



ISSN 00136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 54
январь
февраль
2013

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 1

НОВОСИБИРСК

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

1960

6

Т О М 54

Январь-февраль

№ 1, 2013

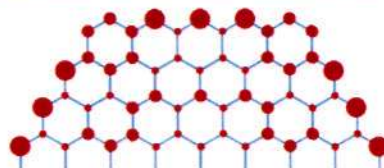
СО Д Е Р Ж А Н И Е

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Лузанов А.В.

Расщепление в нулевом поле триплетных уровней сопряженных молекул. Сравнение точной и приближенных π -схем

Ключевые слова: методы FCI, CIS и ROHF, D-параметр, анизотропия спаривания спинов, ароматические системы

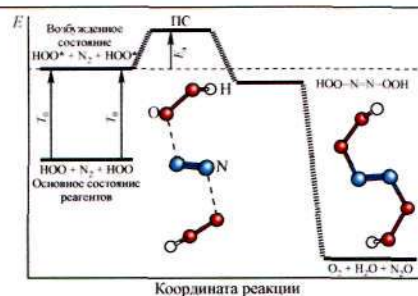


7

Захаров И.И., Лория М.Г., Целищев А.Б.

Структура интередиата $\text{HOO}-\text{N}=\text{N}-\text{OOH}$ при активации N_2 перекисью водорода. Квантово-химические DFT расчеты

Ключевые слова: метод теории функционала плотности (DFT), высокоэнергетические состояния HO_2 и O_2 , активация N_2 , молекулярные и спектроскопические параметры, интередиат $\text{HOO}-\text{N}=\text{N}-\text{OOH}$, спилловер гидроксильного радикала



17

Шагун В.А., Васильцов А.М., Иванов А.В., Михалёва А.И., Трофимов Б.А.

Квантово-химическое исследование механизма региоселективной домино-реакции *O*-винил-2-тетралоноксима

Ключевые слова: -винилоксим, индол, квантово-химический расчет, механизм реакции, -(Z)/ -(E)- изомеризация

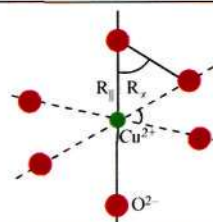


25

Zhang H.-M., Wan X.

Investigation of the EPR parameters and local structure of the rhombic Cu^{2+} center in zinc fluoride

Keywords: electron paramagnetic resonance, defect structure, Cu^{2+} , ZnF_2

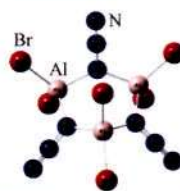


34

Xia Q.Y., Ma D.X., Li D.J., Zhao W.W.

Theoretical study on the structures and properties of $(\text{Br}_2\text{AlN}_3)_n$ ($n = 1-4$) clusters

Keywords: $(\text{Br}_2\text{AlN}_3)_n$ ($n = 1-4$) clusters, density functional theory (DFT), structural feature, IR spectra, thermodynamic properties

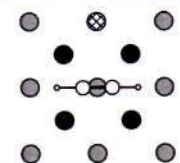


40

Matczak P.

Structural, electronic, and vibrational properties of acetylene on Pd(100) doped with Sn or Pb: A DFT cluster model study

Keywords: acetylene adsorption, Pd-Sn catalyst, Pd-Pb catalyst, DFT

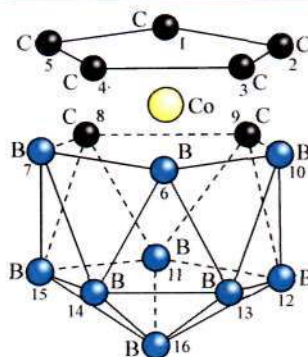


48

Смоляков В.М., Соколов Д.В., Нилов Д.Ю., Гребешков В.В.

Карбометаллические производные бороводородов C_{1v} и C_{5v} : перечисление и идентификация изомеров замещения и схема расчета свойств C_{5v} на основе чисел треугольника Паскаля

Ключевые слова: цикловой индекс, производящие функции, хиральные и ахиральные изомеры замещения, аддитивные схемы, бороводороды, парные и кратные невалентные взаимодействия, молекулярный граф, многоугольные числа, треугольник Паскаля



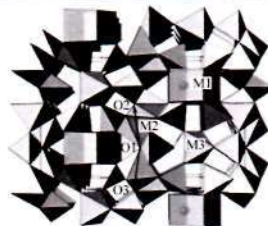
57

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Рядун А.А., Надолинный В.А., Павлюк А.А., Солодовников С.Ф., Богуславский Е.Г.

Причины уширения линий в спектрах ЭПР ионов меди в кристаллах литий-цинкового молибдата $\text{Li}_{2-2x}\text{Zn}_{2+x}(\text{MoO}_4)_3$

Ключевые слова: ЭПР ионов переходных металлов, кристаллы двойного молибдата, сцинтилляторы



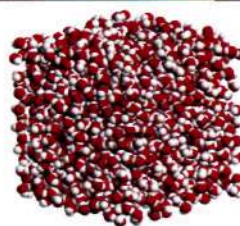
66

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Теплухин А.В.

Параллельные и распределенные вычисления в задачах суперкомпьютерного моделирования молекулярных жидкостей методом Монте-Карло

Ключевые слова: жидкость, вода, суперкомпьютер, моделирование, Монте-Карло, алгоритм, параллельные вычисления, MPI

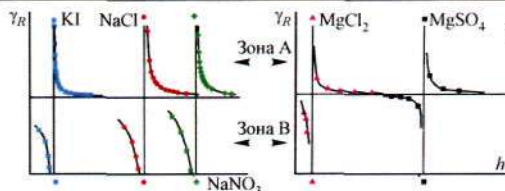


71

Афанасьев В.Н.

Количественная оценка разрывной функции растворителя в водных растворах электролитов

Ключевые слова: адиабатическая сжимаемость, гидратация солей, числа гидратации, разрывная функция растворителя

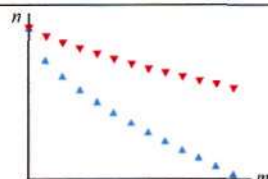


82

Королёв В.П., Серебрякова А.Л.

Гидратация α -аланина в водных растворах хлорида натрия и мочевины

Ключевые слова: хлорид натрия, мочевины, аланин, водные растворы, парциальные объемы, гидратные числа

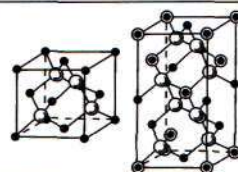


95

Поплавной А.С.

Псевдосимметрия в кристаллических соединениях с высокосимметричными подрешетками

Ключевые слова: псевдосимметрия, электронная плотность, подрешетки Браве, спектры элементарных возбуждений

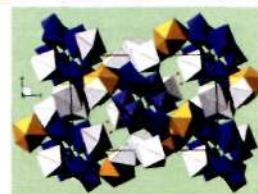


99

Радио С.В., Гумерова Н.И., Баумер В.Н.

Кристаллическая структура паравольфрамата Б натрия-стронция $\text{Na}_6\text{Sr}_2[\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2] \cdot 24\text{H}_2\text{O}$

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

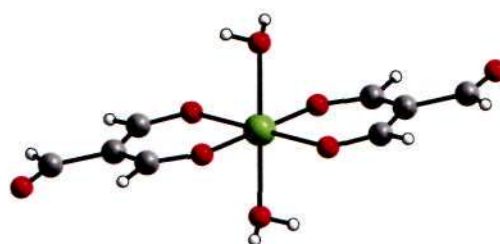


104

Третьяков Е.В., Толстикова С.Е., Романенко Г.В., Богомяков А.С., Сагдеев Р.З., Новоторцев В.М., Овчаренко В.И.

Структура комплексов Mn(II), Co(II), Ni(II) и Cu(II) с триформилметаном

Ключевые слова: комплексы марганца(II), комплексы кобальта(II), комплексы никеля(II), комплексы меди(II), 1,3-дикарбонильные соединения, рентгеноструктурный анализ

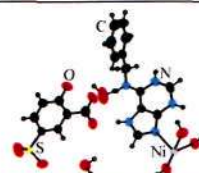


111

Xia M., Wei C.-L.

Crystal structure of a new supramolecular Ni(II) N^6 -benzylaminopurine compound

Keywords: Ni(II) N^6 -benzylaminopurine compound, crystal structure, supramolecule

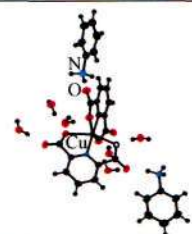


117

Ibotomba Singh U., Bhubon Singh R.K., Borah M.J., Jasinski J.P., Golen J.A.

Characterization and crystal structure study of a new Cu(II) complex of pyridine-2,6-dicarboxylic acid and aniline containing a water cluster

Keywords: pyridine-2,6-dicarboxylate complex, monoclinic, octahedral, copper(II) complex, water cluster, crystal structure



123

Стабников П.А., Корольков И.В., Крисюк В.В., Байдина И.А.

Исследование свойств и строение разнолигандных комплексов меди(II) с гексафторацетилацетоном и метил- и фенилкетонаминами

Ключевые слова: разнолигандные комплексы меди(II), кристаллическая структура, упаковка молекул, летучесть

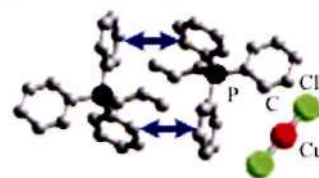


130

Нощенко Г.В., Саливон Н.Ф., Зарыхта Б., Олийник В.В.

Кристаллические структуры галогенocupратов(I) аллилтрифенилфосфония

Ключевые слова: кристаллическая структура, медь(I), аллилфосфоний, стеклинг, слабые водородные связи, фенильный клинч, гомосопряжение, гиперконъюгация



136

Антоненко Т.А., Аликберова Л.Ю., Альбов Д.В.,
Рукк Н.С.

**Особенности строения тиокарбамидных
производных иодидов некоторых лантаноидов**

Ключевые слова: иодиды лантаноидов, тиокарбамид,
аквакомплексы, структура, синтез



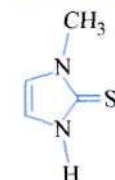
141

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Лодочникова О.А., Бодров А.В., Сайфина А.Ф.,
Никитина Л.Е., Литвинов И.А.

**Новый полиморф метимазола: исследование
методами монокристалльного и порошкового РСА**

Ключевые слова: метимазол, полиморфизм,
водородные связи

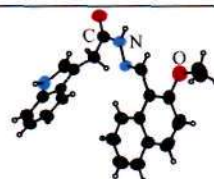


146

Zhi F., Shao N., Wang Q., Zhang Y., Wang R., Yang Y.

**Crystal structures and antibacterial activity of
hydrazone derivatives from 1*H*-indol-3-acetohydrazone**

Keywords: hydrazone derivative, synthesis, X-ray diffraction,
antibacterial activity

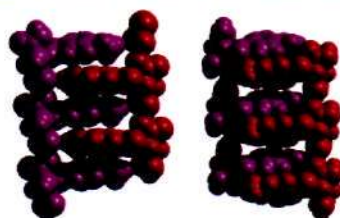


155

Wesela-Bauman G., Boinski T., Dominiak P.,
Hajmowicz H., Synoradzki L., Wierzbicki M., Woliński B.,
Woźniak K., Zawada K.

**Tartaric acid and its *O*-acyl derivatives. 7. Crystal
structure of *O*-*p*-anisoyl-*D*-tartaric acid and its
dimethylammonium salt trihydrate**

Keywords: tartaric acids, acyl derivatives, anisoyl



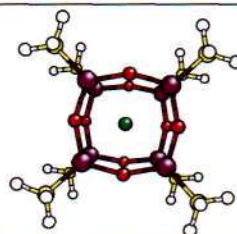
162

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Семёнов С.Г., Бедрина М.Е.

**Квантово-химическое исследование
силескквиоксанов $H_8Si_8O_{12}$, $Me_8Si_8O_{12}$, $H@Me_8Si_8O_{12}$,
 $He@Me_8Si_8O_{12}^+$ и $He@Me_8Si_8O_{12}$**

Ключевые слова: силескквиоксаны, эндокомплексы, гелий,
кубическая симметрия, структура, поляризуемость, PBE0,
B3LYP, cc-pVTZ, MP2

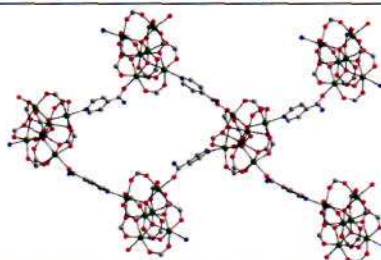


166

Фурсова Е.Ю., Овчаренко В.И., Богомяков А.С.,
Романенко Г.В.

**Структура комплекса 6-ядерного пивалата
марганца с изоникотинамидом**

Ключевые слова: комплексы Mn(II,III),
многоядерные соединения, дитопные лиганды,
изоникотинамид, координационные полимеры,
рентгеноструктурный анализ

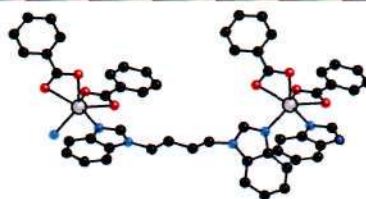


171

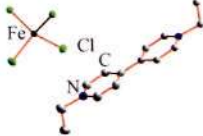
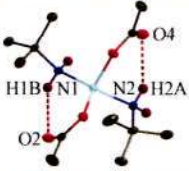
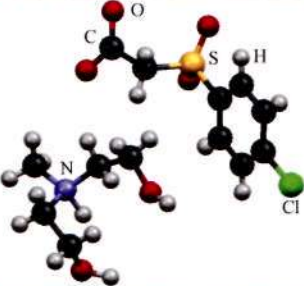
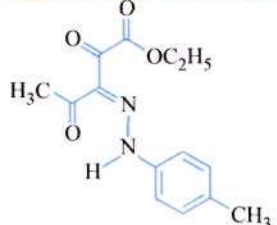

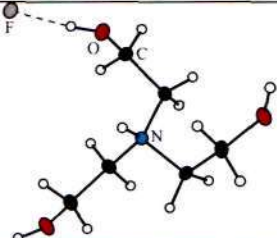
He C.-H., Jiao C.-H., Cui G.-H.

**Crystal structural and thermal properties
of a 1D cadmium coordination polymer
[Cd(PhCOO)₂(bbbm)]_n**

Keywords: bis(benzimidazole), hydrothermal, cadmium(II),
1D coordination polymer



175

Chen W.-T., Luo Z.-G., Liu D.-S., Xu Y.-P., Luo Q.-Y. In situ synthesis and structure of FeCl₄(4,4'-diethyl-4,4'-bipyH) (bipy = bipyridine) Keywords: bipyridine, hydrothermal reaction, in situ, viologen		180
Kandasamy E. Crystal structure of diacetato-bis(2-methyl-2-propylamine)zinc(II) Keywords: zinc acetate, amine, hydrogen bond, NH...O interaction		184
Воронков М.Г., Фундаменский В.С., Адамович С.Н., Зельбст Э.А., Кашаев А.А., Брусков В.А., Мирсков Р.Г., Мирскова А.Н. Кристаллическая и молекулярная структура (4-хлорфенилсульфонил)ацетата N-метил-бис-(2-гидроксиэтил)аммония Ключевые слова: 4-хлорфенилсульфонилуксусная кислота, N-метил-бис(2-гидроксиэтил)амин, ионная жидкость, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ		188
Левенец Т.В., Козьминых В.О., Толстикова А.О. Строение этилового эфира 3-(4-толил)гидразоно-2,4-диоксопентановой кислоты Ключевые слова: однореакторная трехкомпонентная оксалильная конденсация, этиловый эфир 3-(4-толил)гидразоно-2,4-диоксопентановой кислоты, метод РСА		192
Сүлеймен Е.М., Ван Хеке К., Ван Меервельт Л., Дербурграфф В.М., Дехаен В. Абсолютная конфигурация 3-ацетилбетулиновой кислоты Ключевые слова: бетулиновая кислота, 3-ацетоксибетулиновая кислота, рентгеноструктурный анализ		195
Воронков М.Г., Корлюков А.А., Кочина Т.А., Зельбст Э.А. Необычная кристаллическая и молекулярная структура фторида трис(2-гидроксиэтил)аммония Ключевые слова: галогениды (2-гидроксиэтил)аммония, протатраны, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ		198

Содержание следующего номера — в конце журнала