

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 50

Январь – февраль

№ 1, 2009

СО Д Е Р Ж А Н И Е

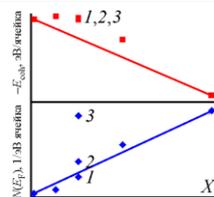
К юбилею Журнала структурной химии 5

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Суетин Д.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л. 7

Электронная структура карбонитридов вольфрама
 $WC_{1-x}N_x$

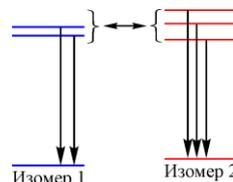
Ключевые слова: карбонитриды вольфрама $WC_{1-x}N_x$,
электронные свойства, FLAPW-GGA, моделирование



Грибов Л.А., Баранов В.И. 16

Общий метод расчета молекулярных процессов при наличии сложных взаимодействий между комбинирующими подсистемами

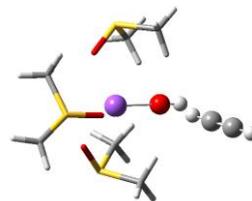
Ключевые слова: химические превращения, квазирезонанс, волновой пакет



Витковская Н.М., Кобычев В.Б., Ларионова Е.Ю.,
Зайцева И.Л., Трофимов Б.А. 24

Теоретическая оценка некоторых взаимодействий в
системе ацетилен–гидроксид щелочного металла–ДМСО

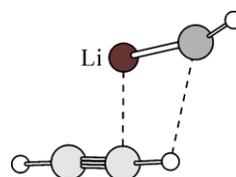
Ключевые слова: щелочные металлы, гидроксиды, катионы,
гидроксид-ион, диметилсульфоксид, ацетилен, координация,
сольватация, неэмпирические расчеты



Ларионова Е.Ю., Витковская Н.М., Кобычев В.Б., Кэмпф Н.В.,
Скитневская А.Д., Трофимов Б.А. 33

Неэмпирическое квантово-химическое исследование
механизма реакции образования этинид-иона в системе
 $C_2H_2/MOH/DMCO$ ($M=Li, Na, K$)

Ключевые слова: этинид-ион, этинирование, механизм реакции,
квантово-химические расчеты, суперосновные среды



Li X.-H., Tang Z.-X., Zhang X.-Z. 40

DFT study of the C—Cl bond dissociation enthalpies and
electronic structure of substituted chlorobenzene compounds

Keywords: density functional theory, bond dissociation enthalpy,
substituent effect, substituted chlorobenzene compounds



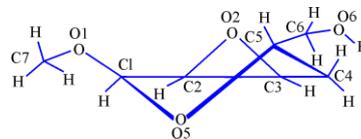
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Королевич М.В., Кириллова С.Г., Пиоттух-Пелецкий В.Н., Андрианов В.М.

47

Интерпретация ИК спектров эпоксисахаридов на основе теоретического расчета частот и интенсивностей нормальных колебаний

Ключевые слова: эпоксисахариды, ИК спектроскопия, анализ нормальных колебаний, абсолютные ИК интенсивности, интерпретация ИК спектра

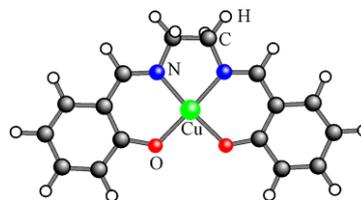


Гиричева Н.И., Гиричев Г.В., Кузьмина Н.П., Медведева Ю.С., Рогачев А.Ю.

58

Строение молекулы Cu(salen), CuO₂N₂C₁₆H₁₄, по данным метода газовой электронографии и квантово-химических расчетов

Ключевые слова: строение, основания Шиффа, CuO₂N₂C₁₆H₁₄, Cu(salen), электронография, квантово-химические расчеты

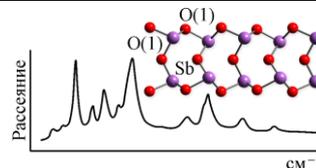


Войт Е.И., Панасенко А.Е., Земнухова Л.А.

66

Исследование оксида сурьмы(III) методами колебательной спектроскопии и квантовой химии

Ключевые слова: оксид сурьмы(III), Sb₂O₃, DFT, ИК, КР, колебательная спектроскопия

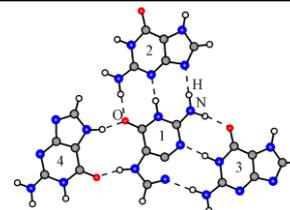


Monajjemi M., Honarparvar B., Nasser S.M., Khaleghian M.

73

NQR and NMR study of hydrogen bonding interactions in anhydrous and monohydrated guanine cluster model: a computational study

Keywords: nuclear magnetic resonance, nuclear quadrupole resonance, hydrogen bonding interactions, *ab initio*, DFT



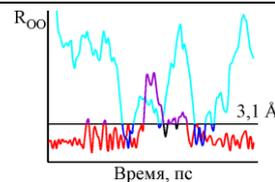
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Волошин В.П., Наберухин Ю.И.

84

Распределение времени жизни водородной связи в компьютерных моделях воды

Ключевые слова: компьютерное моделирование воды, водородные связи, время жизни водородной связи

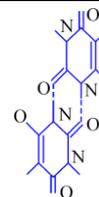


Тен Г.Н., Баранов В.И.

96

Расчет и анализ времени жизни таутомерных форм тимина и 5-хлорурацила в водных растворах с разными pH

Ключевые слова: тимин, 5-хлорурацил, таутомеры, время жизни, расчет

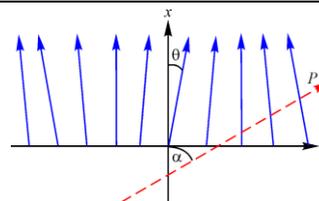


Меньшиков Л.И., Федичев П.О.

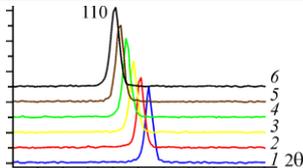
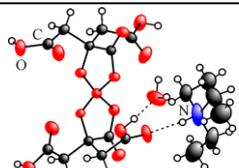
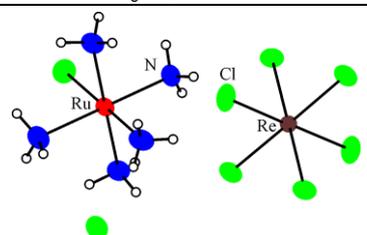
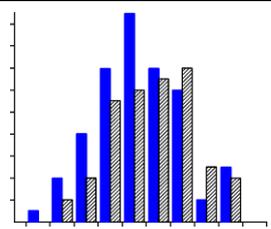
103

Природа перколяционного фазового перехода в пленках гидратной воды, окружающей погруженные тела

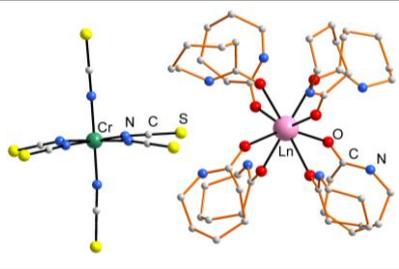
Ключевые слова: полярная жидкость, гидрофобная поверхность, сегнетоэлектрик, дальний порядок



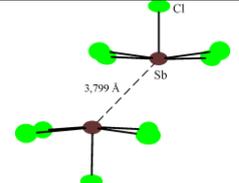
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

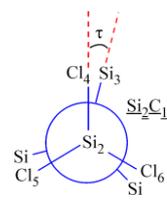
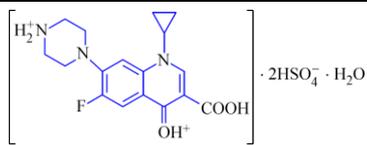
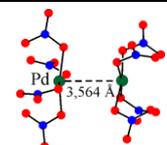
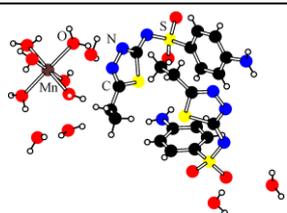
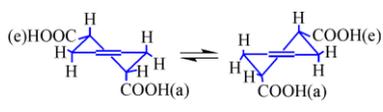
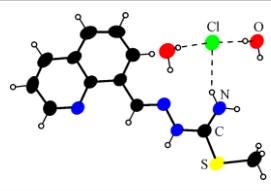
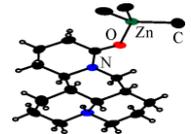
<p>Безносиков Б.В., Александров К.С. Прогноз новых соединений в семействе делафоссита Ключевые слова: кристалл, структурное семейство делафоссита, прогноз новых соединений</p>	<p style="text-align: center;">$\langle F5_1 \rangle \langle F5_1 \rangle \langle F5_1 \rangle \langle F5_1 \rangle$</p> <table border="1" style="width: 100%;"> <tr> <td style="width: 50%; text-align: center;"> Делафоссит CuFeO_2 $(R_A/R_B) < 1$ </td> <td style="width: 50%; text-align: center;"> $\alpha\text{-NaFeO}_2$ $(R_A/R_B) > 1$ </td> </tr> </table>	Делафоссит CuFeO_2 $(R_A/R_B) < 1$	$\alpha\text{-NaFeO}_2$ $(R_A/R_B) > 1$
Делафоссит CuFeO_2 $(R_A/R_B) < 1$	$\alpha\text{-NaFeO}_2$ $(R_A/R_B) > 1$		
<p>Надеев А.Н., Цыбуля С.В., Герасимов Е.Ю., Исупова Л.А. Высокотемпературные фазовые переходы в твердом растворе $\text{La}_{0,25}\text{Sr}_{0,75}\text{FeO}_{3-\delta}$ со структурой перовскита Ключевые слова: перовскит, высокотемпературная рентгенография, фазовый переход</p>			
<p>Звиедре И.И., Беляков С.В. Кристаллическая структура моногидрата дицитратобората триэтиламмония Ключевые слова: координационные соединения бора, дицитратобораты, рентгеноструктурный анализ</p>			
<p>Мартынова С.А., Юсенко К.В., Корольков И.В., Байдина И.А., Корнев С.В. Рентгенографическое исследование $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}][\text{ReCl}_6]$ и $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]_2[\text{ReCl}_6]\text{Cl}_2$ и продуктов их термоллиза. Кристаллохимический анализ системы Ru—Re Ключевые слова: рентгенография, кристаллохимия, рутений, рений, двойные комплексные соли</p>			
<p>Багрянская И.Ю., Барташевич Е.В., Никулов Д.К., Гатиллов Ю.В., Зибарев А.В. Межмолекулярные взаимодействия и структурная дихотомия в кристаллах 1,3,2,4-бензодитиадиазинов Ключевые слова: гетероциклические соединения, межмолекулярные взаимодействия, кристаллические упаковки, молекулярные конформации, топологический анализ электронной плотности</p>			

ОБЗОРЫ

<p>Вировец А.В., Пересыпкина Е.В., Черкасова Е.В., Черкасова Т.Г., Подберезская Н.В. Структурные типы гекса(изотиоцианато)хроматов(III) окта(ε-капролактама)лантаноидов(III). Фазовый переход с обратимым двойникованием Ключевые слова: лантан, празеодим, европий, гадолиний, тербий, ε-капролактама, кристаллическая структура, фазовый переход, двойникование, термохромизм</p>	
---	--

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

<p>Буквецкий Б.В., Седакова Т.В., Мирочник А.Г. Кристаллическая структура и люминесценция комплекса хлорида сурьмы(III) с анилином Ключевые слова: кристаллическая структура, сурьма(III), анилин, люминесценция</p>	
--	---

Ежов Ю.С., Комаров С.А., Симоненко Е.П., Павелко Р.Г., Севастьянов В.Г., Кузнецов Н.Т. Строение молекулы тетракис(трихлорсилил)метана $C(SiCl_3)_4$ Ключевые слова: газовая электронография, квантовая химия, тетракис(трихлорсилил)метан, строение молекул, внутреннее вращение		160
Васильев А.Д., Головнев Н.Н., Байдина И.А. Строение соединения $C_{17}H_{20}FN_3O_3^{2+} \cdot 2HSO_4^- \cdot H_2O$ Ключевые слова: фторхинолон, ципрофлоксацин, серная кислота, кристаллическая структура, водородные связи		165
Абрамов П.А., Соколов М.Н., Вировец А.В., Федин В.П. Кристаллическая структура $[(C_5Me_4Et)_3Rh_3(\mu_3-Se)_2]$ $(PF_6)_2CH_3CN$ и $[(C_5Me_4Et)_2Rh_2(\mu_2-Cl)_3]PF_6$ Ключевые слова: родий, селен, кластеры, гидротермальный синтез, рентгеноструктурный анализ		169
Храненко С.П., Байдина И.А., Куратьева Н.В., Громилов С.А. Рентгеноструктурное исследование $KCs[Pd(NO_3)_4] \cdot 0,5H_2O$ Ключевые слова: палладий(II), нитратокомплексы, рентгенофазовый анализ, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия		173
Миминошвили Э.Б., Миминошвили К.Э., Беридзе Л.А. Рентгенографическое исследование $M(AET)_2 \cdot 11H_2O$ $(M = Mn, Mg, Mn_{0,5}Mg_{0,5})$ и кристаллическая структура $[Mn(OH_2)_6](Aet)_2 \cdot 5H_2O$ Ключевые слова: комплексные соединения, синтез, рентгеноструктурный анализ, Mn(II), Mg(II), этазол, сульфамиды		177
Салахов М.С., Багманов Б.Т., Гречкина О.Т. Топологический подход в установлении зависимости структура—свойство в ряду 4-циклогексен-1,2-дикарбоновых кислот Ключевые слова: теоретико-информационные индексы, <i>цис</i> - и <i>транс</i> -4-циклогексен-1,2-дикарбоновые кислоты, константа ионизации		183
Ботошанский М., Боурош П.Н., Ревенко М.Д., Коржа И.Д., Симонов Ю.А., Панфилие Т. Строение дигидрата хлористоводородной соли S-метилтиосемикарбазона 8-хинолинальдегида Ключевые слова: S-метилтиосемикарбазон 8-хинолинальдегида, таутомерия, конфигурация, кристаллическая структура		188
Jin Z.M., Ma L.L., Wei W.X., Lin C.S., Li W.Z. Molecular and crystal structure of an ethanol solvate of 6-O-methylerythromycin A Keywords: clarithromycin, ethanol solvate, supramolecular complex, crystal structure	$C_{38}H_{69}NO_{13} \cdot 0.5(C_2H_5OH)$	192
Jin Z.M., Ma L.L., Wei W.X., Li Y.Q. On the absolute configuration of matrine: crystal structure of matrin-1-ium-trichlorozincate Keywords: matrine, <i>trans</i> -matrine, absolute configuration, <i>Sophora</i> <i>flavescens</i> , IR spectroscopy		197

Содержание следующего номера — в конце журнала

© Сибирское отделение РАН
Журнал структурной
химии, № 1, 2009