

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 49

Сентябрь-октябрь

№ 5, 2008

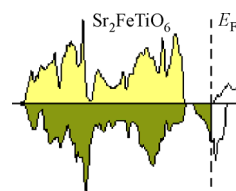
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Банников В.В., Шеин И.Р., Кожевников В.Л., Ивановский А.Л.

**Электронная структура и магнитные свойства
двойных перовскитов Sr_2FeMO_6 ($M = \text{Sc}, \text{Ti}, \dots, \text{Ni}, \text{Cu}$)
по результатам зонных расчетов FLAPW-GGA**

Ключевые слова: двойные перовскиты Sr_2FeMO_6 , зонная структура,
магнетизм, моделирование

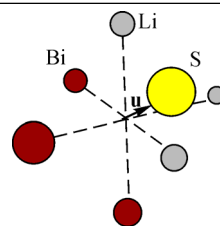


815

Габрельян Б.В., Лаврентьев А.А., Никифоров И.Я.,
Соболев В.В.

**Электронная энергетическая структура MBiS_2 ($M = \text{Li}, \text{Na},$
 K) с учетом рассогласования длин связей $M-S, \text{Bi}-S$**

Ключевые слова: электронная структура, сульфиды, плотность
электронных состояний, рентгеновские спектры

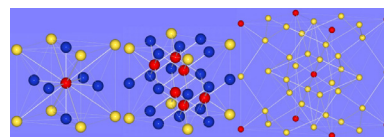


821

Илясов А.В., Рыжкин А.А., Илясов В.В.

**Электронная структура и химическая связь в карбидах,
кристаллизующихся в системе $\text{Fe}-\text{W}-\text{C}$**

Ключевые слова: электронная энергетическая структура,
особенности химической связи

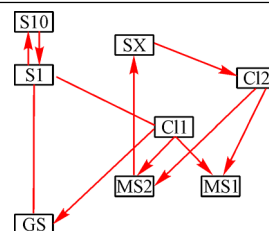


827

Барановский В.И., Сизова О.В.

**Квантово-химическое изучение роли
конических пересечений в процессах фотоизомеризации
комплекса $[\text{RuCl}_5\text{NO}]^{2-}$**

Ключевые слова: нитрозокомплексы переходных металлов,
изомеры связи, конические пересечения, квантовохимический расчет,
метод функционала плотности

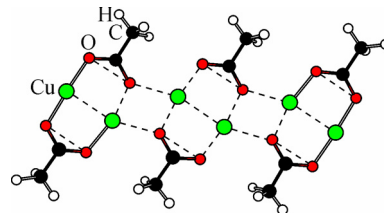


835

Бажанова З.Г., Тарасов Ю.И., Ковтун Д.М., Болталин А.И.,
Новосадов Б.К., Кочиков И.В.

**Квантово-химическое исследование структуры олигомеров
ацетата и трифторацетата Cu(I)**

Ключевые слова: ацетат меди(I), трифторацетат меди(I),
квантово-химические расчеты, олигомеры, структура



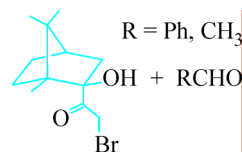
842

Yuan J.Y., Liao X.C., Wang H.M., Tang M.S.

851

Camphor-based α -Bromoketones for the Asymmetric Darzens Reaction: Insights into the Mechanism Using Density Functional Theory

Keywords: DFT, Darzens condensation, benzaldehyde, acetaldehyde, endo-2-bromoacetylisoborneol, mechanism, transition states, diastereoselectivity, aldol, boat-like, chair-like

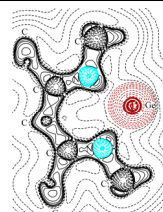


Алексеев Н.В., Чернышев Е.А.

861

Квантово-химическое исследование связей германий – заместитель в соединениях трехкоординированного германия

Ключевые слова: квантовая химия, метод NBO, метод AIM, соединения трехкоординированного германия



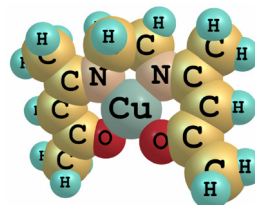
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

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

871

Строение молекул N,N'-этилен-бис(ацетилацетониминатов) никеля(II) и меди(II), MO₂N₂C₁₂H₁₈, по данным метода газовой электронографии и квантово-химических расчетов

Ключевые слова: строение, основания Шиффа, CuO₂N₂C₁₂H₁₈, NiO₂N₂C₁₂H₁₈, Cu(асасен), Ni(асасен), электронография, квантово-химические расчеты

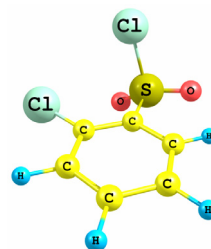


Петрова В.Н., Петров В.М., Гиричев Г.В., Оберхаммер Х., Иванов С.Н.

883

Электронографическое и квантово-химическое исследование строения молекулы 2-хлорбензолсульфонилхлорида

Ключевые слова: 2-хлорбензолсульфохлорид, конформер, молекулярная структура, внутреннее вращение, потенциальные функции, газовая электронография, квантовая химия, масс-спектрометрия

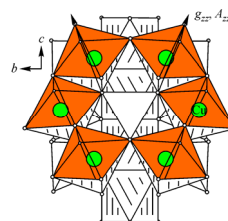


Надолинный В.А., Черней Н.В., Сеницын А.В., Павлюк А.А., Солодовников С.Ф.

891

Исследование методом ЭПР природы примесных центров, отвечающих за сцинтилляционные свойства кристалла Li₂Zn₂(MoO₄)₃

Ключевые слова: ЭПР, рентгеноструктурный анализ, сцинтиллятор, ионы меди, моделирование спектров ЭПР



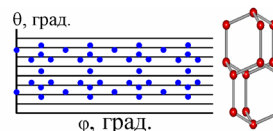
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Тытик Д.Л.

896

Угловые инварианты и локальный порядок в структурах веществ

Ключевые слова: кристаллический модуль, разбиение Делоне

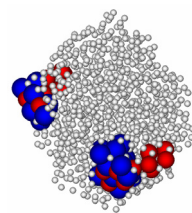


Бушуев Ю.Г., Давлетбаева С.В.

901

Структурные изменения в процессах кристаллизации по данным молекулярно-динамического моделирования кластеров NaCl

Ключевые слова: структура метастабильных жидкостей, нуклеация, кинетика нуклеации, кристаллизация, компьютерное моделирование жидкостей

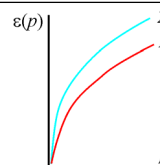


Литинский Г.Б.

907

Диэлектрические свойства жидкости дипольных твердых сфер

Ключевые слова: фактор Кирквуда, диэлектрическая проницаемость, полярные жидкости, дипольные твердые сферы

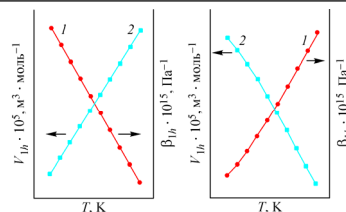


Афанасьев В.Н., Устинов А.Н.

912

Сольватация хлорида и сульфата магния в водных растворах в расширенном диапазоне температур 278,15-323,15 K

Ключевые слова: число гидратации, сжимаемость гидратных комплексов

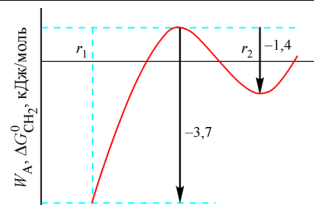


Миргород Ю.А.

920

Термодинамический анализ динамической структуры мицеллярных растворов алкилсульфатов натрия

Ключевые слова: алкилсульфаты натрия, мицелла, термодинамические циклы, гидрофобное взаимодействие, бистабильная структура



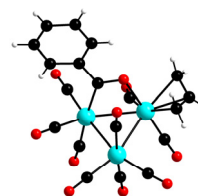
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Максаков В.А., Первухина Н.В., Подберезская Н.В., Афонин М.Ю., Потемкин В.А., Киринов В.П.

926

Рентгеноструктурный и конформационный анализ нового трехъядерного кластера осмия Os3(μ,η²-OCC6H5)(η³-C3H5)(CO)9

Ключевые слова: карбонильные трехосмиевые кластеры, синтез, кристаллическая структура, конформационный анализ

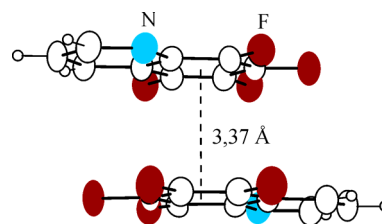


Багрянская И.Ю., Гришина М.А., Сафина Л.Ю., Селиванова Г.А., Потемкин В.А., Гатиллов Ю.В.

933

Рентгеноструктурные и квантово-топологические исследования межмолекулярных взаимодействий в кристаллах частично фторированных хинолинов

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, квантово-топологический анализ, фторированные хинолины, супрамолекулярные мотивы, π-стекинг, невалентные взаимодействия N...H, F...H, F...F и C—F...π

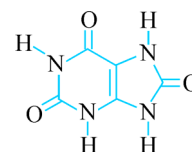


Головина Н.И., Нечипоренко Г.Н., Зюзин И.Н., Лемперт Д.Б., Немцев Г.Г., Шилов Г.В., Утенышев А.Н., Боженко К.В.

942

Некоторые аспекты межмолекулярного взаимодействия карбонильной и иминной групп в кристаллах соединений, содержащих шестичленные гетероциклы

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, межмолекулярные взаимодействия, квантово-химические расчеты, дигидрат 1,3,5-тригидроксиизоциануровой кислоты, 4-аминоурацил, моногидрат 4-аминоурацила

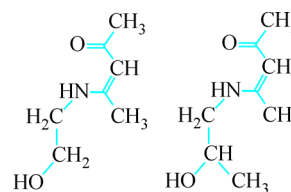


Добрынин А.Б., Грязнов П.И., Наумова О.Е., Литвинов И.А., Альфонсов В.А.

950

**Кристаллическая и молекулярная структура
(3Z)-(±)-4-(2'-гидроксипропил)амино-
и (3Z)-4-(2'-гидроксиэтил)амино-пент-3-ен-2-онов**

Ключевые слова: 4-(2'-гидроксиалкил)амино-пент-3-ен-2-оны, кристаллическая и молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ

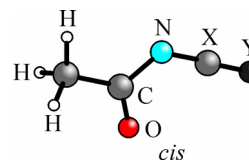


ОБЗОРЫ

Okulik N.B., Jubert A.H., Castro E.A.

**Theoretical Studies on the Structure
and Spectroscopic Properties of Pseudohalides**

Keywords: pseudohalides, photoelectron spectroscopy, theoretical calculations, DFT, *ab initio* methods



956

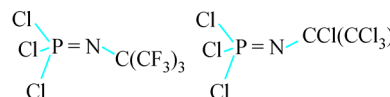
КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Шуров С.Н., Сойфер Г.Б.

971

**Конформационные особенности молекул
 $\text{Cl}_3\text{P} = \text{NC}(\text{CF}_3)_3$ и $\text{Cl}_3\text{P} = \text{NCCl}(\text{CCl}_3)_2$
по результатам неэмпирических расчетов**

Ключевые слова: трихлорфосфазосоединения, квантово-химические неэмпирические расчеты, молекулярная геометрия конформеров



Морозик Ю.И., Фоменко П.В., Шантроха А.В.

974

**Общая формула для расчета формальной неопределенности
химических соединений**

Ключевые слова: идентификация неизвестных веществ, формальная неопределенность, теория графов

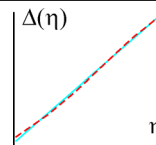
$$\Phi H = \frac{\sum_j a_j (V_j - 2) + 2}{2} = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Павлюхин Ю.Г.

977

Уравнение состояния жидкости твердых сфер

Ключевые слова: жидкость твердых сфер, уравнение состояния жидкости твердых сфер

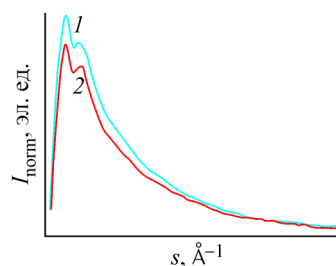


Гречин О.В., Кузнецов В.В., Якимова М.В.

982

**Рентгенодифракционный эксперимент на растворах
 $\text{DyBr}_3 : 20\text{H}_2\text{O}$, $\text{YbBr}_3 : 20\text{H}_2\text{O}$. Предглавный пик как
предпосылка к суждению о структурной организации
растворов**

Ключевые слова: водные растворы, лантанидные катионы, рентгенодифракционный метод, предглавный пик (ППП), диффузионно-усредненная структура (D-структура), координационное окружение катиона, моделирование растворов

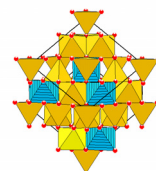


Смоленцев А.И., Мешалкин А.Б., Подберезская Н.В., Каплун А.Б.

985

Уточнение кристаллической структуры LiFe_5O_8

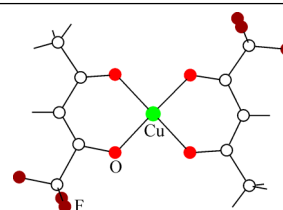
Ключевые слова: оксид лития и железа, феррит лития, вибрационный метод фазового анализа (ВФА), структурный тип шпинели, уточнение структуры



Байдина И.А., Стабников П.А., Громилов С.А.,
Смоленцев А.И.

**Кристаллическая структура
транс-бис(трифторацетилацетонато)меди(II)**

Ключевые слова: медь, β -дикетонаты, рентгеноструктурный анализ,
кристаллохимия

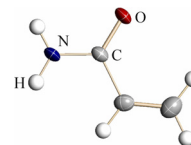


989

Удовенко А.А., Колзунова Л.Г.

Кристаллическая структура акриламида

Ключевые слова: акриламид, кристаллическая структура,
длины связей, валентные углы

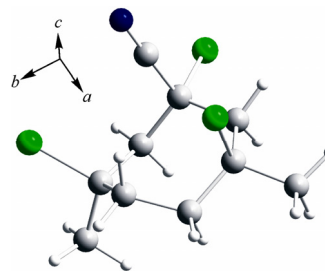


993

Карапетян А.А., Тамазян Р.А., Микаелян А.Р., Григорян А.М.,
Варданян А.С., Никогосян Л.Ж.

**Рентгеноструктурное исследование 1,3,6-трихлор-3,6-
диметилциклогептанкарбонитрила и 2,5-диметил-2,5-
дихлоргексана – продуктов взаимодействия
2,5-диметил-1,5-гексадиена с трихлорацетонитрилом**

Ключевые слова: регио- и стереоспецифичная внутримолекулярная
циклизация, циклогептанкарбонитрил



997

Yin Y.-B., Song Z.-Q., Wang Z.-D., Jiang H.-Q.

**Crystal and Molecular Structure of (\pm)-2-[(1*S*,3*S*)-3-Acetyl-2,2-
Dimethylcyclobutyl]-N-(*p*-Tolyl)Acetamide**

Keywords: single crystal X-ray diffraction, crystal structure, terpenes,
pinonic acid, cyclobutane fragment, hydrogen bond



1001

Содержание следующего номера — в конце журнала