

ISSN 0136-7463

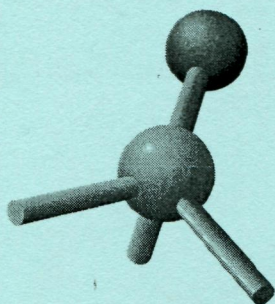
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 56

ИЮЛЬ

2015

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 4

НОВОСИБИРСК

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 56

Июль

№ 4, 2015

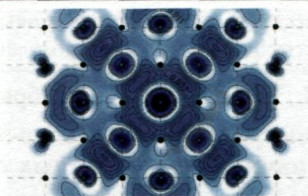
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Гордиенко А.Б., Филиппов С.И.

Расчет характеристик оптического поглощения фторидов с учетом многочастичных эффектов

Ключевые слова: экситоны, фториды, химическая связь, электрон-дырочное взаимодействие, оптика, поглощение, метод моментов, КРМ

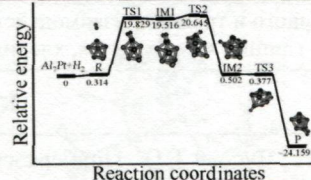


649

An X., Guo L., Ren N., Wen C., Dong X., Niu S.

A density functional theory analysis of molecular hydrogen dissociation on Al_nPt ($n = 1-12$) clusters

Keywords: Al_nPt bimetallic cluster, hydrogen adsorption, DFT calculations, dissociation mechanism

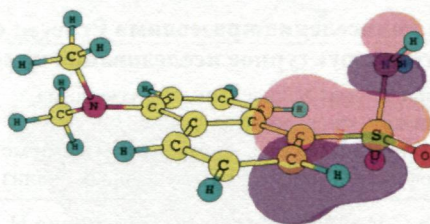


656

Гиричева Н.И., Лапыкина Е.А., Фёдоров М.С., Петрова Д.А.

Флуоресцентные метки. Дансиламид ($CH_3)_2N-C_{10}H_6-SO_2NH_2$, отражение конформационных свойств свободной молекулы в кристаллических структурах

Ключевые слова: дансиламид, конформеры, переходные состояния, NBO-анализ, квантово-химические расчеты, взаимосвязь структур кристалл-газ

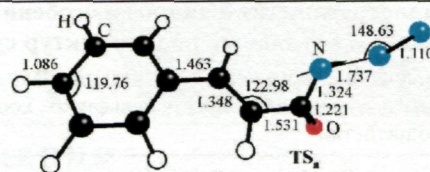


667

Abu-Eittah Rafie H., Hassan Walid M.I., Zordok W.

A theoretical study of the thermal Curtius rearrangement of some cinnamoyl azides using the DFT approach

Keywords: curtius rearrangement, cinnamoyl azides, DFT treatment, one stage mechanism



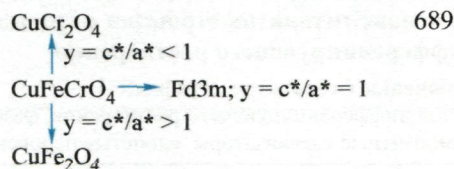
676

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Плясова Л.М., Зайковский В.И., Кустова Г.Н., Минюкова Т.П., Молина И.Ю., Штерцер Н.В., Юрьева Т.М.

Структурные особенности феррит-хромитов меди

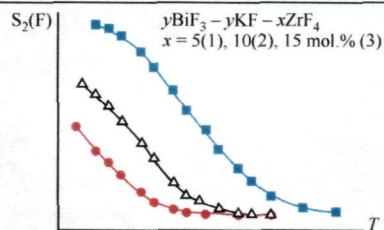
Ключевые слова: Cu—Fe—Cr шпинель, распределение катионов в структуре шпинели, структурный переход в шпинели, паровая конверсия CO



Кавун В.Я., Меркулов Е.Б., Полянцев М.М., Ярошенко Р.М., Гончарук В.К.

Фазовые переходы и ионная подвижность в твердых растворах в системе $\text{BiF}_3\text{—KF—ZrF}_4$

Ключевые слова: твердые растворы с флюоритовой структурой, ионная подвижность, фазовые переходы, спектры ЯМР ^{19}F , спектры ДСК, рентгенофазовый анализ

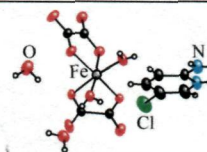


698

Abdelhak J., Cherni S.N., Zid M.F., Driss A.

Crystal structure, spectroscopy properties and magnetic properties of new iron(III) complex

Keywords: crystal structure, iron(III) complex, magnetic properties



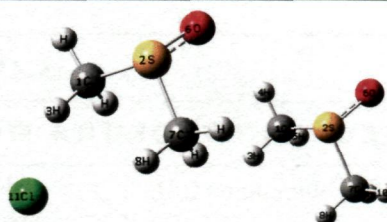
702

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Григорян К.Р., Шиладжян А.А., Затикиан А.Л.

Экспериментальные и теоретические исследования сольватации ионов калия и хлора в водно-диметилсульфоксидных растворах

Ключевые слова: вязкость, уравнение Джонса–Дола, *B*-коэффициент, диметилсульфоксид, ионы K^+ и Cl^- , *ab initio* расчеты, SCRF расчеты, ион-молекулярные комплексы

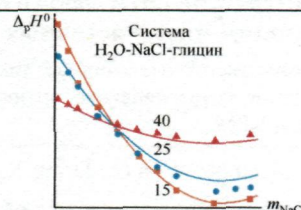


710

Королёв В.П., Антонова О.А., Серебрякова А.Л.

Термодинамика и структура водно-электролитных растворов глицина при различных температурах

Ключевые слова: термодинамика, энтальпия растворения, параметры парного и тройного взаимодействия, двухкомпонентный растворитель, глицин, хлорид калия, хлорид натрия, мочевины



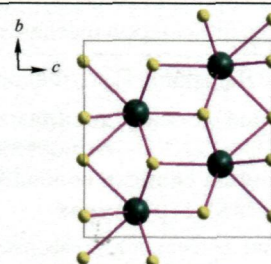
715

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Зеленина Л.Н., Чусова Т.П., Подберезская Н.В., Пирязев Д.А., Корольков И.В.

Новый полиселенид празеодима $\text{PrSe}_{1.95}$: синтез и рентгеноструктурное исследование кристаллов

Ключевые слова: полиселениды празеодима, термодинамическое моделирование, выращивание кристаллов газотранспортными методами, рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ

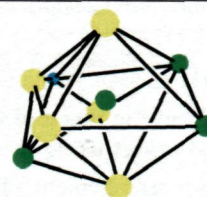


721

Борисов С.В., Магарилл С.А., Первухина Н.В.

Кристаллографический анализ и особенности координации катионов в ряду структур сульфидов с Ti^+

Ключевые слова: кристаллографический анализ, анионные "скелеты", катион Ti^+ в сульфидах, координация Ti^+ , $\text{Ti} + \text{S}$ -подрешетки

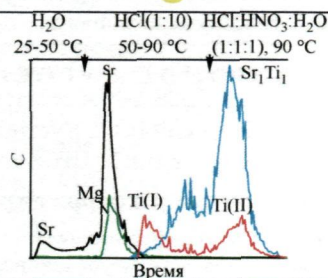


728

Довлитова Л.С., Иванов Д.В., Исупова Л.А., Малахов В.В.

Определение химического и фазового состава смешанных оксидов с перовскитоподобной структурой на основе титанатов стронция методом дифференцирующего растворения

Ключевые слова: стехиография, метод дифференцирующего растворения, фазовый состав, композитные катализаторы, слоистые перовскиты

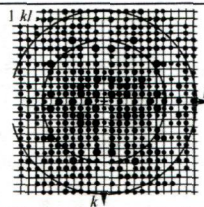


738

Сабиров В.Х.

Ориентационная разупорядоченность сульфат-ионов в кристаллической структуре $\text{NH}_4\text{Al}_{0.43}\text{Fe}_{0.57}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: квасцы, твердые растворы, запрещенные рентгеновские отражения, максимальные подгруппы, ориентационный беспорядок

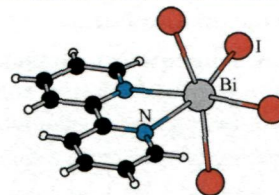


747

Адонин С.А., Соколов М.Н., Федин В.П.

Моно- и биядерные иодидные комплексы Вi(III) с 2,2'-бипиридилем и 1,10-фенантролином: синтез и структура

Ключевые слова: висмут, иодидные комплексы, 2,2'-бипиридил, 1,10-фенантролин, кристаллические структуры

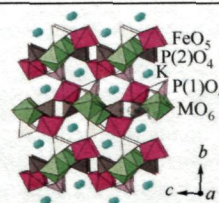


758

Badri A., Hidouri M., López M.L., Veiga M.L., Pico C., Darriet J., Ben Amara M.

Crystal structure and thermal stability of new iron phosphates $\text{KMFe}(\text{PO}_4)_2$ (M = Ni, Mg and Co)

Keywords: iron phosphates, synthesis, crystal structure, phase transitions, IR

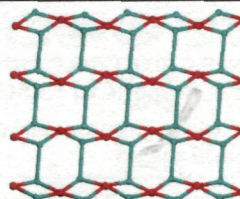


764

Du X., Yang R., Wang X.X., Cui G.H.

A new 2D cobalt(II) coordination polymer constructed from 1,2,4,5-benzenetetracarboxylate and flexible bis(benzimidazole) ligands

Keywords: 1,2,4,5-benzenetetracarboxylate, bis(benzimidazole), cobalt(II), fluorescence property

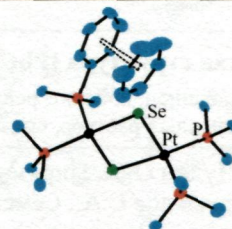


773

Fortney-Zirker R.G., Henderson W., Nicholson B.K.

Structural and mass spectrometric characterisation of the dinuclear platinum(II) selenido-phenylselenolato complex $[\text{Pt}_2(\mu\text{-Se})(\mu\text{-SePh})(\text{PPh}_3)_4]\text{PF}_6$

Keywords: platinum complexes, dinuclear complexes, selenide ligand, phenylselenolato ligand, arylation, crystal structure, electrospray mass spectrometry



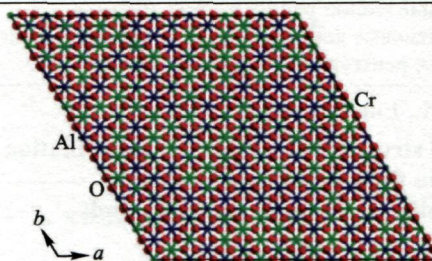
780

ОБЗОРЫ

Урусов В.С., Еремин Н.Н.

Локальная структура твердых растворов по результатам компьютерного моделирования и экспериментальным данным

Ключевые слова: атомистическое компьютерное моделирование, твердые растворы замещения, локальная структура, параметр релаксации, податливость позиции, межатомные расстояния, объемы полиэдров



786

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Грибов Л.А., Прокофьева Н.И.

Вариационное решение задачи об ангармонических колебаниях молекул в центрально-силовом поле

Ключевые слова: колебания молекул, теория, ангармонизм, вариационный метод

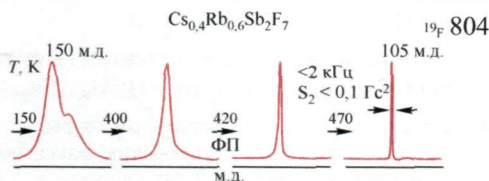
$$\hat{H} = \sum_{ij} \left[-\frac{\hbar^2}{2} (M_i^{-1} + M_j^{-1}) \frac{\partial^2}{\partial s_{ij}^2} + V_{ij} \right]$$

801

Кавун В.Я., Полянцев М.М., Земнухова Л.А.

Ионная подвижность и фазовый переход в гексафтородиантимонате(III) $Cs_{0.4}Rb_{0.6}Sb_2F_7$

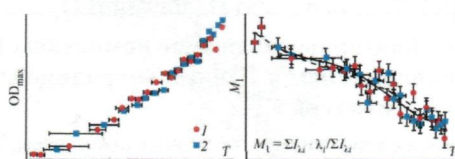
Ключевые слова: гексафтородиантимонаты(III) цезия–рубидия, ионная подвижность, фазовый переход, ионная проводимость, спектры ЯМР ^{19}F , ДСК



Лаврик Н.Л., Горностаева Е.В.

Температурная зависимость полосы поглощения второго обертона ОН колебания воды, свежееобразовавшейся после замораживания

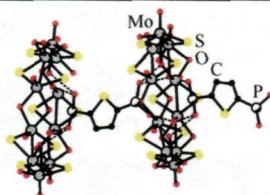
Ключевые слова: таяя вода, сетка водородных связей, ИК спектры



Огиенко Д.С., Смоленцев А.И., Конченко С.Н.

Кристаллическая структура $Cs_2[Mo_{10}S_{10}O_{10}(OH)_{10}(H_2O)_4](C_4H_8S(PO_2H)_2) \cdot 21H_2O$

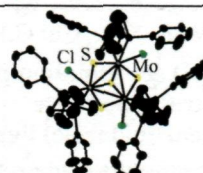
Ключевые слова: полиядерные комплексы, молибден, сера, фосфор, гетероциклические соединения, супрамолекулярные соединения, кристаллическая структура



Петров П.А., Соснин Г.А., Наумов Д.Ю., Конченко С.Н.

Кристаллическая структура семизлектронного кластера молибдена $[Mo_3S_4(dppe)_3Cl_3] \cdot 3,5C_4H_8O_2 \cdot 0,5Et_2O$

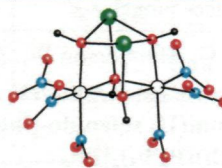
Ключевые слова: кластерные комплексы, молибден, сера, рентгеноструктурный анализ



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

Кристаллическая структура $[PbCo(NO_2)_3(\mu-OH)_2]_2$

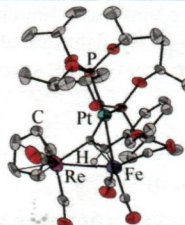
Ключевые слова: свинец, кобальт, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия, твердый раствор, сплав



Верпекин В.В., Чудин О.С., Пирязев Д.А., Рубайло А.И., Громилов С.А., Семейкин О.В.

Новый трехъядерный μ_3 -винилиденный кластер $SrReFePt(\mu_3-C=CHPh)[P(OPr^i)_3]_2$

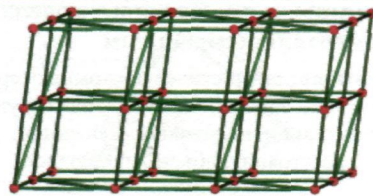
Ключевые слова: рений, железо, платина, винилиденные комплексы, гетерометаллические комплексы, кластеры, рентгеноструктурный анализ



Zhang X., Liu L., Qin L., Cui G.H.

Crystal structure of a 3D Ag(I) coordination polymer based on flexible bis(benzimidazole) and 5-nitroisophthalic acid co-ligands

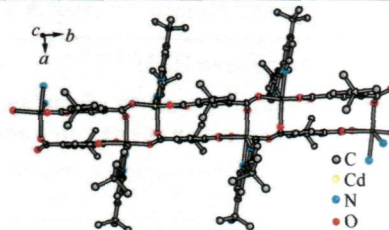
Keywords: Ag(I) complex, 1,4-bis(5,6-dimethylbenzimidazol-1-yl)butane, crystal structure



Xu X.J., Wang J.

Crystal structure and luminescent property of a one-dimensional Cd(II) coordination polymer constructed by 4,4'-di-tert-butyl-2,2'-bipyridine and 5-tert-butyl isophthalic acid

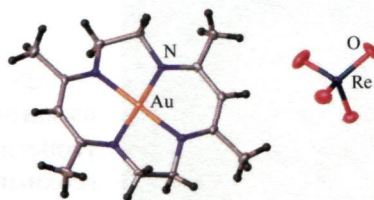
Keywords: Cd(II) complex, 4,4'-di-tert-butyl-2,2'-bipyridine, 5-tert-butyl isophthalic acid, crystal structure, luminescence



Афанасьева В.А., Глинская Л.А., Пирязев Д.А.,
Громилов С.А.

**Кристаллическая и молекулярная структура
[Au(C₁₄H₂₂N₄)]ReO₄**

Ключевые слова: золото, рений, тетраазамакроцикл,
комплексная соль, рентгеноструктурный анализ,
рентгенофазовый анализ, кристаллохимия, термолиз

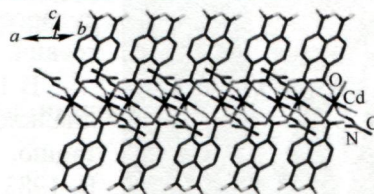


836

Хан И.С., Самсоненко Д.Г., Федин В.П.

**Кристаллическая структура цепочечного
металл-органического координационного полимера
[Cd(dmf)(ntca)]**

Ключевые слова: кристаллическая структура,
координационные полимеры, кадмий



842

Адонин С.А., Пересыпкина Е.В., Соколов М.Н.,
Федин В.П.

**Иодовисмутатный комплекс (Bu₄N)₃[Bi₃I₁₂]:
кристаллическая структура новой полиморфной
модификации**

Ключевые слова: висмут, иодидные комплексы, полиморфизм,
кристаллическая структура

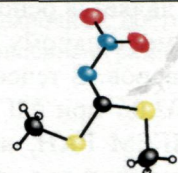


845

Астахов А.М., Васильев А.Д., Антишин Д.В., Бука Э.С.

**Кристаллическая структура
S,S'-диметил-N-нитроимидодитиокарбоната**

Ключевые слова: нитримины, производные нитрогуанидина,
рентгеноструктурный анализ, строение молекул

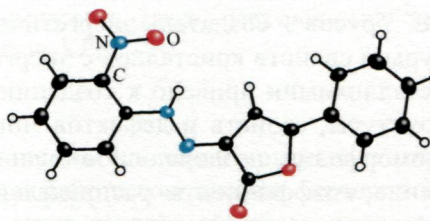


850

Майорова О.А., Гринёв В.С., Егорова А.Ю.

**Кристаллическая структура
3-(2-(2-нитрофенил)гидразоно)-5-фенил-3H-фуран-2-она**

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ,
кристаллическая структура, азо-гидразо таутомерия,
внутримолекулярная водородная связь,
3-(2-(2-нитрофенил)гидразоно)-5-фенил-3H-фуран-2-он

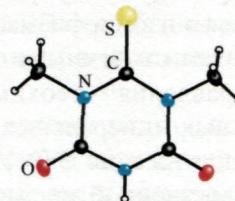


853

Shajari N., Kazemizadeh A.R., Ramazani A., Joo S.W.,
Ślepokura K., Lis T., Souldozi A.

**Facile synthesis and crystal structure
of 1,5-dimethyl-6-thioxo-1,3,5-triazinane-2,4-dione**

Keywords: N,N'-dimethylthiourea, trichloroacetyl isocyanate,
triazinane, X-ray diffraction



856

Содержание следующего номера — в конце журнала