

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 49

Январь – февраль

№ 1, 2008

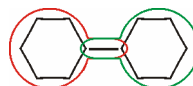
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Грибов Л.А.

Фрагментный метод расчета характеристик электронных состояний очень сложных молекул

Ключевые слова: сложные молекулы, электронные состояния, фрагментарность

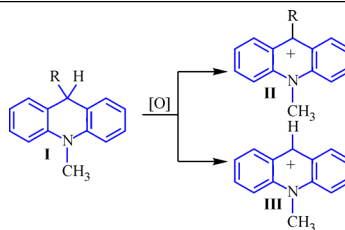


7

Гришина М.А., Потемкин В.А., Матерн А.И.

Теоретическое исследование реакций окисления акриданов

Ключевые слова: моделирование, комплексы, топологический анализ, акридан, структура, НАДН



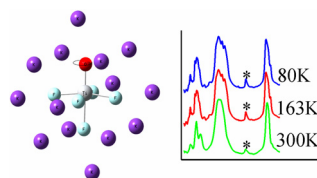
13

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Войт Е.И., Давыдов В.А., Машковский А.А., Войт А.В.

Исследование оксофторотитанатов $(\text{NH}_4)_3\text{TiOF}_5$ и $\text{Rb}_2\text{KTiOF}_5$ методами колебательной спектроскопии и квантовой химии

Ключевые слова: оксофторотитанат аммония, колебательная спектры, квантовая химия

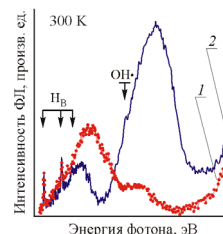


19

Расторгуев А.А., Белый В.И., Смирнова Т.П., Яковкина Л.В.

Исследование электронной структуры пленок HfO_2 методом фотолюминесценции

Ключевые слова: пленки диоксида гафния, фотолюминесценция, вода, гидроксил-радикал

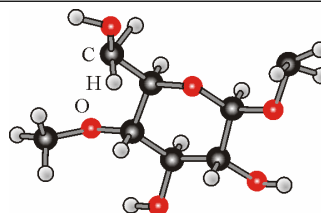


27

Королевич М.В., Пиоттух-Пелецкий В.Н., Жбанкова М.Р.

Спектроскопические признаки оксиметильных заместителей в β -D-глюкопиранозидах и их характеристичность

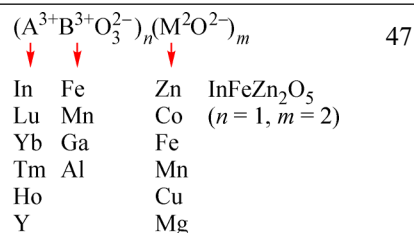
Ключевые слова: глюкопиранозиды, ИК спектроскопия, анализ нормальных колебаний, абсолютные ИК интенсивности, интерпретация ИК спектра



37

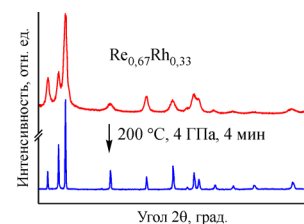
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Безносовых Б.В., Александров К.С.

Прогноз соединений, родственных $\text{InFeZn}_2\text{O}_5$ **Ключевые слова:** кристалл, гексагональные слоистые структуры, прогноз соединений

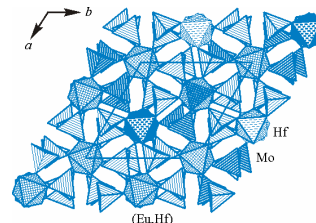
47

Громилов С.А., Шубин Ю.В., Филатов Е.Ю., Дьячкова Т.В., Киреев И.Б., Тютюнник А.П., Зайнулин Ю.Г.

Рентгенографическое исследование продуктов термобарической обработки твердого раствора $\text{Re}_{0,67}\text{Rh}_{0,33}$ **Ключевые слова:** родий, рений, карбид, твердый раствор замещения, камера высокого давления, рентгенофазовый анализ, термолиз, микротвердость

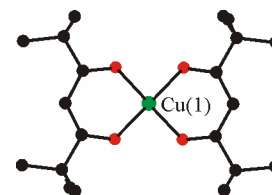
52

Базаров Б.Г., Чимитова О.Д., Клевцова Р.Ф., Тушинова Ю.Л., Глинская Л.А., Базарова Ж.Г.

Кристаллическая структура нового тройного молибдата в системе $\text{Rb}_2\text{MoO}_4\text{—Eu}_2(\text{MoO}_4)_3\text{—Hf}(\text{MoO}_4)_2$ **Ключевые слова:** рубидий, европий, гафний, тройные молибдаты, фазовые равновесия, кристаллическая структура

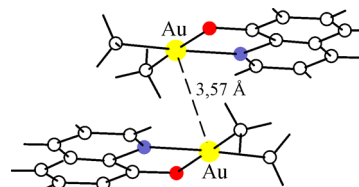
58

Жерикова К.В., Морозова Н.Б., Байдина И.А., Сысоев С.В., Игуменов И.К.

Кристаллическая структура и давление пара комплекса меди(II) с 2,2,6,6-тетраметил-4-фторогептан-3,5-дионом**Ключевые слова:** медь(II), β-дикетонаты, синтез, рентгеноструктурный анализ, давление пара

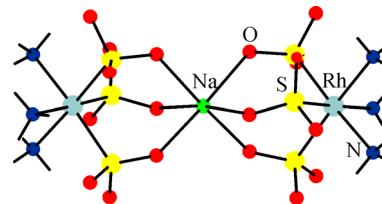
63

Бессонов А.А., Байдина И.А., Морозова Н.Б., Куратьева Н.В., Гельфонд Н.В., Игуменов И.К.

Кристаллическая структура 8-оксихинолината и 8-меркаптохинолината диметилзолота(III)**Ключевые слова:** 8-оксихинолинат, 8-меркаптохинолинат диметилзолота(III), кристаллическая структура

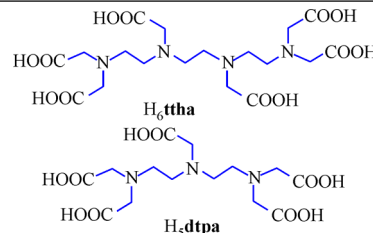
70

Байдина И.А., Беляев А.В., Громилов С.А.

Особенности кристаллической структуры трисульфатаммина Лебединского $\text{Na}_3[\text{Rh}(\text{SO}_3)_3(\text{NH}_3)_3] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ **Ключевые слова:** родий, комплекс, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия

75

Wang J., Liu X.Zh., Wang X.F., Gao G.R., Xing Zh.Q., Zhang X.D., Xu R.

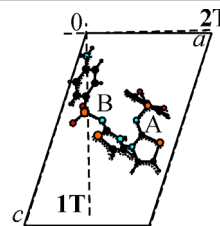
Nine-coordinate rare earth metal complexes with aminopolycarboxylic acids: mononuclear $(\text{NH}_4)_3[\text{Tb}^{\text{III}}(\text{ttha})]5\text{H}_2\text{O}$ and binuclear $(\text{NH}_4)_4[\text{Tb}^{\text{III}}_2(\text{dtpa})_2] \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ **Keywords:** Terbium(III), chelating ligands, ttha, dtpa, crystal structure, thermal analysis

81

Дребущак Т.Н., Болдырева Е.В., Михайленко М.А.

Кристаллическая структура полиморфных модификаций сульфатиазола в области температур 100-295 К – сравнительный анализ

Ключевые слова: полиморфизм, водородные связи, сульфатиазол, рентгеноструктурный анализ, низкие температуры, термическое расширение

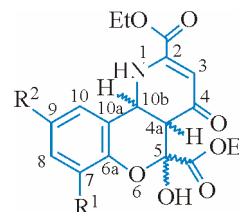


90

Миронова Е.В., Губайдуллин А.Т., Муртазина А.М., Литвинов И.А., Мамедов В.А.

Кристаллическая и молекулярная структура новых производных тетрагидробензо[*e*]пирано[4,3-*b*]пиридинов

Ключевые слова: тетрагидробензо[*e*]пирано[4,3-*b*]пиридины, кристаллическая и молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ

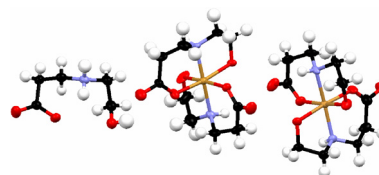


101

Пестов А.В., Слепухин П.А., Вировец А.В., Подберезская Н.В., Ятлук Ю.Г.

Строение кристаллов N-(2-гидроксиэтил)-β-аланина и рацемической смеси координационных стереоизомеров - (2-гидроксиэтил)-β-аланинато никеля(II)

Ключевые слова: кристаллическая структура, N-(2-гидроксиэтил)-β-аланинато никель (II), стереоизомеры, рацемическая смесь



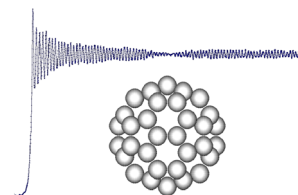
108

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Тытик Д.Л., Белащенко Д.К., Сиренко А.Н.

Структурные превращения в наночастицах серебра

Ключевые слова: нанотехнологии, металлические кластеры, кластеры серебра, метод молекулярной динамики, модель погруженного атома

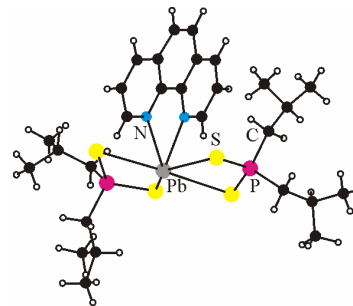


115

Клевцова Р.Ф., Санкова Е.А., Кокина Т.Е., Глинская Л.А., Ларионов С.В.

Разнолигандные комплексные соединения [Pb(Phen){(*изо*-C₄H₉)₂PS₂}₂], [Pb(2,2'-Bipy){(*изо*-C₄H₉)₂PS₂}₂] и образование супрамолекулярных ансамблей в их кристаллических структурах

Ключевые слова: синтез, разнолигандный комплекс, диизобутилдитиофосфинат, Pb, Phen, 2,2'-Bipy, кристаллическая и молекулярная структура, супрамолекулярный ансамбль

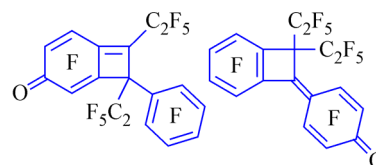


123

Рыбалова Т.В., Гатилов Ю.В., Синяков В.Р., Меженкова Т.В., Карпов В.М.

Рентгеноструктурное исследование производных полифтор-4-метиленициклогекса-2,5-диенона

Ключевые слова: полифторированный метиленициклогексадиенон, бензоциклобутен, структура, межмолекулярные взаимодействия, рентгеноструктурный анализ

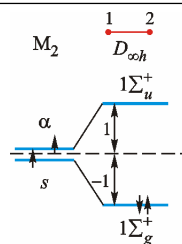


132

ОБЗОР

Шпак А.П., Засуха В.А., Трачевский В.В., Урубкова Е.В.
Электронная структура и физико-химические свойства кластеров *s*-элементов

Ключевые слова: методы теоретико-группового анализа и молекулярных орбиталей (МО), группы, кластеры, *s*-элементы



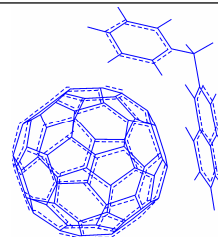
138

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Колкер А.М., Исламова Н.И.

Оценка энергии гиббса растворения фуллерена C_{60} в органических растворителях на основе аддитивно-группового метода

Ключевые слова: фуллерен C_{60} , аддитивно-групповой метод, функциональная группа, энергия Гиббса растворения, органические растворители

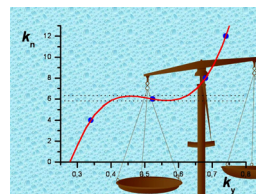


160

Магомедов М.Н.

О случайной упаковке одноатомных структур

Ключевые слова: случайная упаковка, координационное число, коэффициент упаковки, дилатанция, плавление, кристаллизация, стеклование

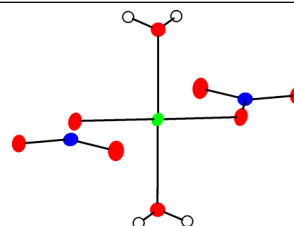


164

Громилов С.А., Храненко С.П., Байдина И.А., Вировец А.В., Пересыпкина Е.В.

Новая кристаллическая модификация динитратодиаквапалладия(II) – β -транс-[Pd(NO₃)₂(H₂O)₂]

Ключевые слова: палладий, нитраты, координационные соединения, кристаллическая структура, кристаллохимия

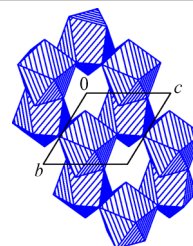


168

Громилов С.А., Храненко С.П., Байдина И.А., Куратьева Н.В.

Кристаллическая структура $K_2[Pd(NO_2)_4] \cdot 2H_2O$

Ключевые слова: палладий, нитриты, координационные соединения, кристаллическая структура, кристаллохимия

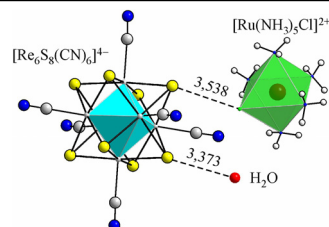


173

Юсенко К.В., Байдина И.А., Шушарина Е.А., Громилов С.А.

Псевдогексагональный мотив укладки комплексных анионов в структуре $Ru(NH_3)_5Cl_2[Re_6S_8(CN)_6] \cdot 3H_2O$

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, рентгенофазовый анализ, рутений, рений, кристаллохимия, хлоропентаммин

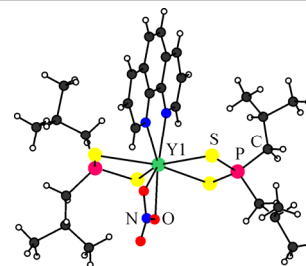


178

Варанд В.Л., Глинская Л.А., Клевцова Р.Ф., Ларионов С.В.

**Кристаллическая и молекулярная структура
разнолигандного соединения $[Y(Phen)\{i-C_4H_9\}_2PS_2\}_2NO_3]$**

Ключевые слова: синтез, разнолигандное соединение, иттрий(III), 1,10-фенантролин, кристаллическая и молекулярная структура, диизобутилдитиофосфинат

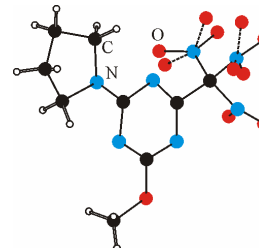


182

Бахарев В.В., Гидаспов А.А., Литвинов И.А., Миронова Е.В.

Молекулярная структура 2-метокси-4-пирролидинил-6-тринитрометил-1,3,5-триазина

Ключевые слова: органическая химия, структура кристаллов, 2-метокси-4-пирролидинил-6-тринитрометил-1,3,5-триазин

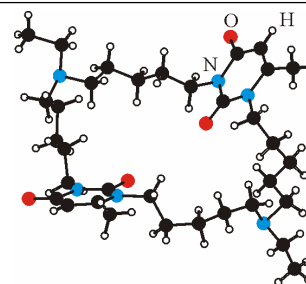


187

Лодочникова О.А., Губайдуллин А.Т., Литвинов И.А.,
Семенов В.Э., Гиниятуллин Р.Х., Резник В.С.

**Кристаллическая структура пиримидинофана,
содержащего два урациловых фрагмента с *цис*-
ориентацией карбонильных групп**

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, межмолекулярные π - π -взаимодействия, пиримидинофаны

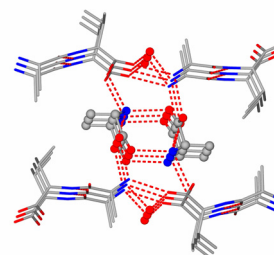


190

Burchell T.J., Soldatov D.V., Ripmeester J.A.

**Crystal structure of the CO-crystal $ALA-VAL \cdot ALA \cdot H_2O$: a
layered inclusion compound**

Keywords: L-alanyl-L-valine, L-alanine, crystal structure, co-crystal, dipeptide, amino acid, β -sheet, layered structure, clathrate, channel



193

Содержание следующего номера — в конце журнала