

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 49

Май – июнь

№ 3, 2008

СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Тапилин В.М.

407

Новый подход к проблеме корреляции: величина потенциала межэлектронного взаимодействия как переменная при решении многочастичного уравнения Шредингера

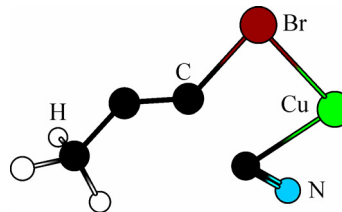
$$\psi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r})\chi(p)$$

Ключевые слова: электрон-электронные корреляции, энергии ионизации гелиеподобных ионов, обобщенные уравнения Хартри–Фока

Фролов Ю.Л., Ващенко А.В., Смирнов В.И., Малькина А.Г., Трофимов Б.А.

415

Квантово-химическое рассмотрение нуклеофильного замещения атома брома на цианогруппу при *sp*-гибридизованном атоме углерода на примере молекулы метилбромацетилена



Ключевые слова: квантово-химические неэмпирические расчеты, нуклеофильное замещение, металлокомплексный катализ, замещенные ацетилены

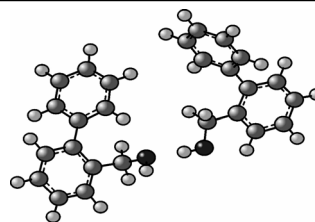
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Бабков Л.М., Давыдова Н.А., Успенский К.Е.

419

Водородная связь и структуры 2-, 3- и 4-бифенилметанолов

Ключевые слова: ИК спектр, структура, водородная связь, Н-комплекс, моделирование, метод функционала плотности, триклинная модификация, моноклинная модификация, стеклофаза, жидкость

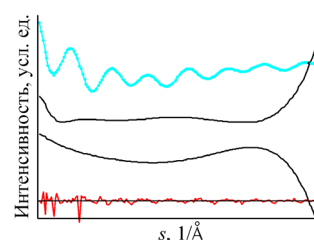


Тарасов Ю.И., Кочиков И.В., Иванов А.А., Ковтун Д.М., Рыков А.Н.

427

Постороннее рассеяние и его выделение в методе газовой электронографии

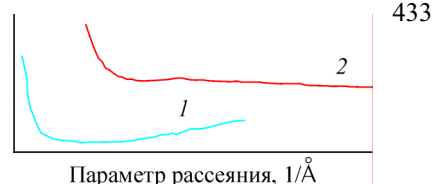
Ключевые слова: газовая электронография, аддитивный и мультипликативный фон, постороннее рассеяние, секторная функция



Тарасов Ю.И., Кочиков И.В., Иванов А.А., Ковтун Д.М., Журко Г.А.

Конструирование оптимального секторного устройства и определение его параметров в методе газовой электронографии

Ключевые слова: газовая электронография, секторная функция, линия фона

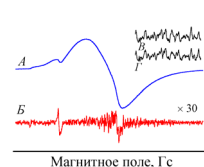


433

Мартыанов О.Н., Юданов В.Ф.

Образование дисперсных ферромагнитных наночастиц в цеолитах в ходе термокислородной активации

Ключевые слова: цеолиты, термокислородная обработка, ферромагнитные наночастицы, ферромагнитный резонанс

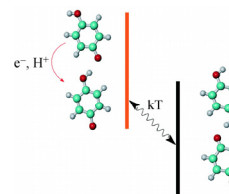


439

Калниньш К.К.

Электронно-протонный эффект и структура возбужденных молекулярных комплексов

Ключевые слова: молекулярный комплекс с переносом заряда, электроно-донорно-акцепторная связь, водородная связь

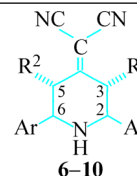


445

Manimekalai A., Anusuya J., Jayabharathi J.

Synthesis and conformational analysis of some cyanomethylene derivatives of piperidines

Keywords: molecular conformation, saturated heterocycles, six-membered cycles, computations, NMR spectra; mass spectra, A^{1,3} strain



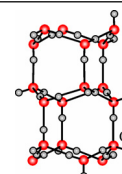
465

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Желиговская Е.А.

Изучение кристаллических водных льдов методом молекулярной динамики

Ключевые слова: водные системы, моделирование, самоорганизация, метод молекулярной динамики

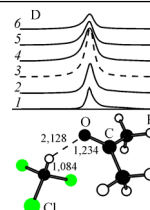


476

Хатмуллина М.Т., Рабчук Л.В., Лазарев В.В., Краузе А.С.

Исследование ассоциации молекул в смеси ацетона с трихлорметаном методом ИК-спектроскопии

Ключевые слова: ацетон (АЦ), трихлорметан (ТХМ), ассоциация, водородная связь, интегральный коэффициент поглощения (α), интегральный молярный коэффициент поглощения



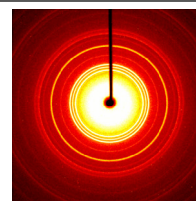
490

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Алексеев А.В., Громилов С.А., Киреенко И.Б., Дребущак Т.Н., Кинеловский С.А.

Рентгенофазовый анализ микроучастков кумулятивного покрытия на титане

Ключевые слова: титан, нитрид титана, полнопрофильное уточнение, рентгенофазовый анализ, микротвердость

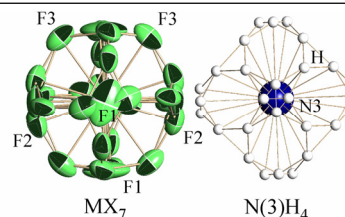


495

Удовенко А.А., Лапташ Н.М.

Ориентационный беспорядок в кристаллических структурах (NH₄)₃ZrF₇ и (NH₄)₃NbOF₆

Ключевые слова: аммонийнофторидные комплексы циркония и ниобия, кристаллическая структура, пентагональная бипирамида, ориентационный беспорядок

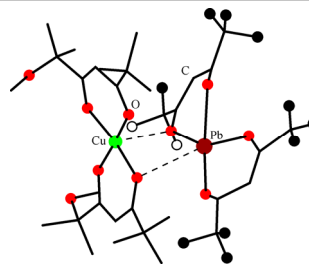


500

Байдина И.А., Крисюк В.В., Пересыпкина Е.В.,
Стабников П.А.

Явление *транс–цис*-изомеризации β-дикетоната меди(II) при сокристаллизации с гексафторацетилацетонатом свинца(II)

Ключевые слова: медь, свинец, кристаллохимия β-дикетонатов, гетерометаллические комплексы, *цис–транс*-изомерия



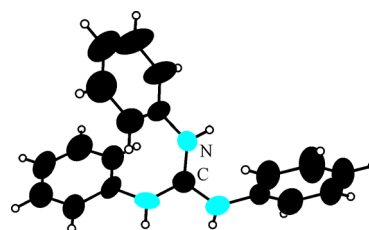
507

Полянская Т.М., Ильинчик Е.А., Волков В.В., Дроздова М.К.,
Юрьева О.П., Романенко Г.В.

Кристаллическая структура и спектральные характеристики

$\{[(C_6H_5)_2N]_2C=NH(C_6H_5)\}[B(C_6H_5)_4] \cdot C_2H_5OH$

Ключевые слова: трифенилгуанидиний, тетрафенилборат, молекулярная и кристаллическая структура, межмолекулярные взаимодействия, спектры ИК, люминесценции

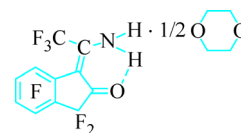


512

Рыбалова Т.В., Карпов В.М., Гатилов Ю.В., Шакиров М.М.

Получение, молекулярная и кристаллическая структура 3-(1-амино-2,2,2-трифторэтилиден)-1,1,4,5,6,7-гексафториндан-2-она, 2-амино-1,1,4,5,6,7-гексафтор-3-трифторацетилиндена и их комплексов с диоксаном и пиридином

Ключевые слова: полифторированные енаминокетоны, индан, инден, комплексы, синтез, структура, рентгеноструктурный анализ, квантовохимические расчеты



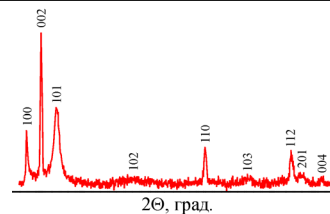
522

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Черепанова С.В., Булавченко О.А., Цыбуля С.В.

Структура нанокристаллических частиц металлического кобальта, формирующихся при восстановлении из оксидов Co_3O_4

Ключевые слова: дефекты упаковки, моделирование, рентгенография *in situ*

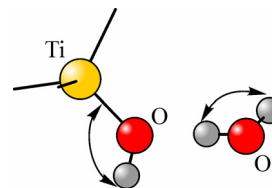


530

Бабков Л.М., Безродная Т.В., Пучковская Г.А.,
Успенский К.Е., Шимановская В.В.

Межмолекулярные взаимодействия и структура приповерхностных слоев в гетерогенных двухкомпонентных системах на основе нанокристаллитов диоксида титана

Ключевые слова: гетерогенная система, диоксид титана, нанокристаллит, бензофенон, 4-пентил-4'-цианобифенил, водородная связь, приповерхностный слой, структура, ИК спектр, молекулярное моделирование



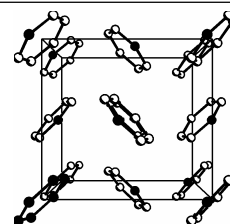
535

ОБЗОРЫ

Зоркий П.М., Ланшина Л.В., Богдан Т.В.

Компьютерное моделирование и дифракционные исследования структуры жидкого бензола

Ключевые слова: жидкий бензол, структура, моделирование, молекулярная динамика, рентгенография, нейтронография



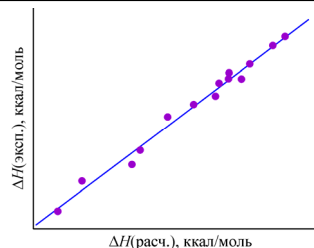
541

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Юрьева А.Г., Полещук О.Х., Филимонов В. Д.

Сравнительное изучение возможностей полноэлектронного базисного набора и псевдопотенциала для атома иода в квантово-химических расчетах подсодержащих соединений методом функционала плотности

Ключевые слова: квантовая химия, квантово-химические методы DFT B3LYP/dgdzvp и B3LYP/6-311G(d)

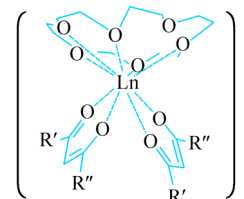


567

Бабайлов С.П.

Наноразмерные термометрические ЯМР сенсоры на основе парамагнитных комплексных ионных пар лантанидов(III) для определения температуры в слабополярных неводных растворах

Ключевые слова: лантанид-индуцированные сдвиги, температурная зависимость ЛИС, молярная парамагнитная восприимчивость, лантаниды, ЯМР, магниторезонансная томография, неводные растворы, термометрические ЯМР сенсоры, ионные пары

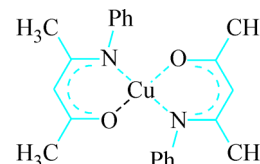


572

Брындин В.Е., Смоленцев А.И., Стабников П.А., Игуменов И.К.

Кристаллическая структура *транс*-бис-(4-фенилимино-пентан-2-оната) меди(II)

Ключевые слова: кристаллическая структура, фенилкеттоиминат, медь(II), кристаллохимия

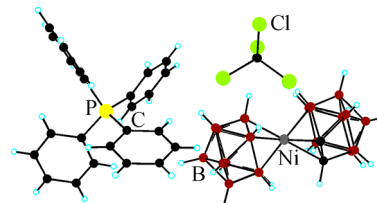


575

Полянская Т.М., Дроздова М.К., Волков В.В.

Кристаллическая структура $[(C_6H_5)_4P][Ni(B_9C_2H_{11})_2] \cdot CCl_4$

Ключевые слова: металлопроизводное *орто*-карборана(12), анион бисдикарболлил никеля(III), тетрафенилфосфоний, синтез, молекулярная и кристаллическая структура

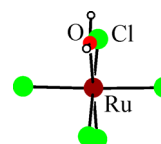


579

Емельянов В.А., Вировец А.В., Байдина И.А.

Кристаллическая структура пентахлороакварутената(III) аммония $(NH_4)_2[Ru(H_2O)Cl_5]$

Ключевые слова: рутений, хлорокомплексы, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия

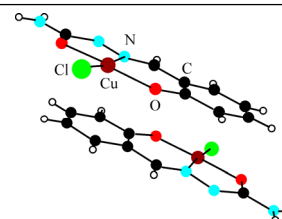


585

Wang J.-L., Liu B., Yang B.-S., Huang S.-P.

Novel copper(II) complex with unusual π -stacking structure, $[Cu(SSC)Cl]_2 \cdot CH_3OH \cdot 2H_2O$ (SSC = salicylaldehyde semicarbazone anion)

Keywords: HSSC, copper(II), complex, crystal structure, π - π interactions, weak interactions

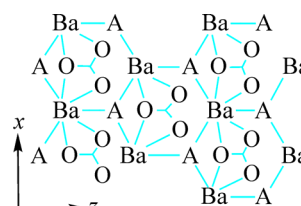


589

Цабель М., Позняк А.Л., Павловский В.И.

Кристаллическая структура дигидрата гидрокарбоната бис[N-(2-гидроксиэтил)иминодиацетата]кобальтата(III) бария, $Ba(\mu_4-HCO_3)[trans(N)-Co(heida)_2] \cdot 2H_2O$

Ключевые слова: кристаллическая структура, комплекс кобальта(III), гидрокарбонат бария, N-(2-гидроксиэтил)иминодиацетат-ион



594

Содержание следующего номера — в конце журнала

© Сибирское отделение РАН
Журнал структурной
химии, № 3, 2008