

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 51

Январь – февраль

№ 1, 2010

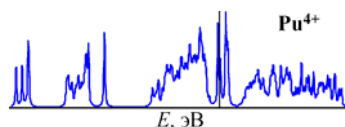
## СОДЕРЖАНИЕ

### ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Рыжков М.В., Ивановский А.Л., Поротников А.В.,  
Щапова Ю.В., Вотяков С.Л.

**Электронное строение примесных центров  $Pu^{3+}$  и  $Pu^{4+}$  в цирконе**

**Ключевые слова:** кластерный расчет, релятивистские эффекты, химическая связь примеси Pu с матрицей  $ZrSiO_4$

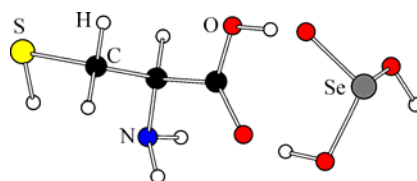


7

Панкратов А.Н., Бычков Н.А., Цивилева О.М.

**Взаимодействие L-цистеина с селенистой и селеновой кислотами: исследование методом теории функционала плотности**

**Ключевые слова:** теория функционала плотности, водородная связь, комплексы, L-цистеин, селенистая кислота, селеновая кислота

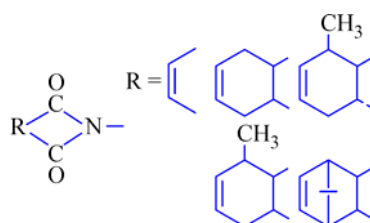


15

Салахов М.С., Гречкина О.Т., Багманов Б.Т.

**Применение топологических индексов в корреляционном анализе N-алкилкарбоксамидов циклических 1,2-дикарбоновых кислот**

**Ключевые слова:** N-алкилкарбоксамиды циклических 1,2-дикарбоновых кислот, теоретико-информационные индексы, константа кислотной ионизации, химический сдвиг протонов карбоксильных групп, химический сдвиг олефиновых протонов



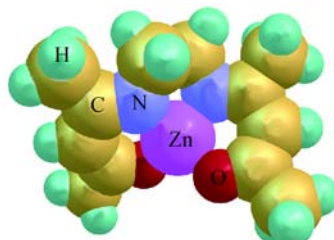
22

### ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ


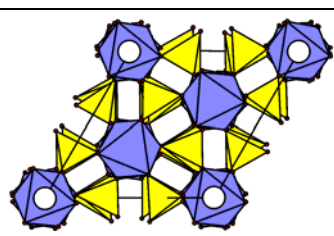
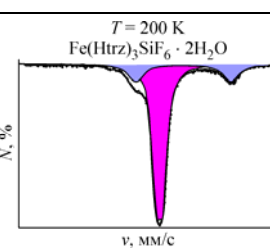
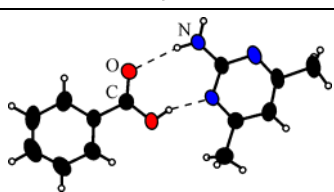
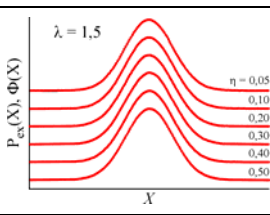
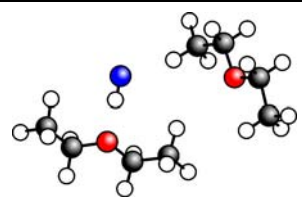
Гиричев Г.В., Гиричева Н.И., Пелевина Е.Д., Твердова Н.В.,  
Кузьмина Н.П., Котова О.В.

**Строение молекулы N,N'-этилен-бис(ацетилацетонимината) цинка(II),  $ZnO_2N_2C_{12}H_{18}$ , по данным метода газовой электронографии и квантово-химических расчетов**

**Ключевые слова:** геометрическое строение, основания Шиффа,  $ZnO_2N_2C_{12}H_{18}$ , Zn(acacen), электронография, масс-спектр



29

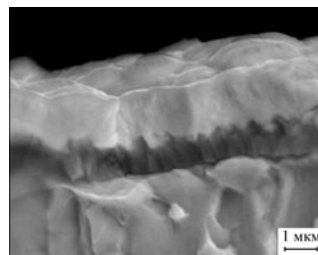
|  |  |
|--|--|
| <p>Тен Г.Н., Нечаев В.В., Щербаков Р.С., Баранов В.И.</p> <p><b>Расчет и анализ структуры и колебательных спектров таутомеров урацила</b></p> <p><b>Ключевые слова:</b> урацил, таутомеры, колебательные спектры, <i>цис—транс</i>-изомерия</p>  |  <p>38</p>  |
| <p>Боровикова Е.Ю., Куражковская В.С., Быков Д.М., Орлова А.И.</p> <p><b>Инфракрасная спектроскопия и строение твердых растворов <math>\text{La}_{0,33}\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3</math> — <math>\text{Yb}_{0,33}\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3</math></b></p> <p><b>Ключевые слова:</b> инфракрасная спектроскопия, фактор-групповой анализ колебаний, редкоземельные ортофосфаты, структурный тип насикона</p> |  <p>46</p>   |
| <p>Шакирова О.Г., Грюнерт М., Наумов Д.Ю., Гютлих Ф., Лавренова Л.Г.</p> <p><b>Исследование спинового перехода <math>^1A_1 \leftrightarrow ^5T_2</math> в разнолигандных комплексах гексафторсиликата железа(II) с 1,2,4-триазолом и 4-амино-1,2,4-триазолом</b></p> <p><b>Ключевые слова:</b> комплексы, железо(II), 1,2,4-триазолы, статическая магнитная восприимчивость, спинового переход</p>           |  <p>51</p>   |
| <p>Li Z., Huang J., Meng A., Zheng B.</p> <p><b>Crystal structure, energy band and optical properties of benzoic acid – 2-amino-4,6-dimethylpyrimidine (1:1) co-crystals</b></p> <p><b>Keywords:</b> CASTEP, band structure, optical properties, DFT</p>   |  <p>58</p>  |
| <p><b>СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ</b></p>  |  |
| <p>Павлюхин Ю.Т.</p> <p><b>Вероятность флуктуаций числа ближайших соседей в жидкости твердых сфер: асимптотическое разложение</b></p> <p><b>Ключевые слова:</b> асимптотические разложения в статистической механике, жидкость твердых сфер, простые жидкости, жидкость с SW-потенциалом взаимодействия</p>  |  <p>65</p>   |
| <p>Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В.</p> <p><b>Строение гетероассоциатов, образующихся в двойной жидкой системе <math>\text{HF}-(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}</math></b></p> <p><b>Ключевые слова:</b> двойная жидкая система, ИК спектр, квантово-химический расчет, водородная связь, гетероассоциаты, фтористый водород, диэтиловый эфир</p>   |  <p>74</p>   |
| <p>Королёв В.П.</p> <p><b>Термические коэффициенты и внутреннее давление водного раствора мочевины. Влияние концентрации, температуры и изотопии</b></p> <p><b>Ключевые слова:</b> мочевина, водные растворы, термические коэффициенты, внутреннее давление</p>  | <p><math>\text{H}_2\text{O}-(\text{NH}_2)_2\text{CO}</math><br/>и<br/><math>\text{D}_2\text{O}-(\text{ND}_2)_2\text{CO}</math></p> <p>81</p> |

## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Гельфонд Н.В., Морозова Н.Б., Игуменов И.К., Филатов Е.С., Громилов С.А., Шубин Ю.В., Квон Р.И., Данилович В.С.

**Структура Ir и Ir-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> покрытий, полученных методом химического осаждения из паровой фазы в присутствии кислорода**

**Ключевые слова:** композиционные покрытия Ir и Ir-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, химическое осаждение из паровой фазы, иридий(III), алюминий(III), трис-ацетилацетонаты

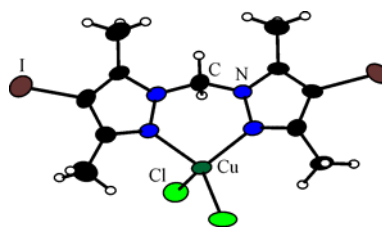


88

Вировец А.В., Пирязев Д.А., Лидер Е.В., Смоленцев А.И., Василевский С.Ф., Лавренова Л.Г.

**Специфические невалентные взаимодействия иод...хлор в структурах комплексов хлорида меди(II) с бис(3,5-диметил-4-иодопиразол-1-ил)метаном**

**Ключевые слова:** кристаллическая структура, медь, невалентные взаимодействия, бис(3,5-диметил-4-иодопиразол-1-ил)метан

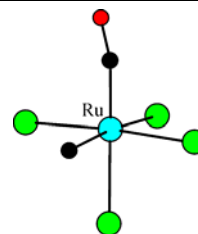


98

Ильин М.А., Емельянов В.А., Байдина И.А.

**Первый пример моноаминокомплекса нитрозорутения. Строение и кристаллическая структура [Ru(NO)(NH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>(H<sub>2</sub>O)Cl][Ru(NO)(NH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>(OH)Cl] × [Ru(NO)(NH<sub>3</sub>)Cl<sub>4</sub>]<sub>2</sub>Cl · 2H<sub>2</sub>O**

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

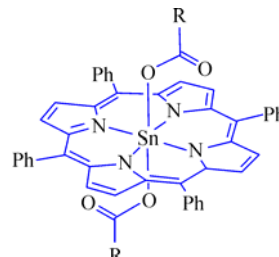


105

McMurtrie J.C., Arnold D.P.

**Tin(IV) porphyrin complexes. Crystal structures of meso-tetraphenylporphyrinatotin(IV) diacetate, bis(dichloroacetate), bis(trifluoroacetate) and diformate, and structural correlations for tin(IV) porphyrin complexes with O-bound anionic ligands**

**Keywords:** tin porphyrins, X-ray crystallography, carboxylato complexes, structure correlations

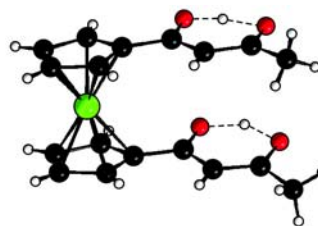


113

Васильев А.Д., Баюков О.А., Кондрасенко, Сергеев Е.Е., Фабинский П.В., Фёдоров В.А.

**Кристаллическая и молекулярная структура 1,1'-бис-(ацетоацетил)ферроцена**

**Ключевые слова:** 1,1'-бис-(ацетоацетил)ферроцен, ацетоацетилферроцен, кристаллическая и молекулярная структура, РСА, ИК, ЯМР, электронный спектр, эффект Мессбауэра

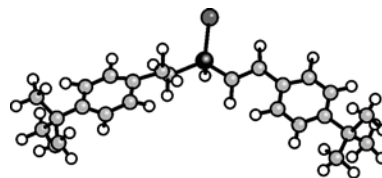


120

Гусарова Н.К., Малышева С.Ф., Белогорова Н.А., Кажева О.Н., Чехлов А.Н., Александров Г.Г., Дьяченко О.А., Синеговская Л.М., Трофимов Б.А.

**Строение и свойства бис{[2-(4-трет-бутил)фен]этил}фосфинсульфида**

**Ключевые слова:** фосфинсульфид, четырехкоординированный атом фосфора, таутомерное равновесие, РСА, спектральные методы, фосфорцентрированные нуклеофилы



126

## СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Грибов Л.А.

### Метод расчета уровней энергии нанообъектов с периодической структурой скелета

**Ключевые слова:** нанообъекты, энергетические уровни, периодическая структура, квазидиагонализация

$$T_p^{(k)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}_2 \times I_n + \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}_2$$

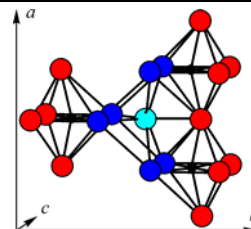
$$\times [\tilde{L}_p^{(cp)}(\theta - \tilde{\theta})L_p^{(cp)}]_n \alpha_k$$

131

Шефер К.И., Черепанова С.В., Мороз Э.М., Герасимов Е.Ю., Цыбуля С.В.

### Особенности реальной структуры псевдобемитов: нарушения структуры и упаковки слоев, связанные с кристаллизационной водой

**Ключевые слова:** псевдобемит, гидроксид алюминия, структура, моделирование дифракционных картин



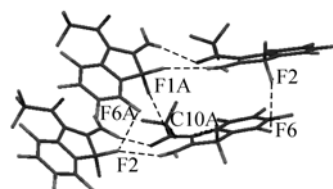
137

Рыбалова Т.В., Гатилов Ю.В.

### Энергия взаимодействия молекулярных пар.

#### I. Анализ супрамолекулярной архитектуры кристаллов полифторированных енаминоиминов и енаминокетонов ряда индана

**Ключевые слова:** упаковка кристалла, квантовохимические расчеты, водородные связи N—H...O и N—H...N, межмолекулярные взаимодействия  $\pi\cdots\pi$ , F... $\pi$ , O... $\pi$ , N... $\pi$ , F...H и F...F, полифторароматические соединения



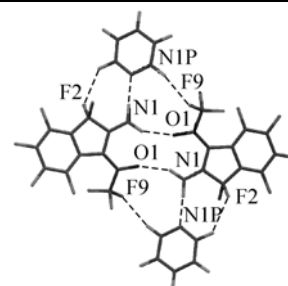
148

Рыбалова Т.В., Гатилов Ю.В.

### Энергия взаимодействия молекулярных пар.

#### II. Анализ супрамолекулярной архитектуры кристаллов комплексов полифторароматических енаминоимина и енаминокетонов с диоксаном и пиридином

**Ключевые слова:** упаковка кристалла, квантово-химические расчеты, водородные связи N—H...O и N—H...N, межмолекулярные взаимодействия  $\pi\cdots\pi$ , F... $\pi$ , O... $\pi$ , N... $\pi$ , F...H и F...F, полифторароматические соединения



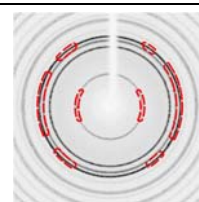
155

## ВОПРОСЫ МЕТОДИКИ И ТЕХНИКИ ЭКСПЕРИМЕНТА

Алексеев А.В., Громилов С.А.

### Проведение количественного рентгенофазового анализа на монокристалльном дифрактометре, оснащенный плоским двухкоординатным детектором

**Ключевые слова:** количественный рентгенофазовый анализ, полнопрофильное уточнение, CCD-детектор, метод Дебая—Шеррера



162

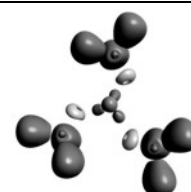
## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Дребущак И.В., Козлова С.Г.

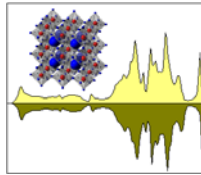
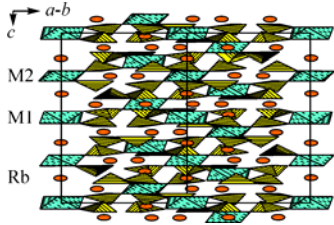
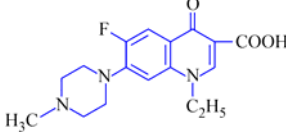
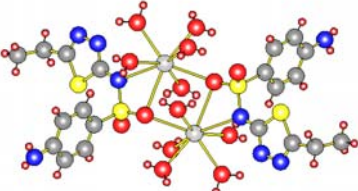
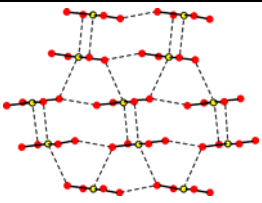
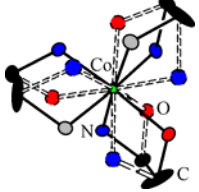
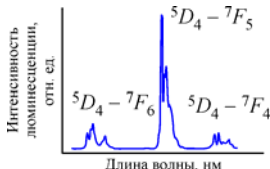
### Водородная связь в комплексе $H_3O(Ph_3PO)_3^+$ .

#### Особенности распределения электронной плотности

**Ключевые слова:** водородная связь, ион гидроксония, квантовая теория атомов в молекулах, QTAIM, функция локализации электронов, ELF



172

|   |   |     |
|---|---|-----|
| <p>Банников В.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л.<br/> <b>Структурные, электронные и магнитные свойства антиперовскитов <math>\text{CaCNi}_3</math>, <math>\text{SrCNi}_3</math> и <math>\text{BaCNi}_3</math> в сравнении со сверхпроводящим <math>\text{MgCNi}_3</math></b><br/> <b>Ключевые слова:</b> антиперовскиты, <math>\text{CaCNi}_3</math>, <math>\text{SrCNi}_3</math>, <math>\text{BaCNi}_3</math>, зонная структура, энергия формирования, магнетизм, моделирование</p>  |    | 176 |
| <p>Чимитова О.Д., Базаров Б.Г., Клевцова Р.Ф., Аншиц А.Г.,<br/>         Фёдоров К.Н., Дубенцов А.В., Верещагина Т.А.,<br/>         Тушинова Ю.Л., Глинская Л.А., Базарова Ж.Г., Гонгорова Л.И.<br/> <b>Кристаллическая структура тройного молибдата в системе <math>\text{Rb}_2\text{MoO}_4\text{—Nd}_2(\text{MoO}_4)_3\text{—Zr}(\text{MoO}_4)_2</math></b><br/> <b>Ключевые слова:</b> рубидий, неодим, цирконий, молибдат, синтез, кристаллическая структура</p>   |     | 179 |
| <p>Васильев А.Д., Головнев Н.Н.<br/> <b>Строение соединения <math>\text{C}_{17}\text{H}_{22}\text{FN}_3\text{O}_3^{2+} \cdot \text{CuCl}_4^{2-}</math></b><br/> <b>Ключевые слова:</b> фторхинолон, пefлоксацин, хлорид меди, кристаллическая структура, водородные связи, <math>\pi\text{—}\pi</math>-взаимодействие</p>   |     | 183 |
| <p>Миминошвили Э.Б., Миминошвили К.Э., Беридзе Л.А.,<br/>         Зазашвили С.Р.<br/> <b>Рентгенографическое исследование <math>\text{M}(\text{Aet})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}</math> (<math>\text{M}=\text{Sr}, \text{Ba}</math>) и кристаллическая структура <math>[\text{Sr}(\text{Aet})(\text{OH}_2)_5](\text{Aet}) \cdot 3\text{H}_2\text{O}</math></b><br/> <b>Ключевые слова:</b> комплексные соединения, рентгеноструктурный анализ, <math>\text{Sr}(\text{II})</math>, <math>\text{Ba}(\text{II})</math>, этазол, сульфаниламиды</p> |    | 187 |
| <p>Байдина И.А., Макотченко Е.В.<br/> <b>Кристаллическая структура бромид-бис(тетрабромоаурата(III))трис(этилендиаммин) кобальта(III), <math>[\text{Co}(\text{N}_2\text{C}_2\text{H}_8)_3][\text{AuBr}_4]_2\text{Br}</math></b><br/> <b>Ключевые слова:</b> золото(III), кобальт(III), комплексы, рентгеноструктурный анализ</p>  |   | 192 |
| <p>Вировец А.В., Михайленко Ю.А., Пересыпкина Е.В.,<br/>         Ткачёв С.В., Черкасова Т.Г.<br/> <b>Октаэдр или тригональная призма? Уточнение кристаллической структуры <math>\text{fac-Co}(\text{NH}_2\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}</math></b><br/> <b>Ключевые слова:</b> кобальт, кристаллическая структура, водородные связи, разупорядоченность</p>  |  | 195 |
| <p>Буквеев Б.В., Петроченкова Н.В., Мирочник А.Г.<br/> <b>Кристаллическая структура и люминесценция метакрилата тербия(III)</b><br/> <b>Ключевые слова:</b> кристаллическая структура, тербий(III), метакрилат, люминесценция</p>   |   | 199 |

Содержание следующего номера — в конце журнала