

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 56

Май-июнь

№ 3, 2015

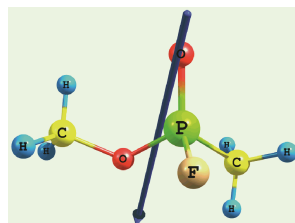
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Лебедев А.В.

**Квантовохимический расчет строения,
дипольного момента и поляризуемости
О-метилметилфторфосфоната в газовой фазе**

Ключевые слова: О-метилметилфторфосфонат,
квантовохимический расчет, геометрические параметры,
конформер, дипольный момент, поляризуемость

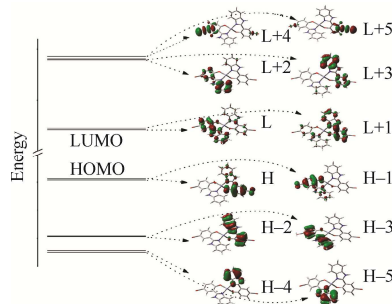


429

Tong Y.-P., Jin Z., Lin Y.-W.

**Electronic structure, charge transfer character and
spectroscopic property
of electroluminescent/photoluminescent [ZnL₂]
(HL = 2-(1H-benzo[D]imidazol-2-yl)-4-bromophenol)
studied by density functional theory**

Keywords: Zn(II) chelate complex,
2-(1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-4-bromophenol,
theoretical calculation; electronic structure, LLCT, TDDFT,
DOS/PDOS



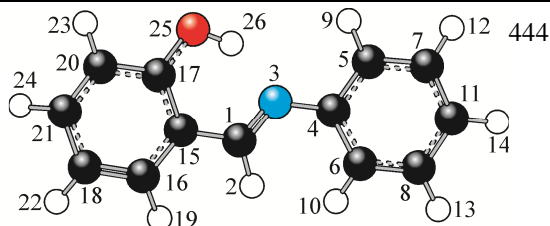
436

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Elroby S.A., Aboud S., Aziz S.G., Hilal R.

**Substituent effects on absorption and vibrational
spectra of some 2-hydroxy Schiff bases: DFT/TDDFT,
natural bond orbital and experimental study**

Keywords: electronic spectra, vibrational spectra, DFT/TDDFT,
solvent and substituent effects. NBO analysis,
2-hydroxy Schiff bases

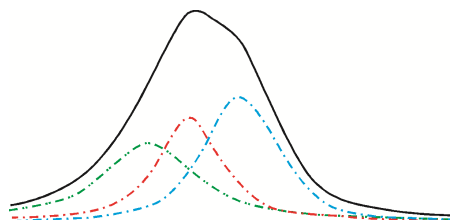


444

Гафуров М.М., Рабаданов К.Ш., Атаев М.Б.,
Алиев А.Р., Амиров А.М., Кубатаев З.Ю.

**Спектры комбинационного рассеяния и строение
систем (1 - x)RbNO₃ + xAl₂O₃**

Ключевые слова: нитрат рубидия, оксид алюминия,
спектры комбинационного рассеяния,
автокорреляционная функция

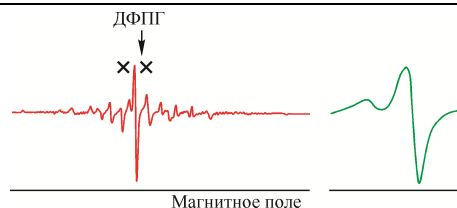


457

Гилинская Л.Г., Борисова Л.С., Костырева Е.А.

Структурные разновидности хелатов VO²⁺ в органическом веществе нефтей и битумоидов по спектрам ЭПР

Ключевые слова: комплексы ванадил-иона, спектры ЭПР, симуляция наложенных спектров

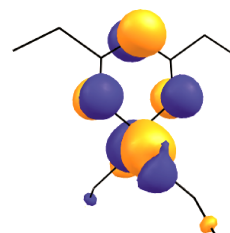


466

Тихонов С.А., Вовна В.И.

Фотоэлектронные спектры и электронная структура имидоиламидинатов дипропила бора

Ключевые слова: электронная структура, фотоэлектронная спектроскопия, теория функционала плотности, теорема Купманса, азотосодержащие комплексы бора, имидоиламидинаты, β-дикетонаты



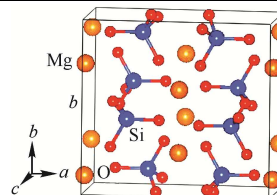
476

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Чибисов А.Н.

Компьютерное моделирование образования точечных дефектов в керамических материалах MgSiO₃

Ключевые слова: *ab initio* расчеты, образование дефектов, структурные свойства

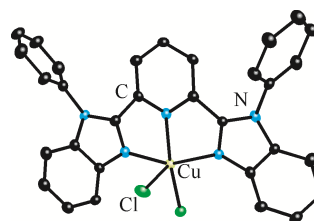


484

Huang Q.-W., Liu S.-G., Li G.B., Wang S.-X., Su W.-Y., Liang D.-M., Mao S.-Q.

Crystal structure and antitumor activities of dichloride 2, 6-bis(1-phenylbenzimidazol-2-yl)pyridine copper(II) complex

Keywords: benzimidazole, copper complex, crystal structure, antitumor activities

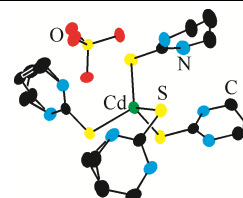


487

Mahmood R., Hussain S.G., Isab A.A., Fettouhi M., Fazal A., Ahmad S.

Structural characterization of tetrakis (1,3-diazinane-2-thione)cadmium(II) sulfate

Keywords: cadmium sulfate, 1,3-diazinane-2-thione, crystal structure

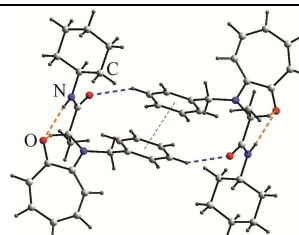


492

Ramazani A., Joo S.W., Amini I., Ślepokura K., Lis T., Souldozi A.

Crystal structure of 2-[benzyl-(7-oxo-cyclohepta-1,3,5-trienyl)-amino]-N-cyclohexylpropanamide

Keywords: single crystal X-ray structure, smiles rearrangement, Ugi-type coupling, tropolone, cyclohexylisocyanide, benzyl amine, acetaldehyde, Ugi-Smiles-type reaction

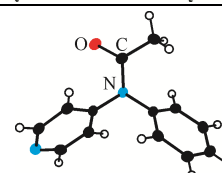


498

Umezono S., Okuno T.

Crystal structure and DFT study of N-phenyl-N-(pyridin-4-yl)acetamide

Keywords: crystal structure, DFT calculation, acetamide, pyridine, hydrogen bond



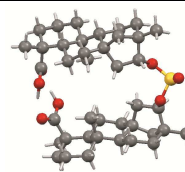
502

Добрынин А.Б., Андреева О.В., Литвинов И.А.

505

**Молекулярная и кристаллическая структура
сульфита изостевиола**

Ключевые слова: изостевиол, сульфит,
рентгеноструктурный анализ, водородная связь



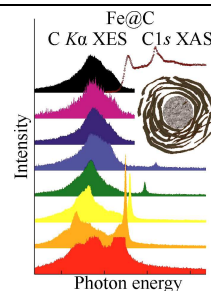
**МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ
«РЕНТГЕНОВСКИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ
И ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ» (РЭСХС-21)
НОВОСИБИРСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР,
7-11 ОКТЯБРЯ 2013 ГОДА**

Галахов В.Р., Шамин С.Н., Уймин М.А., Ермаков А.Е.,
Бухвалов Д.В.

508

**Рентгеновская спектроскопия капсулированных
в углерод наночастиц железа**

Ключевые слова: рентгеновские абсорбционные спектры,
фотоэлектронные спектры,
резонансное неупругое рентгеновское рассеяние,
капсулированные в углерод наночастицы,
дефекты Стоуна–Уэлса

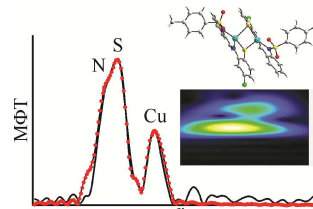


Максимова А.В., Власенко В.Г., Козинкин А.В.,
Куликова О.В., Подсухина С.С., Уваров В.Н.

516

**Электронная структура комплексов кобальта
[Co(CO)₄GeCl₃] и [Co[Ge(C₆H₅)₃](CO)₃][P(C₆H₅)₃]**

Ключевые слова: рентгеновские спектры эмиссии,
метод теории функционала плотности, электронное строение,
гетероядерные карбонильные комплексы кобальта

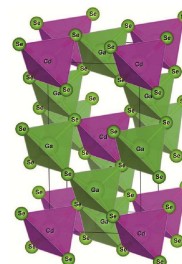


Лаврентьев А.А., Габрельян Б.В., Шкумат П.Н.,
Никифоров И.Я., Парасюк О.В., Хижун О.Ю.

523

**Электронная структура дефектного халькопирита
CdGa₂Se₄ по данным теоретического расчета
«из первых принципов» и рентгеноспектральных
исследований**

Ключевые слова: электронная структура,
дефектный халькопирит, плотности электронных состояний,
рентгеновские спектры

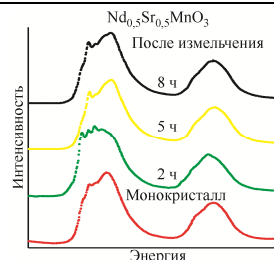


Месилов В.В., Галахов В.Р., Шамин С.Н.,
Гижевский Б.А., Наумов С.В.

527

**Рентгеновские спектры и зарядовые состояния
катионов в наноструктурированных манганитах
La_{0.5}Ca_{0.5}MnO₃ и Nd_{0.5}Sr_{0.5}MnO₃**

Ключевые слова: рентгеновская спектроскопия,
наноструктурированные манганиты, разmol в вибромельнице,
расчеты атомных мультиплетов



Бурлов А.С., Власенко В.Г., Машенко С.А.,
Гарновский Д.А., Ураев А.И., Левченков С.И.,
Зубавичус Я.В., Лифинцева Т.В.

535

**Локальное атомное строение комплексов меди
с 2-тозиламинобензаль-2'-амино-5'-хлортиофенолом**

Ключевые слова: азометины, металлохелаты, XANES,
EXAFS, вейвлет-преобразование,
локальная атомная структура

