

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 52

Ноябрь – декабрь

№ 6, 2011

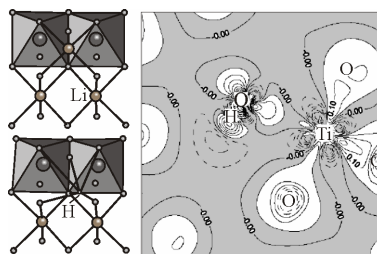
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Шеин И.Р., Денисова Т.А., Бакланова Я.В.,
Ивановский А.Л.

**Структурные, электронные свойства
и химическая связь в протонированных
металлатах лития $\text{Li}_{2-x}\text{H}_x\text{MO}_3$ ($\text{M} = \text{Ti, Zr, Sn}$)**

Ключевые слова: металлаты лития Li_2MO_3 ($\text{M} = \text{Ti, Zr, Sn}$),
протонирование, структурные, электронные свойства,
химическая связь, *ab initio* расчеты

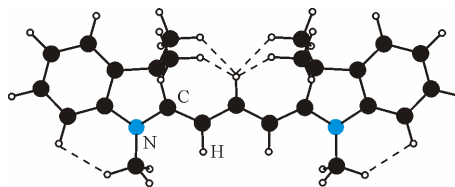


1081

Барышников Г.В., Минаев Б.Ф., Минаева В.А.

**Стабилизирующие водород-водородные
взаимодействия в катионах
индополикарбонианиновых красителей**

Ключевые слова: полиметиновые красители,
метод Бейдера, теория функционала плотности,
критическая точка связи, энергия связи,
тушение флуоресценции

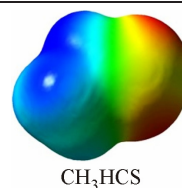


1090

He J.-Y., Long Z.-W., Zhang J.-S.

**Computational investigation of the
 $\text{CH}_3\text{XC}=\text{S}\dots\text{S}$ ($\text{X}=\text{H, HO, HS, PH}_2, \text{CH}_3$) bonding type**

Keywords: MP2, interaction energy,
topological property analysis



CH_3HCS

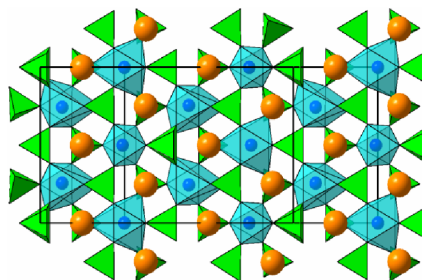
1096

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

**Фазообразование в системах
 $\text{Li}_2\text{MoO}_4\text{--Rb}_2\text{MoO}_4\text{--MMoO}_4$ ($\text{M} = \text{Ca, Sr, Ba, Pb}$)
и кристаллическая структура $\alpha\text{-Rb}_2\text{Pb}(\text{MoO}_4)_2$**

Ключевые слова: литий, рубидий,
щелочно-земельные металлы, свинец, двойные молибдаты,
фазовые соотношения, твердые растворы,
кристаллическая структура, пальмиерит

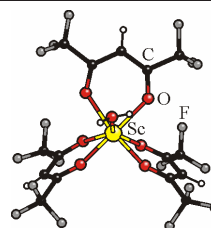


1101

Смоленцев А.И., Жерикова К.В., Трусев М.С.,
Стабников П.А., Наумов Д.Ю., Борисов С.В.

**Кристаллические структуры
трис-гексафторацетилацетонатов алюминия
и скандия**

Ключевые слова: алюминий, скандий, β-дикетонаты,
рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия

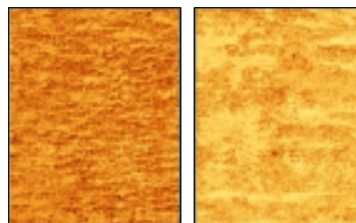


1108

Петрова П.Н., Охлопкова А.А., Фёдоров А.Л.

**Особенности структурообразования полимерных
композитов, модифицированных жидкой смазкой**

Ключевые слова: трибосистема, моторное масло,
полимерные композиты, структура,
степень кристалличности, прочность, износостойкость,
ингибиторы изнашивания

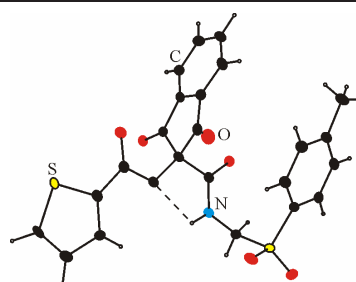


1116

Ramazani A., Kazemizadeh A.R., Ślepokura K., Lis T.

Single crystal X-ray structure of 2-[(4-methylphenyl)sulfonyl]methyl]amino)carbonyl]-1,3-dioxo-2,3-dihydro-1H-inden-2-yl 2-thiophenecarboxylate

Keywords: single crystal X-ray structure,
α-acyloxycarboxamide, multi-component reaction,
Passerini reaction, indane-1,2,3-trione, tosylmethyl isocyanide,
2-thiophenecarboxylic acid

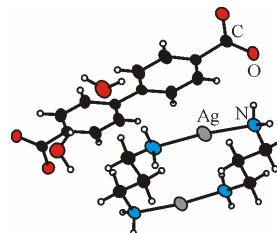


1123

Lou S.-F., Zheng X., Chen Y., Qiu X.-Y.

**Crystal structures of two new dinuclear AG(I)
complexes constructed from
4,4'-biphenyldicarboxylic acid and
N-containing ligands**

Keywords: silver complex, coordination chemistry,
crystal structure, self-assembly, hydrogen bonding



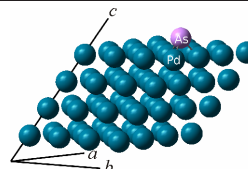
1129

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Малыхин С.Е., Бурылин М.Ю., Бурылин С.Ю.,
Зильберберг И.Л.

**Энергетика адсорбции атома As на поверхности
Pd(111) по данным теории функционала плотности**

Ключевые слова: электротермическая атомно-
абсорбционная спектрометрия, мышьяк, палладий,
матричный модификатор, теория функционала плотности,
энергия атомизации

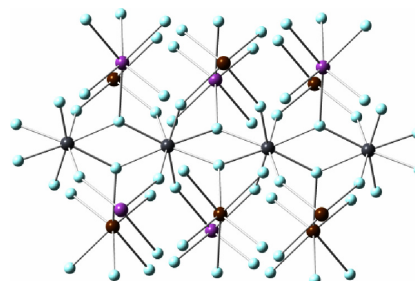


1136

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

**Ионная подвижность, строение и проводимость
в стекле 45ZrF₄–35BiF₃–20CsF по данным ЯМР ¹⁹F,
ИК, КР и импедансной спектроскопии**

Ключевые слова: висмутфтороцирконатные стекла,
спектры ЯМР ¹⁹F, ионная подвижность, ИК,
КР спектроскопия, ионная проводимость

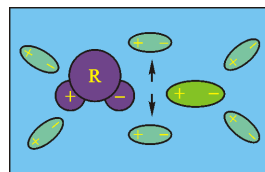


1140

Королёв В.П., Серебрякова А.Л.

Гидратные числа глицина в водном растворе мочевины

Ключевые слова: мочевины, глицин, водные растворы, парциальные объемы, гидратные числа

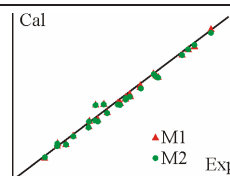


1143

Liao L.M., Li J.F., Lei G.D., Wang B.

Study on octanol-water partition coefficients of benzene halides by molecular vertexes distance index

Keywords: structural descriptor, benzene halides, molecular vertexes distance index (MVDI), QSPR

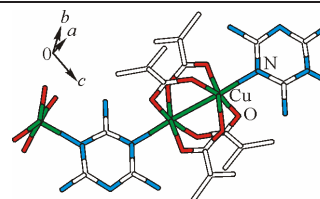


1148

Mamoor G.M., Şahin O., Islam Ullah Khan, Ejaz, Büyüküngör O.

Crystal structure study of the melamine bridged polymeric complex of copper(II)

Keywords: X-ray diffraction analysis, copper(II), carboxylate, melamine

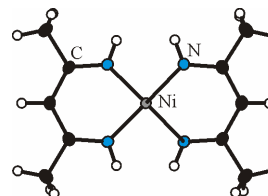


1152

Доровских С.И., Жерикова К.В., Куратьева Н.В., Морозова Н.Б.

Кристаллическая структура комплекса никеля(II) с 2-амино-4-имино-2-пентеном

Ключевые слова: никель(II), β -диимин, рентгеноструктурный анализ

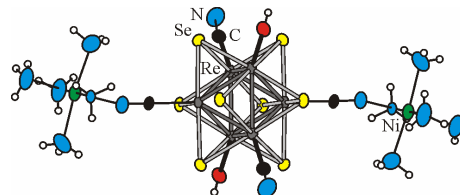


1157

Ермолаев А.В., Смоленцев А.И., Миронов Ю.В.

Синтез и строение молекулярного кластерного комплекса рения *транс*-{[Ni(NH₃)₅]₂[Re₆Se₈(CN)₄(OH)₂]}·6H₂O

Ключевые слова: октаэдрический кластер, рений, никель, кристаллическая структура

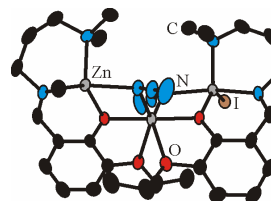


1161

Lou S.-F., Zheng X., Qiu X.-Y.

Crystal structure of a trinuclear Zn(II) complex: [Zn₃L₂($\mu_{1,1}$ -N₃)₂I₂] [L = 2-[(3-dimethylaminopropylimino)methyl]-6-ethoxyphenolate]

Keywords: Schiff base, azide, trinuclear, zinc, crystal structure

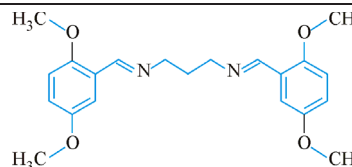


1164

Khalaji A.D., Fejfarova K., Dusek M.

Crystal structure of *N,N'*-bis-(2,5-dimethoxybenzylidene)-1,3-diaminopropane

Keywords: X-ray diffraction, orthorhombic symmetry, Schiff-base



1168

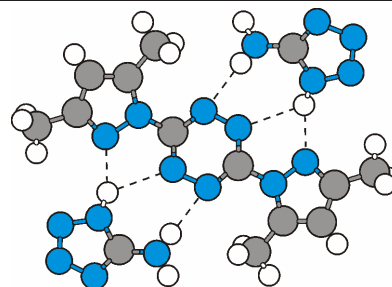
Материалы XV Симпозиума по межмолекулярному взаимодействию и конформациям молекул

Петрозаводск, 14—18 июля 2010 г.

Салмина Е.С., Русинов Г.Л., Слепухин П.А.,
Ишметова Р.И., Толщина С.Г., Потёмкин В.А.,
Гришина М.А.

Межмолекулярные взаимодействия в гетеромолекулярных кристаллах производных тетразина с азолами

Ключевые слова: 1,2,4,5-тетразины, азолы, гетеромолекулярные кристаллы, водородные связи, стэкинг-взаимодействия

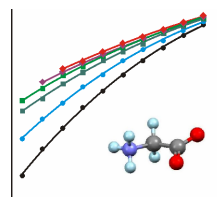


1171

Гринёва О.В., Беляева Е.В.

Строение близких к насыщению водных растворов глицина по данным о сжимаемости

Ключевые слова: строение жидкостей, кооперативные водородные связи, водные растворы, глицин, сжимаемость

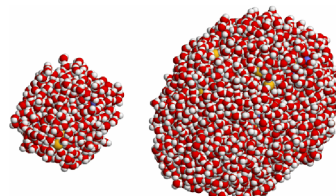


1176

Теплухин А.В.

Пространственные корреляции ионов в нанокластерах водного раствора NaCl

Ключевые слова: вода, раствор NaCl, структура, поляризация, компьютерное моделирование, метод Монте-Карло

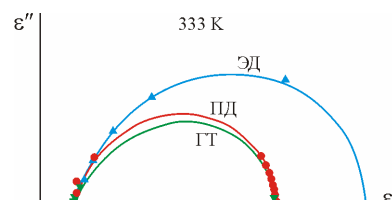


1181

Усачёва Т.М., Журавлёв В.И., Лифанова Н.В.,
Матвеев В.К.

Релаксационные процессы перестройки структуры кластеров в жидкостях. 1,2-Этандиол, 1,2-пропандиол и 1,2,6-гексантириол

Ключевые слова: диолы, триолы, диэлектрические спектры, релаксационные процессы, флуктуационные процессы, дипольные моменты кластеров

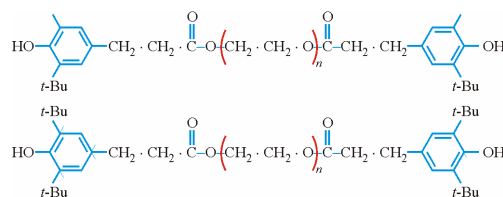


1189

Добрун Л.А., Кузякина Е.Л., Ракитина О.В.,
Сергеева О.Ю., Михайлова М.Е., Домнина Н.С.,
Лезов А.В.

Молекулярные характеристики и антиоксидантная активность полиэтиленгликолей, модифицированных пространственно-затрудненными фенолами

Ключевые слова: конъюгат, антиоксидант, динамическое рассеяние света, вискозиметрия, агрегирование, антирадикальная активность



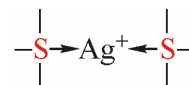
1197

Овчинников М.М., Хижняк С.Д., Пахомов П.М.

1203

Влияние неэлектролитов на процесс гелеобразования в водных цистеин-серебряных растворах

Ключевые слова: L-цистеин, нитрат серебра, гидрогель, кластер, перколяция, супрамолекулярная структура

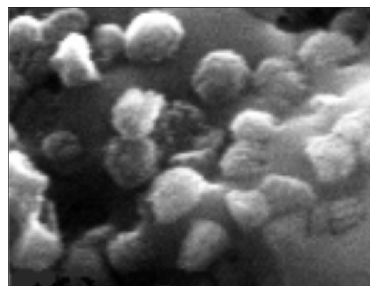


Авдин В.В., Кривцов И.В., Лымарь А.А., Матвейчук Ю.В.

1208

Структурообразование смешанных гелей оксигидрата циркония и кремниевой кислоты, полученных при различном порядке смешения реагентов

Ключевые слова: цирконогель, силикагель, смешанные гели, золь-гель метод, неорганические полимеры, процессы структурообразования, связи Si–O–Zr

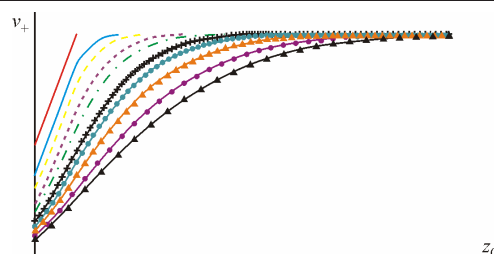


Юрченко А.А., Антюхова М.А., Воронцов-Вельяминов П.Н.

1216

Исследование взаимодействия полимера с поверхностью методом энтропического моделирования

Ключевые слова: молекулярное моделирование, полимеры, малые системы, решёточные модели, свободная энергия

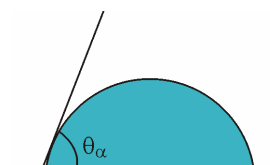


Богданова Ю.Г., Должикова В.Д., Цветкова Д.С., Карзов И.М., Алентьев А.Ю.

1224

Краевые углы смачивания как индикаторы структуры поверхностей полимеров

Ключевые слова: смачивание, структура поверхности полимеров, поверхностная энергия, свободный объем, адгезия, адсорбционные слои, поверхностно-активные вещества

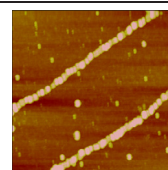


Пучкова А.О., Соколов П.А., Касьяненко Н.А.

1232

Металлизация ДНК на поверхности

Ключевые слова: фиксация ДНК, нанопроволоки, восстановление серебра, ДНК-шаблоны, наноэлектроника, нанобиотехнологии, кремний, металлизация ДНК



Дрибинский Б.А., Касьяненко Н.А.

1239

Влияние длины олигопептида на процесс конденсации ДНК в водно-солевых растворах

Ключевые слова: ДНК, конденсация, олигопептиды, лизин



Пастон С.В., Тарасов А.Е.

1246

Влияние кофеина на конформационные изменения ДНК при γ -облучении *in vitro*

Ключевые слова: кофеин, ДНК, γ -облучение, радиопротекторы, радиосенсибилизаторы, спектрофотометрический анализ, вторичная структура ДНК

