

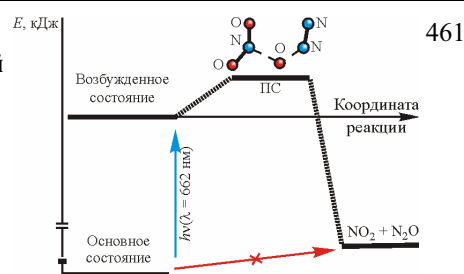
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Захаров И.И.

**Исследование структуры высокоэнергетических состояний триоксида азота и димера (NO)<sub>2</sub>: DFT расчеты в рамках симметризованного формализма Кона—Шэма**

**Ключевые слова:** квантово-химические расчеты, метод функционала плотности (DFT), высокоэнергетические состояния, NO<sub>3</sub> и (NO)<sub>2</sub>, молекулярная структура и реакционная способность, активация N<sub>2</sub> и N<sub>2</sub>O

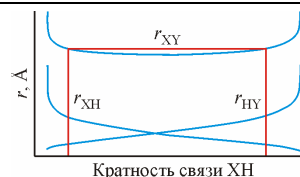


461

Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В.

**Взаимосвязь между длиной водородного мостика и положением в нем протона**

**Ключевые слова:** водородный мостик, длина Н-связи, положение протона, квантово-химический расчет

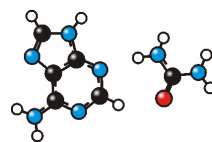


470

Qiu Z., Xia Yo., Wang H., Diao K.

**Hydrogen-bonding interaction of urea with DNA bases: A density functional theory study**

**Keywords:** DFT, urea, hydrogen bond, interaction energy



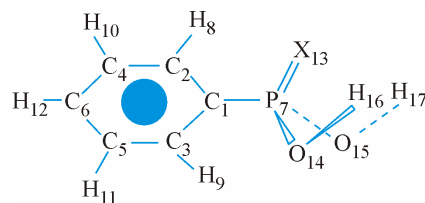
478

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Förner W., Badawi H.M.

**Study of vibrational spectra and their assignments for phenylphosphonic and phenylthiophosphonic acid and comparison to experiments**

**Keywords:** DFT and MP2 calculations, normal coordinate analyses, vibrational spectra and assignments, phenylphosphonic acid, phenylthiophosphonic acid

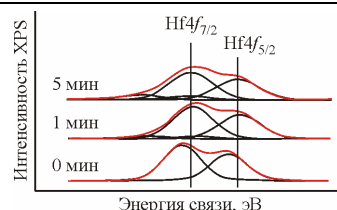


487

Каичев В.В., Дубинин Ю.В., Смирнова Т.П., Лебедев М.С.

**Изучение структуры пленок (HfO<sub>2</sub>)<sub>x</sub>(Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)<sub>1-x</sub>/Si методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии**

**Ключевые слова:** диоксид гафния, оксид алюминия, алюминат гафния, бинарный раствор, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, послойный анализ



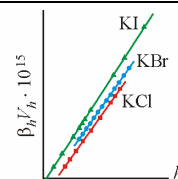
495

## СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Афанасьев В.Н., Устинов А.Н.

### Исследование гидратации галогенидных солей калия методом адиабатического сжатия

**Ключевые слова:** адиабатическая сжимаемость, числа гидратации, адиабатическая сжимаемость гидратных комплексов

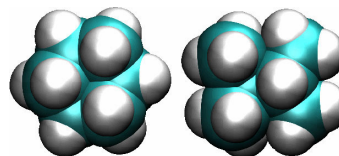


503

Аникеенко А.В., Медведев Н.Н.

### О причине высокой плотности жидкого циклогексана

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, структура простых жидкостей, молекулярные жидкости, жидкие алканы



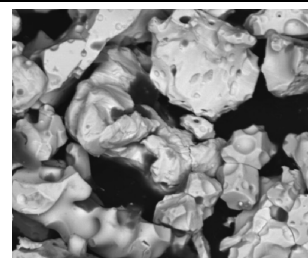
513

## СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

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

### Образование твердых растворов в системе Re—Rh при термобарической обработке наноразмерных металлических порошков

**Ключевые слова:** родий, рений, нанокристаллические порошки, камера высокого давления, рентгенофазовый анализ, твердофазная растворимость



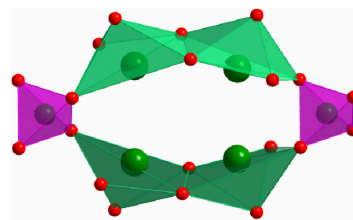
520

## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Мельникова Т.И., Кузьмичева Г.М., Рыбаков В.Б., Болотина Н.Б., Дубовский А.Б., Куссон А.

### Состав и строение твердых растворов в системе $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{—SiO}_2\text{—V}_2^{5+}\text{O}_5$ со структурой силленита

**Ключевые слова:** силленит, гидротермальный синтез, нейтронография, рентгенография, состав, дефекты, диссимметризация

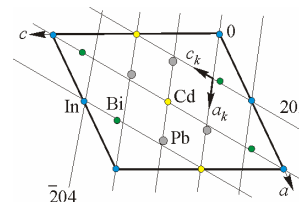


526

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

### Кристаллографический анализ строения ряда «таблетчатых» сульфидов с Bi, In, Pb

**Ключевые слова:** «таблетчатые» структуры, структурообразующие факторы, катионные и анионные матрицы, строительные блоки, структуры сульфидов и сульфосолей

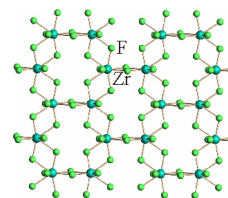


533

Герасименко А.В., Давидович Р.Л., Логвинова В.Б.

### Кристаллические структуры слоистых пентафтороцирконатов метиламмония, глицина и $\beta$ -аланиния

**Ключевые слова:** кристаллическая структура, фтороцирконат, сетчатый слой, метиламмоний, глициний,  $\beta$ -аланиний

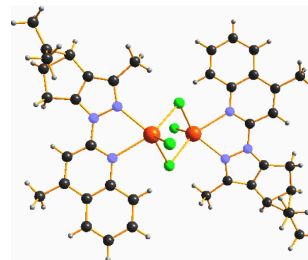


540

Ларионов С.В., Савельева З.А., Клевцова Р.Ф., Глинская Л.А., Усков Е.М., Рахманова М.И., Попов С.А., Ткачев А.В.

### Кристаллическая структура сольвата $[\text{Cd}_2\text{L}_2\text{Cl}_4] \cdot \text{CH}_2\text{Cl}_2$ (L = пирозолихинолин – производное монотерпеноида (+)-3-карена) и фотолюминесценция хирального комплекса $\text{CdLCl}_2$

**Ключевые слова:** комплекс, сольват, кадмий(II), структура, хиральность, фотолюминесценция

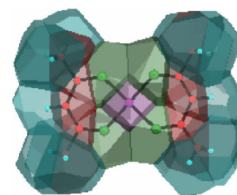


547

Сережкин В.Н., Сукачев Н.В., Сережкина Л.Б., Пушкин Д.В.

**Особенности межмолекулярных взаимодействий в кристаллах ацетилацетонатов металлов**

**Ключевые слова:** энтальпия сублимации, структура кристаллов, полиэдры Вороного—Дирихле, невалентные взаимодействия, ацетилацетонаты,  $\pi$ -комплексы

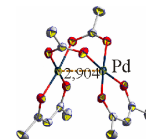


554

Храненко С.П., Шушарина Е.А., Громилов С.А., Коренев С.В.

**Две кристаллические модификации  $\text{Pd}_2(\mu\text{-ac})_2(\text{acac})_2$**

**Ключевые слова:** палладий, биядерный комплекс, ацетилацетон, ацетат, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ

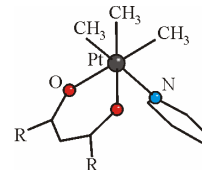


560

Жаркова Г.И., Байдина И.А., Наумов Д.Ю., Игуменов И.К.

**Кристаллическая структура летучих  $\beta$ -дикетонатов триметилплатины(IV) с пиридином**

**Ключевые слова:**  $\beta$ -дикетонаты триметилплатины(IV), структура, синтез, летучесть, термические свойства

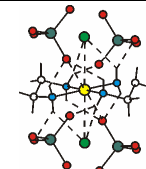


566

Макотченко Е.В., Байдина И.А.

**Структурное исследование комплексов  $[\text{Au}(\text{en})_2]\text{Cl}(\text{ReO}_4)_2$  и  $[\text{Au}(\text{en})_2](\text{ReO}_4)_3$**

**Ключевые слова:** золото, рений, этилендиамин, комплексы, рентгеноструктурный анализ

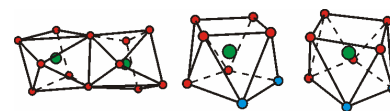


572

Стабников П.А., Жаркова Г.И., Смоленцев А.И., Первухина Н.В., Крисюк В.В.

**Строение и свойства дипивалоилметаната тербия(III) и его аддуктов с Bipy и Phen**

**Ключевые слова:** лантаниды, тербий, дипивалоилметанаты, гетеролигандные комплексы, кристаллическая структура, летучесть



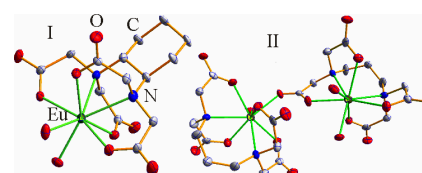
$[\text{Tb}(\text{tmdh})_3]_2$   $\text{Tb}(\text{tmdh})_3 \cdot \text{Bipy}$   $\text{Tb}(\text{tmdh})_3 \cdot \text{Phen}$

577

Wang J., Hu P., Liu B., Xu R., Wang X., Wang D., Zhang L.Q., Zhang X.D.

**Structural determination of new eight-coordinate  $\text{NH}_4[\text{Eu}^{\text{III}}(\text{CYDTA})(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 4.5\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{K}_2[\text{Eu}_2^{\text{III}}(\text{PDTA})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  complexes**

**Keywords:**  $\text{Eu}^{\text{III}}$ , cydta, pdta, complex, synthesis, structure

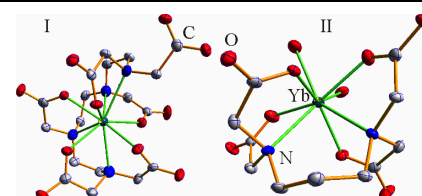


585

Wang J., Hu P., Han G., Zhang L., Li D., Xu R., Chen X., Zhang X.D.

**New nine-coordinate  $(\text{NH}_4)_3[\text{Yb}^{\text{III}}(\text{TTHA})] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  and eight-coordinate  $(\text{NH}_4)[\text{Yb}^{\text{III}}(\text{PDTA})(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  complexes: structural determination**

**Keywords:** ytterbium(III), ttha, pdta, complex, synthesis, structure

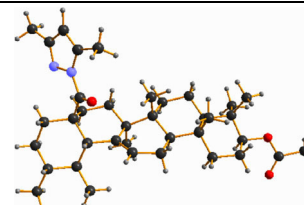


592

Попов С.А., Глинская Л.А., Кокина Т.Е., Клевцова Р.Ф., Шпатов А.В.

**Кристаллическая и молекулярная структура 3,5-диметил-1*H*-пиразолида 3-О-ацетилурсоловой кислоты**

**Ключевые слова:** пиразолиды, урсоловая кислота, кристаллическая структура

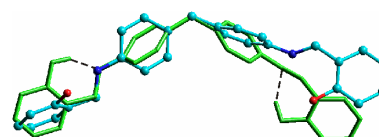


599

Ge C., Zhang X., Guo Ya., Zhang R., Bian H., Zhang Sh.

**Structural and quantum chemical analysis on 4,4'-di(2-hydroxybenzylamino)diphenylmethane**

**Keywords:** 4,4'-di(2-hydroxybenzylamino)diphenylmethane, crystal structure, quantum chemistry, ONIOM method

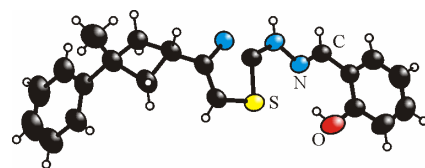


605

Güntep F., Saraçoğlu H., Çalışkan N., Yüksekçepe Ç., Çukurovalı A.

**Structure and DFT calculations of 2-[[3-methyl-3-phenyl-cyclobutyl]-thiazol-2-yl]-hydrazonomethyl}-phenol**

**Keywords:** crystal structure, IR spectra, DFT calculations



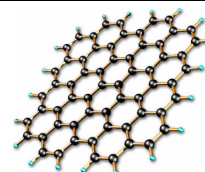
612

**ОБОЗРЫ**

Бацанов С.С.

**Размерный эффект в строении и свойствах конденсированных веществ**

**Ключевые слова:** нанозапазы, структура, межатомные расстояния, модуль упругости, фазовые переходы, температура плавления



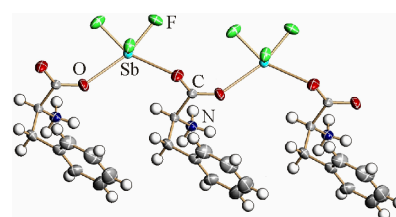
618

**КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ**

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

**Кристаллическая структура молекулярного аддукта фторида сурьмы(III) с L-фенилаланином**

**Ключевые слова:** рентгеноструктурный анализ, кристаллическая структура, фторид сурьмы(III), L-фенилаланин, молекулярный аддукт, ИК спектры поглощения

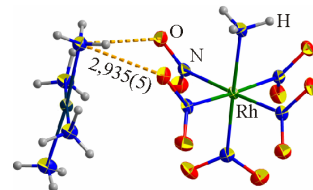


631

Шушарина Е.А., Рыбинская А.А., Плюснин П.Е., Шубин Ю.В., Коренев С.В., Громилов С.А.

**Кристаллическая структура [Pd(NH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>][Rh(NH<sub>3</sub>)(NO<sub>2</sub>)<sub>5</sub>]**

**Ключевые слова:** палладий, родий, двойная комплексная соль, рентгеноструктурный анализ, рентгенофазовый анализ, твердый раствор

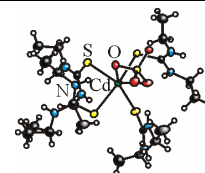


636

Altaf M., Stoeckli-Evans H., Murtaza Gh., Isab A.A., Ahmad S., Shaheen M.A.

**Structural characterization of a cadmium(II)-sulfato complex, [Cd(N,N'-diethyl thiourea)<sub>4</sub>(SO<sub>4</sub>)]**

**Keywords:** cadmium sulfate, N,N'-diethyl thiourea, crystal structure

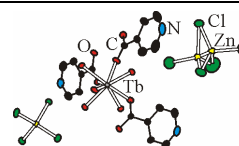


640

Chen W.-T., Ying Sh.-M., Xu Ya.-P., Luo Q.-Ya., Liu D.-Sh.

**Structure and luminescence of [Tb<sub>0.5</sub>(C<sub>6</sub>NO<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>3</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sub>2n</sub>·(H<sub>3</sub>O)<sub>4n</sub>(ZnCl<sub>5</sub>)<sub>n</sub>(ZnCl<sub>4</sub>)<sub>2n</sub>**

**Keywords:** crystal structure, terbium, lanthanide, photoluminescence

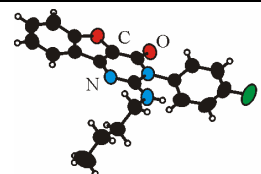


645

Hu Ya.-G., Chen X.-B., Gao H.-T., Ding M.-W.

**Crystal structure of 2-butylamino-3-(4-fluorophenyl) benzofuro[3,2-d]pyrimidin-4(3H)-one**

**Keywords:** crystal structure, benzo[4, 5]furo[3, 2-d]pyrimidin-4(3H)-one, aza-Wittig reaction

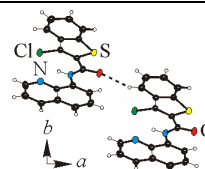


649

Abbasi A., Zamanian S., Tarighi S., Badiei A., Hantehzadeh M.R.

**Structural studies of 3-chloro-N-(8'-quinolyl)benzo[b]thiophene-2-carboxamide**

**Keywords:** benzothiophene, carboxamide, crystal structure, hydrogen bonding, CH—π interaction, π—π interaction



653

**Содержание следующего номера — в конце журнала**