

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

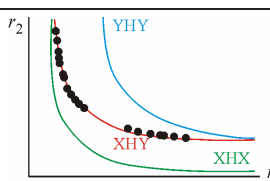
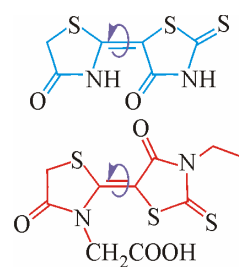
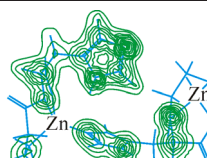
Т О М 51

Сентябрь – октябрь

№ 5, 2010

## СОДЕРЖАНИЕ

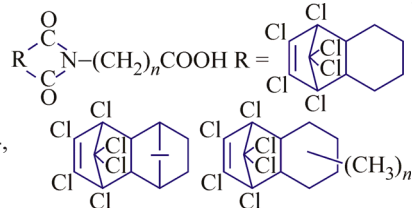
### ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

- Грибов Л.А. 841  
**Новая форма электронно-ядерного гамильтониана и энергетической матрицы в теории строения и свойств молекул**  
**Ключевые слова:** многоатомная молекула, разделение движений, усредненный потенциал, дополнительные ограничения
- $$\hat{H}_3 = \hat{T}_3 + V_{33} + V_{3\alpha}(0) + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 V_{3\alpha}}{\partial Q^2} \right)_0 \langle 0 | Q^2 | 0 \rangle$$
- Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В. 846  
**Соотношение между длинами связей в водородных мостиках OHN и OHCL**  
**Ключевые слова:** водородный мостик, длина Н-связи, квантово-химический расчет
- 
- Барышников Г.В., Минаев Б.Ф., Минаева В.А., Огрен Х. 853  
**Теоретическое исследование конформационного строения и термодинамических свойств 5-(4-оксо-1,3-тиазолидин-2-илиден)-роданина и этил-5-(4-оксо-1,3-тиазолидин-2-илиден)-роданин-3'-уксусной кислоты как акцепторных группировок индолиновых красителей**  
**Ключевые слова:** индолиновые красители, роданин, бироданины, теория функционала плотности, энергия нулевых колебаний, энтальпия образования, конформационные изомеры
- 
- Демухамедова С.Д., Алиева И.Н., Годжаев Н.М. 860  
**Пространственное и электронное строение мономерных и димерных комплексов карнозина с цинком**  
**Ключевые слова:** биокарнозин, комплекс карнозина с цинком, квантово-химические расчеты
- 
- Golmohammadi H., Dashtbozorgi Z. 870  
**Prediction of water-to-polydimethylsiloxane partition coefficient for some organic compounds using QSPR approaches**  
**Keywords:** quantitative structure-property relationship, water-to- polydimethylsiloxane partition coefficient, artificial neural network, multiple linear regression, genetic algorithm, siloxane
- $$K_{\text{PDMS-water}} = [C_i / C_{i+1} - 1] V_w / V_{\text{PDMS}}$$
- $$\log K_{\text{PDMS-water}} = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_n x_n$$

Салахов М.С., Гречкина О.Т., Багманов Б.Т.

**Корреляционный прогноз кислотности и температуры плавления диеновых аддуктов гексахлорциклопентадиена с N-алкилкарбоксимидами малеиновой, циклогексен- и эндиковой 1,2-дикарбоновых кислот**

**Ключевые слова:** N-алкилкарбоксимиды гексахлорбициклопентен-, гексахлортрициклоундецен-, гексахлортетрациклододецен-1,2-дикарбоновых кислот, теоретико-информационные индексы, константа кислотной ионизации, температура плавления



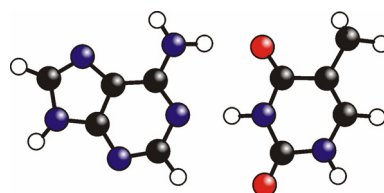
883

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Тен Г.Н., Нечаев В.В., Панкратов А.Н., Березин В.И., Баранов В.И.

**Влияние водородной связи на структуру и колебательные спектры комплементарных пар оснований нуклеиновых кислот. II. Аденин—тимин**

**Ключевые слова:** аденин, тимин, комплементарная пара, колебательные спектры, водородная связь, интерпретация

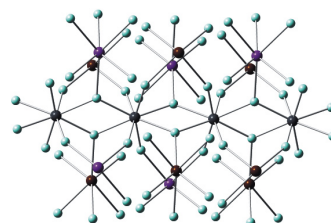


889

Кавун В.Я., Слободюк А.Б., Войт Е.И., Синябрюхов С.Л., Меркулов Е.Б., Гончарук В.К.

**Ионная подвижность и строение стекол в системах  $ZrF_4-BiF_3-MF_2$  ( $M = Sr, Ba, Pb$ ) по данным ЯМР, ИК и КР спектроскопии**

**Ключевые слова:** фториды циркония, висмута, бария, свинца, стронция, фтороцирконатные стекла, спектры ЯМР  $^{19}F$ , ИК и КР, ионная подвижность и проводимость, строение

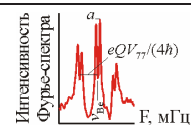


896

Машковцев Р.И., Кулик Л.В., Солнцев В.П.

**Атомы серебра в структурных каналах берилла**

**Ключевые слова:** ЭПР, ЭСЭ, берилл, атом серебра

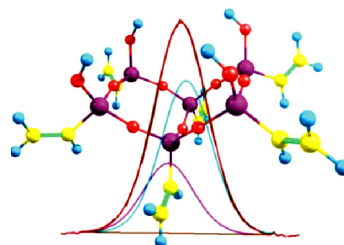


903

Вовна В.И., Осьмушко И.С., Короченцев В.В., Шапкин Н.П., Тутов М.В.

**Исследование электронной структуры поливинилсилоксана  $(CH_2CHSiO_{1.5})_n$  методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и квантово-химического моделирования в приближении ТФП**

**Ключевые слова:** полимеры, силоксаны, РФЭС, ТФП, электронная структура, XPS, DFT



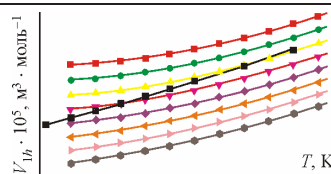
910

## СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Зайцев А.А., Афанасьев В.Н., Устинов А.Н.

**Адиабатическая и изотермическая сжимаемость водных растворов хлорида натрия**

**Ключевые слова:** адиабатическая сжимаемость, изотермическая сжимаемость, водные растворы, число гидратации



916

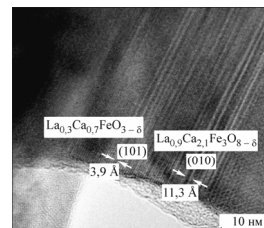
## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Надеев А.Н., Цыбуля С.В., Герасимов Е. Ю.,  
Куликовская Н.А., Исупова Л.А.

### Структурные особенности формирования гетеровалентных твердых растворов

$\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{FeO}_{3-\delta}$  ( $0 \leq x \leq 0,7$ )

**Ключевые слова:** перовскит, морфотропный фазовый переход, наноструктурированное состояние, подвижная форма кислорода

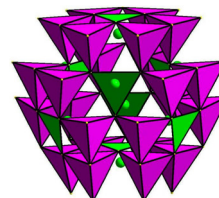


927

Первухина Н.В., Борисов С.В., Магарилл С.А., Васильев В.И.,  
Куратьева Н.В., Козлова С.Г.

### Уточнение кристаллической структуры As-швацита $\text{Cu}_6(\text{Cu}_{5,26}\text{Hg}_{0,75})(\text{As}_{2,83}\text{Sb}_{1,17})\text{S}_{13}$ (Акташ, Горный Алтай)

**Ключевые слова:** As-швацит, сфалеритовый каркас, кластерная вакансия, Hg-теннантит,  $\text{Cu}_6\text{S}$ -октаэдр

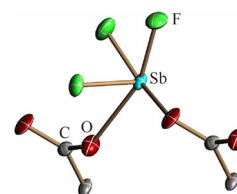


934

Удовенко А.А., Макаренко Н.В., Давидович Р.Л.,  
Земнухова Л.А., Ковалева Е.В.

### Кристаллическая структура тетрафторантимоната(III) *L*-лейцина

**Ключевые слова:** кристаллическая структура, комплексное соединение, тетрафторантимонат(III), *L*-лейцин, димерная группа

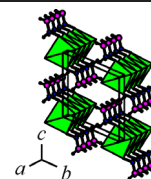


940

Штукенберг А.Г., Пьянкова Л.А., Пунин Ю.О.

### Кристаллическая структура и инфракрасная спектроскопия $\text{MCl}_2 \cdot 2\text{CONH}_2$ ( $\text{M} = \text{Cu}, \text{Mn}$ )

**Ключевые слова:** синтаксия, формаамид, монокристалльный рентгено-структурный анализ, инфракрасная спектроскопия

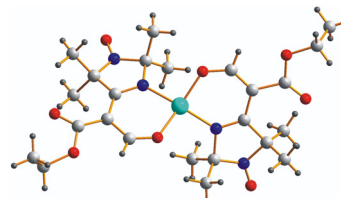


945

Бурдуков А.Б., Беккер К.С., Степанов Г.А., Богатырев А.Л.,  
Первухина Н.В., Богомяков А.С., Резников В.А.

### Структура и магнитные свойства новых хелатных комплексов меди(II) и никеля(II) с нитроксильным радикалом этил-2-(1-оксил-2,2,5,5- тетраметилимидазолидин-4-илиден)-3-оксопропаноатом

**Ключевые слова:** радикалы нитроксильные, комплексы, строение, магнитные свойства

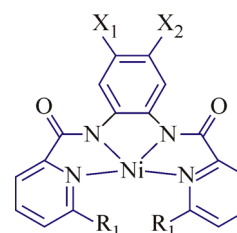


951

Kwak H., Eom G.H., Lee S.H., Koo H.G., Jang S.P., Lee J.,  
Shin W., Lah M.S., Kim C., Kim S.-J., Kim Y.

### Steric effect on construction of extended architectures of Ni(II) complexes directed by intermolecular C-H...F and C-H...O interactions

**Keywords:** pyridine carboxamide, nickel(II) complex, crystal structure, electronic effect, weak interactions, hydrogen bond, supramolecular architecture, cyclic voltammetry

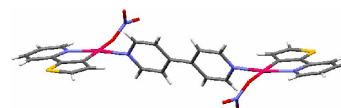


957

Панова А.Г., Проц И., Фундаменский В.С., Балашев К.П.

### Кристаллическая и молекулярная структура комплекса $\mu$ -4,4'-бипиридил-бис[*транс*-С,О-нитрато(2-(2'-тиенил- 3-идо)пиридин)палладий]

**Ключевые слова:** циклопалладированный биядерный комплекс, 2-(2'-тиенил)пиридин, 4,4'-бипиридил, рентгеноструктурный анализ, ЯМР  $^1\text{H}$  спектроскопия

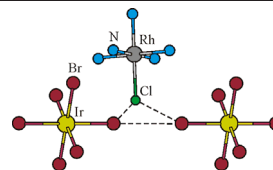


965

Юсенко К.В., Шушарина Е.А., Громилов С.А.

**Рентгеноструктурный анализ поликристаллов  $M^I(NH_3)_5Cl[M^{II}Br_6]$  ( $M^I = Rh, Ir$ ;  $M^{II} = Re, Ir$ )**

**Ключевые слова:** рентгенофазовый анализ, полнопрофильный анализ, метод Ритвелда, кристаллохимия

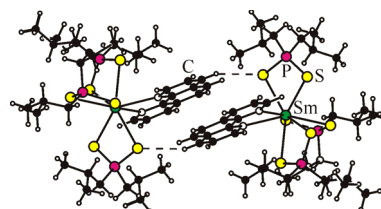


969

Кокина Т.Е., Клевцова Р.Ф., Усков Е.М., Глинская Л.А., Брылева Ю.А., Ларионов С.В.

**Кристаллическая структура соединения  $Sm(Phen)(i-Bu_2PS_2)_3 \cdot MeCN$  и фотолюминесцентные свойства  $SmL(i-Bu_2PS_2)_3$  ( $L = Phen, 2,2'-Bipy$ )**

**Ключевые слова:** разнолигандный комплекс, диизобутилдитиофосфинат, Sm, Phen, 2,2'-Bipy, кристаллическая и молекулярная структура, фотолюминесценция

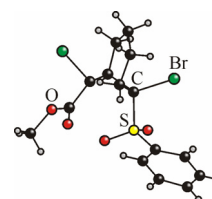


976

Васин В.А., Петров П.С., Генаев А.М., Гиндин В.А., Разин В.В.

**О пространственном строении метил 6,7-эндо,син-дибром-7-анти-(фенилсульфонил) бицикло[3.1.1]гептан-6-экзо-карбоксилата**

**Ключевые слова:** трицикло[4.1.0.0<sup>2,7</sup>]гептан, бицикло[3.1.1]гептан, норпинан, рентгеноструктурный анализ, спектры ЯМР  $^1H$  и  $^{13}C$ , донорно-акцепторное взаимодействие, затрудненное вращение, коалесценция, квантово-химический расчет, метод DFT



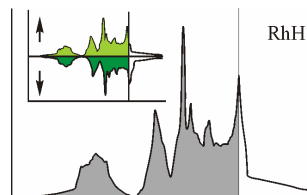
982

**КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ**

Банников В.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л.

**Электронная структура и магнитные свойства гидридов родия  $RhH_x$  ( $x = 0,25, 1,00, 1,33$ ) по данным зонных FLAPW-GGA расчетов**

**Ключевые слова:** гидриды родия, структурные, электронные, магнитные свойства, моделирование

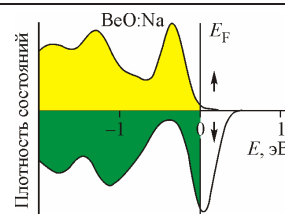


989

Горбунова М.А., Шеин И.Р., Макурин Ю.Н., Кийко В.С., Ивановский А.Л.

**Влияние примесей Li и Na на электронные и магнитные свойства оксида бериллия**

**Ключевые слова:** оксид бериллия, примеси лития, натрия, электронные, магнитные свойства, моделирование

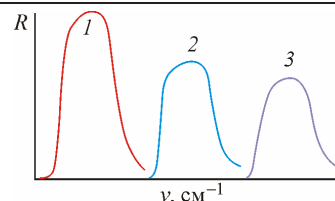


992

Абдукадырова И.Х.

**Закономерности радиационного изменения спектральных характеристик модификаций диоксида кремния**

**Ключевые слова:** диоксид кремния, стеклообразный, кристаллический, модификация, закономерности, спектральные характеристики, быстрые нейтроны

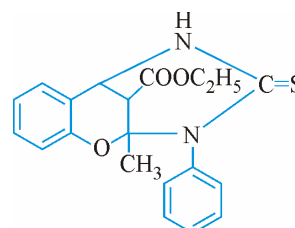


995

Магеррамов А.М., Курбанов А.В., Хрусталева В.Н., Годжаева С.С., Гарибов Э.Н., Фарзалиев В.М., Аллахвердиев М.А.

**Кристаллическая структура этил 9-метил-10-фенил-11-тиоксо-8-окса-10,12-дiazатрицикло[7.3.1.0<sup>2,7</sup>]тридека-2(7),3,5-триен-13-карбоксилата**

**Ключевые слова:** рентгеноструктурный анализ, кристаллическая структура, этил 9-метил-10-фенил-11-тиоксо-8-окса-10,12-дiazатрицикло[7.3.1.0<sup>2,7</sup>]тридека-2(7),3,5-триен-13-карбоксилат, N1-фенилтиокарбамид

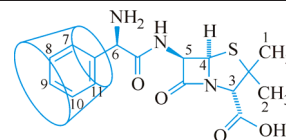


999

Upadhyay S.K., Ali S.M.

### NMR investigation on the interaction of $\beta$ -cyclodextrin and ampicillin

**Keywords:** NMR spectroscopy, COSY, ROESY, inclusion complex

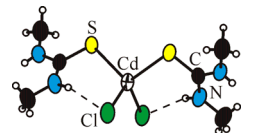


1003

Malik M.R., Ali S., Fettouhi M., Isab A.A., Ahmad S.

### Structural characterization of chloridobis(*N,N'*-dimethylthiourea-*S*)cadmium(II)

**Keywords:** cadmium chloride, *N,N'*-dimethylthiourea, crystal structure

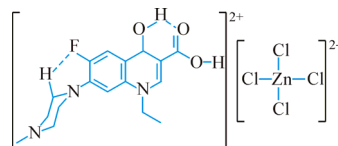


1007

Головнёв Н.Н., Наумов Н.Г., Бахтина А.А., Лыхин А.О.

### Строение соединения $C_{17}H_{22}FN_3O_3 \cdot 2^+ \cdot ZnCl_4^{2-}$

**Ключевые слова:** фторхинолон, пefлоксацин, хлорид цинка, кристаллическая структура, водородные связи,  $\pi$ — $\pi$ -взаимодействие



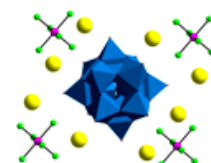
1011

Соколов М.Н., Коренев В.С., Пересыпкина Е.В., Федин В.П.

### Кристаллическая структура двойной соли

#### $Cs_8[\alpha-BW_{12}O_{40}][RhCl_6] \cdot 5.5H_2O$

**Ключевые слова:** гетерополивольфраматы, бор, родий, двойные соли, кристаллическая структура

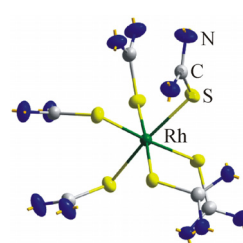


1014

Шушарина Е.А., Дружинина И.А., Татарчук В.В., Громилов С.А.

### Кристаллическая структура тиомочевинных комплексов $[Rh(Thio)_6](NO_3)_3 \cdot 3H_2O$ и $[Pd(Thio)_4](NO_3)_2$ – продуктов экстракционной переработки нитратно-нитритных растворов родия(III) и палладия(II)

**Ключевые слова:** родий, палладий, комплексная соль, рентгеноструктурный анализ

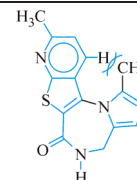


1017

Pesyan N.N.

### Crystal structure of 1,9-dimethyl-4,5-dihydro-6*H*-pyrido[3',2':4,5]thieno[2,3-*f*]pyrrolo[1,2-*a*][1,4]diazepin-6-one

**Keywords:** hydrogen bond, independent molecules, torsion helicoid, diazepinones



1021

Кириллов Н.Ф., Мелехин В.С., Алиев З.Г.

### Строение метилового эфира 4-метил-3,5-диоксо-1-фенил-2-оксапиро[5.5]ундекан-4-карбоновой кислоты методом рентгеноструктурного анализа

**Ключевые слова:** диоксопираны, спирогетероциклы, цинкенолаты, рентгеноструктурный анализ

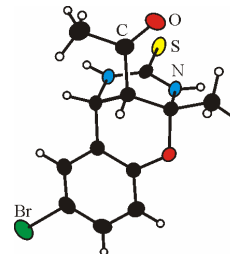


1026

Курбанова М.М., Курбанов А.В., Новрузова А.Б., Хрусталев В.Н., Магеррамов А.М.

### Кристаллическая структура 1-(4-бром-9-метил-11-тиоксо-8-окса-10,12-дiazатрицикло[7.3.1.0<sup>2,7</sup>])тридека-2,4,6-триен-13-ил)этанона

**Ключевые слова:** кристаллическая структура, 1-(4-бром-9-метил-11-тиоксо-8-окса-10,12-дiazатрицикло[7.3.1.0<sup>2,7</sup>])тридека-2,4,6-триен-13-ил)этанон



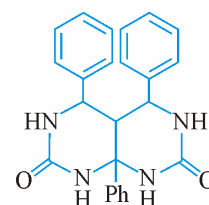
1028

Курбанова М.М., Курбанов А.В., Новрузова А.Б.,  
Хрусталева В.Н., Магеррамов А.М.

1031

**Кристаллическая структура 4,5-бис-фенил-8а-фенил-  
3,4,4а,5,6,8а-гексагидро-1h,8h-пиримидо[4.5-d]  
пиримидин-2,7-диона**

**Ключевые слова:** кристаллическая структура, 4,5-бис-фенил-8а-  
фенил-3,4,4а,5,6,8а-гексагидро-1h,8h-пиримидо[4.5-d]пиримидин-  
2,7-дион



**Содержание следующего номера — в конце журнала**