

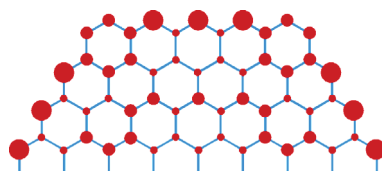
СОДЕРЖАНИЕ

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

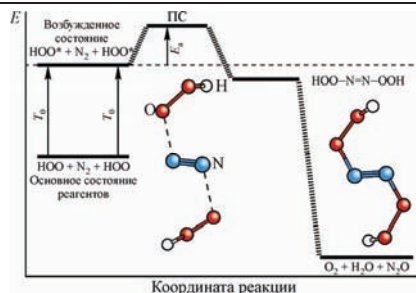


7

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

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

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

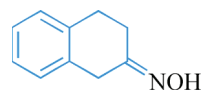


17

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: O -винилоксим, индол, квантово-химический расчет, механизм реакции, *син*-(Z)/*анти*-(E)- изомеризация

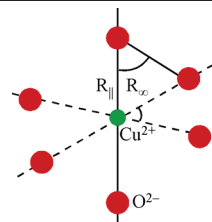


25

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

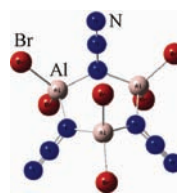


34

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

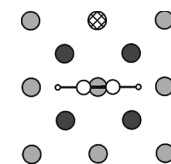


40

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

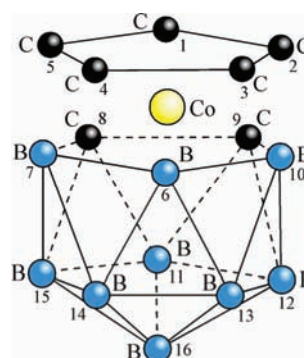


48

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



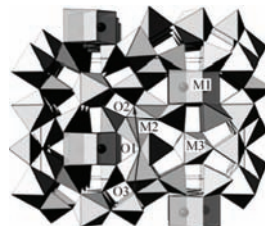
57

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



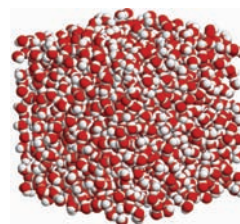
66

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

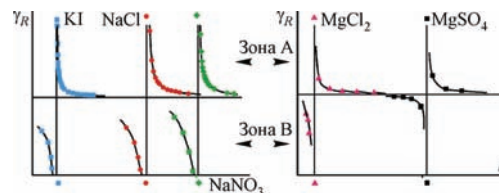


71

Афанасьев В.Н.

Количественная оценка разрывной функции растворителя в водных растворах электролитов

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

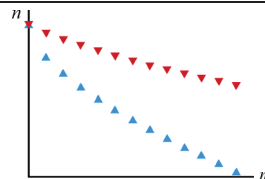


82

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



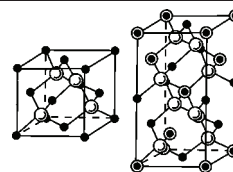
95

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Поплавной А.С.

Псевдосимметрия в кристаллических соединениях с высокосимметричными подрешетками

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

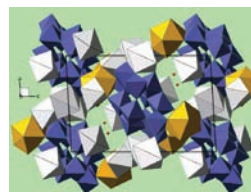


99

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

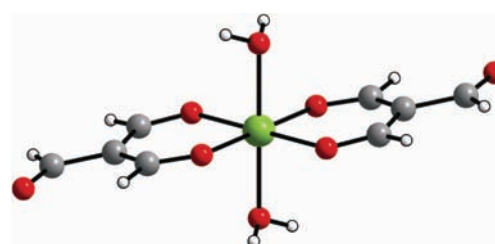


104

Третьяков Е.В., Толстиков 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

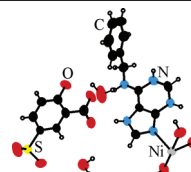


111

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

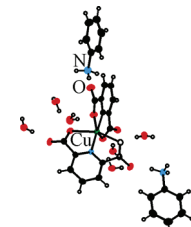


117

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

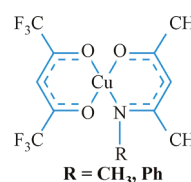


123

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 фенилкетиминами

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

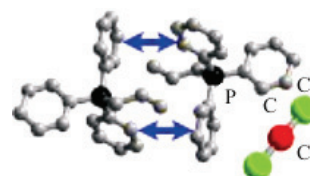


130

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 клин, гомосопряжение, гиперконъюгация



136