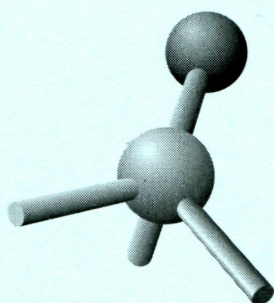


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 55
март
апрель
2014

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ



№ 2

НОВОСИБИРСК

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

ТОМ 55

Март-апрель

№ 2, 2014

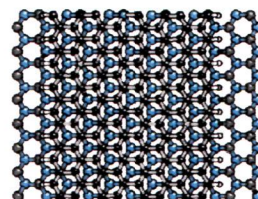
СОДЕРЖАНИЕ

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 нанолента графена типа зигзаг на гексагональном нитриде бора**

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

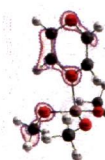


209

Алексеев Н.В.

Квантово-химическое исследование комплексов триметоксисилиция с нейтральными молекулами

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

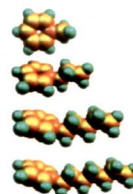


220

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

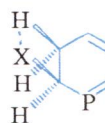


230

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



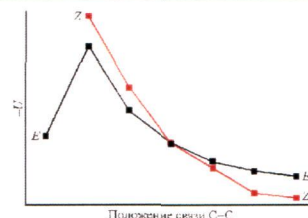
237

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, пентадецины, октадиены, метилоктадеценоаты, идентификация



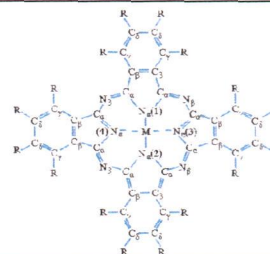
243

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

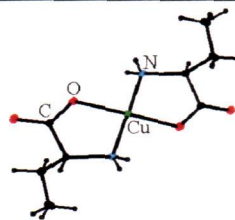


Kumar R., Oubrai S.

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)₂, ZINDO, INDO, HOMO—LUMO

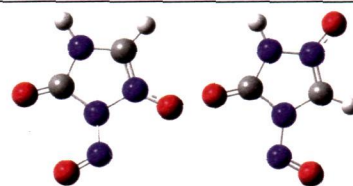


Ravi P., Tewari S.P.

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



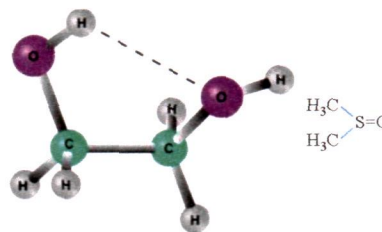
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

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

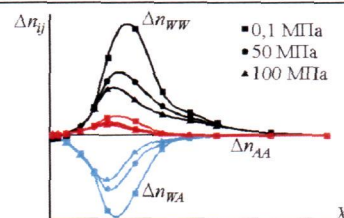


Макаров Д.М., Егоров Г.И.

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

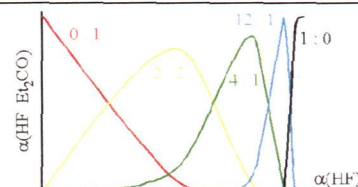


Юхневич Г.В., Тараканова Е.Г.

290

Соотношение между по-разному ассоциированными молекулами раствора HF—Et₂CO

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

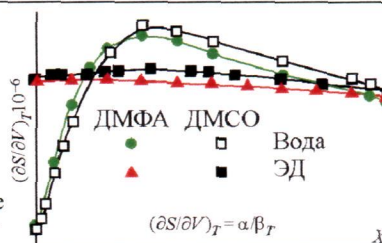


Зайчиков А.М., Крестьянинов М.А.

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

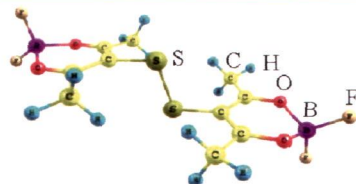


305

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

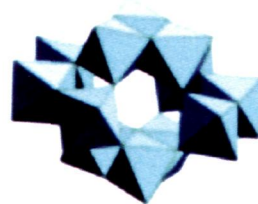


310

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

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

Ключевые слова: полиоксометаллаты, паравольфрамат-Б, смешанные соли, кристаллическая структура

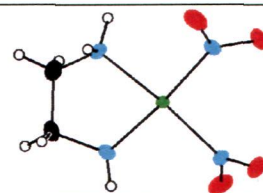


315

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

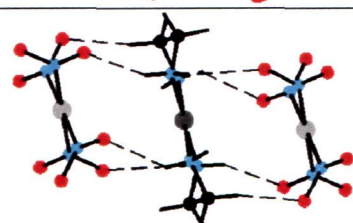


319

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

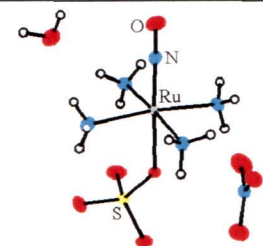


326

Махиня А.Н., Ильин М.А., Байдина И.А., Плюснин П.Е., Алферова Н.И., Пишур 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, аминоккомплексы, сульфатоккомплексы, синтез, рентгеноструктурный анализ, термический анализ



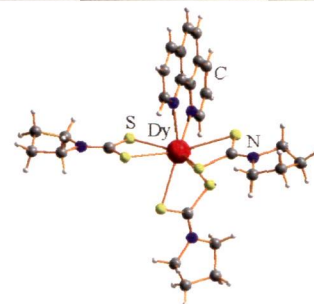
331

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

Ключевые слова: комплексы $\text{Ln}(\text{Phen})(\text{C}_4\text{H}_8\text{NCS}_2)_3$ ($\text{Ln} = \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Tm}$)

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



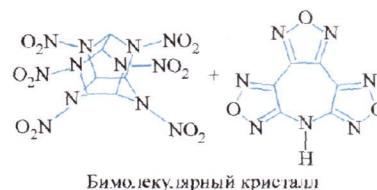
339

Алдошин С.М., Алиев З.Г., Гончаров Т.К., Милёхин Ю.М., Шишов Н.И., Астратъев А.А., Дашко Д.В., Васильева А.А., Степанов А.И.

348

Кристаллическая структура бимолекулярного кристалла 2,4,6,8,10,12-гексанитро-2,4,6,8,10,12-гексаазотетрацикло[5.5.0.0^{5,9}.0^{3,11}]додекана с 7Н-трис-1,2,5-оксадиазоло(3,4-б:3',4'-д:3'',4'''-ф) азепином

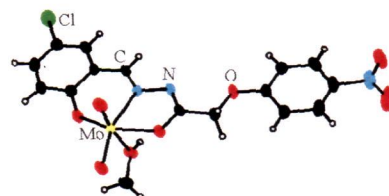
Ключевые слова: 2,4,6,8,10,12-гексанитро-2,4,6,8,10,12-гексаазазовюрцитан, полициклический нитроамин, азепин, оксадиазол, 7Н-трис-1,2,5-оксадиазоло[3,4-б:3',4'-д:3'',4'''-ф] азепин, рентгеноструктурный анализ, кристаллическая и молекулярная структура



Qian S.-S., Li H.-H., Li Y.-N., You Z.-L., Zhu H.-L.

Two mononuclear molybdenum(VI) oxo complexes with tridentate hydrazone ligands: synthesis, structures, and thermal stability

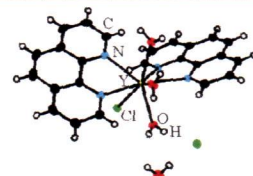
Keywords: molybdenum complex, hydrazone ligand, crystal structure, X-ray diffraction



Moodi A., Khorasani-Motlagh M., Noroozifar M., Patrick B.O.

Yttrium(III) complex with 1,10-phenanthroline ligand: crystal structure and spectroscopic studies

Keywords: yttrium(III) complex, crystal structure, 1,10-phenanthroline, X-ray diffraction analysis

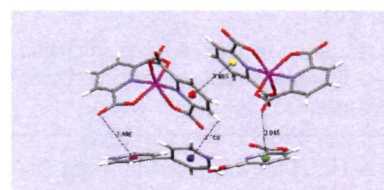


СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Soleimannejad J., Sheshmani S., Solimannejad M., Nazarnia E., Hosseinabadi F.

Two supramolecular complexes of gallium(III) with different adduct ion pairs containing pyridine-2,6-dicarboxylic acid: syntheses, characterization, crystal structures and computational study

Keywords: gallium(III), pyridine-2,6-dicarboxylic acid, 2,9-dimethyl-1,10-phenanthroline, 4,4'-bipyridine, X-ray structure determination, DFT, supramolecular chemistry

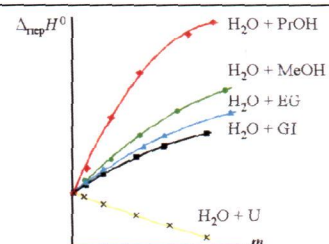


КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Королёв В.П., Антонова О.А., Смирнова Н.Л.

Термодинамические характеристики, структура и взаимодействия L-пролина в водных растворах спиртов и мочевины

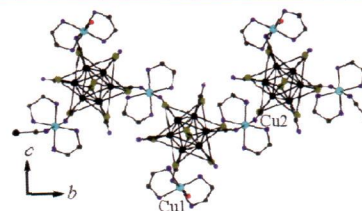
Ключевые слова: калориметрия, энтальпийные и теплоемкостные характеристики, этиленгликоль, глицерин, метанол, L-пролин, 2-пропанол, мочевины



Мионов Ю.В., Ефремова О.А., Фёдоров В.Е.

Кристаллическая структура $\{[Cu(H_2O)(en)_2]\{Cu(en)_2\}Re_6Te_8(CN)_6\} \cdot 3H_2O$

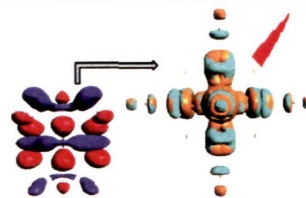
Ключевые слова: октаэдрический кластер, рений, халькоцианидный комплекс, синтез, кристаллическая структура



Alvarado-Soto L., Ramirez-Tagle R.

Electronic structure and molecular properties of $[\text{Re}_{6-x}\text{Os}_x\text{Se}_8\text{Cl}_6]^{(4-x)-}$ ($x = 0-3$) clusters: a study based on time-dependent density functional theory including spin-orbit and solvent effects

Keywords: luminescent cluster TTDFT

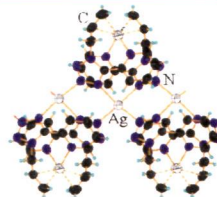


385

Сливка Ю.И., Походило Н.Т., Горешник Е.А., Мыськив М.Г.

Кристаллическая структура нового π -комплекса AgClO_4 с 1-аллил-5-(2-пиридил)-1H-тетразолом состава $[\text{Ag}_2(\text{C}_9\text{H}_6\text{N}_5)_2](\text{ClO}_4)_2$

Ключевые слова: серебро(I), π -комплекс, тетразол, кристаллическая структура

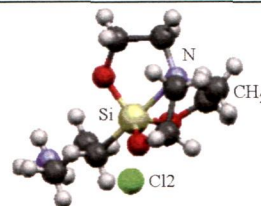


390

Воронков М.Г., Зельбст Э.А., Фундаменский В.С., Гуржий В.В., Болгова Ю.И., Трофимова О.М.

Кристаллическая и молекулярная структура хлорида 1-(3-аммониопропил)силатрана

Ключевые слова: хлорид 1-(3-аммониопропил)силатрана, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ

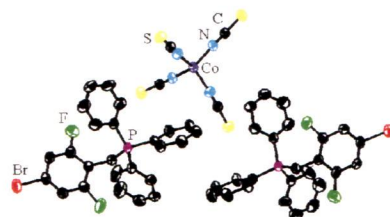


392

Dai S.-L., Cheng Z.-P., Huang R.-K., Guan Q.-Y., Liang Y.-J., Huang W.-Q., Zhou J.-R., Ni C.-L.

Crystal structure and magnetic properties of hybrid material self-assembly from tetra(isothiocyanate)cobalt(II) anion and trisubstituted benzyltriphenylphosphinium

Keywords: tetra(isothiocyanate)cobalt(II) anion, substituted benzyl triphenylphosphinium, crystal structure, magnetic properties

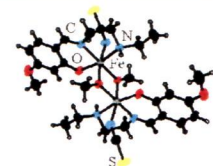


395

Qian S.-S., Wang X., You Z.-L., Zhu H.-L.

Crystal structure and thermal stability of a $\mu_{1,1}$ -(OMe)-bridged dimeric Schiff base iron(III) complex

Keywords: Schiff base, iron complex, dimeric complex, crystal structure, thermal stability

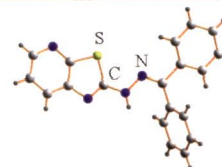


400

Miao S.B., Ji B.M., Zhou L.

Crystal structure of 1-(diphenylmethylene)-2-(thiazolo[4,5-b]pyridin-2-yl)hydrazine

Keywords: 1-(diphenylmethylene)-2-(thiazolo[4,5-b]pyridin-2-yl)-hydrazine, synthesis, crystal structure, N-H...N hydrogen bond



405

Содержание следующего номера — в конце журнала