

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 55

Март-апрель

№ 2, 2014

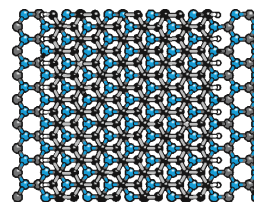
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Илясов В.В., Нгуен В.Ч., Ершов И.В., Нгуен Д.Ч.

***Ab initio* изучение структурных и электронных свойств нанолент графена типа зигзаг на гексагональном нитриде бора**

**Ключевые слова:** зонная структура, гетероструктура, гексагональный нитрид бора, наноленты графена, электронные свойства, магнитные моменты



209

Алексеев Н.В.

**Квантово-химическое исследование комплексов триметоксисилиния с нейтральными молекулами**

**Ключевые слова:** алюмооксаны, комплексы, квантовая химия, метод AIM, метод NBO

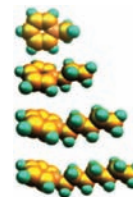


220

Белоцерковец Н.И., Никольский В.М.

**Неэмпирические квантово-химические расчеты структуры гомологического ряда катионов N-алкилпиридиния**

**Ключевые слова:** неэмпирические методы расчета, N-алкилпиридиний, оптимизация геометрии, конформации, полная энергия, парциальные заряды атомов, дипольные моменты, граничные орбитали

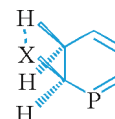


230

Il Beigi H.S., Nikbakht M., Ghanbar pour P.

***Ab initio* study of dehalohydrogenation reaction of 2-halo-2,3-dihydrophosphinine**

**Keywords:** *ab initio*, NBO, NICS, 2-halo-2,3dihydrophosphinines



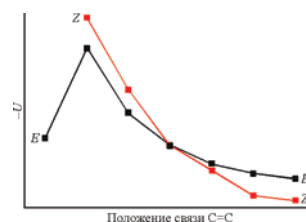
237

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Зенкевич И.Г.

**Молекулярные параметры для газохроматографической идентификации E- и Z-изомеров непредельных соединений**

**Ключевые слова:** непредельные соединения, (E)- и (Z)- изомеры, газохроматографические индексы удерживания, молекулярные топологические параметры, пентадецены, октадиены, метилоктадеценоаты, идентификация



243

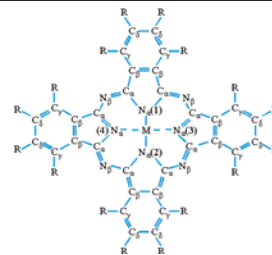
ИЗДАТЕЛЬСТВО СО РАН  
НОВОСИБИРСК  
2014

Семущкина Г.И., Мазалов Л.Н., Басова Т.В., Гуляев Р.В.

252

**Исследование электронной структуры фталоцианина меди и его фторзамещенного аналога методом рентгеновской абсорбционной спектроскопии**

**Ключевые слова:** фталоцианины, рентгеновская абсорбционная спектроскопия, фотоэлектронная спектроскопия

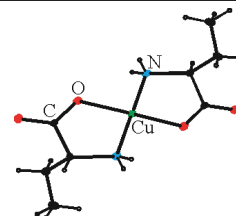


Kumar R., Obrai S.

261

**Comparison of computational studies with X- ray crystal structure of directly synthesized bis(D, L-aminobutyric)copper(II) complex**

**Keywords:** copper metal, direct synthesis, Cu( D,L-but)<sub>2</sub>, ZINDO, INDO, HOMO—LUMO

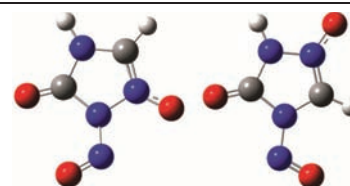


Ravi P., Tewari S.P.

268

**Structures and energies of the tautomers of 1-nitroso-1,2,4-triazol-5-one-2-oxide: new triazol-5-one-N-oxides**

**Keywords:** triazol-5-one-N-oxides, density, heat of explosion, detonation velocity, detonation pressure



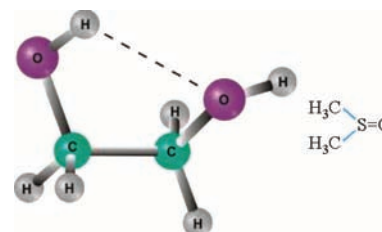
**СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ**

Родникова М.Н., Самигуллин Ф.М., Солонина И.А., Сироткин Д.А.

276

**Подвижность молекул и структура полярных жидкостей**

**Ключевые слова:** коэффициенты самодиффузии, пространственная сетка водородных связей, диамины, диолы, аминоспирты, диметилформамид, диметилсульфоксид, пропиленкарбонат

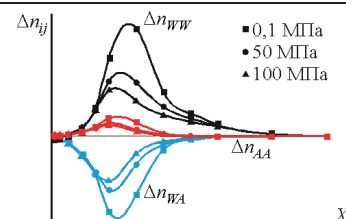


Макаров Д.М., Егоров Г.И.

283

**Анализ влияния давления на локальный состав в смеси вода — алканол с использованием интегралов Кирквуда—Баффа**

**Ключевые слова:** смеси вода—спирт, интегралы Кирквуда—Баффа, локальный состав, избыточное давление

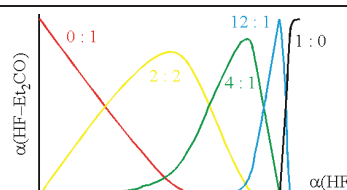


Юхневич Г.В., Тараканова Е.Г.

290

**Соотношение между по-разному ассоциированными молекулами раствора HF—Et<sub>2</sub>CO**

**Ключевые слова:** двойная жидкая система, ИК спектроскопия, водородная связь, гетероассоциаты, фтористый водород, диэтилкетон

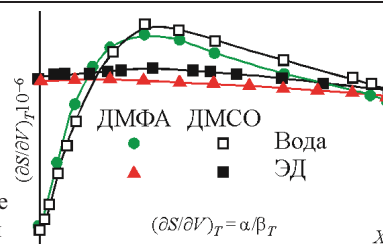


Зайчиков А.М., Крестьянинов М.А.

297

**Структурно-термодинамические характеристики и межмолекулярные взаимодействия в смесях сильно ассоциированных растворителей с апротонными амидами**

**Ключевые слова:** внутреннее давление, структурно-термодинамические характеристики, межмолекулярные взаимодействия, бинарные растворы

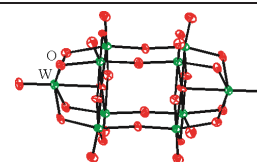


## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

### Кристаллическая структура $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]_2(\text{W}_{10}\text{O}_{32}) \cdot 4\text{H}_2\text{O}$

**Ключевые слова:** декавольфрамат, кобальт, комплексная соль, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ

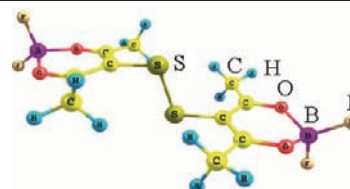


305

Буквецкий Б.В., Свистунова И.В., Гельфанд Н.А.

### Исследование кристаллической структуры двухъядерного ацетилацетоната дифторида бора

**Ключевые слова:** β-дикетонаты дифторида бора, двухъядерные комплексы, дисульфиды, кристаллическая структура



310

Пересыпкина Е.В., Вировец А.В., Адонин С.А., Абрамов П.А., Рогачёв А.В., Синкевич П.Л., Корнев В.С., Соколов М.Н.

### Кристаллическая структура двух солей на основе аниона $[\text{H}_2\text{W}_{12}\text{O}_{42}]^{10-}$ паравольфрамата-В

**Ключевые слова:** полиоксометаллаты, паравольфрамат-В, смешанные соли, кристаллическая структура

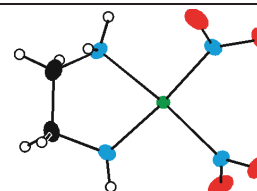


315

Храненко С.П., Куратьева Н.В., Плюснин П.Е., Громилов С.А.

### Две кристаллические модификации $[\text{PdEn}(\text{NO}_2)_2]$ . Синтез, строение, термические свойства

**Ключевые слова:** палладий, этилендиамин, комплексные соединения, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия, термические свойства

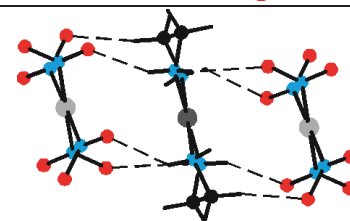


319

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

### Кристаллические структуры $[\text{MEn}_2][\text{Pt}(\text{NO}_2)_4]$ ( $\text{M} = \text{Cu}, \text{Pd}$ )

**Ключевые слова:** палладий, медь, платина, этилендиамин, двойная комплексная соль, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия

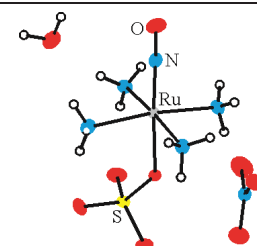


326

Махиня А.Н., Ильин М.А., Байдина И.А., Плюснин П.Е., Алферова Н.И., Пищур Д.П.

### Строение, синтез и термические свойства *транс*- $[\text{Ru}(\text{NO})(\text{NH}_3)_4(\text{SO}_4)]\text{NO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$

**Ключевые слова:** рутений, нитрозокомплексы, амминокомплексы, сульфатоккомплексы, синтез, рентгеноструктурный анализ, термический анализ

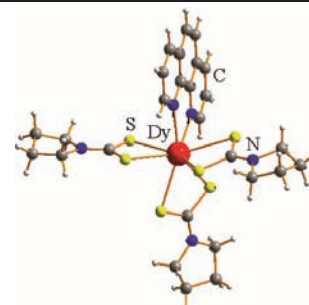


331

Брылёва Ю.А., Глинская Л.А., Корольков И.В., Богомяков А.С., Рахманова М.И., Наумов Д.Ю., Кокина Т.Е., Ларионов С.В.

### Структура сольвата $\text{Dy}(\text{Phen})(\text{C}_4\text{H}_8\text{NCS}_2)_3 \cdot 3\text{CH}_2\text{Cl}_2$ . Магнитные свойства и фотолюминесценция комплексов $\text{Ln}(\text{Phen})(\text{C}_4\text{H}_8\text{NCS}_2)_3$ ( $\text{Ln} = \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Tm}$ )

**Ключевые слова:** лантаниды, пирролидиндитиокарбамат, Phen, разнотетрамерный комплекс, структура, магнитные свойства, фотолюминесценция



339