

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 54

Сентябрь-октябрь

№ 5, 2013

СОДЕРЖАНИЕ

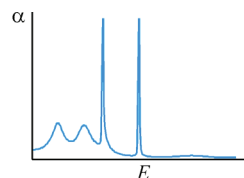
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Лузанов А.В.

π -Система в сильном электрическом поле.

Анализ электронного распаривания

Ключевые слова: полное конфигурационное взаимодействие, индекс распаривания, бирадикалоидность, ароматичность, антиароматичность



797

Копытов А.В., Поплавной А.С., Уфимцев М.К.

Генезис фононных спектров кристаллов $A^2B^4C_2^5$ и $A^1B^3C_2^6$ с решеткой халькопирита из колебательных состояний их подрешеток

Ключевые слова: фононный спектр, динамика решетки, плотность состояния, подрешетки, халькопирит

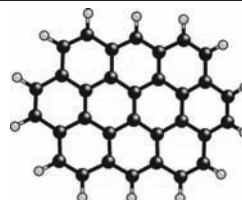


805

Hosseinnejad T., Abdullah Mirzaei R., Nazari F.,
Karimi-Jafari M.H.

Adsorption behavior of CO and C₂H₂ on the graphite basal surface: a quantum chemistry study

Keywords: graphite basal surface, carbon monoxide, acetylene, physical interaction energy, quantum chemical calculations



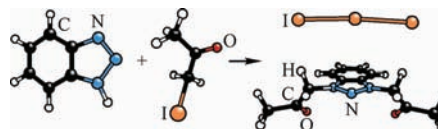
812

Шагун В.А., Дорофеев И.А., Шагун Л.Г.

Механизм образования трииодида

1,3-бис-(2-оксопропил)-3H-1,2,3-бензотриазолия в реакции алкилирования 1,2,3-бензотриазола 1-иодпропан-2-оном

Ключевые слова: квантово-химический расчет, ионная жидкость, механизм реакции, алкилирование, 1,2,3-бензотриазол, 1-иодпропан-2-он



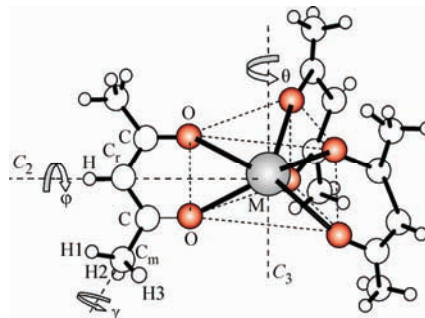
819

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Твердова Н.В., Гиричев Г.В., Шлыков С.А.,
Кузьмина Н.П., Петрова А.А., Зайцева И.Г.

**Исследование структуры и энергетики
β-дикетонатов. XVIII. Молекулярное строение
трис-ацетилацетонатов хрома и кобальта
по данным квантово-химических расчетов
и метода газовой электронографии**

Ключевые слова: трис-ацетилацетонаты, хром, кобальт,
молекулярная структура, газовая электронография,
квантовая химия, масс-спектр

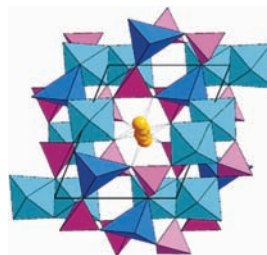


КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Солодовников С.Ф., Солодовникова З.А., Гудкова И.А.,
Золотова Е.С., Юдин В.Н.

Области гомогенности двойных молибдатов в системе $\text{Na}_2\text{MoO}_4\text{--MgMoO}_4$ и строение триклинных $\text{Na}_{1.51}\text{Mg}_{2.245}(\text{MoO}_4)_3$ и $\text{Na}_{1.66}\text{Mn}_{2.17}(\text{MoO}_4)_3$

Ключевые слова: натрий, магний, марганец, двойные молибдаты, нестехиометрия, область гомогенности, кристаллическая структура

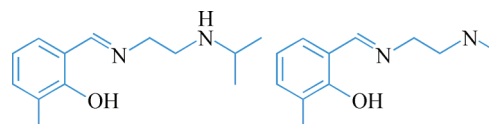


879

Qian S.-S., Zhang M., You Z.-L., Zhu H.-L.

Crystal structures of azido or thiocyanato-coordinated nickel(II) complexes with tridentate Schiff bases

Keywords: Schiff base, nickel complex, azide, thiocyanate, crystal structure



888

Храненко С.П., Быкова Е.А., Юсенко К.В.,
Тютюнник А.П., Громилов С.А.

$[\text{Ru}(\text{NH}_3)_6](\text{MoO}_4)\text{Cl} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ и $[\text{M}(\text{NH}_3)_6](\text{ReO}_4)_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ($\text{M} = \text{Ru}, \text{Ir}$). Синтез и кристаллическая структура

Ключевые слова: рутений, молибден, рений, иридий, комплексная соль, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ

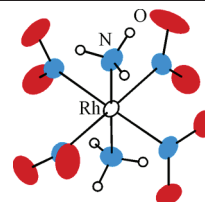


893

Беляев А.В., Смоленцев А.И., Байдина И.А, Ткачёв С.В.

Кристаллическая структура солей аниона *транс*- $[\text{Rh}(\text{NH}_3)_2(\text{NO}_2)_4]^-$ с катионами K^+ , Cs^+ , Ag^+ и $(\text{CH}_3)_4\text{N}^+$

Ключевые слова: родий, *транс*-диамминтетранитриты, соли, кристаллическая структура, ЯМР^{14,15}N

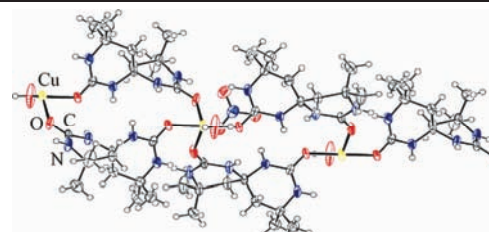


900

Нетребя Е.Е.

Исследование молекулярной и кристаллической структуры нового координационного полимера нитрата меди(II) с 4,4,10,10-тетраметил-1,3,7,9-тетраазоспиро[5.5]ундекан-2,8-дионом

Ключевые слова: медь(II), тригональная бипирамида, спирокарбон, координационный полимер, структура, PCA



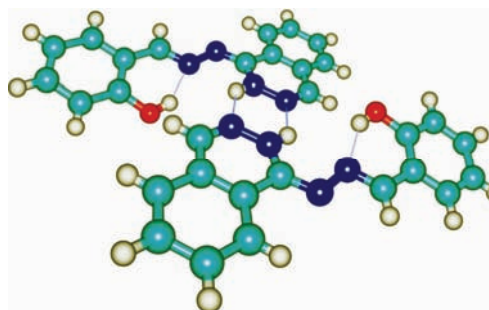
907

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Левченков С.И., Попов Л.Д., Щербаков И.Н.,
Александров Г.Г., Зубенко А.А., Коган В.А.

Таутомерия 1'-фталазинилгидразонов замещенных салициловых альдегидов и 2-дифенилфосфинобензальдегида: рентгеноструктурное исследование и квантово-химическое моделирование

Ключевые слова: гидразоны, таутомерия, рентгеноструктурный анализ, водородная связь, теория функционала плотности



914