

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 55

Май-июнь

№ 3, 2014

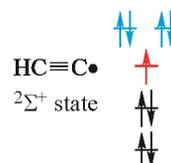
СО Д Е Р Ж А Н И Е

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Лузанов А.В.

Полуканонические МО в методе варьируемой открытой оболочки и в родственных подходах

Ключевые слова: ограниченный метод Хартри-Фока, теория Рутана, канонические МО, теорема Купманса, ауфбау-принцип

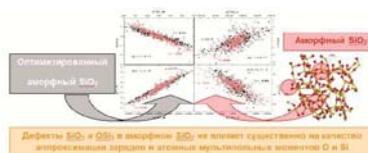


419

Ларин А.В.

Точечные заряды и атомные мультипольные моменты Si и O в аморфном SiO₂ для оценки электростатического поля и потенциала

Ключевые слова: аморфный, оксид, атомный мультипольный момент, электростатический потенциал

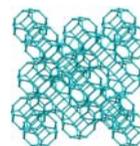


428

Беленков Е.А., Грешняков В.А.

Новые полиморфные разновидности алмаза

Ключевые слова: моделирование, алмаз, полиморфы алмаза, энергии сублимации, объемные модули, электронные плотности состояний, рентгенограммы

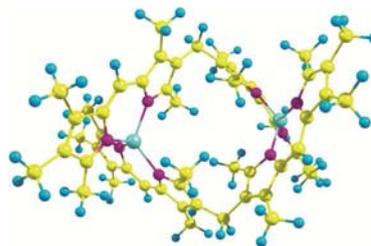


439

Ксенофонтов А.А., Гусева Г.Б., Антина Е.В.,
Вьюгин А.И.

Молекулярная структура бис(дипирролилметенатов) d-металлов по данным квантово-химических расчетов методом РМ6

Ключевые слова: бис(дипирролилметенаты), геликаты, квантово-химические расчеты, метод РМ6, молекулярная структура, реакционная способность



448

Нилов Д.Ю., Смоляков В.М.

Корреляции «свойство алкилсилана – коэффициенты полинома матрицы смежности молекулярного графа»

Ключевые слова: молекулярный граф, матрица смежности A' неоднородного молекулярного графа (НМГ), собственные значения, коэффициенты характеристического полинома (КХП), аддитивная схема, алкилсиланы, энтальпия образования

$$P_{\text{НМГ}} = a_0x_0 + a_1x_1 + a_3x_3 + \\ + a_4x_4 + a_5x_5 + a_6x_6 + a_7x_7 + \\ + a_8x_8 + a_9x_9 + a_{10}x_{10} + \dots + a_{12}x_{12}.$$

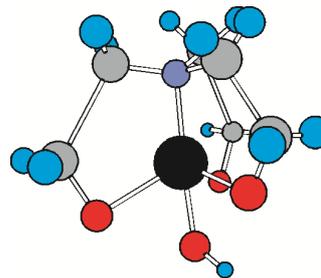
454

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Игнатъев И.С., Воронков М.Г., Кочина Т.А.,
Самохин Г.С., Беляева В.В., Хайкин С.Я.

**Колебательные спектры и электронная структура
1-герматранола, 1,1-квазигерматрандиола
и 1,1,1-гипогерматрантриола**
(HO)_{4-n}Ge(OCH₂CH₂)_nNR_{3-n} (R = H, Me; n = 1–3)

Ключевые слова: 1-герматранол, 1,1-квазигерматрандиол,
1,1,1-гипогерматрантриол, молекулярная структура,
колебательные спектры

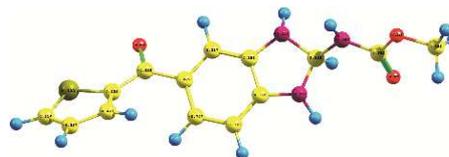


462

Alver Ö., Parlak C., Kaya M.F., Dikmen G., Genç L.

**Vibrational spectroscopic investigation
of methyl(5-[2-thienylcarbonyl]-1H-benzimidazol-2-yl)-
A comparative density functional study**

Keywords: nocodazole, vibrational spectra, TED, DFT, SQM

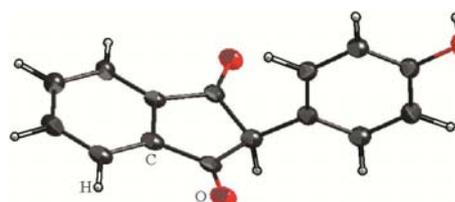


469

Marinov M., Stoyanov N., Ugrinov A., Angelova S.,
Wawer I., Pisklak M., Enchev V.

**Solid state structures of 2-(4-hydroxyphenyl)-
substituted phenalene-1,3-dione and indan-1,3-dione**

Keywords: 2-(4-hydroxyphenyl)-phenalene-1,3-dione,
2-(4-hydroxyphenyl)-indan-1,3-dione, solid-state NMR, X-ray,
quantum-chemical calculations

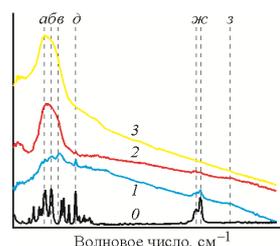


476

Ермакова Е.Н., Кеслер В.Г., Румянцев Ю.М.,
Косинова М.Л.

**Исследование типов химических связей в пленках,
полученных плазмохимическим разложением паров
бис(триметилсилил)этиламина**

Ключевые слова: карбонитрид кремния, тонкие пленки,
PECVD, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия,
ИК-спектроскопия



486

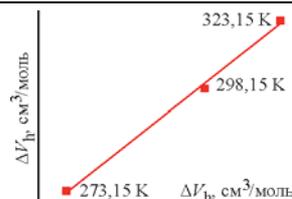
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Королёв В.П.

**Объемные свойства и гидратные числа хлорида
и нитрата аммония в растворе.**

Структурно – термодинамический анализ

Ключевые слова: кажущиеся и парциальные объемы,
гидратные числа, хлорид аммония, нитрат аммония



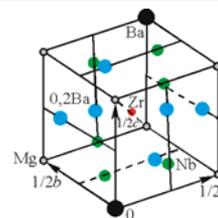
493

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

**Феномен когерентной сборки в типовых структурах
гетерополиниобатов**

Ключевые слова: кристаллографический анализ,
когерентная сборка структуры (coherence-assembly),
катионный каркас, строительные блоки, полиоксониобаты,
менезит (menezesite), аспедамит (aspedamite)



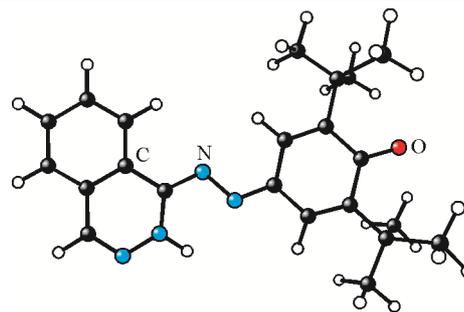
500

Гольдберг А.Е., Кискин М.А., Попов Л.Д.,
Левченко С.И., Щербаков И.Н., Туполова Ю.П.,
Коган В.А.

505

**Кристаллическая структура трехъядерного
комплекса цинка(II) с 1'-фталазинилгидразоном
2,6-ди-*трет*-бутил-*n*-хинона**

Ключевые слова: гидразоны, таутомерия,
1-гидразинофталазин, комплекс цинка(II),
рентгеноструктурный анализ,
теория функционала плотности

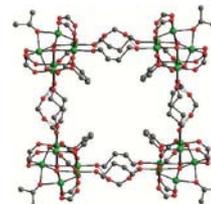


Романенко Г.В., Кузнецова О.В., Фурсова Е.Ю.,
Овчаренко В.И.

511

**Структура многоядерных комплексов пивалата
Ni(II) с бутандиолом**

Ключевые слова: никель(II), полиядерные соединения,
пивалаты, бутандиол, рентгеноструктурный анализ

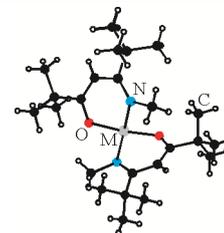


Стабников П.А., Доровских С.И., Первухина Н.В.,
Булушева Л.Г., Романенко Г.В.

517

**Кристаллические и молекулярные структуры
бис(2,2,6,6-тетраметил-3-метиламиногептан-5-оната)
меди(II) и никеля(II)**

Ключевые слова: хелаты меди(II) и никеля(II),
кристаллическая структура, стерические эффекты

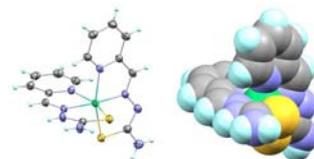


Graiff C., Canossa S., Predieri G.

522

**Coordinative properties of the pyridine-2-carbaldehyde
thiosemicarbazone ligand towards Ni(II)**

Keywords: nickel, thiosemicarbazone complexes,
crystal structure

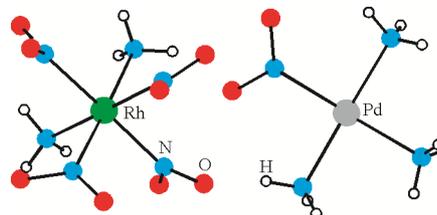


Храненко С.П., Куратьева Н.В., Громилов С.А.

527

**Кристаллические структуры
[Pd(NH₃)₃(NO₂)] [Rh(NH₃)₂(NO₂)₄]
и [PdEn₂] [Rh(NH₃)(NO₂)₅] · 0,75H₂O**

Ключевые слова: палладий, родий, этилендиамин, нитрит,
двойная комплексная соль, рентгеноструктурный анализ,
кристаллохимия

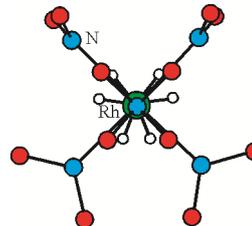


Байдина И.А., Смоленцев А.И., Беляев А.В.

532

**Структурное исследование комплексных солей
[Rh(NH₃)₅(NO₂)](NO₃)₂ · H₂O,
[Rh(NH₃)₅(NO₂)] [Pd(NO₂)₄] и K₂[Rh(NH₃)(NO₂)₅] · H₂O**

Ключевые слова: комплексы, двойные комплексные соли,
родий, палладий, рентгеноструктурный анализ, ЯМР ¹⁴N,
нитроаммины

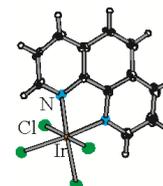


Адонин С.А., Абрамов П.А., Усков С.И.

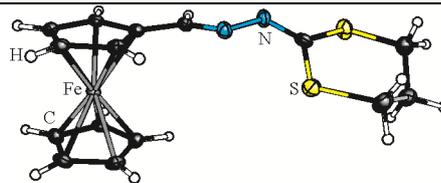
538

**Кристаллическая структура комплексов Ir(III)
с 1,10-фенантролином K[Ir(phen)Cl₄] · H₂O и
(Me₄N)[Ir(phen)Cl₄]**

Ключевые слова: иридий, фенантролин,
кристаллическая структура

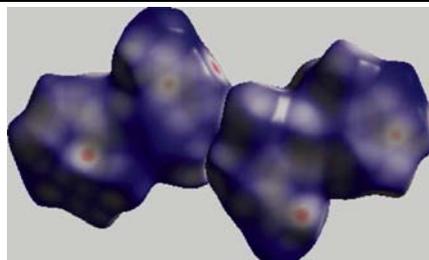


Wu P.

Crystal structures of 2-ferrocenylmethylidenehydrazono-1,3-dithiane and 2-ferrocenylmethylidenehydrazono-1,3-dithiepane**Keywords:** X-ray diffraction, dithiane, dithiepane, ferrocenyl

543

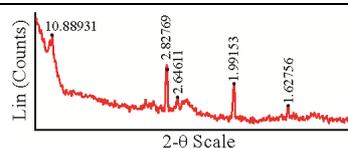
Wawrzycka-Gorczyca I.

N–H···S hydrogen bonding motifs in crystalline solids of 1,2,4-triazole-5-thiones – application of the Cambridge Structural Database. Part 1. R²₂(8) ring motif**Keywords:** N–H···S hydrogen bond, R²₂(8) ring motif, 1,2,4-triazole-5-thiones, dimer, Hirshfeld surface, fingerprint plot, CSD, Cambridge Structural Database

548

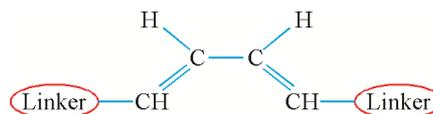
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Mishra D., Arora R., Lahiri S., Amritphale S.S., Chandra N.

A novel process for making alkaline iron oxide nano particles by solvo thermal approach**Keywords:** Alkaline iron oxide, nano particles, solvo thermal

553

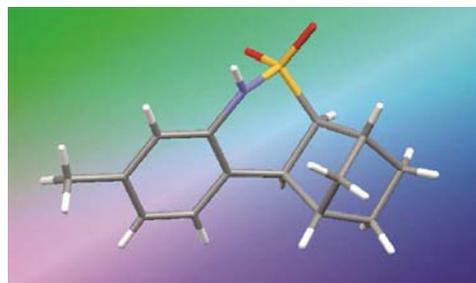
Chamani Z., Bayat Z., Mahdizadeh S.J.

Theoretical study of electronic conductance through organic nanowires**Keywords:** *cis*- and *trans*-butadiene, molecular wire, HOMO–LUMO gap, electric field, gold cluster

557

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

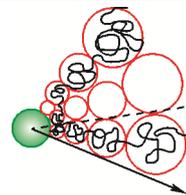
Миронова Е.В., Лодочникова О.А., Криволапов Д.Б., Веремейчик Я.В., Племенков В.В., Литвинов И.А.

Кристаллическая структура новых циклических сульфин- и сульфонамидов тиазинового ряда: конформация, внутри- и межмолекулярные взаимодействия**Ключевые слова:** сульфинамиды, сульфонамиды, кристаллическая и молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ, водородные связи, DFT-расчеты, топологический анализ

566

ОБЗОРЫ

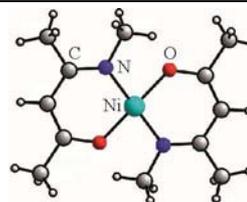
Куцевол Н.В., Безуглая Т.Н., Безуглый Н.Ю.

Особенности внутримолекулярной структуры разветвленных полимерных систем в растворе**Ключевые слова:** разветвленные полимеры, молекулярная архитектура, дендримеры, звездообразные сополимеры

575

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Стабников П.А., Кошеева О.С., Первухина Н.В., Жаркова Г.И.

Структура бис(2-метилимино-3-пентен-4-онато) никеля(II). Свойства кетоиминатов никеля**Ключевые слова:** бисхелат никеля(II), кристаллическая структура, летучесть

587