

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 55

Сентябрь-октябрь

№ 5, 2014

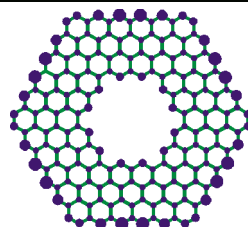
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Лузанов А.В.

Меры электронного распаривания для больших сопряженных систем

Ключевые слова: электронная корреляция, число эффективно распаренных электронов, π -оболочка, полициклические ароматические углеводороды, молекулы, графен, нанопоры

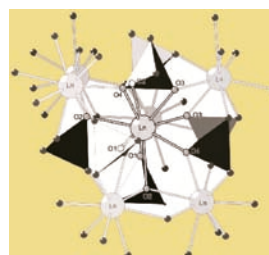


845

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

Электронное строение и относительная радиационная стойкость ортофосфатов LnPO_4 ($\text{Ln} = \text{Ce}, \text{Nd}, \text{Sm}$)

Ключевые слова: ортофосфаты LnPO_4 ($\text{Ln} = \text{Ce}, \text{Nd}$ и Sm), *ab initio* расчеты, электронное строение, химическая связь, радиационная стойкость

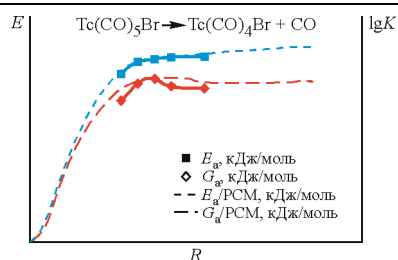


855

Мальцев Д.А., Барановский В.И.

Применение дискретно-континуальной модели растворителя в квантово-химическом исследовании декарбонилирования пентакарбонилбромида технеция

Ключевые слова: пентакарбонилбромид технеция, вариационная теория скоростей реакций, квантово-химический расчет, метод функционала плотности

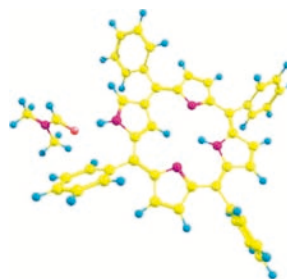


862

Березин Д.Б., Крестьянинов М.А.

Структура Н-ассоциатов порфиринов, инвертированных порфириноидов и корролов с N,N-диметилформамидом

Ключевые слова: порфирин, порфириноид, коррол, инвертированный изомер порфирина, N,N-диметилформамид, Н-ассоциат, внутримолекулярная водородная связь, химическая активность NH-связи, оптимизация геометрии, NBO-анализ



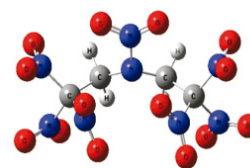
868

Aghabozorgi F., Hamadanian M.

877

Theoretical investigation of heat of formation and detonation performance on 1,1,3,5,5-pentanitro-1,5-bis (difluoramino)-3-azapentane substituted

Keywords: density functional calculations, heat of formation, heat of explosion

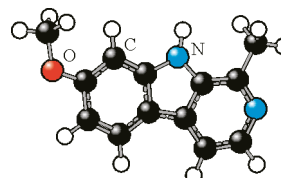


Tahan A., Ahmadinejad N.

883

The investigation of solvent effects on the stability and ^{15}N NMR shielding of hallucinogenic Harmine using PCM model and NBO interpretation

Keywords: harmine, polarized continuum model (PCM), NMR, NBO interpretation



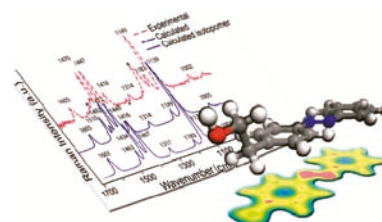
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Minisini B., Messenger G., Piyanzina I., Delorme N., Bardeau J.-F.

889

Vibrational analysis of [4-[(E)-phenylazo]phenyl]ethanol based on the comparison between experimental and DFT calculated Raman spectra

Keywords: Azo dye, DFT calculation, Raman spectra

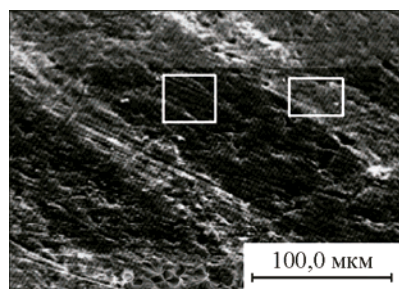


Соколов В.В., Коротаев Е.В., Перегудова Н.Н., Кучумов Б.М., Прозоров П.А., Топякова М.В., Мазалов Л.Н., Диков Ю.П., Булеев М.И., Пичугин А.Ю., Филатова И.Ю., Бердинский А.С., Величко А.А.

898

Рентгеновские и Оже-микронзондовые исследования кристаллов слоистых дисульфидов хрома-меди, допированных ванадием

Ключевые слова: слоистые дисульфиды хрома-меди, кристаллы, Оже-микронзондовые исследования, СЭМ, EDX-анализ, РФА, включения



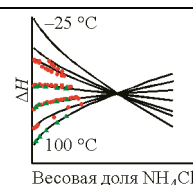
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Королёв В.П.

905

Система $\text{H}_2\text{O}-\text{NH}_4\text{Cl}$. Есть ли в термодинамике отклик на точку нуклеации?

Ключевые слова: термодинамика, водный раствор, хлорид аммония



КРИСТАЛЛОХИМИЯ

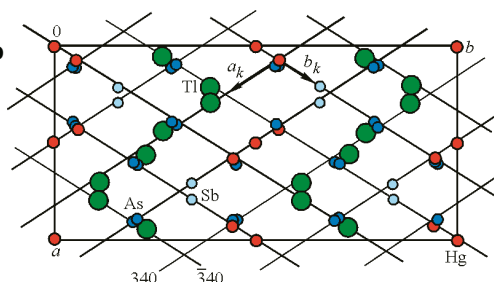
Борисов С.В., Магарилл С.А., Первухина Н.В.

910

Особенности кристаллообразования в ряде структур халькогенидов с одновалентным Tl.

Эффект упорядоченной упаковки в координации Tl

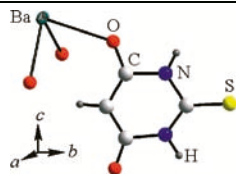
Ключевые слова: кристаллографический анализ, катионные и анионные подрешетки, Tl^+ - халькогениды, AgTlTe , врбаит (vrbaite), $\text{Hg}_3\text{Tl}_4\text{As}_8\text{Sb}_2\text{S}_{20}$, габриэлит (gabrielite), $\text{Tl}_2\text{AgCu}_2\text{As}_3\text{S}_7$, эффект упорядоченной упаковки в координации, координация Tl^+



Головнёв Н.Н., Молокеев М.С.

**Кристаллическая структура двух
2-тиобарбитуратных комплексов бария**

Ключевые слова: кристаллическая структура,
тиобарбитурат бария, водородные связи, π - π взаимодействие

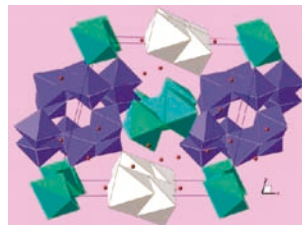


918

Радио С.В., Мельник Н.А., Иванцова Э.С., Баумер В.Н.

**Кристаллическая структура двойного
паравольфрамата Б натрия-меди(II)
 $\text{Na}_2\text{Cu}_3(\text{CuOH})_2[\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]\cdot 32\text{H}_2\text{O}$**

Ключевые слова: анион паравольфрамата Б,
изополивольфрамат, кристаллическая структура,
ИК спектроскопия, рентгеноструктурный анализ

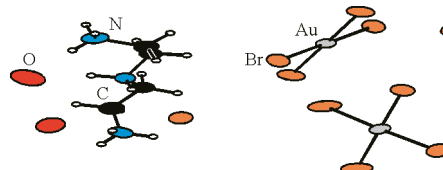


925

Макотченко Е.В., Байдина И.А., Корольков И.В.

**Строение тетрабромоауратов(III)
диэтилентриаммония**

Ключевые слова: золото, диэтилентриамин, комплексы,
рентгеноструктурный анализ

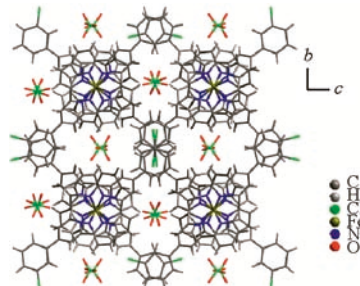


933

Fu W.-W., Zhang F.-X., Kuang D.-Z.

**Crystal structures of $[\text{Fe}(m\text{-NO}_2\text{phtpy})_2](\text{ClO}_4)_2$
and $[\text{Fe}(m\text{-Clphtpy})_2](\text{ClO}_4)_2$ ($m\text{-NO}_2\text{phtpy} =$
 $4'-(3\text{-nitrophenyl})-2,2':6',2''\text{-terpyridine}$
and $m\text{-Clphtpy} = 4'-(3\text{-chlorophenyl})-2,2':6',2''\text{-terpyridine}$)**

Keywords: iron(II) compound,
 $4'-(3\text{-nitrophenyl})-2,2':6',2''\text{-terpyridine}$,
 $4'-(3\text{-chlorophenyl})-2,2':6',2''\text{-terpyridine}$, crystal structure



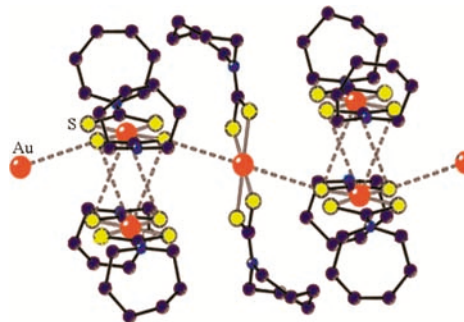
941

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Лосева О.В., Родина Т.А., Смоленцев А.И., Иванов А.В.

**Получение, супрамолекулярная самоорганизация
и термическое поведение
гетерополиядерного комплекса
 $([\text{H}_3\text{O}][\text{Au}\{\text{S}_2\text{CN}(\text{CH}_2)_6\}_2][\text{Au}_2\{\text{S}_2\text{CN}(\text{CH}_2)_6\}_4][\text{ZnCl}_4]_2)_n$**

Ключевые слова: диалкилдитиокарбаматы цинка
со свойствами хемосорбентов,
формы связывания золота из растворов,
гетерополиядерные комплексы золота(III)-цинка,
кристаллическая и супрамолекулярная структура,
PCA, MAS ЯМР ^{13}C , синхронный термический анализ



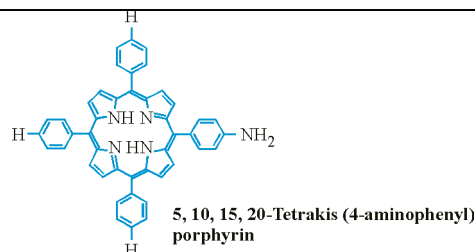
947

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Haroon-Ur-Rashid, Naveed Umar M., Khan K.,
Naveed Anjum M.

**Relaxivity measurement of new synthesized
porphyrin based magnetic resonance imaging (MRI)
contrast agents**

Keywords: contrast agent, porphyrin, relaxivity, gadolinium,
ligand



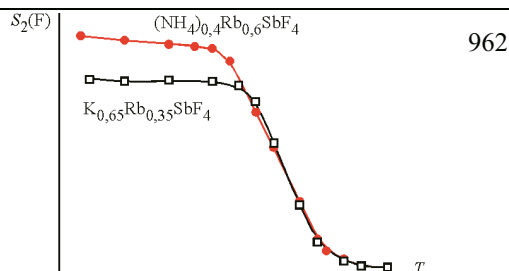
956

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Кавун В.Я., Полянцев М.М., Земнухова Л.А.,
Бровкина О.В., Сергиенко В.И.

**Ионная подвижность и фазовые переходы
в соединениях $K_{0,65}Rb_{0,35}SbF_4$ и $(NH_4)_{0,4}Rb_{0,6}SbF_4$
по данным ЯМР и ДСК**

Ключевые слова: тетрафтороантимонаты(III) калия–рубидия
(аммония), ионная подвижность, фазовые переходы,
спектры ЯМР ^{19}F , 1H

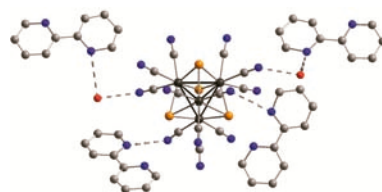


962

Гайфулин Я.М., Смоленцев А.И., Миронов Ю.В.

**Кристаллическая структура ионного кластерного
комплекса $(2,2'-bipyH_2)_2[Re_4Se_4(CN)_{12}] \cdot (2,2'-$
 $bipy) \cdot 7H_2O$**

Ключевые слова: рений, кубановый кластерный комплекс,
катион бипиридила, кристаллическая структура

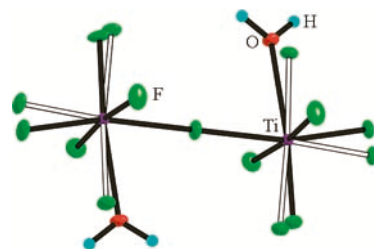


966

Давидович Р.Л., Ткачев В.В., Логвинова В.Б.,
Костин В.И., Ставила В.

**Кристаллическая структура фторидотитаната(IV)
тетраметиламмония с димерными комплексными
анионами различного состава**

Ключевые слова: кристаллическая структура,
фторидотитанат(IV), тетраметиламмоний,
димерный комплексный анион, октаэдр, тетраэдр

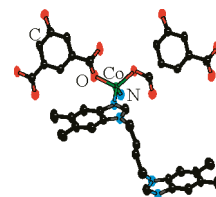


969

Ming C.L., Du X., Qin L., Cui G.H.

**Crystal structural and fluorescence properties of a two-
dimensional cobaltous coordination polymer containing
bis(benzimidazole) ligand**

Keywords: 1,4-bis(5,6-dimethyl-benzimidazolyl)-2-butene,
Co(II) complex, crystal structure

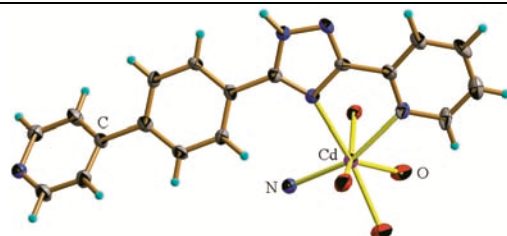


973

Liu F.-L., Wang X.-P., Sun D.

**Crystal structure of a novel cadmium sulfate
coordination polymer based on multidentate
2-(3-(4-(pyridin-4-yl)phenyl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl)
pyridine ligand**

Keywords: coordination polymer, cadmium complex, sulfate
2-(3-(4-(pyridin-4-yl)phenyl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl)pyridine

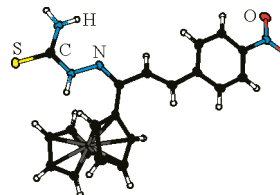


978

Wang N., Huo Y.

**Single crystal structure of new (*Z*)-2-((*E*)-3-
(4-nitrophenyl)-1-ferrocenylallylidene)hydrazine
carbothioamide**

Keywords: X-ray diffraction, monoclinic symmetry,
carbothioamide, ferrocenyl

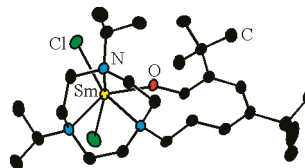


983

Cui J., Santos I.C., Carretas J.M.

**Yttrium and samarium complexes with a linked 1,4,7-
triazacyclononane-aryloxide ancillary ligand**

Keywords: 1,4,7-triazacyclononane (TACN), yttrium, samarium,
synthesis, crystal structures



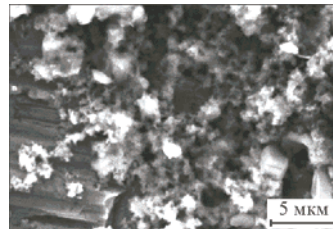
987

**МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ
«МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ СОСТАВА И СТРУКТУРЫ
ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ»,
НОВОСИБИРСК, 21 – 25 ОКТЯБРЯ 2013 г.**

Измайлов Р.Р., Голованова О.А., Панова Т.В.

**Синтез и кристаллизация
карбонатгидроксилапатита на металлических
имплантатах**

Ключевые слова: синтез, синовиальная жидкость, титан, карбонатгидроксилапатит, обработка поверхности, мощный ионный пучок, кристаллизация

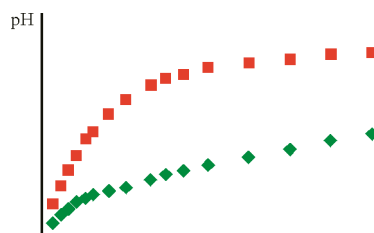


992

Бердинская М.В., Голованова О.А., Зайц А.В.,
Дроздов В.И., Леонтьева Н.Н., Антоничева Н.В.

**Физико-химическое исследование структуры,
состава и свойств гидроксилапатита,
модифицированного силикат-ионами**

Ключевые слова: гидроксилапатит, силикат-ионы, кремнийсодержащий гидроксилапатит, внеклеточная жидкость, структура, фазовый состав, биорезорбируемость

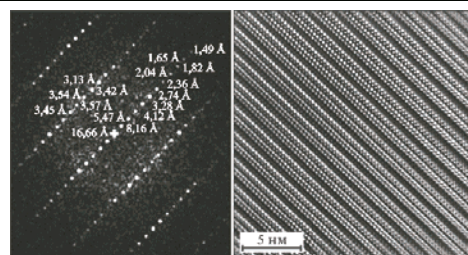


1000

Ищенко А.В., Ищенко Е.В., Андрушкевич Т.В.

**Исследование многокомпонентных MoVTe(Nb)O
катализаторов селективного превращения пропана
методами просвечивающей электронной
микроскопии**

Ключевые слова: просвечивающая электронная микроскопия, наноразмерные кристаллиты, M1 и M2 фазы, MoVTe(Nb)O-окисные катализаторы

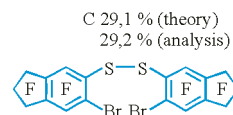


1007

Фадеева В.П., Тихова В.Д., Дерябина Ю.М.,
Никуличева О.Н.

**Определение органогенных элементов в составе
функциональных веществ и материалов**

Ключевые слова: элементный анализ, органогенные элементы, окисно-каталитические композиции, функциональные вещества и материалы

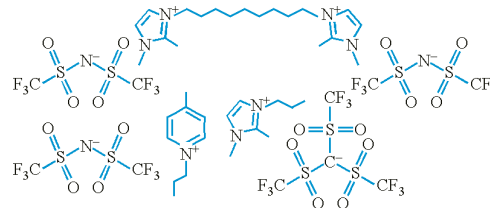


1017

Шашков М.В., Сидельников В.Н.

**Исследование характеристик пленок ионных
жидкостей методом капиллярной газовой
хроматографии**

Ключевые слова: ионные жидкости, газовая хроматография, неподвижные фазы, диффузия, загрузочная емкость

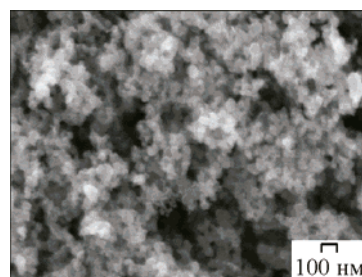


1025

Штерцер А.А., Ульяницкий В.Ю., Батраев И.С.,
Громилов С.А., Окотруб А.В., Сапрыкин А.И.

**Диагностика структуры и состава
ультрадисперсного углерода, полученного
детонационным способом**

Ключевые слова: ацетилен, кислород, детонация, углеродный конденсат, ультрадисперсные порошки, рентгенофазовый анализ, электронная микроскопия, комбинационное рассеяние, электрохимические свойства



1031