

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 50

Май – июнь

№ 3, 2009

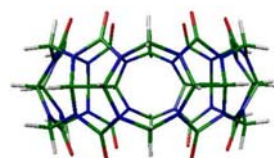
## СОДЕРЖАНИЕ

### ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Маслий А.Н., Гришаева Т.Н., Кузнецов Ан.М., Баковец В.В.

**Квантово-химическое исследование структурирования воды в полости кукурбит[6]урилла**

**Ключевые слова:** кукурбит[6]урил, кавитанд, метод функционала плотности PBE, кластеры воды, структура воды

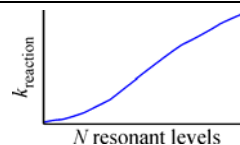


413

Грибов Л.А., Баранов В.И.

**Внутримолекулярный резонанс как каталитический фактор**

**Ключевые слова:** химические превращения, резонанс, катализ

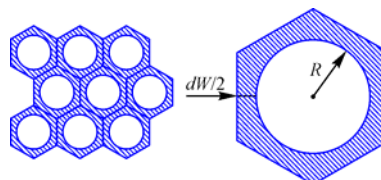


419

Аникеенко А.В., Медведев Н.Н., Ковалев М.К., Мельгунов М.С.

**Моделирование диффузии молекул газа в пористых слоях разной структуры**

**Ключевые слова:** компьютерное моделирование, случайные блуждания, диффузия молекул газа, мезопористые мезофазные материалы, пористые слои, время выдержки в слое, газовая хроматография

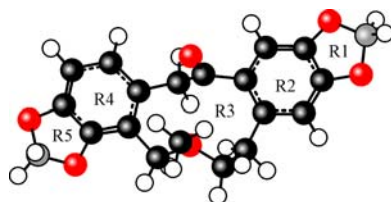


425

Siddiqui S.A., Dwivedi A., Singh P.K., Hasan T., Jain S., Prasad O., Misra N.

**Molecular structure, vibrational spectra and potential energy distribution of protopine using *ab initio* and density functional theory**

**Keywords:** FT – IR spectra, PED, protopine, molecular structure, vibrational spectra



433

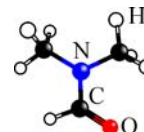
### ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Сабылинский А.В., Габуда С.П., Козлова С.Г., Дыбцев Д.Н., Федин В.П.

**<sup>1</sup>H ЯМР уточнение структуры подрешетки гостей и молекулярной динамики в ультратонких каналах соединения включения**

**[Zn<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>4</sub>O<sub>4</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>N<sub>2</sub>)] · n(H<sub>3</sub>C)<sub>2</sub>NCHO**

**Ключевые слова:** металлорганический сорбент, диметилформамид, молекулярная подвижность, <sup>1</sup>H ЯМР

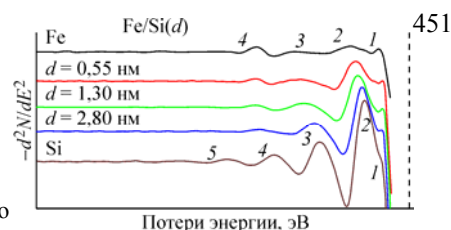


443

Паршин А.С., Александрова Г.А., Варнаков С.Н.,  
Овчинников С.Г.

# **Спектроскопия потерь энергии отраженных электронов и сечение неупругого рассеяния в анализе слоистых структур системы Fe–Si**

**Ключевые слова:** спектроскопия потерь энергии отраженных электронов, сечение неупругого рассеяния, средняя длина неупругого свободного пробега электрона

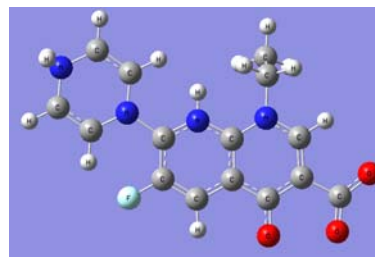


451

Полищук А.В., Карасева Э.Т., Емелина Т.Б.,  
Николенко Ю.М., Карасев В.Е.

# **Электронная структура и спектроскопические свойства норфлоксацина, энноксацина и налидиксовой кислоты**

**Ключевые слова:** фторхинолоны, антибактериальная активность, рентгеноэлектронная спектроскопия, электронное строение, спектры УФ поглощения, люминесценция, квантово-химический расчет, малликовские заряды

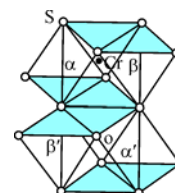


456

Мазалов Л.Н., Соколов В.В., Крючкова Н.А., Вовк Е.И.,  
Филатова И.Ю., Абрамова Г.М.

# **Рентгеноэлектронное изучение зарядового состояния ионов 3d- металлов в дисульфидах CuCr<sub>1-x</sub>V<sub>x</sub>S<sub>2</sub> (x=0–0,4)**

**Ключевые слова:** катион-замещенные дисульфиды, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, Оже-спектроскопия



## **СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ**

Павлюхин Ю.Т.

# **Особенность термодинамической теории возмущений простых жидкостей**

**Ключевые слова:** термодинамическая теория возмущений, простые жидкости

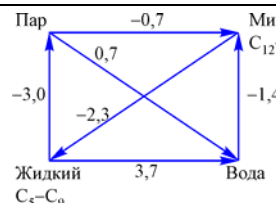
$$\left\langle \exp \left[ - \sum_i \epsilon_i N_i \right] \right\rangle = \exp \left[ - \sum_i \epsilon_i \langle N_i \rangle \right] \left\langle \exp \left[ - \sum_i \epsilon_i \Delta N_i \right] \right\rangle$$

468

Миргород Ю.А.

# **Термодинамический анализ структуры водных растворов углеводородов C<sub>12</sub>–C<sub>18</sub>**

**Ключевые слова:** углеводороды C<sub>5</sub>–C<sub>9</sub> и C<sub>12</sub>–C<sub>18</sub>, мицеллы, термодинамические циклы, гидрофобное взаимодействие, бистабильная структура

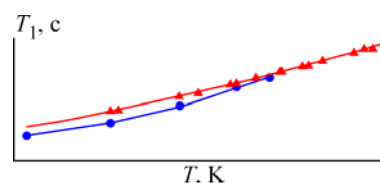


478

Мельниченко Н.А., Выхребенцев А.С.

# **Параметры температурной зависимости скорости магнитной релаксации протонов с различными способами их функционального представления в воде и ее растворах, включая морскую воду**

**Ключевые слова:** растворы, морская вода, температурная зависимость, релаксация, динамические свойства, структура воды



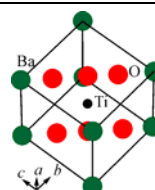
482

## **КРИСТАЛЛОХИМИЯ**

Кабилов Ю.В., Куприянов М.Ф., Чебанова Е.В.

# **Реконструктивные фазовые переходы кислородно-октаэдрических структур**

**Ключевые слова:** кристаллохимия, фазовые переходы, сегнетоэлектрики, оксидные системы



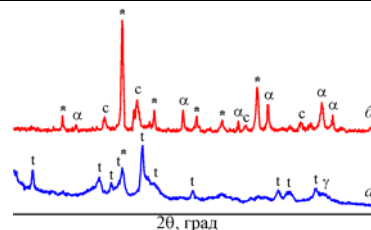
492

Булавченко О.А., Цыбуля С.В., Черепанова С.В.,  
Афонасенко Т.Н., Цырульников П.Г.

497

**Высокотемпературное рентгенографическое исследование процессов формирования и расслоения алюмомарганцевой шпинели  $Mn_{1.5}Al_{1.5}O_4$**

**Ключевые слова:** высокотемпературная рентгенография, алюмомарганцевые системы, фазовые превращения

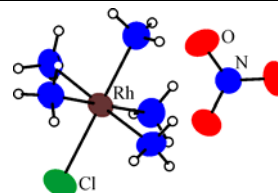


Плюснин П.Е., Семитут Е.Ю., Байдина И.А., Шелудякова Л.А.,  
Коренев С.В.

502

**Кристаллическая структура и свойства  $[M(NH_3)_5Cl](NO_3)_2$ , где  $M = Ir, Rh, Ru$**

**Ключевые слова:** иридий, родий, рутений, хлоропентаммины, нитраты, рентгеноструктурный анализ, рентгенофазовый анализ

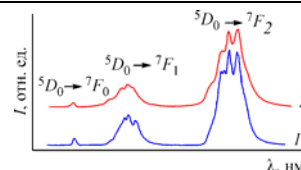


Буквецкий Б.В., Петроченкова Н.В., Мирочник А.Г.

508

**Кристаллическая структура и люминесценция акрилата европия(III)**

**Ключевые слова:** кристаллическая структура, европий(III), акрилат, люминесценция

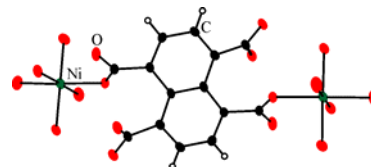


Cui G.-H., Yu Y.-M., Dong G.-Y.

513

**Spectral and thermal properties, and the crystal structure of 1,4,5,8-naphthalenetetracarboxylate dinuclear Ni(II) complex**

**Keywords:** crystal structure, hydrogen bonding, tetracarboxylate, Ni(II) complex

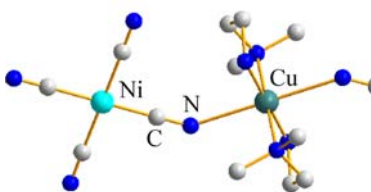


Chen X., Yang P., Ma S.-L., Ren S., Tang M.-Y., Yang Y.,  
Guo Z.-J., Liu L.-Z.

518

**Two new cyanide-bridged complexes,  $\{[Cu(men)_2][Ni(CN)_4]\}_n$  and  $[Mn(bpy)_2]_4[Mo(CN)_8]_2 \cdot 0.5MeOH \cdot 0.75H_2O$ : syntheses and crystal structures**

**Keywords:** cyanide, bimetallic complex, coordination polymer, hydrogen bond, 1D chain, 2D network

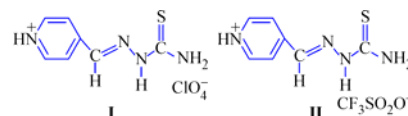


Смоленцев А.И., Лавренова Л.Г., Елохина В.Н.,  
Нахманович А.С., Ларина Л.И.

522

**Кристаллические структуры солей перхлората и трифторметансульфоната тиосемикарбазона пиридин-4-альдегида**

**Ключевые слова:** перхлорат, трифлат, тиосемикарбазон-пиридин-4-альдегид, синтез, РСА, ЯМР спектры

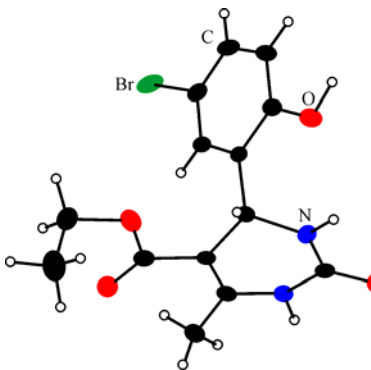


Курбанова М.М., Курбанов А.В., Аскеров Р.К.,  
Аллахвердиев М.А., Хрусталеv В.Н., Магеррамов А.М.

527

**Кристаллические структуры этил-4-(5-бром-2-гидроксифенил)-6-метил-2-оксо-1,2,3,4-тетрагидропиримидин-5-карбоксилата и этил-1-метил-15-оксо-2-окса-14,16-дiazатетрацикло[11.3.1.0<sup>3.12</sup>.0<sup>6.11</sup>]гептадека-3,5,7,9,11-пентаен-17-карбоксилата**

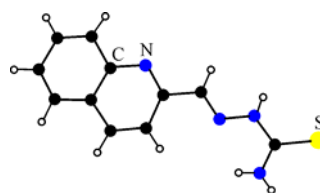
**Ключевые слова:** рентгеноструктурный анализ, кристаллическая структура, этил-4-(5-бром-2-гидроксифенил)-6-метил-2-оксо-1,2,3,4-тетрагидропиримидин-5-карбоксилат, этил-1-метил-15-оксо-2-окса-14,16-дiazатетрацикло[11.3.1.0<sup>3.12</sup>.0<sup>6.11</sup>]гептадека-3,5,7,9,11-пентаен-17-карбоксилат



Боурош П.Н., Ревенко М.Д., Гданец М., Стратулат Е.Ф., Симонов Ю.А.

**Молекулярная и кристаллическая структура тиосемикарбазона 2-хинолинальдегида**

**Ключевые слова:** тиосемикарбазон 2-хинолинальдегида, синтез, строение, конфигурация, кристаллическая структура



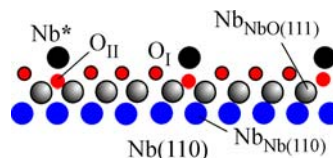
532

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Кузнецов М.В., Разинкин А.С., Шалаева Е.В.

**Фотоэлектронная спектроскопия и дифракция поверхностных наноразмерных структур NbO/Nb(110)**

**Ключевые слова:** РФЭС, РФД, СТМ, поверхность, ниобий, оксид ниобия, поверхностные структуры

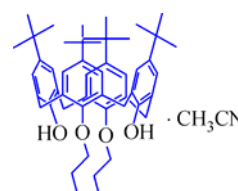


536

Gruber T., Bombicz P., Seichter W., Weber E.

**X-ray crystal structures and isostructurality calculation of calix[4]arenes with lower rim propyl and carboxylic acid or mixed carboxylic acid and ester substituents involving solvent complexes with methanol and ethanol**

**Keywords:** calix[4]arenes, solvate, inclusion compound, crystal structure, supramolecular interaction, hydrogen bonds, isostructurality calculation

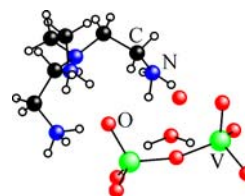


544

Li J., Xing Y.H., Ge M.F., Wang C.G., Li Z.P., Niu S.Y.

**A new polyoxovanadium supramolecular complex  $[(N(CH_2CH_2NH_3)_3)_2(V_6O_{18})] \cdot 3H_2O$ : synthesis, structure, and thermal properties**

**Keywords:** polyoxovanadate complex, hydrogen bonds, tris(2-aminoethyl)amine, tren, crystal structure



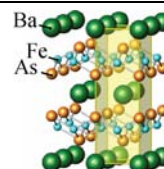
553

**ОБЗОРЫ**

Ивановский А.Л.

**Новые сверхпроводники на основе тройных арсенидов  $(Ca, Sr, Ba)Fe_2As_2$ : синтез, свойства и моделирование**

**Ключевые слова:** тройные арсениды, сверхпроводимость, синтез, структура, свойства, моделирование



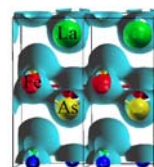
560

**КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ**

Шеин И.Р., Ивановский А.Л.

**Химическая связь в  $LaFeAsO$ ,  $SrFe_2As_2$  и  $LiFeAs$  – базисных фазах новых 18-56 К сверхпроводников**

**Ключевые слова:** FeAs сверхпроводники, зонные расчеты, химическая связь



573

Красных Е.Л.

**Прогнозирование энтальпий испарения на основе модифицированных индексов рандича. I. Одноатомные спирты**

**Ключевые слова:** энтальпия испарения, топологический индекс, индекс связанности, спирты, энергия водородных связей, QSPR

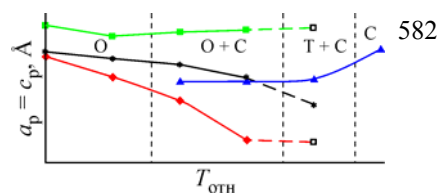


577

Куприна Ю.А., Тесленко П.Ю., Кофанова Н.Б.,  
Куприянов М.Ф., Кабиров Ю.В.

**Рентгенографическое исследование процесса  
фазообразования при получении  $\text{KNbO}_3$**

**Ключевые слова:**  $\text{KNbO}_3$ , перовскит, твердофазный синтез, стехиометрия

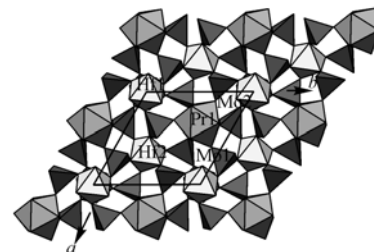


582

Базаров Б.Г., Гроссман В.Г., Клевцова Р.Ф., Аншиц А.Г.,  
Верещагина Т.А., Глинская Л.А., Тушинова Ю.Л.,  
Федоров К.Н., Базарова Ж.Г.

**Кристаллическая структура  
двойного молибдата  $\text{Pr}_2\text{Hf}_3(\text{MoO}_4)_9$**

**Ключевые слова:** таллий, празеодим, гафний, двойные молибдаты, коснарит, кристаллическая структура

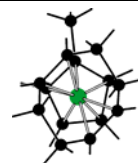


587

Жерикова К.В., Морозова Н.Б., Байдина И.А.

**Кристаллическая структура (5-метилциклопентадиенил)-  
(1,5-циклооктадиен)иридия(I)**

**Ключевые слова:** иридий(I), 1,5-циклооктадиен, 5-метилциклопентадиен, синтез, рентгеноструктурный анализ

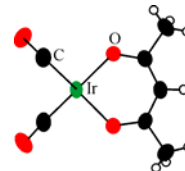


591

Жерикова К.В., Куратьева Н.В., Морозова Н.Б.

**Кристаллическая структура  
(ацетилацетонато)(дикарбонил)иридия(I)**

**Ключевые слова:** иридий(I), ацетилацетон, карбонил, рентгеноструктурный анализ

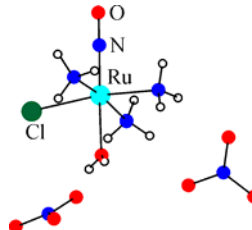


595

Емельянов В.А., Кабин Е.В., Байдина И.А.

**Строение  $[\text{RuNO}(\text{NH}_3)_3(\text{H}_2\text{O})\text{Cl}](\text{NO}_3)_2$  – продукта  
взаимодействия хлорида гидроксонитротриаммин-  
нитрозорутения(II) с азотной кислотой**

**Ключевые слова:** рутений, нитрозокомплексы, амминокомплексы, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия

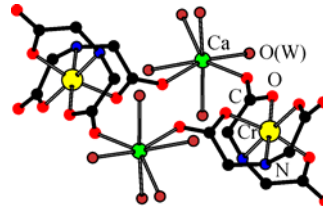


598

Цабель М., Павловский В.И., Позняк А.Л.

**Кристаллическая структура нонагидрата *цис*(N)-  
*бис*(иминодиацетато)хромата(III) кальция  
 $\text{Ca}[\text{Cr}(\text{Ida})_2]_2 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$**

**Ключевые слова:** кристаллическая структура, ион *бис*(иминодиацетато)хромата(III), соль кальция

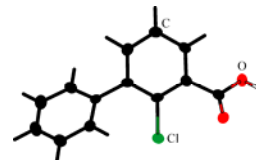


602

Боярский В.П., Фонарь М.С., Сувинска К., Симонов Ю.А.

**Строение 2-хлор-3-фенилбензойной кислоты**

**Ключевые слова:** полихлорбифенилы, карбонилирование, ароматические карбоновые кислоты, синтез, кристаллическая структура

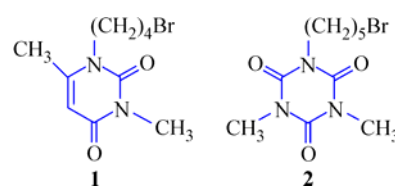


605

Воронина Ю.К., Сайфина Л.Ф., Романова Е.С.,  
Лодочникова О.А., Литвинов И.А.

**Кристаллическая структура бромалкильных производных  
6-метил-урацила и изоциануровой кислоты**

**Ключевые слова:** рентгеноструктурный анализ, пиримидинофаны, изоцианураты,  $\text{C}=\text{O} \cdots \text{Br}$  - взаимодействия,  $\text{C}-\text{H} \cdots \text{O}$  - взаимодействия



608

Содержание следующего номера — в конце журнала

© Сибирское отделение РАН  
Журнал структурной  
химии, № 3, 2009