцевых минералов озера Большое Миассово (Южный Урал)

Ключевые слова: структура, химический состав, свойства, марганцевые минералы, воздействие температур, рентгенография, ИК спектроскопия

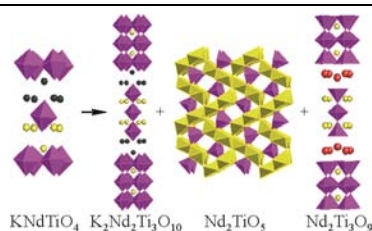


Санкович А.М., Зверева И.А.

805

Исследование термического распада слоистых перовскитоподобных оксидов ANdTiO₄ и A₂Nd₂Ti₃O₁₀ (A = Na, K)

Ключевые слова: перовскитоподобные слоистые титанаты, термическая стабильность, порошковая рентгеновская дифракция



Солотчина Э.П., Солотчин П.А.

814

Состав и структура низкотемпературных природных карбонатов кальцит-доломитового ряда

Ключевые слова: кристаллохимия, карбонаты, ряд кальцит–доломит, рентгенография, ИК спектроскопия, озерные осадки, палеоклимат

