

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 51

Ноябрь-декабрь

№ 6, 2010

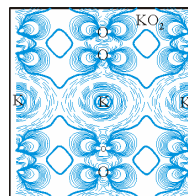
## СОДЕРЖАНИЕ

### ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Журавлев Ю.Н., Оболонская О.С.

#### Структура, механическая стабильность и химическая связь в оксидах щелочных металлов

**Ключевые слова:** оксиды, пероксиды, надпероксиды, озониды, упругие постоянные, Маллиkenовская заселенность, атомные заряды, деформационная плотность, химическая связь

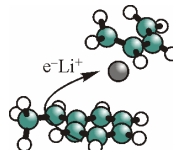


1043

Калниньш К.К., Подольский А.Ф.

#### Электронно-возбужденные реакционные комплексы в анионной сополимеризации неполярных мономеров

**Ключевые слова:** перенос электрона и катиона, структура возбужденных комплексов RHF, ROHF/DH, B3LYP

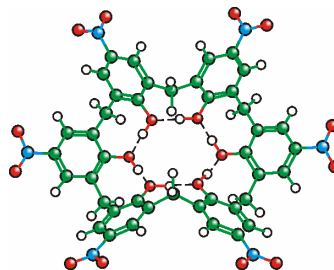


1052

Новиков А.Н., Шапиро Ю.Е.

#### Изучение водородных связей в *n*-замещенных каликс[4]- и каликс[6]аренах методами *ab initio* и функционала электронной плотности

**Ключевые слова:** *n*-замещенный каликсарен, *n*-галогенкаликс[4]арен, *n*-галогенкаликс[6]арен, водородная связь, метод Хартри—Фока, метод функционала электронной плотности, константы Гаммета, множественная корреляция, метод Гроотенхьюза

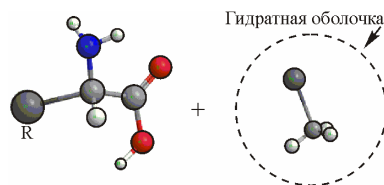


1062

Шагун В.А., Смирнов В.И., Шагун Л.Г.

#### Квантово-химическое исследование механизма взаимодействия монометилового катиона ртути с аминокислотами G, H, S и Y

**Ключевые слова:** квантово-химический расчет, монометиловый катион ртути, аминокислота, механизм реакции



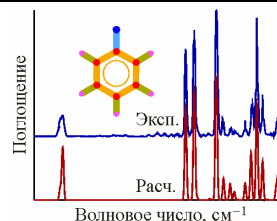
1073

### ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Павлючко А.И., Васильев Е.В., Грибов Л.А.

#### Оценка вклада обертонов в ИК спектры галогенпроизводных углеводов на основе квантово-химических расчетов

**Ключевые слова:** ангармонический расчет, обертоны, составные частоты, фтор- и хлорпроизводные углеводороды

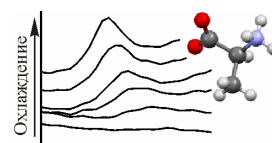


1084

Миньков В.С., Чесалов Ю.А., Болдырева Е.В.

**Исследование влияния температуры на ИК спектры кристаллических аминокислот, дипептидов и полиаминокислот. VI. *L*-аланин и *DL*-аланин**

**Ключевые слова:** аланин, аминокислоты, оптические изомеры, ИК-спектроскопия, рентгеновская дифракция, водородные связи

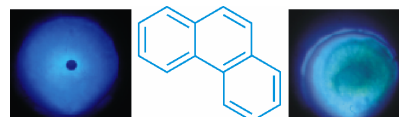


1091

Политов А.А., Чупахин А.П., Тапилин В.М., Булгаков Н.Н., Друганов А.Г.

**К механизму механохимической димеризации антрацена. Кристаллический фенантрен в условиях высокого давления и сдвига**

**Ключевые слова:** антрацен, фенантрен, димер, электронная структура, механохимия, высокое давление, сдвиг, фотолюминесценция

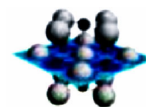


1103

Яловега Г.Э., Шматко В.А., Солдатов А.В.

**Локальная и электронная структуры свободных кластеров NaCl как функция размера кластера: анализ методами XANES и DFT**

**Ключевые слова:** свободные кластеры, рентгеновская спектроскопия поглощения, теория функционала электронной плотности, геометрическая оптимизация

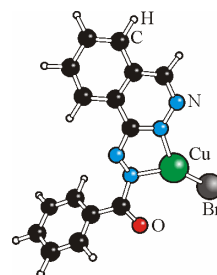


1109

Евсюкова М.А., Кравцова А.Н., Щербаков И.Н., Попов Л.Д., Левченков С.И., Туполова Ю.П., Зубавичус Я.В., Тригуб А.Л., Солдатов А.В.

**Атомная структура комплекса бромида меди на основе 1'-фталазинилгидразон бензоина: анализ на основе теории функционала плотности и рентгеновской спектроскопии поглощения**

**Ключевые слова:** атомная структура, теория функционала плотности, XANES спектроскопия



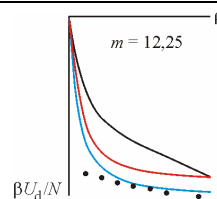
1114

**СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ**

Литинский Г.Б.

**Неаддитивность ориентационных взаимодействий и теория возмущений для дипольных твердых сфер**

**Ключевые слова:** термодинамическая теория возмущений, неаддитивность взаимодействий, жидкость дипольных твердых сфер, модель Вайдома—Роулинсона

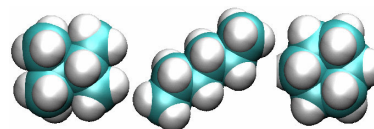


1119

Аникеенко А.В., Ким А.В., Медведев Н.Н.

**Исследование структуры жидких C6-алканов методом молекулярной динамики**

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, структура простых жидкостей, молекулярные жидкости, жидкие алканы



1127

Афанасьев В.Н., Голубев В.А.

**Адиабатическая сжимаемость и структурные характеристики водных растворов неэлектролитов**

**Ключевые слова:** гидратация, число гидратации, молярная адиабатическая сжимаемость гидратных комплексов, свободный растворитель

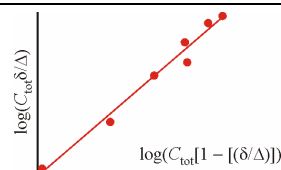


1134

Миргород Ю.А., Постников Е.Б., Борщ Н.А.

**Исследование методом ЯМР  $^{13}\text{C}$  структуры мицелл хлоридов алкиламмония в водных растворах**

**Ключевые слова:** ЯМР  $^{13}\text{C}$ , хлориды алкиламмония, структура мицелл в воде, структурная модель ассоциации



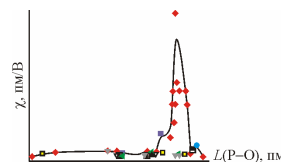
1147

**КРИСТАЛЛОХИМИЯ**

Кидяров Б.И., Атучин В.В., Первухина Н.В.

**Взаимосвязь «структура—свойство» кристаллов как фактор уточнения структурно-физических данных**

**Ключевые слова:** нецентросимметричные кристаллы, фосфаты, структура, микроструктура, нелинейно-оптические свойства

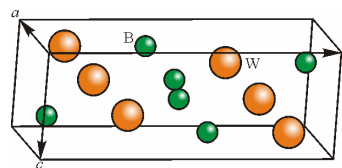


1155

Громилов С.А., Кинеловский С.А., Алексеев А.В., Киреев И.Б.

**Исследование высокотемпературных фаз  $\text{W}_2\text{B}$  и  $\beta\text{-WB}$ , полученных при кумулятивном нанесении покрытий**

**Ключевые слова:** кумулятивный синтез, покрытие, борид вольфрама,  $\text{W}_2\text{B}$ ,  $\beta = \text{WB}$ , рентгенофазовый анализ, микротвердость

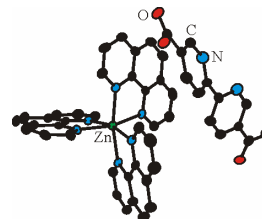


1161

Гао Э.-З., Лю Ш.-Х.

**Молекулярная структура координационного соединения додекагидрата трис(фенантролин)цинк(II) 2,2'-бипиридил-5,5'-дикарбоксилата**

**Ключевые слова:** кристаллическая структура, 1,10-фенантролин, 2,2'-бипиридин-5,5'-дикарбоновая кислота,  $\pi$ — $\pi$ -взаимодействие, водные кластеры

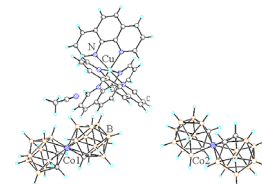


1167

Полянская Т.М., Дроздова М.К., Волков В.В.

**Низкотемпературное рентгеноструктурное исследование  $[\text{Cu}^{\text{II}}(1,10\text{-C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_3]^{2+} \{\text{Co}^{\text{III}}[\eta^5\text{-(3-1,2-C}_2\text{B}_9\text{H}_{11})_2]_2\} \cdot 2 \cdot \text{CH}_3\text{CN}$**

**Ключевые слова:** низкотемпературный РСА, кристаллическая структура, медь, кобальт, фенантролиновый лиганд, производные *орто*-карборана(12), ацетонитрил

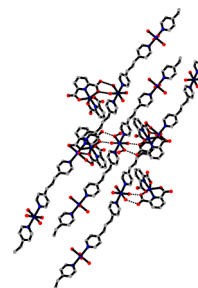


1174

Zhang M.-S., Sun B.-W., Fang R.-B., Zhao Q.-H.

**Crystal structure and thermal properties of novel Co(II) complexes with 2,6-pyridinedicarboxylate containing infinite one-dimensional chain:  $[\text{CoL}^1(\text{H}_2\text{O})_4][\text{Co}(\text{pydc})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  AND  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6][\text{Co}(\text{pydc})_2]\text{L}^2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  ( $\text{L}^1 = 1,3\text{-bis(4-pyridyl)propane}$ ,  $\text{L}^2 = 3\text{-amino-1h-1,2,4-triazole}$ ,  $\text{pydc} = 2,6\text{-pyridinedicarboxylic acid}$ )**

**Keywords:** Co(II) complexes, one-dimensional complexes, crystal structure, hydrogen bonding, 2, 6-pyridinedicarboxylic acid

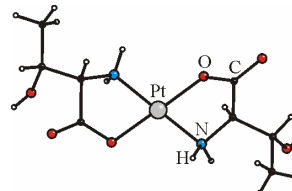


1180

Крылова Л.Ф., Ковтунова Л.М., Романенко Г.В., Шелудякова Л.А.

**Стереизомерные комплексы Pt(II) с треонином и аллотреонином**

**Ключевые слова:** стереоизомеры, комплексы, платина, треонин, аллотреонин, ЯМР спектры, ИК спектры, кристаллическая структура

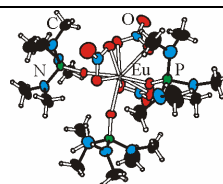


1187

Буквецкий Б.В., Мирочник А.Г., Жихарева П.А., Карасёв В.Е.

**Кристаллическая структура и триболоминесценция центросимметричного комплекса  $[\text{Eu}(\text{NO}_3)_3(\text{ГМФА})_3]$**

**Ключевые слова:** европий(III), комплексы, структура, люминесценция, триболоминесценция



1200

## СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Ворох А.С., Кожевникова Н.С., Ремпель А.А., Магерль А.

### Образование нанопленки сульфида кадмия CdS на прекурсорном слое $\text{Cd}(\text{OH})_2/\text{SiO}_2$

**Ключевые слова:** сульфид кадмия, химическое осаждение, наноструктурированные пленки



1206

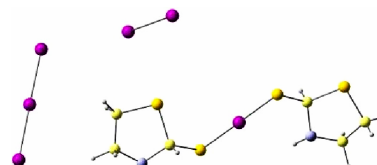
## ОБЗОРЫ

Черновьянц М.С., Долинкин А.О.

1211

### Гетероароматические тиамиды: структура и устойчивость комплексов переноса заряда с иодом, антииреоидная активность

**Ключевые слова:** гетероароматические тиамиды, комплексы переноса заряда с иодом, иодониевые соли, дисульфиды моно(ди)-катионов, структура, устойчивость, спектроскопические исследования, антииреоидные препараты



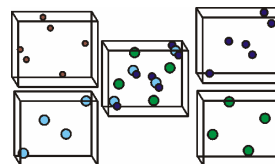
## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Басалаев Ю.М., Демущин П.В.

1225

### Генезис энергетических зон из подрешеточных состояний в кристаллах $\text{MgSiN}_2$ и $\text{MgGeN}_2$

**Ключевые слова:** функционал плотности, метод подрешеток, тройные нитриды

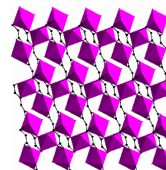


Cui G.-H., Dong G.-Y., Liu X.-H., Yu Y.-M.

1230

### Crystal structures and fluorescence of a new 2D layer cadmium(II) malate coordination polymer

**Keywords:** cadmium(II), crystal structure, malate ligand, coordination polymer, two-dimension, fluorescence

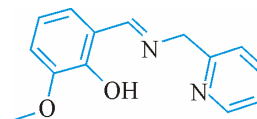


Hui R.-H., Zhou P., You Z.-L.

1235

### Crystal structures of two dinuclear cadmium(II) complexes with Schiff bases as ligands

**Keywords:** schiff base, Cd(II), dimer, isothiocyanate, phenolate

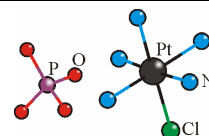


Венедиктов А.Б., Тютюнник А.П., Громилов С.А.

1239

### Кристаллическая структура $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}](\text{PO}_4) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

**Ключевые слова:** фосфат хлоропентаммин платины(IV), рентгеноструктурный анализ поликристаллов

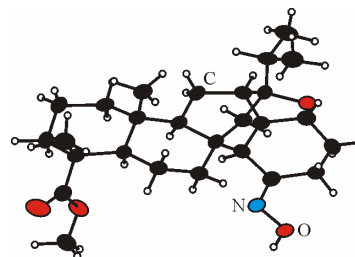


Смирнова И.Е., Третьякова Е.В., Казакова О.Б., Супоницкий К.Ю.

1242

### Молекулярная и кристаллическая структура метил 20-изопропил-15(E)-гидроксимино-5,9-диметил-18-оксагексацикло [12.4.0.2<sup>2,13</sup>.1<sup>18,20</sup>.0<sup>5,10</sup>.0<sup>4,13</sup>]генэйкозан-9-карбоксилата

**Ключевые слова:** метил 20-изопропил-15(E)-гидроксимино-5,9-диметил-18-оксагексацикло [12.4.0.2<sup>2,13</sup>.1<sup>18,20</sup>.0<sup>5,10</sup>.0<sup>4,13</sup>]генэйкозан-9-карбоксилат, синтез, рентгеноструктурный анализ



Указатель статей. Том 51 ..... 1245  
Авторский указатель. Том 51 ..... 1255

Содержание следующего номера — в конце журнала

© Сибирское отделение РАН  
Журнал структурной химии,  
№ 6, 2010