

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 50

Март – апрель

№ 2, 2009

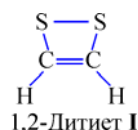
## СОДЕРЖАНИЕ

### ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Фролов Ю.Л., Ващенко А.В., Малькина А.Г., Трофимов Б.А.

**Неэмпирические квантово-химические расчеты энергии и структуры изомеров 1,2-ацетилендитиола**

**Ключевые слова:** неэмпирические квантово-химические расчеты, 1,2-ацетилендитиол, 1,2-дитиет, 1,2-дитиоглиоксаль, ароматичность



211

Астахов А.М., Дюгаев К.П., Кузубов А.А., Наслузов В.А.,  
Васильев А.Д., Бука Э.С.

**Теоретическое исследование строения нитриминов.**

**I. Структура 2-нитрогуанидина и его алкилпроизводных**

**Ключевые слова:** энергоемкие соединения, нитримины, нитрогуанидин, строение молекул, длины связей, валентные углы, квантово-химические расчеты

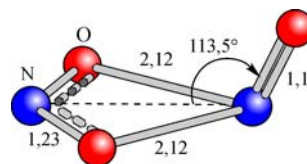


216

Захаров И.И., Захарова О.И.

**Квантовохимическое свидетельство существования нового изомера N<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – нитрита нитрозония**

**Ключевые слова:** метод функционала плотности, квантово-химические расчеты, триоксид диазота, изомеры, нитрит нитрозония

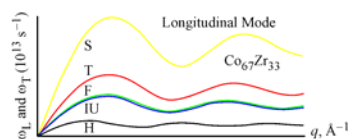


227

Vora A.M.

**Vibrational dynamics of Co<sub>67</sub>Zr<sub>33</sub> semiconductor glassy alloy**

**Keywords:** Co, Zr, pair potential, semiconductor glassy alloy, phonon dispersion curves (PDC), thermodynamic properties, elastic properties



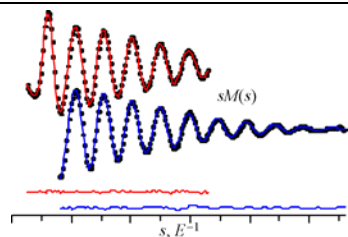
235

### ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Гиричева Н.И., Шлыков С.А., Гиричев Г.В., Чернова Е.В.,  
Лапыкина Е.А.

**Строение молекулы LuBr<sub>3</sub> по данным синхронного электронографического и масс-спектрометрического эксперимента**

**Ключевые слова:** газовая электронография, масс-спектрометрия, трибромид лутетия, молекулярная структура, частоты колебаний



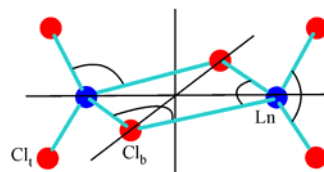
243

Гиричева Н.И., Шлыков С.А., Гиричев Г.В., Чернова Е.В., Лапыкина Е.А.

251

# **Строение молекул $\text{ErCl}_3$ и $\text{YbCl}_3$ по данным синхронного электронографического и масс-спектрометрического эксперимента**

**Ключевые слова:** газовая электронография, масс-спектрометрия, трихлорид эрбия, трихлорид иттербия, состав пара, молекулярная структура, частоты колебаний, квантово-химические расчеты, ангармоничность колебаний

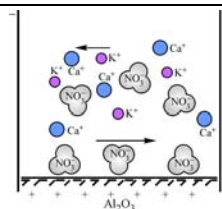


Гафуров М.М., Рабаданов К.Ш.

262

# **Исследование гомогенных и гетерофазных расплавов и стекол системы $\text{K}_2\text{CA}/\text{NO}_3$ методом ИК – Фурье спектроскопии**

**Ключевые слова:** инфракрасные спектры, нитратные стекла, наполненные системы

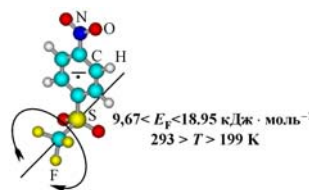


Шундрин Л.А., Поленов Е.А.

267

# **Термодинамические активационные параметры заторможенного вращения $\text{CF}_3$ - группы в анион-радикале 4-нитрофенилтрифторметилсульфона в ДМФА**

**Ключевые слова:** сульфоны, анион-радикалы, заторможенное вращение, ЭПР спектроскопия, U-B3LYP



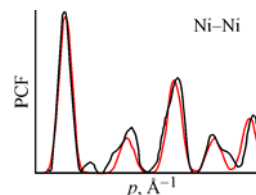
## **СТРУКТУРА ПОВЕРХНОСТИ**

Гай Д.Е., Желтышева О.Р., Деев А.Н., Гильмутдинов Ф.З.

275

# **Использование протяженных тонких структур спектров энергетических потерь электронов для определения параметров атомных парных корреляций в оксидных пленках никеля**

**Ключевые слова:** электронная спектроскопия, спектры энергетических потерь электронов, атомная парная корреляционная функция

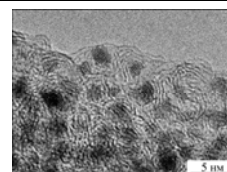


Шитова Н.Б., Цырульников П.Г., Шляпин Д.А., Барбашова П.С., Кочубей Д.И., Зайковский В.И.

273

# **Рутений-углеродный наноккомпозит**

**Ключевые слова:** рутений, комплексы, пиролиз, композит, наночастицы



Kriaa A., Hamdi N., Srasra E.

288

# **Proton adsorption and acid-base properties of Tunisian illites in aqueous solution**

**Keywords:** minerals, clays, illite, point of zero charge, potentiometric titration, surface ionization constants



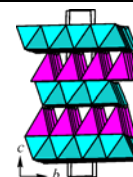
## **КРИСТАЛЛОХИМИЯ**

Васильева И.Г., Кардаш Т.Ю., Малахов В.В.

302

# **Фазовые превращения $\text{CuCrS}_2$ : структурное и химическое исследование**

**Ключевые слова:** тройной медь-хром-сульфид, частично упорядоченные фазы, структура, состав, фазовые переходы

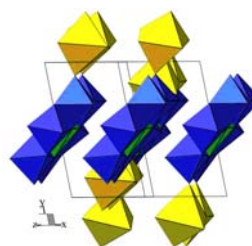


Розанцев Г.М., Радио С.В., Гумерова Н.И., Баумер В.Н., Шишкин О.В.

311

**Кристаллическая структура и свойства  
гетерополигексавольфрамоникелата (2+) натрия  
 $\text{Na}_4[\text{Ni}(\text{OH})_6\text{W}_6\text{O}_{18}] \cdot 16\text{H}_2\text{O}$**

**Ключевые слова:** гетерополисоединение, вольфрамат, гетерополигексавольфрамоникелат (2+) натрия, структура Андерсона–Эванса, кристаллическая структура, ИК спектроскопия, рентгеноструктурный анализ, термический анализ

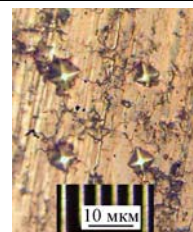


Громилов С.А., Дьячкова Т.В., Юсенко К.В., Киреенко И.Б., Тютюнник А.П., Зайнулин Ю.Г.

320

**Изучение продуктов термобарической обработки  
 $\text{Re}_{0,50}\text{Rh}_{0,50}$**

**Ключевые слова:** родий, рений, твердый раствор замещения, высокое давление, высокая температура, рентгенофазовый анализ, термолиз, микротвердость

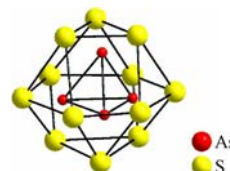


Борисов С.В., Магарилл С.А., Первухина Н.В.

325

**Кристаллохимический анализ ряда структур минералов  
с  $[\text{Hg}_2]^{2+}$ -гантелями**

**Ключевые слова:** атомные подрешетки, кристаллические структуры  $[\text{Hg}_2]^{2+}$ -содержащих минералов, структурообразующие факторы

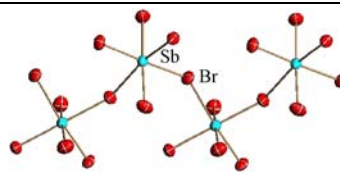


Буквечкий Б.В., Седакова Т.В., Мирочник А.Г.

335

**Кристаллическая структура и люминесценция комплекса  
бромиды сурьмы(III) с анилином**

**Ключевые слова:** кристаллическая структура, сурьма(III), анилин, люминесценция



Ильин М.А., Кабин Е.В., Емельянов В.А., Байдина И.А., Воробьев В.А.

341

**Строение и синтез *транс*-динитро- и *транс*-  
динитратокомплексов диаминнитрозорутения(II)  
 $[\text{RuNO}(\text{NH}_3)_2(\text{NO}_2)_2(\text{OH})]$  и  
 $[\text{RuNO}(\text{NH}_3)_2(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]\text{NO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$**

**Ключевые слова:** рутений, нитрозокомплексы, аминоккомплексы, нитрокомплексы, нитратокомплексы, отработанное ядерное топливо, рентгеноструктурный анализ

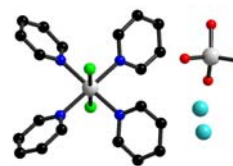


Васильченко Д.Б., Байдина И.А., Филатов Е.Ю., Корнев С.В.

349

**Исследование структуры и термических свойств  
комплексных солей  $[\text{RhPy}_4\text{Cl}_2]\text{X}$ , где  $\text{X} = \text{Cl}^-, \text{ReO}_4^-, \text{ClO}_4^-$**

**Ключевые слова:** родий, пиридин, перренат-ион, перхлорат-ион, рентгеноструктурный анализ, термический анализ



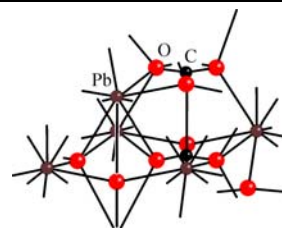
**КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ**

Бисенгалиева М.Р.

357

**Определение положения водородных атомов основного  
карбоната свинца гидроцеруссита квантово-химическими  
методами и моделирование его колебательных спектров**

**Ключевые слова:** атомные позиции, кристаллическая структура, колебательные спектры, термодинамические функции, квантово-химический расчет

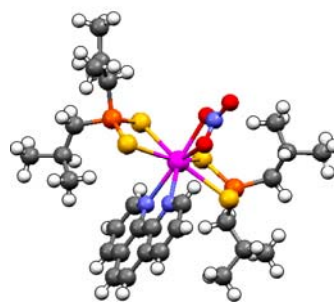


Бабайлов С.П., С.П. Варанд С.П.

362

**Молекулярное строение парамагнитных бис-изодибутилдитиофосфинатных комплексов лантанидов(III) с 1,10-фенантролином в растворе по данным релаксационной спектроскопии ЯМР**

**Ключевые слова:** лантаниды, парамагнитные комплексы лантанидов, парамагнитные лантанид-индуцированные увеличения скоростей спин-решеточной релаксации, релаксационная спектроскопия ЯМР, молекулярное строение, люминесцентные сенсоры, хелатные лиганды, 1,10-фенантролин, неводные растворы

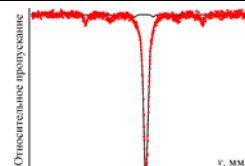


Варнек В.А., Соколов В.В., Филатова И.Ю., Петров С.А.

365

**Мессбауэровские спектры сульфидов  $\text{CuCrS}_2$ , допированных железом**

**Ключевые слова:** сульфиды, железо, мессбауэровские спектры, фазовый состав, строение

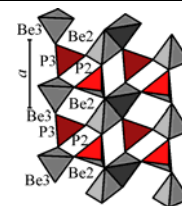


Бакакин В.В., Сереткин Ю.В., Демин С.П.

369

**Суперпаракаркас в кристаллической структуре фосфата-гидрофосфата дибериллий цезия  $\text{Cs}[\text{Be}_2(\text{PO}_4)(\text{PO}_4\text{H})]$**

**Ключевые слова:** кристаллическая структура, бериллофосфат цезия, паракаркас, суперпаракаркас

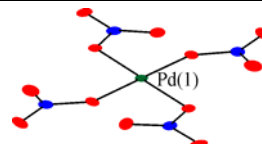


Храненко С.П., Байдина И.А., Громилов С.А.

374

**Кристаллическая структура  $\beta\text{-K}_2[\text{Pd}(\text{NO}_3)_4]$**

**Ключевые слова:** палладий, нитраты, координационные соединения, кристаллическая структура, кристаллохимия

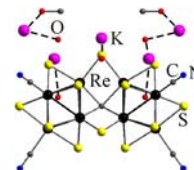


Миронов Ю.В., Ким С.-Дж., Федоров В.Е.

378

**Кристаллическая структура биоктаэдрического кластерного комплекса  $\text{K}_6[\text{Re}_{12}\text{CS}_{17}(\text{CN})_6] \cdot 2\text{CH}_3\text{OH} \cdot 10\text{H}_2\text{O}$**

**Ключевые слова:** рений, биоктаэдрический тиоцианидный кластер, синтез, кристаллическая структура

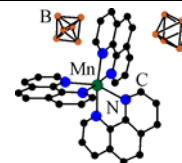


Полянская Т.М., Дроздова М.К., Волков В.В., Мякишев К.Г.

381

**Кристаллическая структура  $[\text{Mn}(1,10\text{-C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_3](\text{B}_6\text{H}_7)_2$**

**Ключевые слова:** катион [*трис*-фенантролинмарганец(II)](2+), анион гептагидро-клозо-гексаборат(1-), рентгеноструктурный анализ монокристаллов

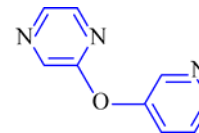


Li H., Zhao H.-Y., Zhang S.-G., Shi J.-M.

386

**Crystal structure of a two-dimensional Co(II) coordination polymer:  $[\text{Co}(\mu\text{-PP})_2(\text{SCN})_2]_n$  [PP = 2-(pyridine-3-yloxy)pyrazine]**

**Keywords:** crystal structure, cobalt(II) complex, 2D polymer, layered structure

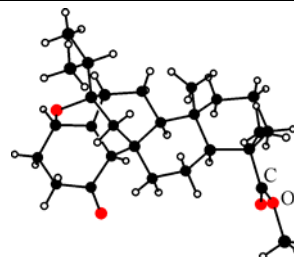


Смирнова И.Е., Третьякова Е.В., Казакова О.Б.,  
Старикова З.А., Федянин И. В.

391

**Молекулярная структура метил-18R-13-изопропил-10а,7-диметил-4-оксо-1-оксагексацикло  $[\text{12.4.0.0}^{5a,4a}.0^{13,12}.0^{1,1a}.0^{10a,6a}]$ хеникозан-7-карбоксилата**

**Ключевые слова:** метил-18R-13-изопропил-10а,7-диметил-4-оксо-1-оксагексацикло  $[\text{12.4.0.0}^{5a,4a}.0^{13,12}.0^{1,1a}.0^{10a,6a}]$ хеникозан-7-карбоксилат, синтез, рентгеноструктурный анализ

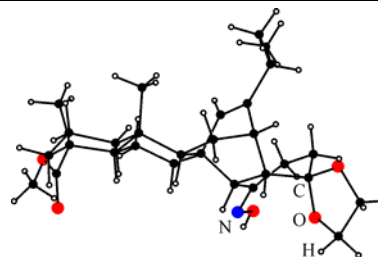


Смирнова И.Е., Третьякова Е.В., Казакова О.Б., Старикова З.А.

393

**Молекулярная структура метил-4-*анти*-гидроксиимино-1-диоксолано-13-изопропил-10а,7-диметилпентацiclo[106.8.5.0<sup>46,106</sup>.0<sup>6а,10а</sup>.0<sup>1а,4а</sup>]икоза-14-ен-7-карбоксилата**

**Ключевые слова:** метил-4-*анти*-гидроксиимино-1-диоксолано-13-изопропил-10а,7-диметилпентацiclo[106.8.5.0<sup>46,106</sup>.0<sup>6а,10а</sup>.0<sup>1а,4а</sup>]икоза-14-ен-7-карбоксилат, синтез, рентгеноструктурный анализ

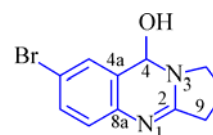


Окманов Р.Я., Тожибоев А.Г., Тургунов К.К., Ташходжаев Б., Мукаррамов Н.И., Шахидояттов Х.М.

396

**Новая полиморфная модификация кристаллической структуры бромпеганола**

**Ключевые слова:** алкалоиды, хиназолины, полиморфизм, рентгеноструктурный анализ

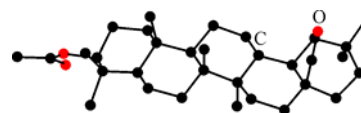


Медведева Н.И., Флехтер О.Б., Корлюков А.А.

399

**Молекулярная структура 23,24,25,26,27,29,30-гептаметил-19,28-оксагексацикло[15.13.18.0<sup>17,18</sup>.0<sup>13,14</sup>.0<sup>8,9</sup>.0<sup>5,10</sup>]тетракос-3-ил ацетата**

**Ключевые слова:** 23,24,25,26,27,29,30-гептаметил-19,28-оксагексацикло[15.13.18.0<sup>17,18</sup>.0<sup>13,14</sup>.0<sup>8,9</sup>.0<sup>5,10</sup>]тетракос-3-ил ацетат, рентгеноструктурный анализ



Содержание следующего номера — в конце журнала