

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 53

Январь – февраль

№ 1, 2012

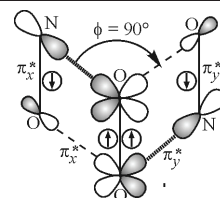
## СОДЕРЖАНИЕ

### ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Захаров И.И., Минаев Б.Ф.

**Квантово-химическое исследование структуры пероксида  $O=NO-ON=O$  и механизма реакции окисления NO в газовой фазе**

**Ключевые слова:** квантово-химические расчеты, пероксид азота  $N_2O_4$ , реакция окисления NO, диоксид  $NO_2$

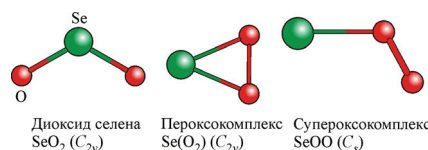


7

Кобзев Г.И., Урваев Д.Г., Давыдов К.С., Заика Ю.В.

**Исследование фотохимических процессов в реакции  $Se + O_2 \rightarrow SeO_2$  методами квантовой химии с учетом спин-орбитального взаимодействия**

**Ключевые слова:** сечение поверхности потенциальной энергии, возбужденные оксокомплексы селена, синглетный кислород, спин-орбитальное взаимодействие, параметры расщепления в нулевом поле

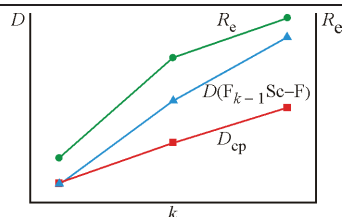


18

Соломоник В.Г., Муханов А.А.

**Неэмпирическое исследование молекул фторидов скандия  $ScF$ ,  $ScF_2$  и  $ScF_3$**

**Ключевые слова:** фториды скандия, строение и спектры молекул, энтальпия атомизации, квантовая химия, метод связанных кластеров, экстраполяция к пределу полного базисного набора

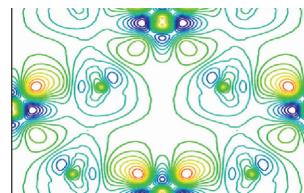


34

Басалаев Ю.М., Маринова С.А.

**Роль подрешеток в формировании электронной структуры и химической связи в кристалле  $Zn_2SiO_4$  с решеткой дефектного халькопирита**

**Ключевые слова:** функционал плотности, метод подрешеток, халькопирит

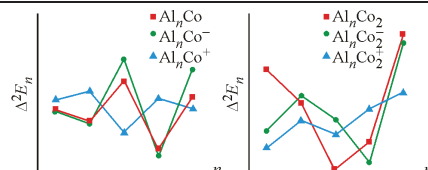


41

Ma G., Guo L.

**Calculated properties of neutral and charged  $Al_nCo_m$  clusters by the density functional theory**

**Keywords:**  $Al_nCo_m$  clusters, density functional theory, frequency analysis, structural properties

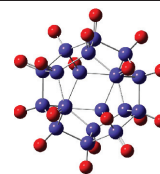


45

LaViolette R.A., Benson M.T.

# **Structure and thermodynamics of phosphorus oxide caged clusters**

**Keywords:** density functional theory, phosphorus oxide clusters, LDA, GGA



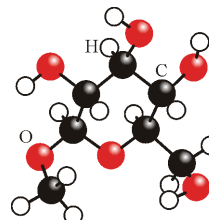
54

## **ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Бабков Л.М., Королевич М.В., Моисейкина Е.А.

# **Водородная связь, ИК спектр и строение метил-β-D-глюкопиранозид**

**Ключевые слова:** метил-β-D-глюкопиранозид, водородная связь, Н-комплекс, молекулярное моделирование, функционал плотности, нормальные колебания, ИК спектр, частота, интенсивность

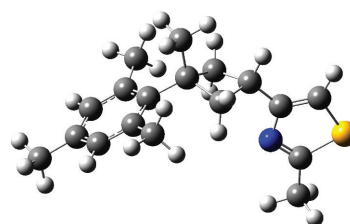


60

Yüksektepe Ç., Çalışkan N., Yılmaz I., Çukurovalı A.

# **Molecular and crystal structure, spectroscopic properties of 2-methyl-4-(3-methyl-3-phenyl-cyclobutyl)-thiazole determined by the experimental method and a quantum chemical calculation**

**Keywords:** *ab initio* calculation, semi-empirical method, B3LYP, conformational analysis, vibrational assignment, X-ray structure determination

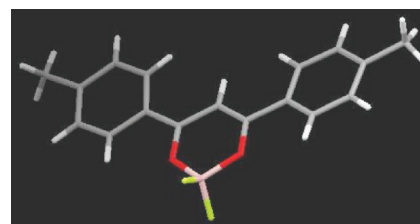


68

Буквечкий Б.В., Федоренко Е. В., Мирочник А.Г., Белолипцев А.Ю.

# **Кристаллическая структура и люминесценция 2,2-дифтор-4,6-(4-метилфенил)-1,3,2-диоксаборина**

**Ключевые слова:** β-дикетонаты дифторида бора, 2,2-дифтор-4,6-(4-метилфенил)-1,3,2-диоксаборин, кристаллическая структура, люминесценция, *H*- и *J*-агрегаты, квантово-химическое моделирование



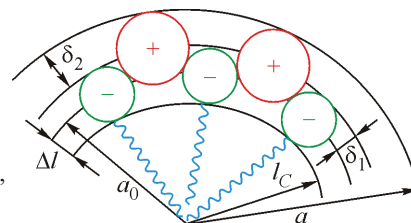
78

## **СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ**

Кузнецов В.С., Усольцева Н.В., Быкова В.В.

# **Электростатические взаимодействия в мицеллярных растворах *n*-алкилсульфатов натрия и применимость уравнения Пуассона–Больцмана для их вычисления**

**Ключевые слова:** ионные мицеллы, электростатические взаимодействия, уравнение Пуассона–Больцмана, энергия Гиббса мицеллообразования, химический потенциал, теория Дебая–Хюккеля

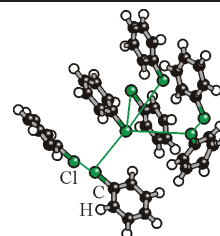


87

Богдан Т.В., Алексеев Е.С.

# **Молекулярно-динамическое моделирование жидких смесей бензола с хлорбензолом**

**Ключевые слова:** молекулярно-динамическое моделирование, функция радиально-углового распределения, жидкий бензол, жидкий хлорбензол, жидкие смеси бензол–хлорбензол, хлор-агрегация



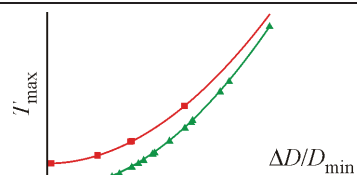
98

# КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Журавлёв В.Д., Резницких О.Г.

## Анализ парных гетеровалентных замещений в молибдатах и вольфраматах типа шеелита

**Ключевые слова:** шеелит, молибдаты, вольфраматы, гетеровалентные замещения

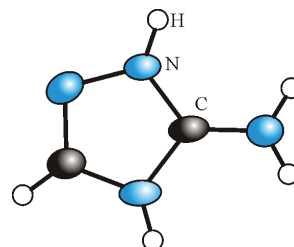


105

Удовенко А.А., Макаренко Н.В., Давидович Р.Л., Земнухова Л.А., Ковалёва Е.В.

## Кристаллические структуры тетрафторантимонатов(III) моно- и дипротонированного катионов 3-амино-1,2,4-триазолия

**Ключевые слова:** рентгеноструктурный анализ, кристаллическая структура, тетрафторантимонат(III), 3-амино-1,2,4-триазолий, водородная связь

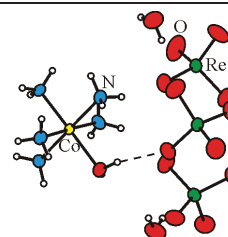


110

Байдина И.А., Филатов Е.Ю., Макотченко Е.В., Смоленцев А.И.

## Получение и изучение строения комплексных солей Co(III) с перренат-анионом

**Ключевые слова:** кобальт, аммиак, этилендиамин, перренат-ион, рентгенофазовый анализ, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия

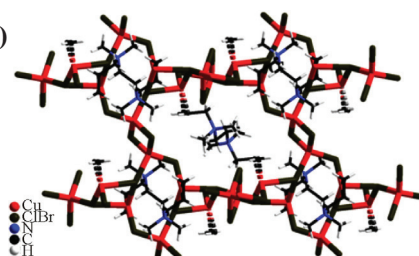


117

Мончак М.М., Горешник Е.А., Мыськив М.Г.

## Архитектура каркасных $\pi$ -комплексов галогенидов меди(I) с N-аллил-N,N,N',N'-тетраметилэтилендиаминием и N,N'-диаллил-N,N,N',N'-тетраметилэтилендиаминием состава $\{[C_2H_4N_2(H^+)(CH_3)_4(C_3H_5)]CuCl_6\}$ и $\{[C_2H_4N_2(CH_3)_4(C_3H_5)_2]_{0.5}Cu_2Cl_{1.67}Br_{1.33}\}$

**Ключевые слова:** медь(I), аллильные производные N,N,N',N'-тетраметилэтилендиамина,  $\pi$ -комплексы, купрогалогенидные фрагменты, кристаллическая структура

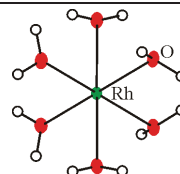


124

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

## Кристаллические структуры акваиона родия(III) с тетраэдрическими анионами

**Ключевые слова:** родий, акваион, координационные соединения, кристаллическая структура

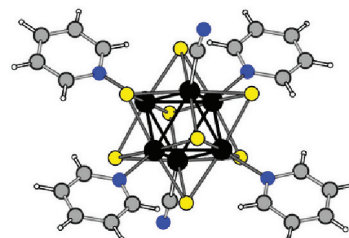


130

Леднева А.Ю., Наумов Н.Г., Вировец А.В., Кордиер С., Молард Я.

## Кристаллическая структура комплексов *транс*- $[Re_6S_8(CN)_2L_4]$ , где L – пиридин или 4-метилпиридин

**Ключевые слова:** рений, октаэдрический кластер, кристаллическая структура, стэкинг-взаимодействие, топологический анализ упаковок

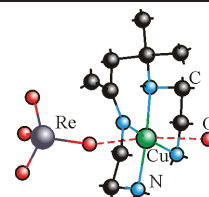


137

Быкова Е.А., Храненко С.П., Семитут Е.Ю., Громилов С.А.

## Кристаллическая структура $[CuL](NO_3)(ReO_4)$ и $[CuL](ReO_4)_2$ (L = 4,6,6-триметил-1,9-диамино-3,7-дiazanon-3-ен)

**Ключевые слова:** медь, рений, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ, термические исследования



142