

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 51

Май – июнь

№ 3, 2010

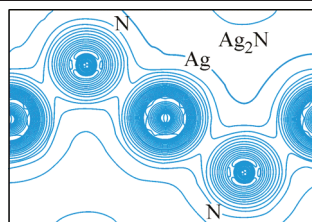
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Гордиенко А.Б., Журавлев Ю.Н.

Расчеты из первых принципов структурных, упругих и электронных свойств нитридов серебра

Ключевые слова: нитриды серебра, кристаллическая структура, упругие постоянные, поликристаллы, модули упругости, зонная структура, плотность состояний, Малликовская заселенность, химическая связь

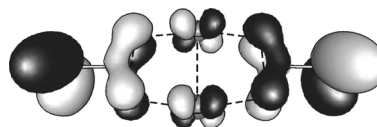


425

Бажанова З.Г., Тарасов Ю.И., Ковтун Д.М., Болталин А.И., Новосадов Б.К., Кочиков И.В.

Квантово-химическое исследование структуры фторированных мономеров и димеров ацетатов Ag(I)

Ключевые слова: ацетаты серебра, квантово-химические расчеты, сканирование поверхности потенциальной энергии

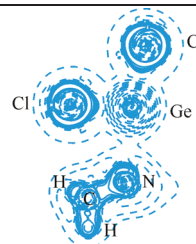


433

Алексеев Н.В., Чернышев Е.А.

Квантово-химическое исследование электронной структуры замещенных гермоканы

Ключевые слова: гермоканы, квантовая химия, метод AIM, топологический анализ

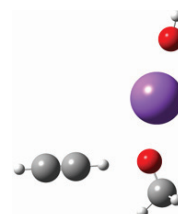


442

Ларионова Е.Ю., Витковская Н.М., Кобычев В.Б., Трофимов Б.А.

Неэмпирическое квантово-химическое исследование механизмов реакций в системе C₂H₂/CH₃OH/КОН/ДМСО

Ключевые слова: виниловые эфиры, винилирование, метоксид-ион, механизм, гидроксид калия, диметилсульфоксид, квантово-химические расчеты

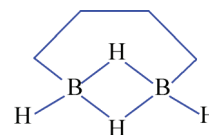


451

Salavati-Niasari M., Mirsattari S.N., Monajjemi M., Hamadani M.

Density functional B3LYP and B3PW91 studies of the properties of four cyclic organodiboranes with tetramethylene fragments

Keywords: density functional theory, alkylborane, boranes, vibrational frequencies, natural bond orbital

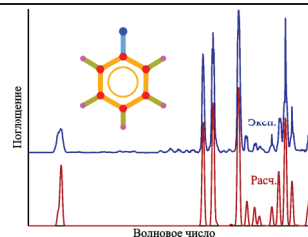


459

Павлючко А.И., Грибов Л.А.

Оценка вклада полос поглощения для обертонов и составных частот в области отпечатков пальцев для алканов, нитрилов, аминов и нитроалканов

Ключевые слова: спектры поглощения, ангармонический расчет, интенсивности обертонов и составных частот, алканы, нитрилы, амины, нитроалканы



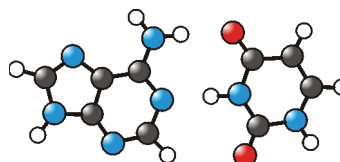
466

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Тен Г.Н., Нечаев В.В., Панкратов А.Н., Баранов В.И.

Влияние водородной связи на структуру и колебательные спектры комплементарных пар оснований нуклеиновых кислот. I. Аденин—урацил

Ключевые слова: аденин, урацил, комплементарная пара, колебательные спектры, водородная связь, интерпретация

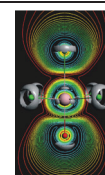


474

Кавун В.Я., Козлова С.Г., Ткаченко И.А., Габуда С.П.

ЯМР и DFT исследование химической связи титанил-иона в пентафторкомплексах $(\text{NH}_4)_3\text{TiOF}_5$ и $\text{Rb}_2\text{KTiOF}_5$

Ключевые слова: ион титанила, комплексные оксофториды титана, спектры ЯМР ^{19}F , анизотропия химического сдвига, ионная подвижность, строение аниона



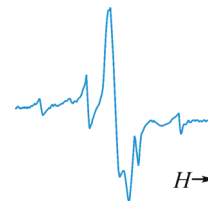
$[\text{TiOF}_5]^{3-}$

483

Гилинская Л.Г.

Органические радикалы в природных апатитах по данным ЭПР: потенциальные генетические и палеоклиматические индикаторы

Ключевые слова: органические радикалы, комплексы ванадил-иона, спектры ЭПР, природные морские апатиты, палеоклимат



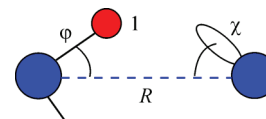
491

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Ефимов Е.Я.

О влиянии геометрии водородного мостика на колебательные спектры воды: трехпараметрический потенциал Н-связи

Ключевые слова: жидкая вода, континуальная модель, водородная связь, флуктуационная теория, геометрия, потенциал, колебательные спектры



Геометрия водородной связи $\text{O}-\text{H}\cdots\text{O}$: R , ϕ и χ

501

Королёв В.П.

Объемные свойства водных растворов аминокислот при температуре от сингулярной до критической

Ключевые слова: аминокислоты, водные растворы, объемные свойства

$$\begin{aligned} &\rightarrow (\partial H / \partial p)_T \\ &\uparrow \\ &V = (\partial G / \partial p)_T \\ &\downarrow \\ &\rightarrow -T(\partial S / \partial p)_T \end{aligned}$$

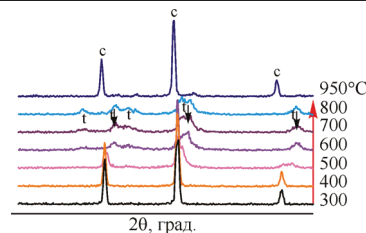
509

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Булавченко О.А., Цыбуля С.В., Цырульников П.Г., Афонасенко Т.Н., Черепанова С.В., Герасимов Е.Ю.

Химические и структурные превращения в алюмомарганцевой шпинели состава $\text{Mn}_{1.5}\text{Al}_{1.5}\text{O}_4$ при нагреве и охлаждении на воздухе

Ключевые слова: высокотемпературная рентгенография, алюмомарганцевые системы, фазовые превращения

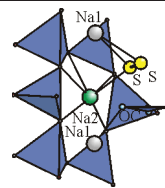


518

Сапожников А.Н.

Особенности кристаллохимии давина из Тултуйского лазуритового месторождения (Прибайкалье)

Ключевые слова: группа канкринита, структура давина, анионные комплексы, сульфатная и сульфидная формы серы

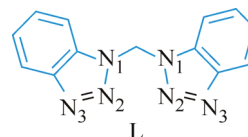


525

Лидер Е.В., Пирязев Д.А., Вировец А.В., Лавренова Л.Г., Смоленцев А.И., Усков Е.М., Потапов А.С., Хлебников А.И.

Структура и люминесцентные свойства комплекса хлорида кадмия(II) с бис(бензотриазол-1-ил)метаном

Ключевые слова: кадмий, бис(бензотриазол-1-ил)метан, комплекс, синтез, кристаллическая и молекулярная структура, люминесцентные свойства

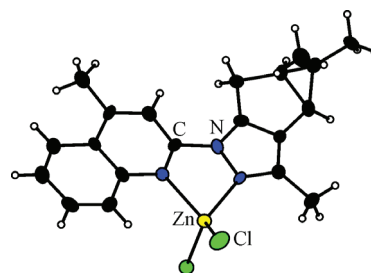


532

Ларионов С.В., Савельева З.А., Клевцова Р.Ф., Глинская Л.А., Усков Е.М., Попов С.А., Ткачев А.В.

Кристаллическая структура и фотолюминесценция оптически-активного комплекса $[ZnL^1Cl_2]$, где L^1 = пиразолилхинолин – производное монотерпеноида (+)-3-карена

Ключевые слова: синтез, комплекс Zn(II), кристаллическая и молекулярная структура, терпеноиды, хиральность, фотолюминесценция

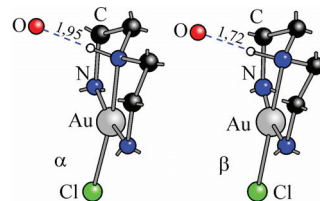


537

Байдина И.А., Макотченко Е.В., Шушарина Е.А., Плюснин П.Е., Смоленцев А.И., Громилов С.А.

Две кристаллические модификации $[Au(dien)Cl](ReO_4)_2$. Синтез, строение и термические свойства

Ключевые слова: золото, рений, комплекс, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ, термический анализ

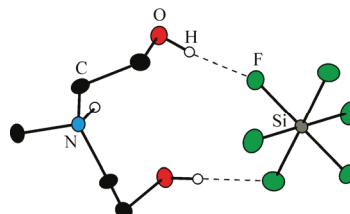


544

Воронков М.Г., Корлюков А.А., Фундаменский В.С., Зельбст Э.А., Антипин М.Ю.

Молекулярная структура гексафторсиликата N-метилбис(2-гидроксиэтил)аммония при 100 и 298 К

Ключевые слова: молекулярная структура, гексафторсиликаты, аммониевые катионы, сокращенные межмолекулярные контакты, PCA, квантово-химические расчеты

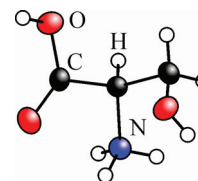


552

Удовенко А.А., Давидович Р.Л., Земнухова Л.А., Ковалева Е.В., Макаренко Н.В.

Кристаллическая структура тетрафтороантимоната(III) DL-сериния

Ключевые слова: серин, фторид сурьмы(III), кристаллическая структура



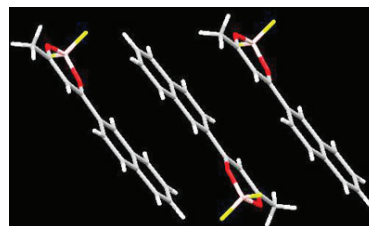
558

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Буквечкий Б.В., Федоренко Е.В., Мирочник А.Г., Белолипец А.Ю.

Кристаллическая структура 1-нафтилбутандионата-1,3 дифторида бора ($C_{10}H_7COCHCOCH_3BF_2$). π -Стекинг-взаимодействие и люминесценция

Ключевые слова: β -дикетонаты дифторида бора, 1-нафтилбутандионата-1,3 дифторида бора, кристаллическая структура, эксимеры, люминесценция

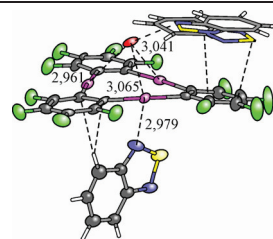


563

Семёнов Н.А., Багрянская И.Ю., Алексеев А.В., Гатилов Ю.В., Лорк Э., Мевс Р., Рошенталер Г.-Ф., Зибарев А.В.

Новые молекулярные комплексы тримера перфтор-орто-фениленртути с гетероциклическими соединениями

Ключевые слова: гетероциклические соединения, полимеркуромакроциклы (антикрауны), молекулярные комплексы, рентгеноструктурный анализ, рентгенофазовый анализ



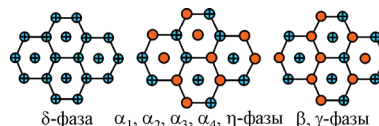
569

ОБЗОРЫ

Стабников П.А., Жаркова Г.И., Комиссарова Л.А., Смоленцев А.И., Борисов С.В.

Упаковка хиральных молекул трис-ацетилацетонатов металлов

Ключевые слова: хиральные молекулы, трис-ацетилацетонаты металлов, низкотемпературный термохромизм и фазовые превращения



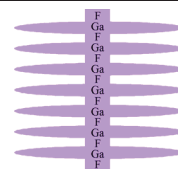
575

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Семёнов С.Георг., Бедрина М.Е.

Структура фталоцианината монофторида галлия(III): квантово-химическое исследование

Ключевые слова: фталоцианинат галлия(III), фторидные мостики, all-ecl.-гептамер, all-ecl.-полимер, структура, B3LYP/6-31G

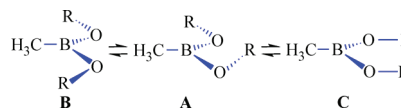


587

Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А., Кузнецов В.В.

Конформационный анализ метилборной кислоты и ее ациклических эфиров

Ключевые слова: метилборная кислота, борный эфир, конформер, квантово-химические расчеты, поверхности потенциальной энергии, барьер внутреннего вращения

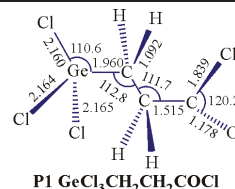


590

Fang Y.Z., Ma W.Y., Zhou J.H., Liu Y.

Theoretical studies on the mechanism of chlorination reaction of trichlorogermyl acrylic acid

Keywords: germyl, crylic acid, density functional theory, potential energy calculations, transition state

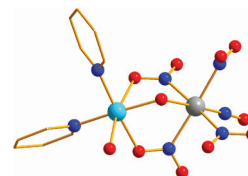


593

Костин Г.А., Бородин А.О., Куратьева Н.В.

Кристаллическая и молекулярная структура гетерометаллических комплексов [RuNO(NO2)4OHnCuPyn]

Ключевые слова: медь, рутений, гетерометаллические комплексы, нитрозокомплексы

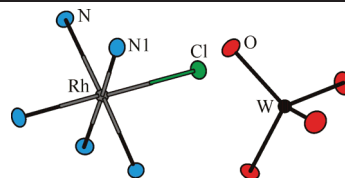


598

Храненко С.П., Шушарина Е.А., Смоленцев А.И., Плюснин П.Е., Громилов С.А.

Кристаллическая структура [Rh(NH3)5Cl](WO4)

Ключевые слова: вольфрам, родий, комплексная соль, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ, термический анализ

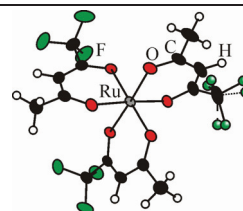


601

Морозова Н.Б., Куратьева Н.В., Жерикова К.В., Черемисина Т.Н.

Кристаллические структуры цис- и транс-трифторацетилацетоната рутения(III)

Ключевые слова: рутений(III), трифторацетилацетон, цис- и транс-, синтез, рентгеноструктурный анализ

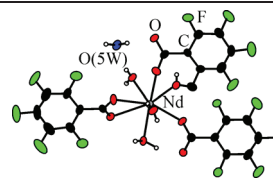


605

Глинская Л.А., Леонова Т.Г., Клевцова Р.Ф., Ларионов С.В.

Кристаллическая и молекулярная структура соединения $[\text{Nd}_2(\text{H}_2\text{O})_8(\text{C}_6\text{F}_5\text{COO})_6] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: неодим(III), биядерный комплекс, кристаллическая и молекулярная структура, пентафторбензоат-ионы

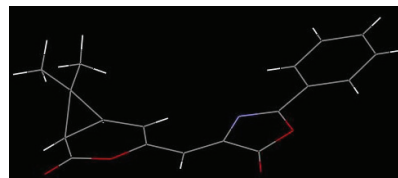


610

Касрадзе В.Г., Салимова Е.В., Галин Ф.З., Куковинец О.С.,
Старикова З.А., Антипин М.Ю.

Молекулярная структура (4Z)-{[(1R,6S)-7,7-диметил-2-оксо-3-оксабицикло[4.1.0]гепт-4-ен-4-ил]метиле́н}-2-фенил-1,3-оксазол-5(4H)-она

Ключевые слова: оксазолон, формилпроизводное еноллактона кетокареновой кислоты, реакция Эрленмейера, рентгеноструктурный анализ



616

Содержание следующего номера — в конце журнала