

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 49

Июль – август

№ 4, 2008

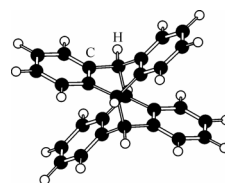
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Тапилин В.М., Булгаков Н.Н., Чупахин А.П., Политов А.А.

**К механизму механохимической димеризации антрацена.
Квантово-химический расчет электронной структуры
антрацена и его димера**

Ключевые слова: антрацен, димер, электронная структура,
механохимия

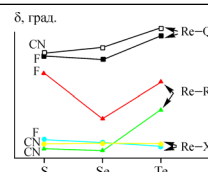


609

Рыжиков М.Р., Козлова С.Г., Габуда С.П.

**Напряженные связи в кластерных комплексах
[Re₄Q₄X₁₂]⁴⁺ (Q=S, Se, Te; X=F, CN⁻) по данным AIM и ELF**

Ключевые слова: AIM, ELF, кластерные комплексы, напряженные
связи

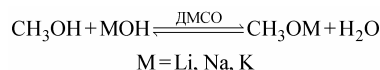


616

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

**Неэмпирическое квантово-химическое исследование
механизма образования метоксид-иона в системах
МОН/ДМСО/СН₃ОН (М=Li, Na, K)**

Ключевые слова: метоксид-ион, винилирование, механизм,
квантово-химические расчеты

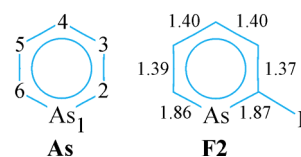


623

Ghiasi R., Monajjemi M., Mokarram E.E., Makkipour P.

**Theoretical studies on the structures, properties, and
aromaticities of fluorinated arsabenzenes**

Keywords: arsabenzene, fluorinated aromatics, aromaticity, NICS,
B3LYP, GIAO, CSGT



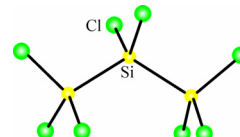
628

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Ежов Ю.С., Комаров С.А., Симоненко Е.П., Севастьянов В.Г.

Особенности строения молекулы октахлортрисилана Si₃Cl₈

Ключевые слова: газовая электронография, квантовая химия,
октахлортрисилан, строение молекул, внутреннее вращение

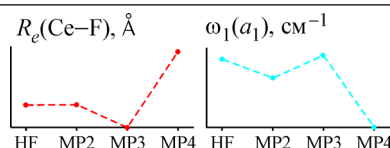


633

Соломоник В.Г., Ячменев А.Ю., Смирнов А.Н.

**Строение, силовые поля и колебательные спектры
молекул тетрагалогенидов церия**

Ключевые слова: тетрагалогениды церия, строение молекул, силовые
постоянные, частоты колебаний, квантово-химические расчеты

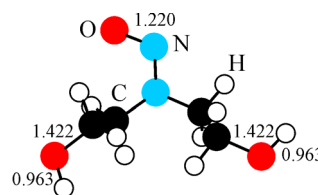


640

Alizadeh R., Najafi N.M.

Theoretical study of structure, stability and infrared spectra of hydrogen bonding complexes pairing N-nitrosodiethanolamine (NDELA) and one to five water molecules

Keywords: hydrogen bond, clusters, nitrosamine, computations, B3LYP

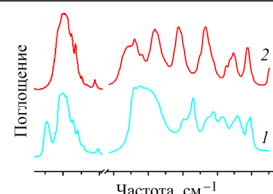


649

Чесалов Ю.А., Чернобай Г.Б., Болдырева Е.В.

Исследование влияния температуры на ИК спектры кристаллических аминокислот, дипептидов и полиаминокислот. II. L-серин и DL-серин

Ключевые слова: серин, оптические изомеры, ИК-спектроскопия, водородные связи

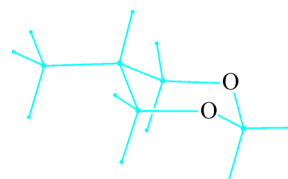


655

Мамлеев А.Х., Галеев Р.В., Гундерова Л.Н., Файзуллин М.Г., Шапкин А.А.

Микроволновый спектр, центробежное возмущение, дипольный момент и конформация 5-метил-1,3-диоксана

Ключевые слова: 5-метил-1,3-диоксан, микроволновый спектр, конформация, дипольный момент

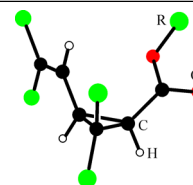


667

Мирзабекова Н.С., Кузьмина Н.Е., Осипова Е.С., Лукашов О.И.

Изучение особенностей пространственного строения синтетических пиретроидов методами ЯМР спектроскопии

Ключевые слова: пиретроиды, пространственные изомеры, ROESY



672

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Киров М.В.

Антисимметрия и стабильность водных систем. III. Конформации гексагональных циклов

Ключевые слова: вода, антисимметрия, асимметрия, водородные связи, конформация, изоморфизм

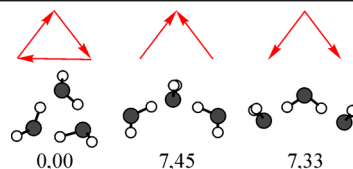


678

Киров М.В.

Антисимметрия и стабильность водных систем. IV. Малые кластеры произвольной формы

Ключевые слова: вода, кластер, антисимметрия, асимметрия, гомохиральность, *ab initio* расчеты

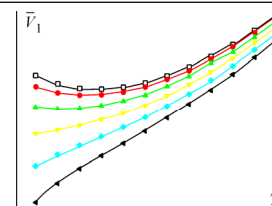


684

Королев В.П.

Объемные свойства и структура водных растворов мочевины при 263-348 К

Ключевые слова: мочевины, водные растворы, объемные свойства, структура

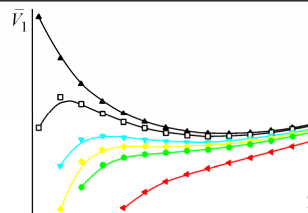


688

Королев В.П.

Свойства и структура водных растворов мочевины вплоть до сингулярной температуры переохлажденной воды. Влияние изотопии

Ключевые слова: мочевины, водные растворы, свойства, структура, изотопия

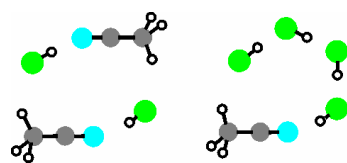


696

Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В.

Состав и строение гетероассоциатов, образующихся в двойной жидкой системе HF–CH₃CN

Ключевые слова: двойная жидкая система, ИК спектр, квантово-химический расчет, водородная связь, гетероассоциаты, фтористый водород, ацетонитрил

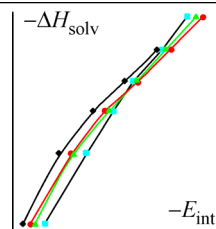


707

Зайчиков А.М., Крестьянинов М.А.

Термодинамические параметры сольватации неэлектролитов в водных растворах амидов карбоновых кислот

Ключевые слова: сольватация неэлектролитов, водные растворы амидов, вклады взаимодействия и реорганизации, структура растворов, межмолекулярные взаимодействия



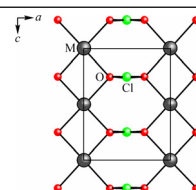
717

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Смоленцев А.И., Наумов Д.Ю.

Кристаллические структуры хлоритов рубидия и цезия

Ключевые слова: кристаллическая структура, хлориты, рубидий, цезий

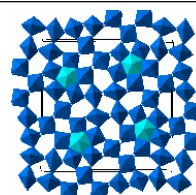


725

Кардаш Т.Ю., Плясова Л.М., Бондарева В.М., Шмаков А.Н.

Уточнение распределения катионов в двойном оксиде Nb—Mo

Ключевые слова: порошковая дифрактометрия, метод Ритвельда, аномальное рассеяние рентгеновских лучей, структура Nb₂Mo₃O₁₄

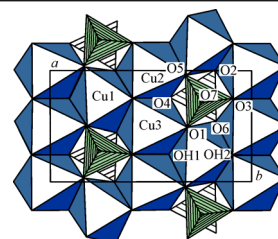


729

Кашаев А.А., Рождественская И.В., Баннова И.И., Сапожников А.Н., Глебова О.Д.

Равновесность, однородность и ацентричность структуры фольбортита Cu₃(OH)₂(V₂O₇) · 2H₂O

Ключевые слова: структура фольбортита, Cu-октаэдры, V-тетраэдры, равновесность структуры, однородность структуры, водородная связь

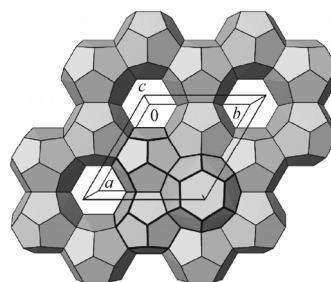


736

Солдатов Д.В., Сувиньска К., Терехова И.С., Манаков А.Ю.

Структурное исследование гидратных соединений полиакрилатных ионообменных смол в тетраизоамиламмониевой форме. Кристаллическая структура клатратного гидрата линейного полиакрилата тетраизоамиламмония

Ключевые слова: гидратация полимеров, бинарная система, соединение включения, полимерный гость, кристаллическая структура

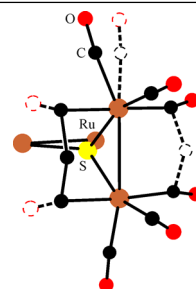


741

Приходько И.Ю., Кирич В.П., Максаков В.А., Вировец А.В., Головин А.В.

Активация связи C—S в мягких условиях: рентгеноструктурное и спектроскопическое исследование кластера Ru₄(μ₄-S)(μ,η³-C₃H₅)₂(CO)₁₂

Ключевые слова: кристаллическая структура, карбонильные кластеры рутения, аллил, активация связей C—S

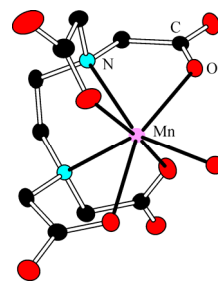


748

Wang X.F., Gao J., Wang J., Zhang Zh.H., Wang Y.F., Chen L.J., Sun W., Zhang X.D.

Crystal structures of seven-coordinate $(\text{NH}_4)_2[\text{Mn}^{\text{II}}(\text{edta})(\text{H}_2\text{O})]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$, $(\text{NH}_4)_2[\text{Mn}^{\text{II}}(\text{cydta})(\text{H}_2\text{O})]\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ and $\text{K}_2[\text{Mn}^{\text{II}}(\text{Hdtpa})]\cdot 3.5\text{H}_2\text{O}$ complexes

Keywords: manganese(II) chelate, ethylenediamine-N,N,N',N'-tetraacetic acid (H_4edta), *trans*-1,2-cyclohexanediamine-N,N,N',N'-tetraacetic acid (H_4cydta), diethylenetriamine-N,N,N',N'',N''-pentaacetic acid (H_5dtpa)

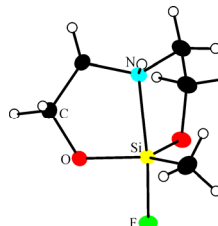


753

Корлюков А.А., Воронков М.Г., Зельбст Э.А., Гребнева Е.А., Трофимова О.М., Антипин М.Ю.

Молекулярная структура 1-метил-1-фторквазисилатрана (2-метил-2-фтор-1,3-диокса-6-аза-2-силациклооктана)

Ключевые слова: 1-метил-1-фторквазисилатран, 2-метил-2-фтор-1,3-диокса-6-аза-2-силациклооктан, молекулярная структура, рентгеновская дифракция



760

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Грибов Л.А., Прокофьева Н.И.

Волновые движения атомов в молекулярных наноструктурах

Ключевые слова: колебания молекул, нестационарные процессы

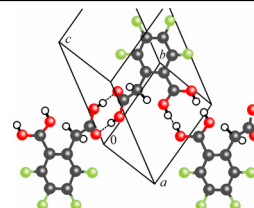
$$\bar{Q}(t=0) = [\langle k | Q | n \rangle] [c_{0k} c_{0n}]$$

764

Рыбалова Т.В., Гатилов Ю.В., Зонов Я.В., Карпов В.М.

Супрамолекулярная архитектура кристаллов полифторированных гомофталевых кислот

Ключевые слова: полифторированные 2-(карбоксиметил)бензойные (гомофталевые) кислоты, кристаллическая структура, водородная связь, взаимодействия C–F...π и H–O...π, супрамолекулярный синтон



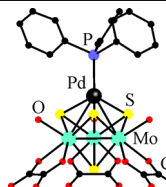
769

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Гущин А.Л., Соколов М.Н., Наумов Д.Ю., Федин В.П.

Кристаллическая структура $\text{K}_2[\text{Mo}_3(\text{PdPPH}_3)\text{S}_4(\text{C}_2\text{O}_4)_3(\text{H}_2\text{O})_3]\cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: молибден, палладий, халькогенидные кластеры, кубановые кластеры, рентгеноструктурный анализ

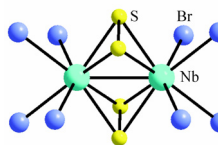


775

Гущин А.Л., Соколов М.Н., Пересыпкина Е.В., Федин В.П.

Кристаллическая структура $\text{Ti}_5\{[\text{Nb}_2\text{S}_4\text{Br}_8]\text{Br}\}$

Ключевые слова: кластер, таллий, ниобий, кристаллическая структура

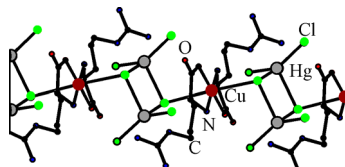


779

Цабель М., Павловский В.И., Позняк А.Л.

Кристаллическая структура гексахлоридмеркурата(II) бис(*l*-аргинин)меди(II) $[\text{Cu}(\text{l-Arg})_2]\text{Hg}_2\text{Cl}_6$

Ключевые слова: кристаллическая структура, комплексы меди(II) с аргинином, хлоромеркурата(II)-ионы

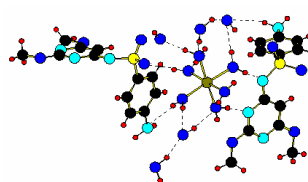


783

Миминошвили Э.Б., Миминошвили К.Э., Беридзе Л.А.

Структура пентагидрата бис(4-*n*-аминобензолсульфамидо-2,6-диметоксиимидина) гексааквамагния(II)

Ключевые слова: комплексные соединения, структурный анализ, сульфадиметоксин, сульфаниламиды

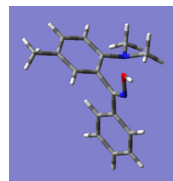


787

Куликов О.В., Миначева Л.Х., Мазепа А.В.

Изучение структуры *син*-оксима 2-*N,N'*-диметиламино-5-метилбензофенона C₁₆H₁₈N₂O

Ключевые слова: *син*-оксим, кристаллическая структура, РСА, водородные связи, масс-фрагментация

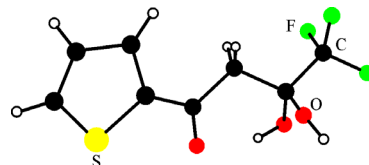


791

Шишкина С.В., Тищенко Ю.В., Караваева Н.Л.,
Погорелова Н.В., Шишкин О.В.

Молекулярная и кристаллическая структура 4,4,4-трифтор-3,3-дигидрокси-1-тиофен-2-ил-бутан-1-оне

Ключевые слова: 4,4,4-трифтор-3,3-дигидрокси-1-тиофен-2-ил-бутан-1-оне, 2-теноилтрифторацетон, конформация, рентгеноструктурный анализ, квантово-химические расчеты

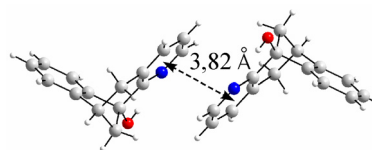


795

Шушарина Е.А., Колтунов К.Ю., Громилов С.А.,
Смоленцев А.И.

Кристаллическая структура 6,11-дигидро-6,11-метано-5H-бензо[5,6]циклопента[1,2-b]пиридинола-11

Ключевые слова: 6,11-дигидро-6,11-метано-5H-бензо[5,6]циклопента[1,2-b]пиридинол-11, рентгеноструктурный анализ

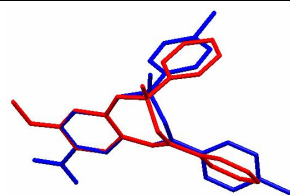


798

Swamy G.Y.S.K., Sridhar B., Ravikumar K., Reddy K.S.,
Reddy V.V.N.

Synthesis and crystal structure of two derivatives of benzodiazepines

Keywords: Crystal structure, X-ray diffraction, benzodiazepines, hydrogen bonding



800

Содержание следующего номера — в конце журнала