

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 52

Январь – февраль

№ 1, 2011

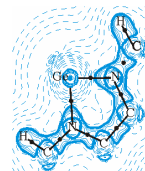
## СОДЕРЖАНИЕ

### ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Алексеев Н.В., Чернышев Е.А.

**Квантово-химическое исследование связей германий – заместитель в замещенных гермиленах**

**Ключевые слова:** квантовая химия, гермилены, метод AIM, метод NBO

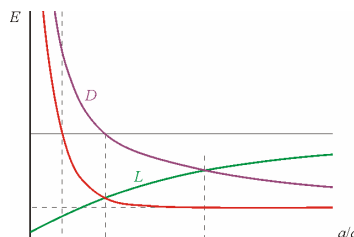


7

Холопов Е.В.

**Универсальное решение проблемы термодинамического предела при кулоновском и мультипольных взаимодействиях в кристаллах**

**Ключевые слова:** кристаллическая решетка, решеточные суммы, прямое суммирование, кулоновская энергия, дипольное взаимодействие, квадрупольное взаимодействие, тензор Лоренца

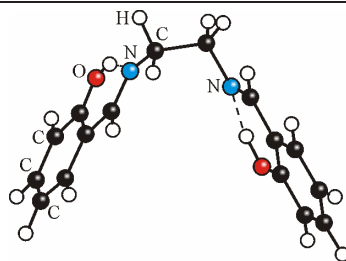


15

Слизнев В.В., Гиричев Г.В.

**Теоретическое исследование кето-енольной изомерии и внутреннего вращения в молекуле H<sub>2</sub>Salen, N,N'-этилен-бис(салицилиденимина) – основании Шиффа**

**Ключевые слова:** основание Шиффа, H<sub>2</sub>Salen, строение, кето-енольная изомерия, внутреннее вращение, конформеры, внутримолекулярная водородная связь, гиперсопряжение, теория функционала электронной плотности

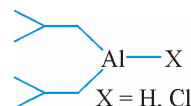


22

Панкратьев Е.Ю., Хурсан С.Л., Тюмкина Т.В., Халилов Л.М.

**Исследование самоассоциации HAlBu<sub>2</sub><sup>i</sup> и ClAlBu<sub>2</sub><sup>i</sup> квантово-химическими методами**

**Ключевые слова:** ди-изо-бутилалюминийгидрид, ди-изо-бутилалюминийхлорид, самоассоциация, равновесие, квантовая химия, *ab initio* и DFT моделирование



33

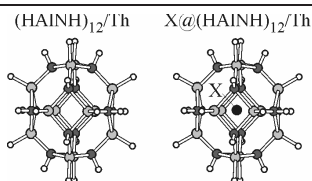
### ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Zhang C.-Yu., Zhao X., Zhang J., Wang B.-Q.

**Structure and stability of endohedral complexes**

**<sup>4/2</sup>X@ (HAINH)<sub>12</sub> (X = N, P, As, C<sup>+</sup>, Si<sup>-</sup>)**

**Keywords:** density functional theory, endohedral complexes, inclusion energy, quartet state, doublet state

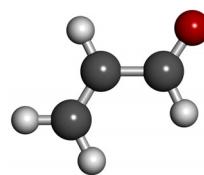


41

Панченко Ю.Н., Абраменков А.В., Бок Ч.У.

**Замечание по поводу неэмпирического колебательного анализа поворотных изомеров акролеина**

**Ключевые слова:** *транс*- и *цис*-акролеин, колебательные спектры, основное и низшие возбужденные электронные состояния, изотопные сдвиги

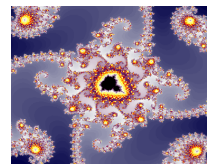


48

Monajjemi M., Baheri H., Mollaamin F.

**A percolation model for carbon nanotube-polymer composites using the Mandelbrot—Given curve**

**Keywords:** percolation theory, fractal, Mandelbrot—Given curve, carbon nanotube composites

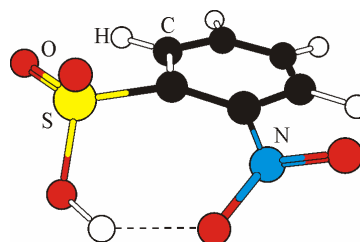


60

Петров В.М., Гиричева Н.И., Гиричев Г.В., Петрова В.Н., Иванов С.Н., Бардина А.В.

**Электроннографическое и квантово-химическое исследование строения молекулы 2-нитробензолсульфоновой кислоты**

**Ключевые слова:** 2-нитробензолсульфоновая кислота, конформер, молекулярная структура, газовая электронография, квантовая химия, масс-спектрометрия

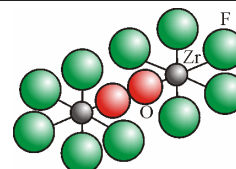


65

Федотов М.А., Беляев А.В.

**Изучение гидролиза  $ZrF_6^{2-}$  и строения промежуточных продуктов гидролиза методом ЯМР  $^{19}F$  и  $^{91}Zr$  в поле 9,4 Т**

**Ключевые слова:**  $Zr(IV)$ , фториды, фторидные комплексы, гидролиз, поликонденсация, ЯМР  $^{19}F$  и  $^{91}Zr$

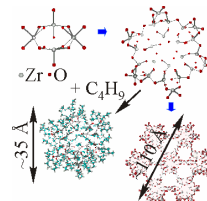


74

Канажевский В.В., Коцаренко Н.С., Коломийчук В.Н., Кочубей Д.И.

**Иерархическая структура в комплексах бутоксида циркония в растворах *n*-бутанола**

**Ключевые слова:** бутоксид циркония, растворы алкоксидов циркония, EXAFS

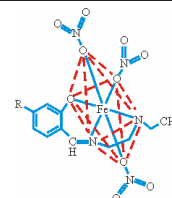


80

Груздев М.С., Червонова У.В., Колкер А.М., Домрачева Н.Е.

**Структура железо(III)содержащих комплексов на основе молекулы азометина 4,4'-додецилоксибензоилоксибензоил-4-салицилиден-*N'*-этил-*N*-этилендиамина**

**Ключевые слова:** основание Шиффа, строение, масс-спектрометрия, ИК спектроскопия



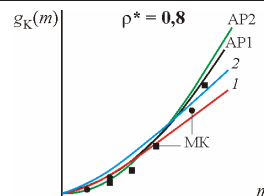
88

**СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ**

Литинский Г.Б.

**Диэлектрические свойства жидкости дипольных твердых сфер. Теория ассоциативных равновесий**

**Ключевые слова:** теория ассоциативных равновесий, константа ассоциации, фактор Кирквуда, жидкость дипольных твердых сфер

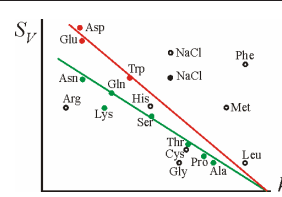


96

Королёв В.П.

**Объемные свойства тройной системы вода – мочеви́на – аминокислота. Разбавленные и концентрированные растворы**

**Ключевые слова:** мочеви́на, аминокислота, водные растворы, парциальные объемы

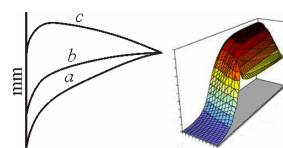


101

Yue W.X., Koçak H., Zhang D.H., Yıldırım A.

**A second attempt to establish an analytical expression to steam-water dipole orientation parameter using the Boubaker Polynomials Expansion Scheme**

**Keywords:** steam-water, BPES, permanent dipole moment, analytical expression



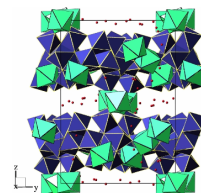
110

**КРИСТАЛЛОХИМИЯ**

Радио С.В., Розанцев Г.М., Баумер В.Н., Шишкин О.В.

**Кристаллическая структура паравольфрамата Б никеля  $\text{Ni}_5[\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2] \cdot 37\text{H}_2\text{O}$**

**Ключевые слова:** изополивольфрамат, паравольфрамат Б, кристаллическая структура, ИК спектроскопия, рентгеноструктурный анализ

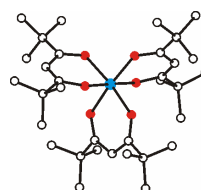


115

Стабников П.А., Смоленцев А.И., Первухина Н.В., Кощеева О.С., Комиссарова Л.Н., Борисов С.В.

**Структура дипивалоилметаната алюминия(III)  $\text{AlO}_6\text{C}_{33}\text{H}_{57}$**

**Ключевые слова:** алюминий дипивалоилметанат, кристаллическая структура, упаковки *трис*-дипивалоилметанатов металлов



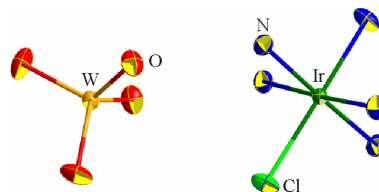
122

Шушарина Е.А., Плюснин П.Е., Храненко С.П., Громилов С.А.

**Строение и термические свойства**

**$[\text{Ir}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]_x[\text{Rh}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]_{1-x}\text{MO}_4$  ( $x = 0,5, 1$ ;  $\text{M} = \text{Mo}, \text{W}$ )**

**Ключевые слова:** вольфрам, молибден, иридий, родий, комплексная соль, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ, термический анализ



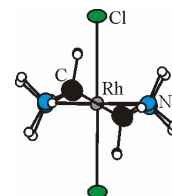
129

Байдина И.А., Воробьева С.Н., Смоленцев А.И., Беляев А.В.

**Кристаллические структуры**

***транс*-дихлоробис(этилендиамин) родия(III) с однозарядными анионами**

**Ключевые слова:** родий, *транс*-тетрамины, координационные соединения, кристаллическая структура

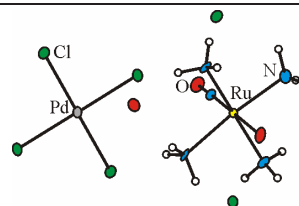


137

Плюснина О.А., Емельянов В.А., Байдина И.А., Плюснин П.Е., Громилов С.А.

**Строение и термические свойства двойных комплексных солей  $[\text{RuNO}(\text{NH}_3)_4(\text{H}_2\text{O})_2][\text{MCl}_4]\text{Cl}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{M} = \text{Pt}, \text{Pd}$**

**Ключевые слова:** двойная комплексная соль, рутений, платина, палладий, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия, термолиз

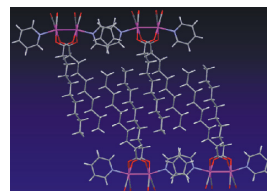


144

Johnpeter J.P., Therrien B.

**$\text{Ru}_2(\text{CO})_4\{\text{OOC}(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3\}_2\text{L}_2$  sawhorse-type complexes containing  $\mu_2\text{-}\eta^2$ -carboxylato ligands derived from saturated fatty acids**

**Keywords:** carbonyl ligands, carboxylato bridges, fatty acids, dinuclear complexes, ruthenium



155

Habib-ur-Rehman, Ahmad S., Ajaz H., Hanif M., Altaf M., Stoeckli-Evans H.

**Crystal structure of a silver(I) complex  $\{[\text{Ag}(\text{N-methylthiourea})_2][\text{NO}_3]\}_n$  exhibiting infinite chains of  $\text{AgS}_4$  tetrahedra**

**Keywords:** silver(I) complexes, *N*-methylthiourea, crystal structure



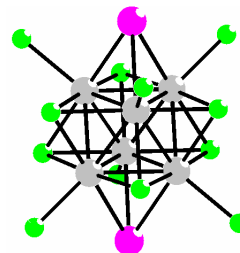
164

Соколов М.Н., Михайлов М.А., Вировец А.В., Федин В.П.

### Кристаллические структуры

$(\text{H}_7\text{O}_3)_2[(\text{Mo}_6\text{Cl}_{7,22}\text{I}_{0,78})\text{Cl}_6]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ,  $(\text{H}_9\text{O}_4)_2[(\text{Mo}_6\text{Cl}_{6,66}\text{I}_{1,34})\text{Cl}_6]$  и  $(\text{H}_5\text{O}_2)_2[(\text{Mo}_6\text{Cl}_{6,36}\text{I}_{1,64})\text{Cl}_6]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ : резкие изменения в упаковке при небольших изменениях состава кластерных ядер

**Ключевые слова:** молибден, иод, хлор, кластеры, рентгеноструктурный анализ, топология упаковок, масс-спектры

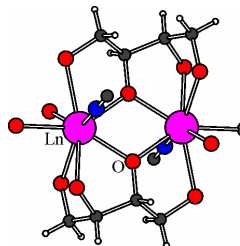


170

Тарасенко М.С., Леднева А.Ю., Наумов Д.Ю., Наумов Н.Г., Федоров В.Е.

### Координационные полимеры на основе кластерных анионов $[\text{Re}_6\text{Se}_8(\text{CN})_6]^{4-}$ , катионов лантанидов и четырехатомного спирта – эритрола

**Ключевые слова:** рений, октаэдрический кластер, цианидный комплекс, лантаниды, синтез, кристаллическая структура, полиатомный спирт

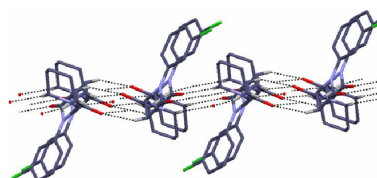


176

Зарипова А.Р., Спиридонова Р.Р., Гнездилов О.И., Ризванов И.Х., Литвинов И.А., Губайдуллин А.Т., Самуилов Я.Д.

### Структура продукта взаимодействия N-винилкапролактама с 3-хлорфенилизоцианатом

**Ключевые слова:** N-винилкапролактam, 3-хлорфенилизоцианат, хромато-масс-спектрометрические исследования, РСА

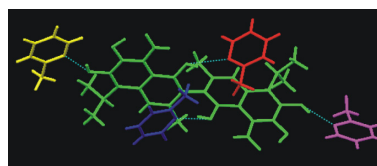


184

Талипов С.А., Хонкелдиева М.Т., Изотова Л.Ю., Тиляков З.Г., Ибрагимов Б.Т.

### Клатраты госсипола. Строение и термическое поведение сольватов госсипола с двумя изомерами пикולי́на

**Ключевые слова:** госсипол, 4-пиколин, 2-пиколин, клатратообразование, кристаллическая структура



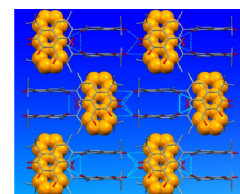
190

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Хонкелдиева М.Т., Талипов С.А., Изотова Л.Ю., Тиляков З.Г., Ибрагимов Б.Т., Курталиев Э.Н.

### Клатраты госсипола. Строение и термическое поведение комплекса госсипола с акридином

**Ключевые слова:** госсипол, акридин, клатратообразование, кристаллическая структура

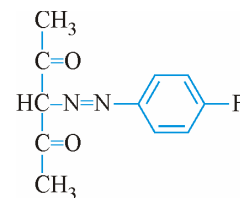


197

Магеррамов М.А., Алиева Р.А., Назарова Р.З., Чырагов Ф.М., Потехин К.А.

### Изучение кристаллической и молекулярной структуры азосоединения ацетилацетона – $[\text{C}_{11}\text{H}_{11}\text{N}_2\text{O}_2\text{F}_1]$ методом РСА

**Ключевые слова:** рентгеноструктурный анализ, азопроизводные ацетилацетона, межмолекулярная водородная связь, упаковка молекулы 3-[4-фторфенилазопентандион]-2,4

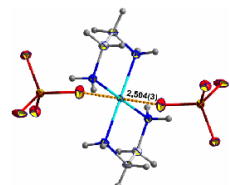


201

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

### Кристаллическая структура $[\text{Cu}(\text{en})_2](\text{ReO}_4)_2$

**Ключевые слова:** медь, рений, этилендиамин, термолиз, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ

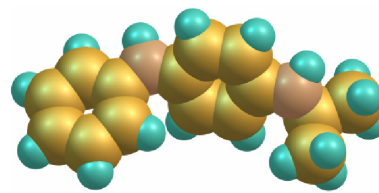


206

Мухутдинов Э.А., Губайдуллин А.Т., Криволапов Д.Б.,  
Литвинов И.А., Мухутдинов А.А.

**Кристаллическая структура N-фенил-N'-изопропил-*n*-фенилендиамин**

**Ключевые слова:** N-фенил-N'-изопропил-*n*-фенилендиамин,  
рентгеноструктурный анализ

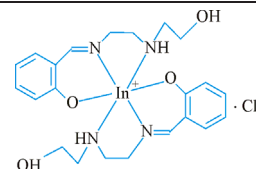


209

Swamy G.Y.S.K., Ravikumar K.

**Crystal structure of indium(III)-Schiff base complex**

**Keywords:** crystal structure, Schiff base, metal complex,  
X-ray diffraction, hydrogen bonding

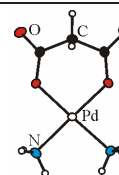


211

Ye Q.-S., Xie M.-J., Liu W.-P., Xia W.-Zh., Chen X.-Zh.,  
Chang Q.-W., Yu Y.

**Crystal structure of diammine(malonato)palladium(II)**

**Keywords:** palladium, malonate, ammonia, crystal structure, synthesis

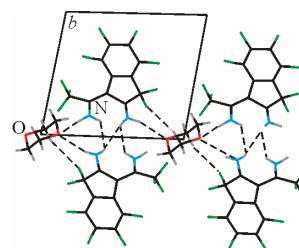


215

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

**Температурное исследование енамино-иминной  
таутомерии в сокристаллах 3-(1-амино-2,2,2-  
трифторэтилиден)-2-имино-1,1,4,5,6,7-гексафториндана  
с диоксаном методом PCA**

**Ключевые слова:** температурный рентгеноструктурный анализ,  
полифторированные енаминоимины, индан, инден, таутомеры,  
равновесие

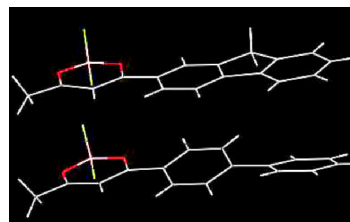


218

Буквечкий Б.В., Федоренко Е.В., Мирочник А.Г.

**Кристаллическое строение и люминесцентные свойства  
2,2-дифтор-4-(9Н-флуорен-2-ил)-6-метил-  
1,3,2-диоксаборина**

**Ключевые слова:** β-дикетонаты дифторида бора,  
2,2-дифтор-4-(9Н-флуорен-2-ил)-6-метил-1,3,2-диоксаборин,  
кристаллическая структура, люминесценция



223

Содержание следующего номера — в конце журнала