

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 50

Июль – август

№ 4, 2009

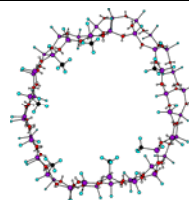
## СОДЕРЖАНИЕ

### ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Дульцев Ф.Н.

**Зависимость реакционной способности  
алкил-допированных слоев диоксида кремния  
от характера связывания Si-O-Si**

**Ключевые слова:** реконструкция поверхности, пористый диоксид  
кремния, молекулярная механика



623

Красных Е.Л.

**Прогнозирование энтальпии испарения на основе  
модифицированных индексов Рандича.**

**II. Многоатомные спирты**

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

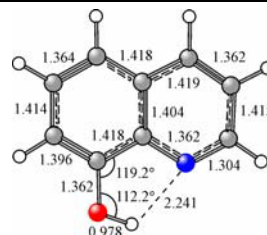


629

Zhou Z.-Y., Shan G.-G., Zhu Y.-L., Yu X.-J., Dong Y.-H.,  
Zhao J.-Y.

**Theoretical studies on excited state proton transfer  
tautomerism reaction and spectroscopic properties  
of 8-hydroxyquinoline monomers and dimers**

**Keywords:** 8-hydroxyquinoline, proton transfer, excited state,  
spectroscopy

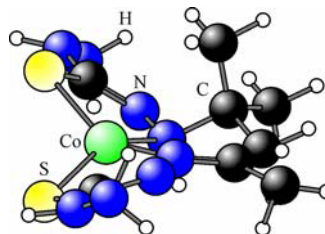


636

Чачков Д.В., Михайлов О.В., Астафьев М.Н.

**Неэмпирический квантово-химический расчет структур  
координационных соединений, возникающих  
при темплатном синтезе в системах ион M(II)–  
гидразинотетрагидразид–ацетон (M= Co, Ni, Cu)**

**Ключевые слова:** темплатный синтез, макроциклический комплекс,  
B3LYP



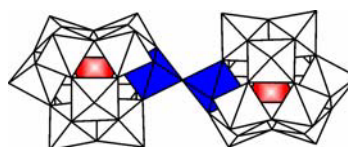
643

### ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Максимов Г.М., Максимовская Р.И., Холдеева О.А.,  
Федотов М.А., Зайковский В.И., Васильев В.Г.,  
Арзуманов С.С.

**Синтез и свойства гетерополикислоты  $H_8(PW_{11}TiO_{39})_2O$**

**Ключевые слова:** гетерополикислоты, комплексы титана, ЯМР



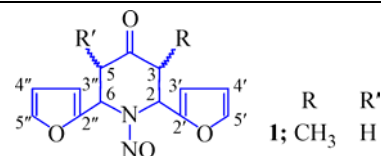
648

ИЗДАТЕЛЬСТВО СО РАН  
НОВОСИБИРСК

Thangamani A., Jayabharathi J., Manimekalai A.

**Boat form contributions in crowded piperidines: theoretical and experimental study**

**Keywords:** *N*-nitroso-2,6-bis(2'-furyl)piperidines, conformations,  $^1\text{H}$  NMR,  $^{13}\text{C}$  NMR, semiempirical AM1 calculations



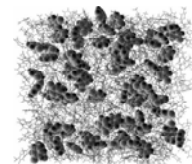
658

## СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Богдан Т.В., Исаева Е.В.

**Молекулярно-динамическое моделирование структуры жидких хлорбензола, *орто*-хлортолуола и их смесей**

**Ключевые слова:** жидкий хлорбензол, жидкий *орто*-хлортолуол, молекулярная динамика, функция радиально-углового распределения

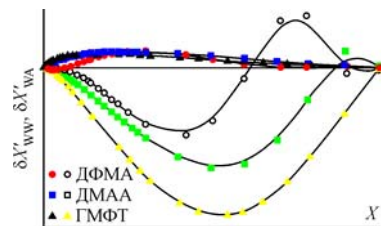


669

Зайчиков А.М., Крестьянинов М.А.

**Структурно-термодинамические характеристики и межмолекулярные взаимодействия в водных растворах гексаметилфосфортриамида**

**Ключевые слова:** внутреннее давление, межмолекулярные взаимодействия, структура водных растворов, гексаметилфосфортриамид, диалкиламида



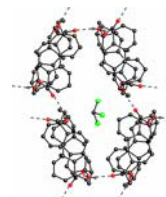
676

## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Лодочникова О.А., Хайбуллин Р.Н., Мусин Р.З., Губайдуллин А.Т., Катаев В.Е.

**Соединения включения на основе 16(*S*)-дигидро- и 15-*en*-стевиолов**

**Ключевые слова:** дитерпеноиды, стевиол, водородные связи, соединения включения

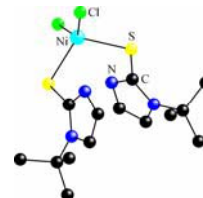


685

Singh U.P., Aggarwal V.

**Structural studies of nickel(II) complexes with 1-*tert*-butylimidazole-2-thione and 3-phenyl-5-methyl-pyrazole ligands**

**Keywords:** synthesis, 1-*tert*-butylimidazole-2-thione, nickel(II), 3-phenyl-5-methyl-pyrazole, non-covalent interactions



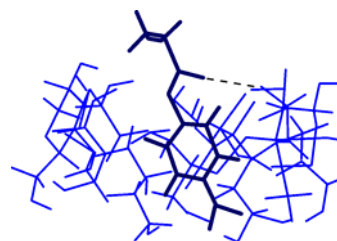
691

## СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Coscarello E.N., Barbiric D.A., Castro E.A., Vico R.V., Buján E.I., de Rossi R.H.

**Comparative analysis of complexation of pesticides (fenitrothion, methylparathion, parathion) and their carboxylic ester analogues by  $\beta$ -cyclodextrin. Theoretical semiempirical calculations**

**Keywords:** supramolecular complexes,  $\beta$ -cyclodextrin, inclusion compounds, semiempirical calculations, pesticides

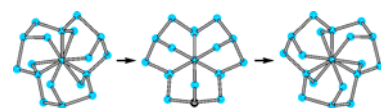


698

Тытик Д.Л.

**Моделирование кооперативного движения атомов в симметричных системах**

**Ключевые слова:** области симметрии, компьютерное моделирование



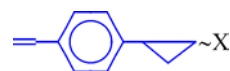
707

# КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Гулиев К.Г., Пономарева Г.З., Мамедли С.Б., Гулиев А.М.

720

## Ультрафиолетовые спектры поглощения 2-замещенных-1-(*n*-винилфенил)циклопропанов

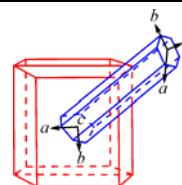


**Ключевые слова:** 2-замещенный 1-(*n*-винилфенил)циклопропан, УФ спектр, циклопропановый цикл, сопряжение, заместитель

Алейникова К.Б., Афанасьев М.М., Занин И.Е.

723

## Исследование природы эпитаксиального роста красной и черной модификаций дифосфида цинка

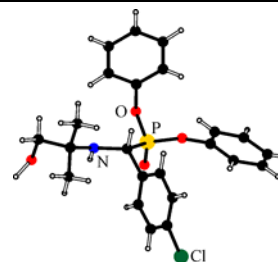


**Ключевые слова:** эпитаксиальный рост, дифосфид цинка, атомы-аналоги, атомный мотив, плоскости срачивания

Добрынин А.Б., Грязнов П.И., Наумова О.Е., Литвинов И.А., Сякаев В.В., Альфонсов В.А.

726

## Кристаллическая и молекулярная структура (±)-дифенил-4'-хлорфенил-[(2-гидрокси-1,1-диметилэтил)амино]метилфосфоната



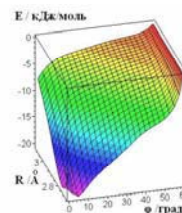
**Ключевые слова:** кристаллическая и молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ, (±)-дифенил-4'-хлорфенил-[(2-гидрокси-1,1-диметилэтил)амино]метилфосфонат

# МАТЕРИАЛЫ XIV СИМПОЗИУМА ПО МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОМУ ВЗАИМОДЕЙСТВИЮ И КОНФОРМАЦИЯМ МОЛЕКУЛ 15–21 ИЮНЯ 2008 г., ЧЕЛЯБИНСК

Ефимов Ю.Я.

729

## О влиянии геометрии водородного мостика на колебательные спектры воды: двухпараметрические потенциалы Н-связи



**Ключевые слова:** жидкая вода, континуальная модель, водородная связь, флуктуационная теория, геометрия, потенциал, колебательные спектры

Бурейко С.Ф., Кучеров С.Ю.

739

## Строение и межмолекулярные взаимодействия в комплексах с водородной связью ряда бифункциональных азотсодержащих соединений

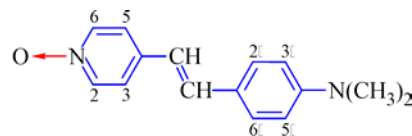


**Ключевые слова:** структура молекул, водородная связь, спектроскопия, квантово-химические расчеты, растворы, молекулярные и ионные комплексы, циклические комплексы

Кондратьева А.П., Лебедева Н.Ш., Губарев Ю.А., Павлычева Н.А., Андреев В.П., Альпер Г.А., Кумеев Р.С.

748

## Фотоиндуцированная изомеризация N-оксида 4-(4'-диметиламиностирил)пиридина

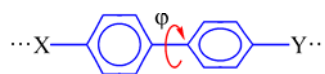


**Ключевые слова:** N-оксид 4-(4'-диметиламиностирил)пиридина, фотооблучение, *транс* → *цис* изомеризация, фотостационарная смесь

Гринева О.В.

753

## Конформации и межмолекулярные контакты молекул 4- и 4,4'-замещенных бифенилов в кристаллах

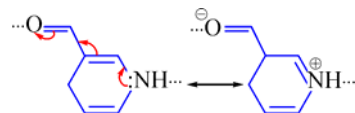


**Ключевые слова:** конформации нежестких молекул, Кембриджский банк структурных данных, межмолекулярные водородные связи, контакты галоген...галоген

Банару А.М., Словохотов Ю.Л.

# **Водородные связи в карбонилированных 1,4-дигидропиридинах**

**Ключевые слова:** Кембриджский банк данных, водородная связь,  $\pi$ -делокализация, карбонильная группа, молекулярная цепь

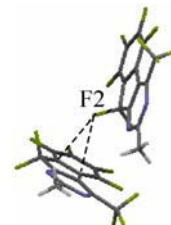


761

Рыбалова Т.В., Багрянская И.Ю.

# **Роль межмолекулярных взаимодействий C-F... $\pi$ , F...H и F...F в инженерии кристаллов фторорганических соединений, F-агрегация**

**Ключевые слова:** межмолекулярные взаимодействия C-F... $\pi$ , F...H и F...F, F-агрегация, квантово-топологический анализ, квантово-химические расчеты

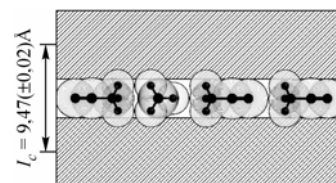


767

Пинаков Д.В., Алферова Н.И., Чехова Г.Н., Шубин Ю.В.

# **Роль межмолекулярного взаимодействия в формировании строения соединений включения «хозяин-гость» на основе полимерной матрицы фторида графита**

**Ключевые слова:** интеркалированные соединения фторированного графита, инфракрасная спектроскопия, рентгенофазовый анализ, межмолекулярные взаимодействия

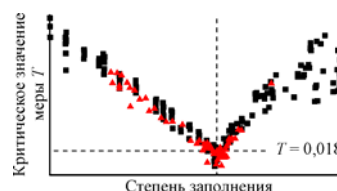


780

Аникеенко А.В., Медведев Н.Н.

# **Исследование структуры упаковок твердых сфер вблизи берналовской плотности**

**Ключевые слова:** упаковки твердых сфер, предельная плотность упаковок, структура жидкости, структура стекла, кристаллизация, порог перколяции

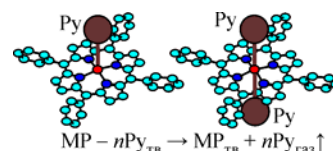


787

Малькова Е.А., Лебедева Н.Ш., Вьюгин А.И.

# **Межмолекулярное взаимодействие тетрафенилпорфирина и его металлокомплексов с пиридином в кристаллическом состоянии**

**Ключевые слова:** металлтетрафенилпорфирин, молекулярные комплексы, термоокислительная деструкция, термогравиметрический анализ, кинетические характеристики

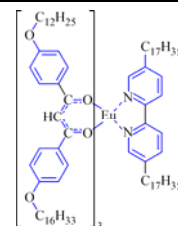


795

Лапаев Д.В., Никифоров В.Г., Сафиуллин Г.М., Галявиев И.Г., Джабаров В.И., Князев А.А., Лобков В.С., Галяметдинов Ю.Г.

# **Особенности межлигандного переноса энергии в мезогенном аддукте европия(III)**

**Ключевые слова:** редкоземельные комплексы,  $\beta$ -дикетоны, европий(III), внутримолекулярный перенос энергии, спектроскопические свойства

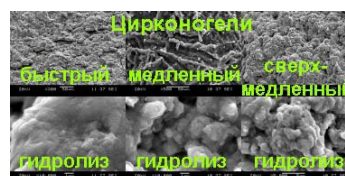


802

Авдин В.В., Никитин Е.А., Лымарь А.А., Батист А.В.

# **Влияние скорости гидролиза на структуру и свойства оксигидратов циркония**

**Ключевые слова:** оксигидраты циркония, скорость гидролиза, оксихлорид циркония, золь-гель метод, скорость гелеобразования, процессы структурирования

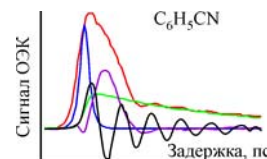


809

Никифоров В.Г., Лобков В.С.

# **Особенности либрационной динамики молекул бензонитрила и орто-дихлорбензола в жидкости**

**Ключевые слова:** межмолекулярные взаимодействия, либрация молекул, фемтосекундная спектроскопия



817

Содержание следующего номера — в конце журнала

© Сибирское отделение РАН  
Журнал структурной  
химии, № 4, 2009