

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 53

Март – апрель

№ 2, 2012

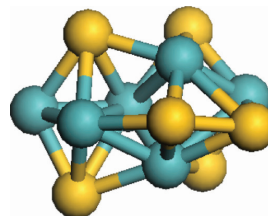
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Рыжков М.В., Дэлли Б.

**Пространственная структура и стабильность  
наночастиц  $\text{Mo}_n\text{Si}_m$**

**Ключевые слова:** неэмпирический расчет,  
наночастицы  $\text{Mo}_n\text{Si}_m$ ,  
связь стабильности с геометрической структурой

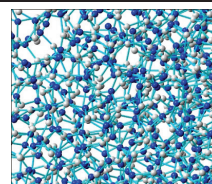


213

Liao N., Xue W., Yang P., Zhang M.

**Tensile deformation induced structural rearrangement  
in amorphous silicon nitride**

**Keywords:** silicon nitride, molecular dynamics,  
tensile deformation, amorphous structure

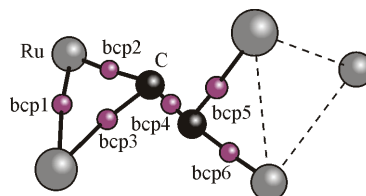


219

May A., Ouddai N.

**Topological analysis of the bonding  
in  $[\text{Ru}_5(\mu_4\text{-C}_2)\text{L}(\text{CO})_{13}]$  and  $[\text{Ru}_4(\mu_4\text{-C}_2)\text{L}(\text{CO})_{10}]$  complexes  
( $\text{L}=(\mu\text{-SMe})(\mu\text{-PPh}_2)_2$ )**

**Keywords:** topological analysis, atoms in molecules (AIM),  
electron localization function (ELF), metal acetylide

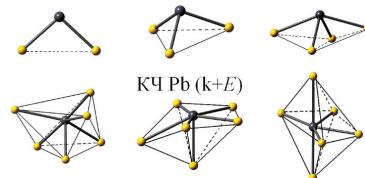


224

Войт Е.И., Давидович Р.Л.

**Квантово-химическое исследование тиокомплексов  
свинца(II) с моно- и бидентатными лигандами**

**Ключевые слова:** квантовая химия, DFT, тиокомплексы,  
свинец(II), лиганды, неподеленная электронная пара

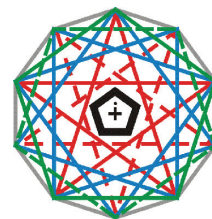


231

Береговая И.В., Щеголева Л.Н.

**Поверхность потенциальной энергии  
и константы протонного СТВ катион-радикала  
циклопентана**

**Ключевые слова:** квантово-химические расчеты,  
поверхность потенциальной энергии, псевдотворщение,  
катион-радикалы, константы СТВ

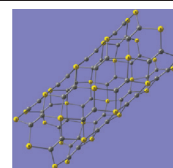


242

Ващенко А.В., Кузнецова С.Ю., Сомина Л.А.

# **Квантово-химическая оценка макроциклизации 1,4-дитиина**

**Ключевые слова:** 1,4-дитиин, B3LYP, макроциклизация, поликонденсация, нанотрубка

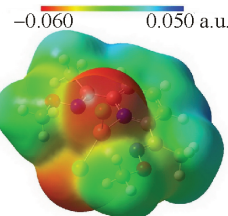


249

Özdemir N., Dayan O., Dinçer M., Çetinkaya B.

# **Copper(II) and cobalt(II) complexes of 2,6-diacetylpyridine bis(*O*-methyloxime): a theoretical investigation**

**Keywords:** 2,6-diacetylpyridine bis(*O*-methyloxime), IR spectroscopy, *ab initio* calculations, molecular electrostatic potential, frontier molecular orbitals

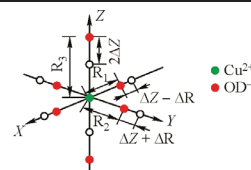


253

Zhang H.M., Wu S.Y., Zhang Z.H., Xu P.

# **Investigations on the local structure and spin Hamiltonian parameters for the orthorhombic Cu<sup>2+</sup> center in Ca(OD)<sub>2</sub>**

**Keywords:** electron paramagnetic resonance, crystal- and ligand-field theory, Cu<sup>2+</sup>, Ca(OD)<sub>2</sub>

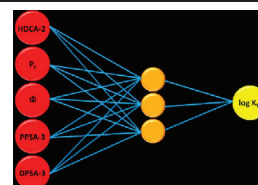


262

Dashtbozorgi Z., Golmohammadi H.

# **Prediction of gas to water partition coefficient of some organic compounds using theoretically derived molecular descriptors**

**Keywords:** artificial neural network, gas to water partition coefficient, genetic algorithm, partial least squares



268

## **ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Павлючко А.И., Васильев Е.В., Грибов Л.А.

# **О точности *ab initio* расчетов абсолютных интенсивностей полос в ИК спектрах молекул**

**Ключевые слова:** органические соединения, ИК спектры, абсолютные интенсивности, квантово-химические расчеты

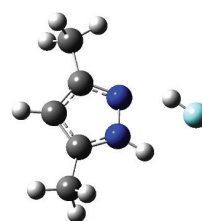
$$\frac{\int D_{\text{vib}}(\nu) d\nu}{d \int D_{\text{vib}}(\nu) d\nu} = \begin{cases} >1 \\ 1 \\ <1 \end{cases} ?$$

278

Бурейко С.Ф., Кучеров С.Ю.

# **Структура аддуктов межмолекулярного взаимодействия диметилпиразола и дифенилформамидина с галоидоводородами в растворе**

**Ключевые слова:** структура молекулярных и ионных комплексов, водородная связь, переход протона, растворы, ИК спектроскопия, квантово-химические расчеты

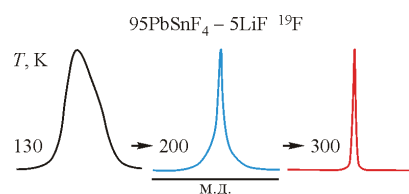


285

Кавун В.Я., Рябов А.И., Телин И.А., Подгорбунский А.Б., Синебрюхов С.Л., Гнеденков С.В., Гончарук В.К.

# **Ионная подвижность и проводимость в PbSnF<sub>4</sub>, допированном фторидом щелочного металла, по данным ЯМР и импедансной спектроскопии**

**Ключевые слова:** кристаллические образцы в системах PbSnF<sub>4</sub>-MF, спектры ЯМР (<sup>19</sup>F, <sup>7</sup>Li), ионная подвижность, ионная проводимость

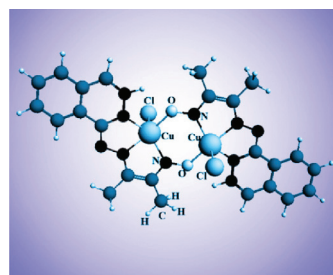


292

Брылёва М.А., Кравцова А.Н., Щербаков И.Н.,  
Левченков С.И., Попов Л.Д., Коган В.А., Туполова Ю.П.,  
Зубавичус Я.В., Тригуб А.Л., Солдатов А.В.

**Анализ атомной структуры комплексов меди(II)  
с 1'-фталазинилгидразоном диацетилмонооксима  
методами рентгеновской спектроскопии поглощения  
и магнетохимии**

**Ключевые слова:** комплексы меди(II), атомная структура,  
электронная структура, XANES спектроскопия, магнетохимия



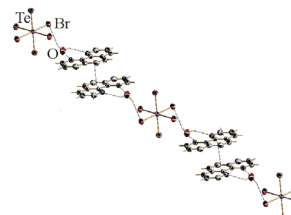
297

## СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

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

**Кристаллическая структура, люминесцентные  
и термохромные свойства гексабромотеллулата(IV)  
бис-1,10-фенантролина дигидрата**

**Ключевые слова:** теллур(IV), комплексные соединения,  
кристаллическая структура, люминесценция, термохромизм

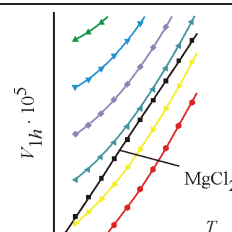


307

Устинов А.Н., Афанасьев В.Н.

**Независимость чисел сольватации электролитов  
от температуры до границы полной сольватации,  
определяемых методом адиабатического сжатия**

**Ключевые слова:** изотермическая сжимаемость,  
адиабатическая сжимаемость, сжимаемость гидратных комплексов,  
числа сольватации

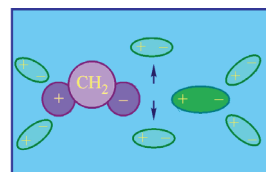


314

Королёв В.П.

**Обезвоживание глицина в смешанных растворителях**

**Ключевые слова:** парциальные объемы, гидратные числа,  
водные растворы, глицин, *трет*-бутиловый спирт, этиленгликоль,  
глицерин, мочевины



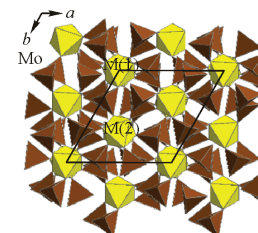
324

## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Гонгорова Л.И., Базаров Б.Г., Чимитова О.Д., Аншиц А.Г.,  
Верецагина Т.А., Клевцова Р.Ф., Глинская Л.А.,  
Базарова Ж.Г.

**Кристаллическая структура нового тройного молибдата  
Rb<sub>5</sub>CeZr(MoO<sub>4</sub>)<sub>6</sub>**

**Ключевые слова:** рубидий, церий, цирконий, молибдат, синтез,  
кристаллическая структура

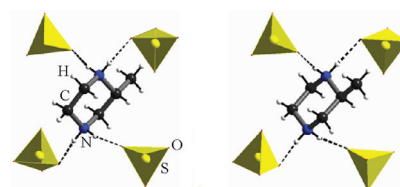


330

Hajlaoui F., Naïli H., Yahyaoui S., Mhiri T., Bataille T.

**Crystal structures of two enantiomorphous  
2-methylpiperazinediium hexaaquacopper sulfates  
[(R or S)-C<sub>5</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>][Cu(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>](SO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>**

**Keywords:** non-centrosymmetric, three-dimensional structure,  
hydrogen bonds, open framework structures

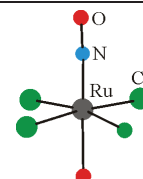


335

Емельянов В.А., Байдина И.А., Громилов С.А.

**Кристаллическая структура нитрозотрихлорокомплекса  
рутения(II) Na[RuNOCl<sub>3</sub>(H<sub>2</sub>O)OH]·2H<sub>2</sub>O**

**Ключевые слова:** рутений, нитрозокомплексы, хлорокомплексы,  
рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия



342