

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 49

Март – апрель

№ 2, 2008

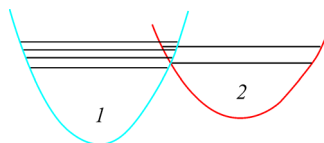
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Грибов Л.А.

**Метод оценки вероятности структурных
изомер-изомерных превращений при наличии большого
числа квазивырожденных уровней энергий
взаимодействующих подсистем**

Ключевые слова: структурные превращения, безызлучательные
переходы, квазирезонирующие уровни энергии

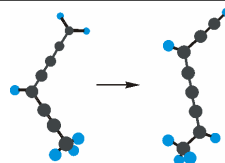


207

Грибов Л.А., Дементьев В.А., Михайлов И.В.

Матрицы смежности и графы химических превращений

Ключевые слова: мониторинг реакций, матрица смежности,
пути реакций

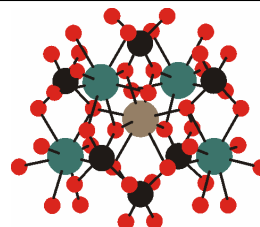


211

Рыжков М.В., Ивановский А.Л., Поротников А.В.,
Щапова Ю.В., Вотяков С.Л.

Электронное строение примесного центра урана в цирконе

Ключевые слова: кластерный расчет, релятивистские эффекты,
химическая связь примеси U с матрицей ZrSiO₄

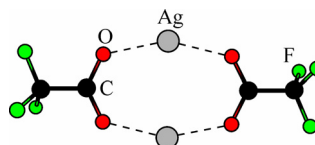


215

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

**Квантовохимическое исследование димера
трифторацетата серебра**

Ключевые слова: трифторацетат серебра, квантовохимические
расчеты, сканирование поверхности потенциальной энергии

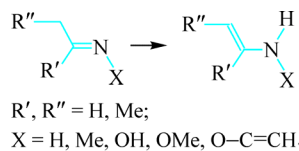


221

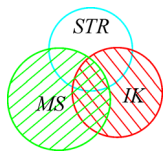
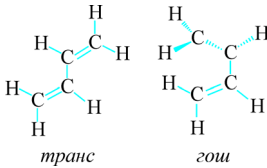
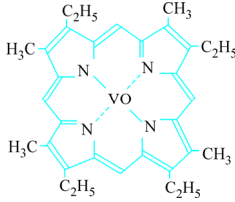
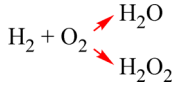
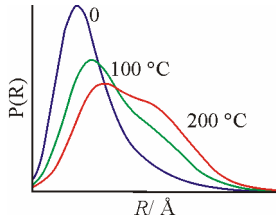
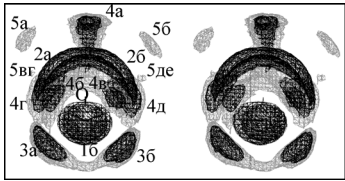
Кобычев В.Б., Витковская Н.М., Трофимов Б.А.

**Теоретическое исследование [1,3]-прототропных
перегруппировок оксимов и их эфиров**

Ключевые слова: имины, енамины, оксими, О-метилоксимы,
О-винилоксимы, гидроксилламины, внутреннее вращение, изомерия,
неэмпирические расчеты



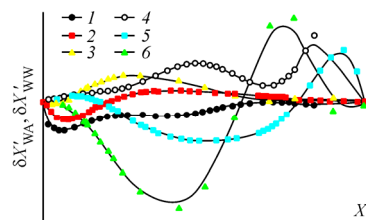
230

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ		
<p>Корнакова Т.А., Богданова Т.Ф., Пиотух-Пелецкий В.Н.</p> <p>Оценка эффективности совместного использования баз данных по ИК и масс-спектрометрии для установления строения неизвестного соединения</p> <p>Ключевые слова: ИК спектроскопия, масс-спектрометрия, базы данных, установление строения</p>		238
<p>Панченко Ю.Н., Де Марэ Ж.Р.</p> <p>Колебательный анализ бута-1,3-диена и его дейтеро- и ¹³C-производных и некоторых их поворотных изомеров</p> <p>Ключевые слова: бута-1,3-диен, дейтеро- и ¹³C-производные, поворотные изомеры, анализ колебательных спектров, квантово-химические силовые поля</p>		249
<p>Гилинская Л.Г.</p> <p>Спектры ЭПР комплексов V(IV) и структура нефтяных порфиринов</p> <p>Ключевые слова: структура порфиринов, комплексы ванадил-иона, спектры ЭПР, фракции природных битумоидов</p>		259
<p>Калинкин А.В., Пашис А.В., Бухтияров В.И.</p> <p>Исследование методом РФЭС взаимодействия H₂ и смесей H₂+O₂ на модельном катализаторе Pt/MoO₃</p> <p>Ключевые слова: катализатор Pt/MoO₃, водород, газовые смеси H₂+O₂, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия</p>		269
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ		
<p>Ефимов Ю.Я.</p> <p>О влиянии геометрии водородного мостика на колебательные спектры воды: простейшие модели потенциала Н-связи</p> <p>Ключевые слова: жидкая вода, континуальная модель, водородная связь, флуктуационная теория, геометрия, потенциал, колебательные спектры</p>		275
<p>Теплухин А.В.</p> <p>Изучение закономерностей ближнего упорядочения водных молекул методом Монте-Карло. I. Парные пространственные корреляции</p> <p>Ключевые слова: вода, структура, компьютерное моделирование, Монте-Карло</p>		284
<p>Кустов А.В., Смирнова Н.Л., Антонова О.А., Крестьянинов М.А., Железняк Н.И., Гречин О.В., Королев В.П.</p> <p>Термодинамические свойства, параметры межчастичных взаимодействий и структура водно-амидных растворов бромидов аммония и тетраалкиламмония</p> <p>Ключевые слова: водные растворы, амиды, структура, гидрофобные эффекты, термодинамические свойства, параметры взаимодействия</p>	$\Delta\Delta_p S^0 = \frac{\Delta_p G_2^0}{RT_2} - \frac{\Delta_p G_1^0}{RT_1} = -\frac{1}{R} \int_{T_1}^{T_2} \frac{\Delta H_p^0}{T^2} dT$ $\Delta\Delta_p S^0 = \Delta_p S_2^0 - \Delta_p S_1^0 = \int_{T_1}^{T_2} \frac{\Delta C_p^0}{T} dT$	292

Зайчиков А.М., Крестьянинов М.А.

Структурно-термодинамические параметры и межмолекулярные взаимодействия в водных растворах амидов муравьиной кислоты

Ключевые слова: внутреннее давление, межмолекулярные взаимодействия, структура водных растворов, амиды муравьиной кислоты



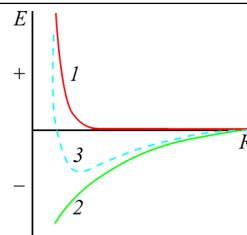
299

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Бацанов С.С.

Зависимость энергий от длин связей в молекулах и кристаллах

Ключевые слова: молекула, кристалл, энергия связи, межатомное расстояние, силовая константа, модуль упругости, наследование структуры

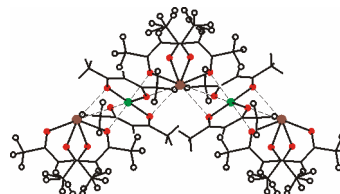


309

Байдина И.А., Крисюк В.В., Пересыпкина Е.В., Стабников П.А.

Структура и свойства гетерокомплексного соединения на основе гексафторацетилацетоната свинца(II) и трифторацетилацетоната меди(II) $\text{Cu}(\text{tfa})_2 \cdot \text{Pb}(\text{hfa})_2$

Ключевые слова: медь, свинец, кристаллохимия β -дикетонатов, гетерометаллические комплексы, термический анализ

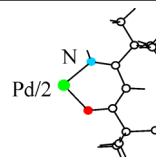


317

Жаркова Г.И., Байдина И.А., Стабников П.А.

Новые летучие комплексы Ni(II) и Pd(II) на основе 2,2,6,6-тетраметил-3-амино-4-гептен-5-она: свойства, структура

Ключевые слова: β -иминокетонаты, никель(II), палладий(II), летучесть, структура

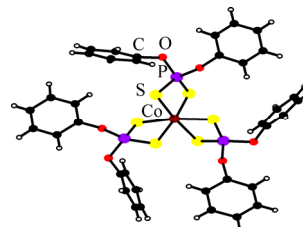


322

Клевцова Р.Ф., Глинская Л.А., Ларионов С.В.

Кристаллические и молекулярные структуры внутрикомплексных соединений $\text{Rh}[(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_2\text{PS}_2]_3$ и $\text{Co}[(\text{C}_6\text{H}_5\text{O})_2\text{PS}_2]_3$

Ключевые слова: дитиофосфат, Rh(III), Co(III), кристаллическая и молекулярная структура, внутрикомплексное соединение



330

Лодочникова О.А., Литвинов И.А., Палей Р.В., Племенков В.В.

Кристаллическая структура сульфониевых солей природных азуленов

Ключевые слова: хамазулен, гвайазулен, сульфониевые соли, взаимодействия С-Н...л, рентгеноструктурный анализ



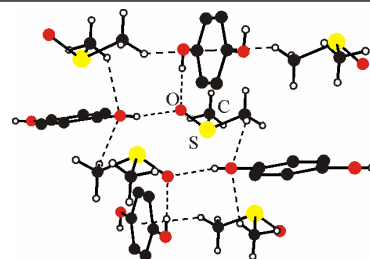
335

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Полянская Т.М., Халдоияниди К.А.

Структура комплекса 1:1 диметилсульфоксида с гидрохиноном: супрамолекулярная архитектура на основе водородных связей D-H...A (D = O, C; A = O, π)

Ключевые слова: гидрохинон, диметилсульфоксид, толуол, структура, диаграмма, фаза, система, межмолекулярные взаимодействия, супрамолекулярная архитектура



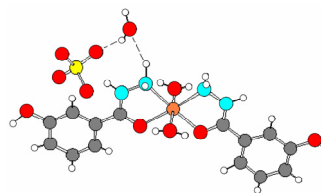
340

Миминошвили Э.Б., Миминошвили К.Э., Зазашвили С.Р., Беридзе Л.А.

347

Структура гидрата сульфата *транс*-диаква-бис(3-гидроксibenzoилгидразин) меди(II),
 $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_8\text{O}_2\text{N}_2)_2(\text{OH})_2]\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$

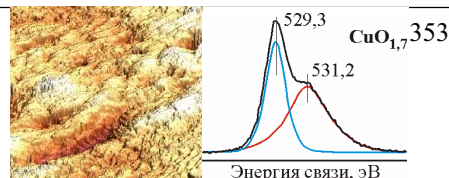
Ключевые слова: комплексные соединения, синтез, структурный анализ, переходные металлы, 3-гидроксibenzoилгидразин



Стадниченко А.И., Сорокин А.М., Боронин А.И.

Исследование наноструктурированных пленок оксида меди CuO методами РФЭС, УФЭС и СТМ

Ключевые слова: оксид меди, кислород, поверхность, РФЭС, УФЭС, СТМ, плазма, наночастица, оксидная пленка

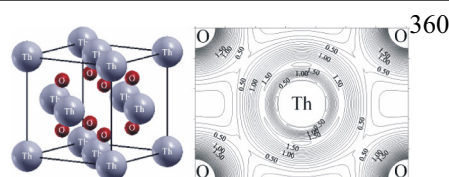


ОБЗОРЫ

Шейн И.Р., Ивановский А.Л.

Соединения тория с неметаллами: электронное строение, химическая связь, физико-химические свойства

Ключевые слова: двойные, тройные торийсодержащие фазы, электронное строение, химическая связь, компьютерное материаловедение

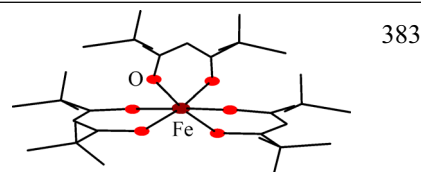


КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Смоленцев А.И., Алексеев А.В., Горвард Р.В., Байдина И.А., Громилов С.А.

Фазовый переход $\text{Fe}(\text{dpm})_3$ в интервале 243 – 210 К

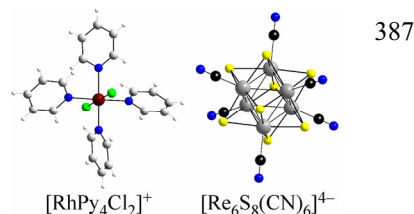
Ключевые слова: кристаллическая структура, монокристалл, фазовый переход, кристаллохимия



Шушарина Е.А., Юсенко К.В., Куратьева Н.В., Байдина И.А., Громилов С.А.

Мотив трехслойной плотнейшей укладки кластерных анионов в структуре $[\text{RhPy}_4\text{Cl}_2]_4[\text{Re}_6\text{S}_8(\text{CN})_6] \cdot 1,5\text{H}_2\text{O}$

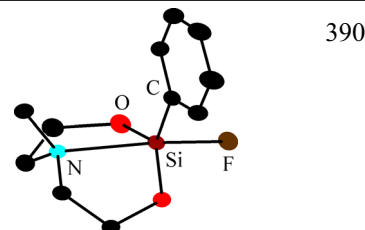
Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, родий, рений, кластер, кристаллохимия



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

Молекулярная структура 1-фенил-1-фтор-5-метилквазисилатрана (2-фенил-2-фтор-1,3-диокса-6-аза-6-метил-2-силациклооктан)

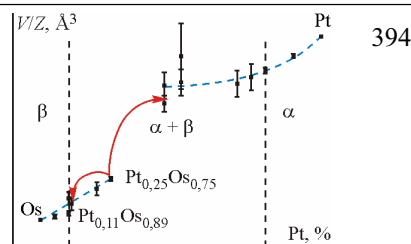
Ключевые слова: 1-фенил-1-фтор-5-метилквазисилатран, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ



Громилов С.А., Дьячкова Т.В., Тютюнник А.П., Зайнулин Ю.Г., Губанов А.И., Черепанова С.В.

Исследование продукта термобарической обработки $\text{Pt}_{0,25}\text{Os}_{0,75}$

Ключевые слова: платина, осмий, твердый раствор, поликристалл, высокие давления и температуры, рентгенографическое исследование, кристаллохимический анализ



Содержание следующего номера — в конце журнала

CONTENTS

Theory of molecular structure and chemical bonding

Gribov L.A. Method of evaluating the probability of structural isomer-isomeric transformations at presence of the large number of quasi-degenerations of the energy levels of the interacting subsystems ..	207
Gribov L.A., Dementiev V.A., Mikhailov I.V. Incidence matrix and graphs for chemical transformations	211
Ryzhkov M.V., Ivanovskii A.L., Porotnikov A.V., Shchapova J.V., Votyakov S.L. Electronic structure of uranium impurity center in zircon	215
Tarasov Yu.I., Bazhanova Z.G., Kovtun D.M., Boltalin A.I., Novosadov B.K., Kochikov I.V. Quantum chemical study of silver trifluoroacetate dimmer	221
Kobychev V.B., Vitkovskaya N.M., Trofimov B.A. A theoretical study of the [1,3]-prototropic shift in oximes and oxime ethers	230

Study of the structure of molecules by physical methods

Kornakova T.A., Bogdanova T.F., Piottukh-Peletsy V.N. Evaluation of the efficiency of joint using the IR and mass-spectrometry data bases for structure elucidation	238
Panchenko Yu.N., De Maré G.R. Vibrational analysis of buta-1,3-diene and its deuterio- and ¹³ C-derivatives and some of their rotational isomers	249
Gilinskaya L.G. EPR spectra of V(IV) complexes and the structure of petroleum porphyrins	259
Kalinkin A.V., Pashis A.V., Bukhtiyarov V.L. XPS study of the interaction H ₂ and H ₂ +O ₂ mixtures with the model catalyst Pt/MoO ₃	269

Structure of liquids and solutions

Efimov Yu.Ya. Influence of H-bond bridge geometry on water vibration spectra: the simplest models of H-bond potential	275
Teplukhin A.V. Computer simulation study of local ordering of water molecules by Monte Carlo method. I. Binary spatial correlations	284
Kustov A.V., Smirnova N.L., Antonova O.A., Krest'yaninov M.A., Zheleznyak N.I., Grechin O.V., Korolev V.P. Thermodynamic properties, intermolecular interaction parameters and structure of aqueous amide solutions of ammonium and tetraalkylammonium bromides	292
Zaichikov A.M., Krestyaninov M.A. Structural and thermodynamic parameters and intermolecular interactions in aqueous solutions of formic acid amides	299

Crystal chemistry

Batsanov S.S. Dependency of energy on the bond length in molecules and crystals	309
Baidina I.A., Krisyuk V.V., Peresyphina E.V., Stabnikov P.A. Structure and properties of heterocomplex compound of lead(II) hexafluoroacetylacetonate and copper(II) trifluoroacetylacetonate Cu(tfa) ₂ ·Pb(hfa) ₂	317
Zharkova G.I., Baidina I.A., Igumenov I.K. New volatile Ni(II) and Pd(II) complexes based on 2,2,6,6-tetramethyl-3-amino-4-hepten-5-ono: properties, structures	322

Klevtsova R.F., Glinskaya L.A., Larionov S.V. Crystal and molecular structures of intracomplex compounds, $\text{Rh}[(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_2\text{PS}_2]_3$ and $\text{Co}[(\text{C}_6\text{H}_5\text{O})_2\text{PS}_2]_3$	330
Lodochnikova O.A., Litvinov I.A., Palei R.V., Plemenkov V.V. The crystal structure of sulfonium salts of natural azulenes	335

Supramolecular and nanodimensional systems

Polyanskaya T.M., Khaldoyanidi K.A. Synthesis and structure of the 1:1 complex between quinol and dimethyl sulfoxid: supramolecular architecture <i>via</i> hydrogen bonding $\text{D} \cdots \text{H} \cdots \text{A}$ ($\text{D} = \text{O}, \text{C}$; $\text{A} = \text{O}, \pi$) .	340
Miminoshvili E.B., Miminoshvili K.E., Zazashvili S.R., Beridze L.A. Structure of <i>trans</i> -diaqua-bis(3-hydroxybenzoylhydrazine)copper(II) sulfate monohydrate, $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_8\text{O}_2\text{N}_2)_2(\text{OH}_2)_2]\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$	347
Stadnichenko A.I., Sorokin A.M., Boronin A.I. XPS, UPS and STM study of the nanostructured CuO films	353

Reviews

Shein I.R., Ivanovskii A.L. Thorium compounds with nonmetals: electronic structure, chemical bonding, physicochemical properties	360
---	-----

Brief communications

Smolentsev A.I., Alekseev A.V., Gorvard R.V., Baidina I.A. $\text{Fe}(\text{dpm})_3$ phase transition in the range of 243—210 K	383
Shusharina E.A., Yusenko K.V., Kurat'eva N.V., Baydina I.A., Gromilov S.A. Synthesis and Crystal structure of the $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]_2[\text{Re}_6\text{S}_8(\text{CN})_6] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	387
Voronkov M.G., Korlyukov A.A., Zel'bst E.A., Grebneva E.A., Trofimova O.M., Antipin M.Yu. Molecular structure of 1-phenyl-1-fluoro-5-methylquazisilatrane (2-phenyl-2-fluoro-1,3-dioxo-6-aza-6-methyl-2-silacyclooctane)	390
Gromilov S.A., D'yachkova T.V., Tyutyunnik A.P., Zaynulin Yu.G., Gubanov A.I., Cherepanova S.V. Study of product of thermobarically-treated $\text{Pt}_{0,25}\text{Os}_{0,75}$	394