

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 50

Январь – февраль

№ 1, 2009

СОДЕРЖАНИЕ

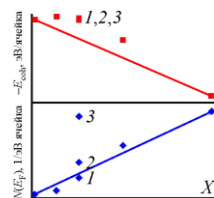
К юбилею Журнала структурной химии 5

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

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

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

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

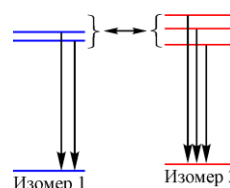


7

Грибов Л.А., Баранов В.И.

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

Ключевые слова: химические превращения, квазирезонанс,
волновой пакет

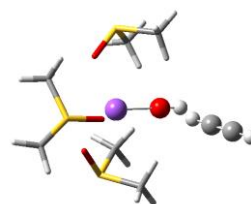


16

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

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

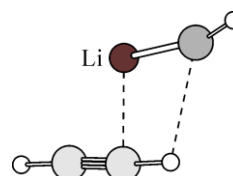


24

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

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

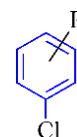


33

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

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



40

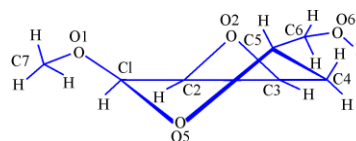
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

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

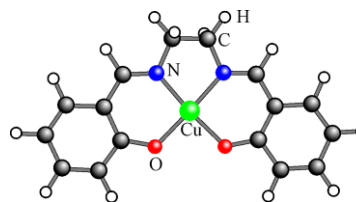


Гиричева Н.И., Гиричев Г.В., Кузьмина Н.П., Медведева Ю.С.,
Рогачев А.Ю.

58

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

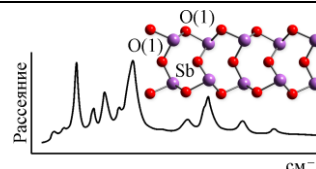
Ключевые слова: строение, основания Шиффа, CuO₂N₂C₁₆H₁₄, Cu(salen), электронография, квантово-химические расчеты



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

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

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



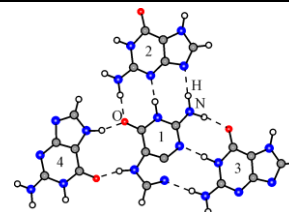
66

Monajjemi M., Honarparvar B., Nasseri 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



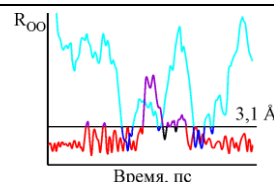
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

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

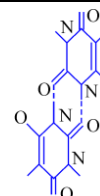


Тен Г.Н., Баранов В.И.

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

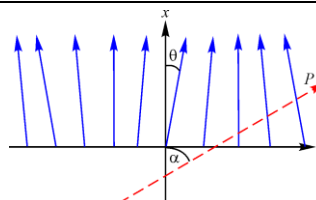


Меньшиков Л.И., Федичев П.О.

103

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

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

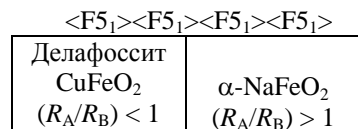


КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Безносовых Б.В., Александров К.С.

Прогноз новых соединений в семействе делафоссита

Ключевые слова: кристалл, структурное семейство делафоссита, прогноз новых соединений

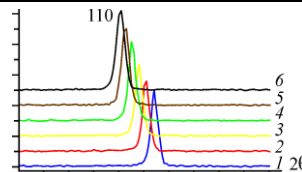


108

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

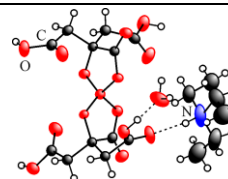


114

Звиедре И.И., Беляков С.В.

Кристаллическая структура моногидрата дицитратобората триэтиламмония

Ключевые слова: координационные соединения бора, дицитратобораты, рентгеноструктурный анализ

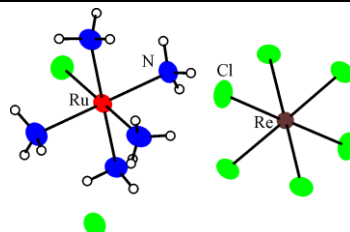


121

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 термолитиза. Кристаллохимический анализ системы Ru—Re

Ключевые слова: рентгенография, кристаллохимия, рутений, рений, двойные комплексные соли

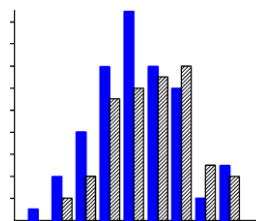


126

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



133

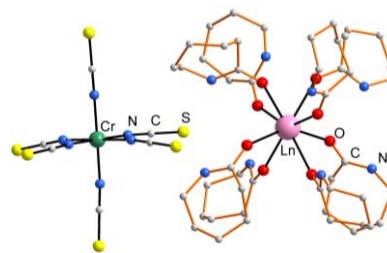
ОБЗОРЫ

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



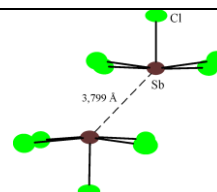
144

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

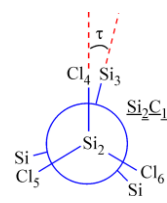
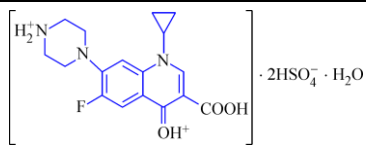
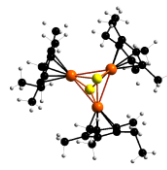
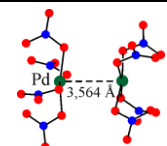
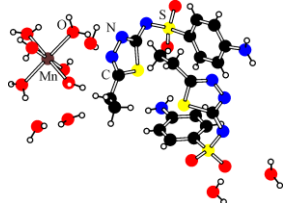
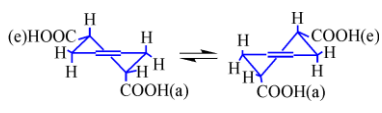
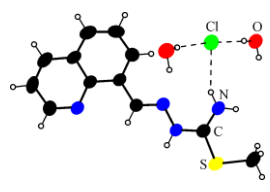
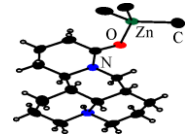
Буквецкий Б.В., Седакова Т.В., Мирочник А.Г.

Кристаллическая структура и люминесценция комплекса хлорида сурьмы(III) с анилином

Ключевые слова: кристаллическая структура, сурьма(III), анилин, люминесценция



156

Ежов Ю.С., Комаров С.А., Симоненко Е.П., Павелко Р.Г., Севастьянов В.Г., Кузнецов Н.Т. Строение молекулы тетракис(трихлорсил)метана $C(SiCl_3)_4$ Ключевые слова: газовая электронография, квантовая химия, тетракис(трихлорсил)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