

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 50

Ноябрь-декабрь

№ 6, 2009

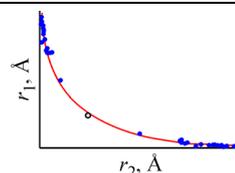
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В.

Соотношение между длинами связей в водородных мостиках N—H...N, O—H...O, F—H...F и Cl—H...Cl

Ключевые слова: водородный мостик, длина H-связи, квантово-химический расчет

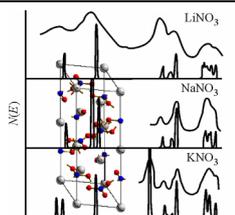


1063

Журавлёв Ю.Н., Корабельников Д.В.

Природа электронных состояний и фотоэлектронные спектры оксианионных кристаллов

Ключевые слова: нитриты, нитраты, сульфиты, сульфаты, хлораты, перхлораты, плотность состояний, Малликеновская заселенность, зарядовое состояние, парциальный заряд, фотоэлектронный спектр

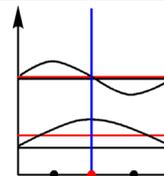


1070

Литинский Г.Б., Крикунова В.Е.

Модель свободных электронов для гетероатомных сопряженных молекул

Ключевые слова: модель свободных электронов, гетероатомные сопряженные молекулы, энергетический спектр



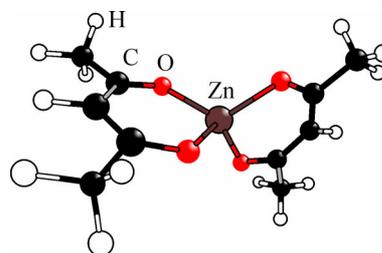
1078

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Антина Е.В., Белова Н.В., Березин М.Б., Гиричев Г.В., Гиричева Н.И., Захаров А.В., Петрова А.А., Шлыков С.А.

Исследование структуры и энергетики β-дикетонатов. XVI. Молекулярное строение и колебательный спектр ацетилацетоната цинка по данным газовой электронографии и квантово-химических расчетов

Ключевые слова: газовая электронография, квантовая химия, масс-спектрометрия, ацетилацетонат цинка, молекулярная структура, частоты колебаний

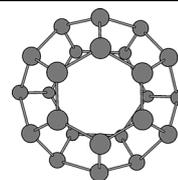


1084

Peng S., Li X.J., Zhang Y., Zhao S.

Molecular structures and thermochemistry of the derivatives of C₂₄ fullerene by attaching a variety of chemical groups

Keywords: C₂₄ fullerene, derivative, structure, thermochemistry, DFT

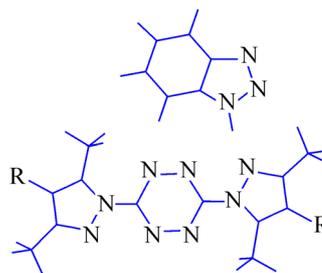


1095

Ившина Н.Н., Барташевич Е.В., Потёмкин В.А., Гришина М.А., Ишметова Р.И., Русинов Г.Л., Латош Н.И., Слепухин П.А., Чарушин В.Н.

Теоретическое исследование изменения колебательных характеристик при комплексообразовании замещенных 1,2,4,5-тетразинов с 1,2,3-бензотриазолом

Ключевые слова: производные 1,2,4,5-тетразина, ИК спектроскопия, частоты валентных колебаний, молекулярные сокриссталлы, водородная связь

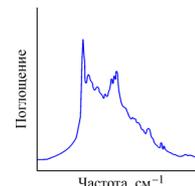


1102

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

Исследование влияния температуры на ИК спектры кристаллических аминокислот, дипептидов и полиаминокислот. V. L-серилглицин

Ключевые слова: пептидная связь, дипептиды, L-серилглицин, водородная связь, ИК спектроскопия

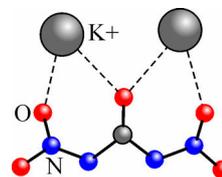


1108

Ильясов С.Г., Лобанова А.А., Багрянская И.Ю., Рыбалова Т.В., Гатиллов Ю.В.

Исследование структуры N,N'-динитромочевины и ее солей физико-химическими методами

Ключевые слова: динитромочевина, таутомерные формы, калиевые соли, ИК, УФ, РСА, квантово-химические расчеты

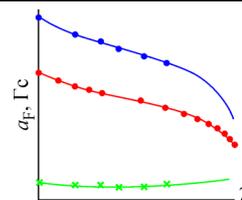


1115

Шундрин Л.А., Мельников П.В., Поленов Е.А.

Внутреннее заторможенное вращение группы CF₃ в анион-радикале 2-трифторметилнитробензола в смесях ДМФА:H₂O

Ключевые слова: анион-радикалы, заторможенное вращение, внутреннее вращение, ЭПР спектроскопия, нитробензол

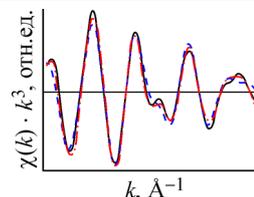


1121

Мороз Э.М., Кривенцов В.В., Кочубей Д.И.

Исследование катализатора EuroPt-1 рентгенографическим методом радиального распределения электронной плотности и EXAFS спектроскопии

Ключевые слова: EXAFS, катализатор, платина, оксид, структура

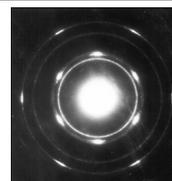


1132

Макотченко В.Г., Назаров А.С.

Структурные характеристики полифториддиуглерода

Ключевые слова: графит, фторокислитель, интеркалированные соединения, полифториддиуглерод, степень ионности



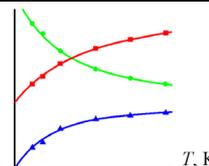
1139

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Королёв В.П.

Влияние концентрации, температуры и изотопии на теплоемкость водного раствора мочевины

Ключевые слова: мочевины, водные растворы, теплоемкость

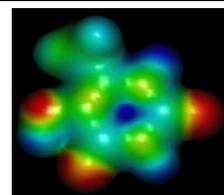


1147

Даутова И.Ф., Иванов С.П., Хурсан С.Л.

Влияние гидратации на стабильность кето-енольных таутомеров 5-гидрокси-6-метилурацила

Ключевые слова: квантово-химический расчет, 5-гидрокси-6-метилурацил, таутомер, гидратация, водородная связь



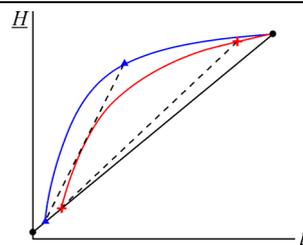
1155

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Косяков В.И., Шестаков В.А.

Структуры с вакансионными подрешетками на основе ГЦК и ОЦК упаковок сфер и их стабильность при отрицательных давлениях

Ключевые слова: вакансии, вакансионные кластеры, упаковки сфер, термодинамическая стабильность, отрицательное давление, гомологические серии, моделирование, структурные характеристики

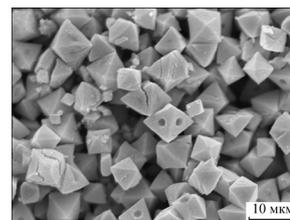


1166

Громилов С.А., Шубин Ю.В., Губанов А.И., Максимовский Е.А., Коренев С.В.

Рентгенографическое изучение продуктов термолиза $(\text{NH}_4)_2[\text{OsCl}_6]_x[\text{PtCl}_6]_{1-x}$

Ключевые слова: платина, осмий, комплексная соль, твердый раствор, поликристалл, рентгенографическое исследование, псевдоморфизм

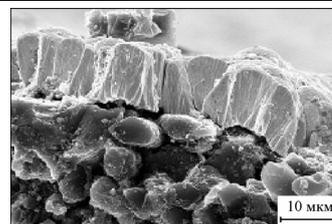


1174

Гельфонд Н.В., Морозова Н.Б., Филатов Е.С., Громилов С.А., Игуменов И.К.

Структура рениевых покрытий, полученных методом CVD

Ключевые слова: Re-покрытия, рентгеновская дифракция, сканирующая электронная микроскопия, химическое осаждение из паровой фазы (CVD), диренийдекакарбонил, циклопентадиенилренийтрикарбонил

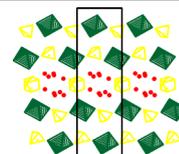


1179

Воробьева С.Н., Байдина И.А., Алексеев А.В., Беляев А.В.

Рентгеноструктурное исследование сульфатов родия(III)

Ключевые слова: родий, сульфаты, аквакомплексы, координационные соединения, кристаллическая структура

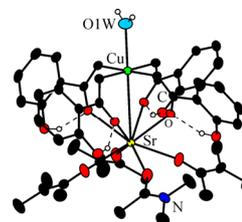


1187

Горинчой В.В., Симонов Ю.А., Шова С.Г., Шофрански В.Н., Туртэ К.И.

Кристаллические и молекулярные структуры двуядерных комплексов $\{\text{Cu—M}\}$, $\text{M} = (\text{Cu}, \text{Sr}, \text{Ba})$ на основе салициловой кислоты

Ключевые слова: синтез, гомо- и гетеродвуядерные салицилаты, медь, рентгеноструктурный анализ

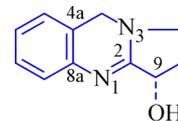


1196

Окманов Р.Я., Тожибоев А.Г., Тургунов К.К., Ташходжаев Б., Хакимова З.М., Туляганов Т.С., Шахидоятов Х.М.

Кристаллические структуры алкалоида пеганина и его сокристалла с пеганолом

Ключевые слова: хиназолины, пеганин, пеганол, соли, сокристаллы, рентгеноструктурный анализ

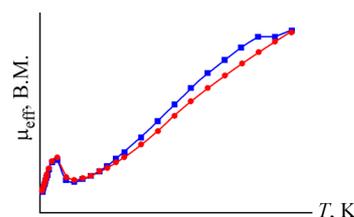


1203

Higashikawa H., Inoue K., Maryunina K.Yu., Romanenko G.V., Bogomyakov A.S., Kuznetsova O.V., Fursova E.Yu., Ovcharenko V.I.

Structure and magnetic properties of the pentanuclear complex $[\text{Fe}_2(\text{CN})_{12}\text{Ni}_3(\text{L})_6] \cdot 27\text{H}_2\text{O}$, where L is nitronyl nitroxide

Keywords: nickel, iron, cyano bridge, nitroxide, pentanuclear complex, crystal structure, magnetic properties

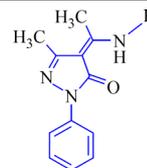


1209

Amarasekara A.S., Owereh O.S., Lyssenko K.A., Timofeeva T.V.

Structural tautomerism of 4-acylpyrazolone Schiff bases and crystal structure of 5-methyl-2-phenyl-4-{1-[(pyridin-2-ylmethyl)-amino]-ethylidene}-2,4-dihydro-pyrazol-3-one

Keywords: 4-acylpyrazolone, Schiff-base, tautomerism

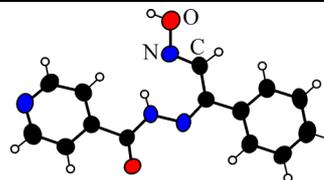


1213

Zülfikaroğlu A., Yüksektepe Ç., Bati H., Çalışkan N., Büyükgüngör O.

Crystal structure and properties of (Z)-N'-(E)-2-(hydroxyimino)-1-phenylethylideneisonicotinohydrazide

Keywords: pyridine, oxime, hydrazone, twin crystal, isomerism



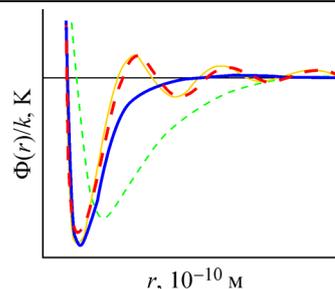
1219

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Сдобняков Н.Ю., Базулев А.Н., Самсонов В.М., Кульпин Д.А., Соколов Д.Н.

Исследование удельной свободной поверхностной энергии нанокapель алюминия с использованием потенциала Шоммерса

Ключевые слова: термодинамическая теория возмущений, нанокapли металлов, потенциалы межмолекулярного взаимодействия: Шоммерса, Морса, Шиффа, размерная зависимость поверхностного натяжения, стабильность



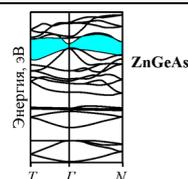
1223

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Басалаев Ю.М., Поплавной А.С.

Роль подрешеток в формировании химической связи ионно-ковалентных кристаллов

Ключевые слова: метод подрешеток, функционал плотности, халькопирит

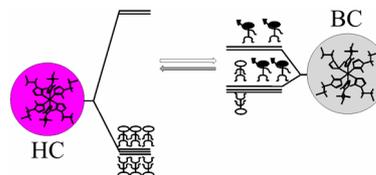


1229

Кудрявцев А.Б., Линерт В.

О сходстве и различиях моделей спинового перехода, основанных на псевдоизинговском гамильтониане и функционале свободной энергии

Ключевые слова: спиновый переход, модель псевдоизинговского потенциала, молекулярно-статистическая модель

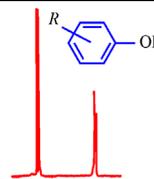


1233

Курковская Л.Н., Левина И.И.

Взаимодействие фенолов с овальбумином по данным метода ЯМР

Ключевые слова: фенолы, овальбумин, Н-связь, метод ЯМР

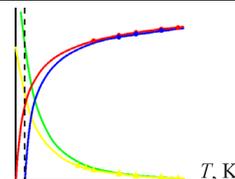


1238

Королёв В.П.

Поведение $\bar{\alpha}_2^0(T)$ водного раствора мочевины около точки сингулярности

Ключевые слова: мочевины, водные растворы, объемные свойства

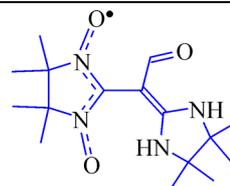


1240

Третьяков Е.В., Коренева О.В., Романенко Г.В., Богомяков А.С., Овчаренко В.И., Сагдеев Р.З.

Структура и магнитные свойства бисхелата Cu(II) со спин-меченым аминокислотным остатком

Ключевые слова: нитронилнитроксилы, комплексы меди(II), кристаллическая структура, магнитные свойства

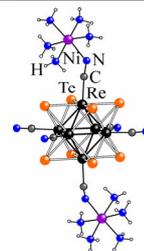


1245

Брылёв К.А., Миронов Ю.В., Фёдоров В.Е.

**Кристаллическая структура октаэдрического
цианомостикового кластерного комплекса
 β -[$\{\text{Ni}(\text{NH}_3)_5\}_2\{\text{Re}_6\text{Te}_8(\text{CN})_6\}] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$**

Ключевые слова: октаэдрический кластер, рений, никель, синтез, кристаллическая структура

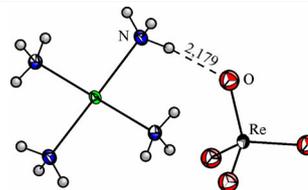


1249

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

Кристаллическая структура $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4](\text{ReO}_4)_2$

Ключевые слова: медь, рений, комплекс, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ

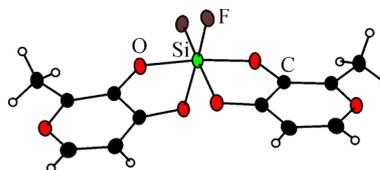


1253

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

**Необычная молекулярная структура ($\text{C}=\text{O} \rightarrow \text{Si} \leftarrow \text{O}'=\text{C}'$)
бис(2-метил-4-пирино-3-окси)дифтор(λ^6)силикония**

Ключевые слова: бис(2-метил-4-пирино-3-окси)дифтор(λ^6)силиконий, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ

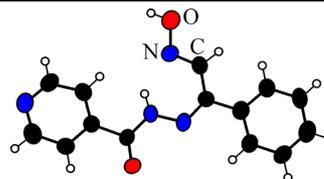


1259

Jin Z.M., Shu Z., Feng H., Chen H.X., Xu W.J.

**Crystal and molecular structure of 4,4'-bipyridinium
bis(*trans*-2-hydroxycinnamate) bis(4,4'-bipyridine)**

Keywords: whole molecule disorder, hydrogen bond, co-crystal, hydroxycinnamate, ortho-coumaric acid, 4,4'-bipyridine

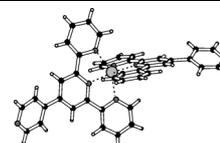


1260

Ding Yu, Wang F., Ku Z.-J., Wang L.-S., Zhou H.-B.

**Hydrothermal synthesis and crystal structure of
 $[\text{Zn}(\text{pytpy})_2][\text{NO}_3]_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$**

Keywords: pytpy, zinc complex, crystal structure, hydrothermal synthesis



1264

Указатель статей. Том 501268

Авторский указатель. Том 501277

Содержание следующего номера — в конце журнала