

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 52

Сентябрь – октябрь

№ 5, 2011

СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Грибов Л.А., Прокофьева Н.И.

871

Матричные элементы для дипольных переходов при постановке квантовой задачи для молекул с ограничениями на движения ядер

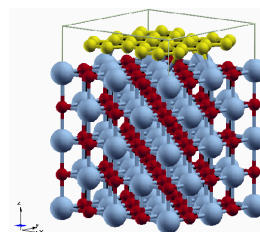
$$\langle \mu \rangle_v' = \sum_{v \neq 0} c_v' c_v'' \Delta \langle \mu_e \rangle_v + \sum_{\substack{v,l \\ v \neq l}} c_v' c_l'' s_{ev}^{(l)} \langle \mu \rangle_v^l$$

Ключевые слова: квантовая химия, квантовые уравнения, матричные элементы

Илясов В.В., Великохазский Д.А., Ершов И.В.,
Никифоров И.Я., Жданова Т.П.

879

Первопринципные расчеты параметров химической связи и зонной структуры двумерной системы графен/MnO(001)

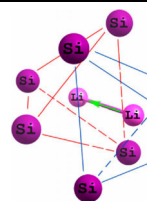


Ключевые слова: зонная структура, химическая связь, магнетизм, поверхность Ферми, ультра тонкие пленки, графен, монооксид марганца

Попов З.И., Федоров А.С., Кузубов А.А.,
Кожевникова Т.А.

891

Теоретическое исследование абсорбирования лития в аморфном и кристаллическом кремнии

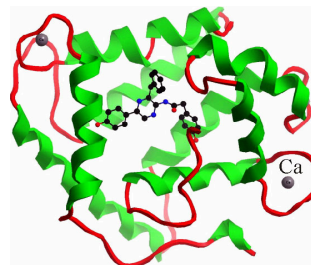


Ключевые слова: диффузия, квантово-химические расчеты, аморфный кремний

Антипина Л.Ю., Томилин Ф.Н., Высоцкий Е.С.,
Овчинников С.Г.

900

Квантово-химическое исследование образования 2-гидропероксицелентеразина в Ca^{2+} -регулируемом фотопротеине обелине

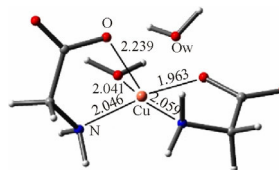


Ключевые слова: целентеразин, 2-гидропероксицелентеразин, *Obelia Longissima*, *Renilla Muellieri*

Gomzi V.

906

Modeling bis(glycinato)copper(II) cis-trans isomerization process: theoretical analysis



Keywords: copper(II), glycine, isomerization, DFT calculation, PCM

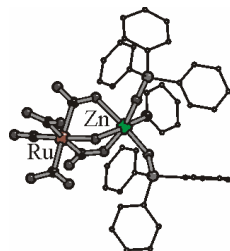
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Костин Г.А., Бородин А.О., Ткачёв С.В.,
Куратьева Н.В.

917

**Исследование замещения лигандов
в гетерометаллических Ru/Zn комплексах
методом ^{31}P ЯМР**

Ключевые слова: рутений, цинк,
гетерометаллические комплексы, замещение лигандов,
структурный анализ

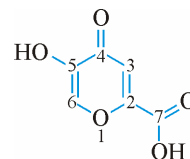


Волынкин В.А., Пачуев А.В., Пирогова А.Н.,
Панюшкин В.Т., Шурыгин А.Я.

922

**Исследование коеновой кислоты и ее солей
с Li^+ и Na^+ методом ЯМР в водном растворе
и твердом состоянии**

Ключевые слова: коеновая кислота, CP-MAS, MQ-MAS,
wPMLG



Могильников К.П., Семенова О.И.

**Эллипсометрический метод определения
структуры наноразмерных пористых слоев**

Ключевые слова: адсорбция, тонкие пористые пленки,
эллипсометрия, модуль Юнга

$$D = D_0 \left(1 + \frac{RT}{V_a Y} \ln \left(\frac{P_a}{P_0} \right) \right)$$

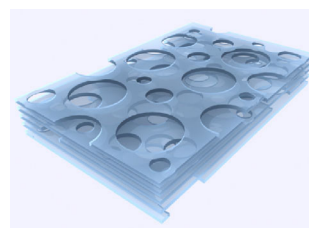
926

Юданов Н.Ф., Окотруб А.В., Булушева Л.Г.,
Асанов И.П., Шубин Ю.В., Юданова Л.И.,
Алферова Н.И., Соколов В.В., Гаврилов Н.Н.,
Тур В.А.

932

**Слоистые соединения на основе перфорированных
графенов**

Ключевые слова: графит, слоистые соединения,
перфорированный графен, фторид углерода

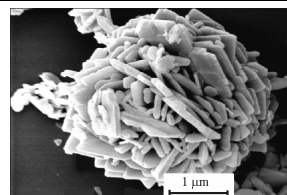


КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Ramesh T.N.

**Vapour phase diffusion of ammonia on the first row
transition metal series and its effect on the
crystallization process – a structural investigation**

Keywords: diffusion, layered compounds,
structure determination



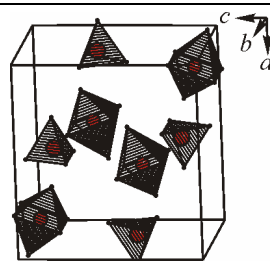
939

Шушарина Е.А., Храненко С.П., Плюснин П.Е.,
Кардаш Т.Ю., Громилов С.А.

$[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]\text{MoO}_4$ ($M = \text{Mo}, \text{W}$).

**Синтез, кристаллическая структура,
термические свойства**

Ключевые слова: вольфрам, молибден, кобальт,
комплексная соль, кристаллохимия,
рентгеноструктурный анализ, термические свойства



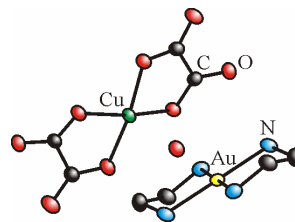
946

Мако́тченко Е.В., Быкова Е.А., Семитут Е.Ю.,
Шубин Ю.В., Снытников П.В., Плюснин П.Е.

952

Кристаллическая структура и термические свойства $[\text{Au}(\text{en})_2]_2[\text{Cu}(\text{C}_2\text{O}_4)_2]_3 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: золото, медь, этилендиамин, оксалат-ион, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ, термический анализ

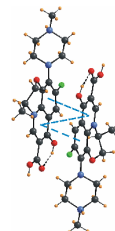


Васильев А.Д., Головнев Н.Н.

958

Кристаллическая структура дигидрата тетрабромидокадмиата левофлоксациндиума $\text{C}_{18}\text{H}_{22}\text{FN}_3\text{O}_4^{2+} [\text{CdBr}_4]^{2-} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: левофлоксацин, анион тетрабромидокадмиата, кристаллическая структура, водородные связи, π - π взаимодействие

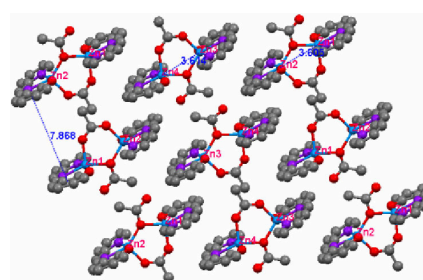


Liu R.-P., Duan M.-Yu., Li J., Su Zh.-P., Zhang J.-H.,
Zhang F.-X.

963

Crystal structures of the $[\text{Zn}(\text{SALIMP})(\text{CH}_3\text{CO}_2)]_2$ and $[\text{Cu}(\text{SALIMP})\text{Cl}]$ with 2-[[2-(pyridinylmethyl)imino]methyl]phenol (HSALIMP) as ligand

Keywords: zinc(II) complex, copper(II) complex, Schiff base, crystal structure, 2-[[2-(pyridinylmethyl)imino]methyl]phenol (HSALIMP)

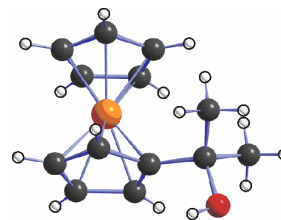


Васильев А.Д., Фабинский П.В., Сергеев Е.Е.,
Фёдоров В.А.

968

Кристаллическая и молекулярная структура 2-ферроценил-2-пропанола

Ключевые слова: 2-ферроценил-2-пропанол, кристаллическая и молекулярная структура, PCA, ИК, электронный спектр

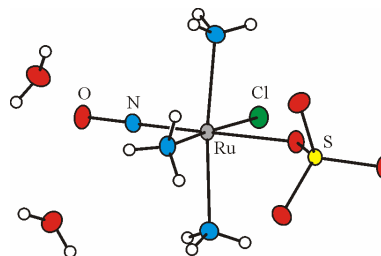


Махиня А.Н., Шушарина Е.А., Байдина И.А.,
Ильин М.А.

973

Строение и синтез первых нитрозоаминокомплексов рутения с координированным сульфат-ионом $[\text{Ru}(\text{NO})(\text{NH}_3)_4(\text{SO}_4)](\text{HSO}_4) \cdot \text{H}_2\text{O}$ и $[\text{Ru}(\text{NO})(\text{NH}_3)_3\text{Cl}(\text{SO}_4)] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: рутений, нитрозокомплексы, аминокомплексы, сульфатоккомплексы, хлорокомплексы, рентгеноструктурный анализ, термогравиметрия, ИК спектроскопия

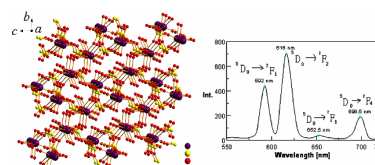


Zhang X., Ma Yu., Zhao H., Jiang Ch., Sun Yu., Xu Ya.

981

Characterization and very strong luminescence of a new 3-D europium sulfate $\text{Eu}_2(\text{H}_2\text{O})_4(\text{SO}_4)_3$

Keywords: europium sulfate, solvothermal synthesis, luminescence, 3-D

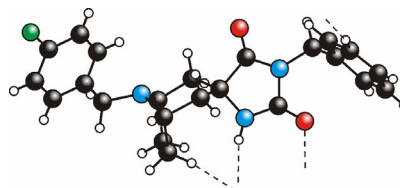


Manjunath H.R., Naveen S., Ananda Kumar C.S., Benaka Prasad S.B., Sridhar M.A., Shashidhara Prasad J., Rangappa K.S.

986

Crystal and molecular structure studies of 1'-benzyl-8-(4-fluorobenzyl)-8-azaspiro[5.5]undecane-3,4'-imidazolidine-2',5'-dione

Keywords hydantoin, crystal structure, spiro centered, chair conformation, hydrogen bonding



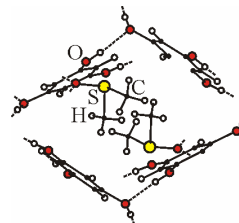
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Полянская Т.М., Халдожаниди К.А., Смоленцев А.И.

991

Супрамолекулярная архитектура комплекса 1:1 флороглюцина с диметилсульфоксидом

Ключевые слова: флороглюцин, диметилсульфоксид, структура, монокристалл, диаграмма, молекулярный комплекс, межмолекулярное взаимодействие, водородная связь

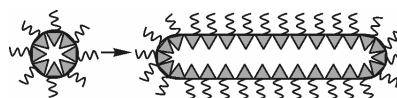


Подлипская Т.Ю., Булавченко А.И., Шелудякова Л.А.

997

Свойства воды в обратных мицеллах triton N-42 при солубилизации растворов HCl по данным ИК-Фурье и фотон корреляционной спектроскопии

Ключевые слова: обратные мицеллы, оксиэтилированные ПАВ, солубилизация, связанная (гидратная) вода, свободная (объемная) вода, ИК-Фурье спектроскопия, фотон корреляционная спектроскопия

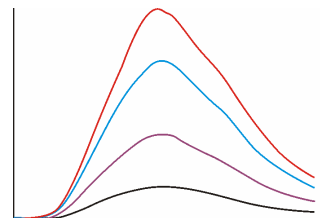


Подлипская Т.Ю., Булавченко А.И., Шелудякова Л.А.

1006

Исследование свойств воды при экстракции Pt(IV) и Au(III) обратными мицеллами triton N-42 из кислых сульфатно-хлоридных растворов

Ключевые слова: гидратная (связанная) вода, объемная (свободная) вода, ИК-Фурье спектроскопия, обратные мицеллы, Triton N-42, экстракция



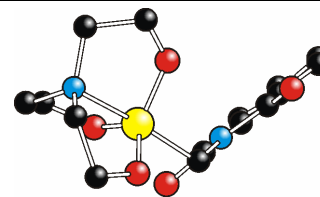
СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Воронков М.Г., Зельбст Э.А., Васильев А.Д., Болгова Ю.И., Солдатенко А.С., Трофимова О.М.

1011

Кристаллическая и молекулярная структура N-(1-силатранилметил)фталимида

Ключевые слова: N-(1-силатранилметил)фталимид, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ

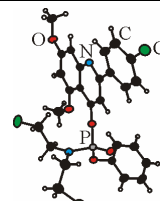


Yuan J.W., Qu L.B., Chen X.L., Qu Z.B., Li Y.C.

1015

Crystal and molecular structures of 2-(4-chlorophenyl)-5, 7-dimethoxyquinolin-4-yl phenyl bis(2-chloroethyl) phosphoramidate

Keywords: crystal and molecular structure, X-ray crystallography, 2-phenyl-4-quinolone, phosphoramidate



КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Грибов Л.А., Прокофьева Н.И.

1019

Электронно-колебательная задача для молекул с инверсионными движениями

Ключевые слова: квантовая теория молекул, электронно-ядерный гамильтониан, инверсионные движения

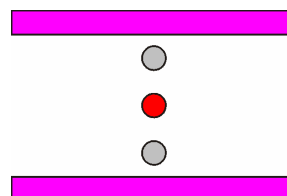
$$\hat{H}_{j\bar{j}}(v) = \hat{H}_j(v) + \dots + \sum_{kj \neq j} c_j c_k \left(\frac{\partial V_{j\bar{j}}}{\partial Q_k} \right) \langle v_i | Q_k | v_j \rangle + \dots + \hat{H}_{\bar{j}}(Q)$$

Семёнов С.Г., Бедрина М.Е.

1022

Структура (μ-оксо)бис[фталоцианиinatoалюминия(III)]: квантовохимическое исследование

Ключевые слова: (μ-оксо)бис[фталоцианиinatoалюминий(III)], структура, индексы связей, потенциалы ионизации, дикатион, B3LYP/6-31G**

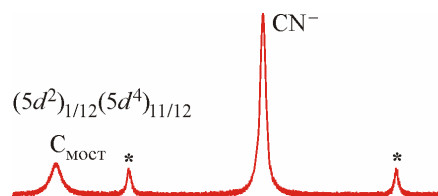


Фёдоров В.Е., Наумов Н.Г., Миронов Ю.В., Козлова С.Г., Габуда С.П.

1026

Локализация электронной вакансии в одномолекулярном переключателе на базе 12-ядерного ренийвого кластера

Ключевые слова: 12-ядерные кластерные комплексы рения, ЯМР ¹³C, теория функционала плотности

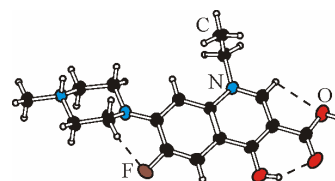


Головнев Н.Н., Наумов Н.Г., Головнева И.И., Дорохова Н.В.

1029

Строение (C₁₇H₂₂FN₃O₃)[MCl₄]·H₂O (M = Cd, Hg)

Ключевые слова: пefлоксацин, кадмий, ртуть(II), хлориды, кристаллическая структура, водородные связи, π-π взаимодействие

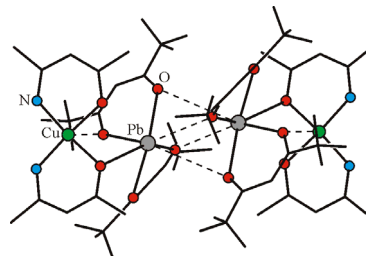


Байдина И.А., Крисюк В.В., Корольков И.В., Стабников П.А.

1034

Исследование строения нового гетерометаллического комплекса на основе кетонимината меди(II) [цис-Cu(ki)₂•Pb(hfa)₂]₂

Ключевые слова: медь, свинец, кристаллохимия β-дикетонатов, гетерометаллические комплексы, летучесть

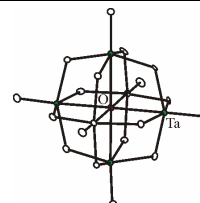


Абрамов П.А., Абрамова А.М., Пересыпкина Е.В., Гущин А.Л., Адонин С.А., Соколов М.Н., Федин В.П.

1038

Новая соль полиоксотанталата Na₈[Ta₆O₁₉]·24.5H₂O и ее свойства

Ключевые слова: танталат, кристаллическая структура, рентгеноструктурный анализ

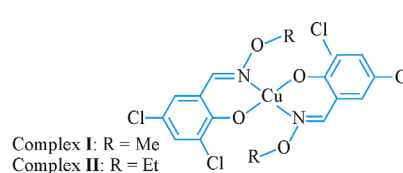


Dong W.-K., Gong Sh.-Sh., Sun Yi.-X., Tong J.-F., Yao J.

1043

Structural characterization of two copper(II) complexes with oxime-type ligands

Keywords: synthesis, characterization, crystal structure, oxime-type ligand, copper(II) complex



Rüffer T., Lang H., Nawaz S., Isab A.A., Ahmad S., Athar M.M. 1050

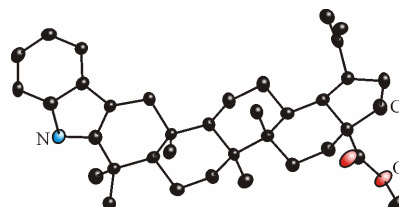
Crystal structure of bis(triphenylphosphine)bis(*N,N'*-dibutylthiourea)silver(I) nitrate

Structure
 $C_{54}H_{70}P_2S_2AgN_5O_3$

Keywords: silver(I) complex, *N,N'*-dibutylthiourea, triphenylphosphine, crystal structure

Казакова О.Б., Хуснутдинова Э.Ф., Супоницкий К.Ю. 1055

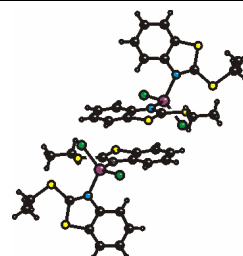
Молекулярная структура метил 1-изопропенил-5а,5в,8,8,14а-пентаметил-1,2,3,3а,4,5,5а,5в,6,7,7а,8,9,14,14а,14в,15,16,16а,16в-икосагидроциклопента[7,8]фенантро[2,1-*b*]карбазол-3а-карбоксилата



Ключевые слова: 1-изопропенил-5а,5в,8,8,14а-пентаметил-1,2,3,3а,4,5,5а,5в,6,7,7а,8,9, 14,14а,14б,15,16,16а,16б-икосагидроциклопента[7,8]фенантро[2,1-*b*]карбазол-3а-карбокси- лат, рентгеноструктурный анализ

Воронков М.Г., Зельбст Э.А., Васильев А.Д., Солдатенко А.С., Болгова Ю.И., Трофимова О.М. 1058

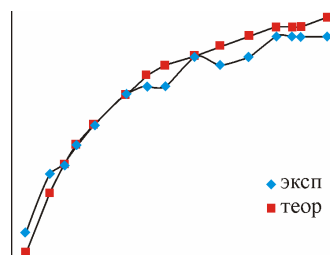
Кристаллическая и молекулярная структура комплекса 2-этилтио-4,5-бензо-1,3-тиазола с дихлоридом кобальта



Ключевые слова: комплекс 2-этилтио-4,5-бензо-1,3-тиазола с $CoCl_2$, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ

Исаева Э.Л., Шамсутдинова М.Х., Буков Н.Н., Панюшкин В.Т. 1062

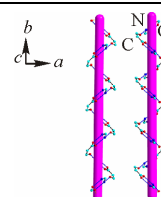
Строение и магнитные свойства комплексного соединения $Cu(II)$ с 2-[2-гидроксифенил]-4,4-дифенил-1,2-дигидро-4Н-3,1-бензоксазином



Ключевые слова: 2-[2-гидроксифенил]-4,4-дифенил-1,2-дигидро-4Н-3,1-бензоксазин, биядерный комплекс меди(II), модель углового перекрытия, молярная магнитная восприимчивость, антиферромагнитный обмен

Gao E.J., Zhu M.C., Liu L., Zhang W.Z., Sun Y.G. 1065

Adduct of 2-aminobenzothiazole and 2-Hydroxy-3-naphthoic acid and its luminescence properties



Keywords: adduct of 2-aminobenzothiazole and 2-Hydroxy-3-naphthoic acid, hydrogen binding, luminescence

Содержание следующего номера — в конце журнала