

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 50

Сентябрь – октябрь

№ 5, 2009

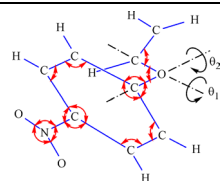
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Фролов Ю.Л., Ващенко А.В.

Квантово-химический анализ структуры и спектроскопических свойств арилвиниловых эфиров

Ключевые слова: DFT расчеты, ИК спектроскопия, КР спектроскопия, арилвиниловые эфиры, колебания двойной связи

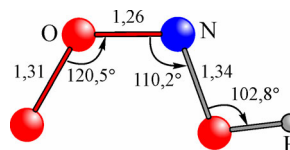


833

Захаров И.И., Захарова О.И., Целищев А.Б., Лория М.Г.

Электронная и геометрическая структуры изомеров азотной кислоты. Квантово-химические DFT расчеты

Ключевые слова: квантово-химические расчеты, метод функционала плотности (DFT), молекулярная структура, термодинамические параметры, изомеры азотной кислоты HNO_3

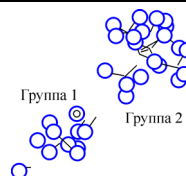


843

Погребной А.А., Гришина М.А., Потемкин В.А.

Моделирование комплексов изоформы 1A2 цитохрома P450 с субстратами

Ключевые слова: докинг, моделирование, комплекс, субстрат, PCA, P450, 1A2, 2H14

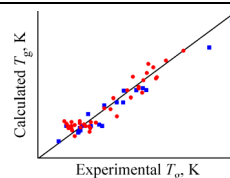


852

Yu X.L., Yu W.H., Wang X.Y.

DFT-based quantum theoretic QSPR studies of the glass transition temperatures of polyacrylates

Keywords: polyacrylates, density function theory, glass transition temperature, QSPR



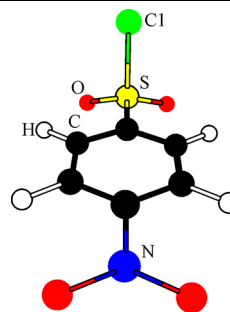
859

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Петров В.М., Петрова В.Н., Гиричев Г.В., Гиричева Н.И., Оберхаммер Х., Бардина А.В., Иванов С.Н., Краснов А.В.

Электронографическое и квантово-химическое исследование строения молекулы 4-нитробензолсульфонилхлорида

Ключевые слова: 4-нитробензолсульфохлорид, конформер, молекулярная структура, внутреннее вращение, потенциальные функции, газовая электронография, квантовая химия, масс-спектрометрия

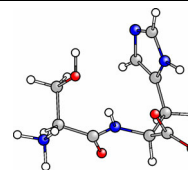


865

Liu Y., Hou J.-B., Liu X.-X., Miao F.-M., Zhao Y.-F.

Structural studies of *L*-seryl-*L*-histidine dipeptide by means of molecular modeling, DFT and ¹H NMR spectroscopy

Keywords: Ser-His, dipeptide, molecular modeling, DFT, lowest energy structure



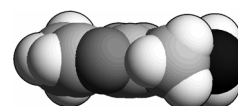
873

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Калугин М.Д., Теплухин А.В.

Изучение взаимодействия кофеина с ДНК в водном растворе методом Монте-Карло с использованием параллельных вычислений

Ключевые слова: вода, структура, кофеин, ДНК, компьютерное моделирование, Монте-Карло, параллельные вычисления



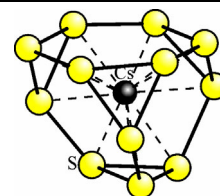
878

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Борисов С.В., Магарилл С.А., Первухина Н.В.

Особенности кристаллохимии ртутьсодержащих природных сульфидов и сульфосолей

Ключевые слова: структурообразующие факторы, катионные и анионные матрицы, строительные блоки, структуры сульфидов и сульфосолей, ртутьсодержащие минералы

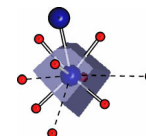


890

Сережкин В.Н., Урусов В.С.

Стереохимия ванадия в кислородсодержащих соединениях

Ключевые слова: ванадий, кислородсодержащие соединения, стереохимия, кристаллохимия, полиэдры Вороного–Дирихле

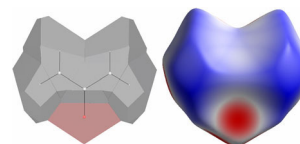


898

Прокаева М.А., Бабуринов И.А., Сережкин В.Н.

О методах определения площадей поверхности молекул

Ключевые слова: площадь поверхности молекулы, полиэдры Вороного–Дирихле, поверхности Хиршфельда, ван-дер-ваальсовы модели молекул, межмолекулярные взаимодействия

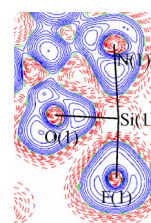


905

Корлюков А.А., Антипин М.Ю., Бузин М.И., Зельбст Э.А., Болгова Ю.И., Трофимова О.М., Воронков М.Г.

Молекулярная и кристаллическая структура двух фаз 1-фторсилатрана. Особенности распределения электронной плотности

Ключевые слова: 1-фторсилатран, молекулярная структура, рентгеновская дифракция, квантово-химический расчет

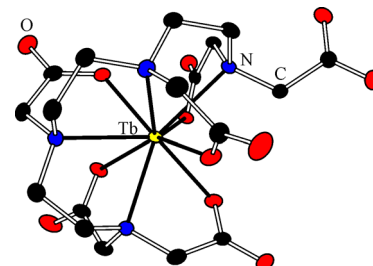


911

Liu B., Wang Y.F., Wang J., Gao J., Xu R., Kong Y.M., Zhang L.Q., Zhang X.D.

Syntheses and crystal structures of nine-coordinate $K_2[Eu^{III}(dtpa)(H_2O)] \cdot 5H_2O$ and $Na_2[Tb^{III}(Httha)] \cdot 6H_2O$ complexes

Keywords: Eu^{3+} , Tb^{3+} , Diethylenetriamine-N, N, N', N'', N''-pentaacetic acid (H_5dtpa), Triethylenetetramine-N, N, N', N'', N''-hexaacetic acid (H_6ttha), complex



917

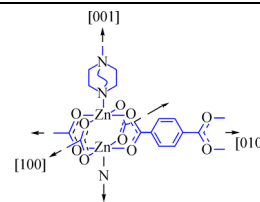
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

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

924

Супрамолекулярные взаимодействия и структурные превращения в нанореакторной системе металлорганический сорбент–ацетон

Ключевые слова: металлорганический сорбент, КР, ^1H ЯМР, протонный обмен, кетонная и енольная формы ацетона



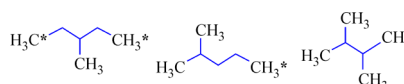
ОБЗОРЫ

Зенкевич И.Г.

931

Хромато-масс-спектрометрическая идентификация соединений с разветвленным углеродным скелетом. Критерии выявления *трет*-бутильных групп в структуре молекул

Ключевые слова: органические соединения, структурные аналоги, *трет*-бутильная группа, масс-спектрометрия, газохроматографические индексы удерживания, идентификация



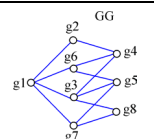
КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Макаров Л.И.

946

Инверсии проекций заузленных молекулярных структур

Ключевые слова: заузленная молекулярная структура, графовое представление диаграммы, инверсия

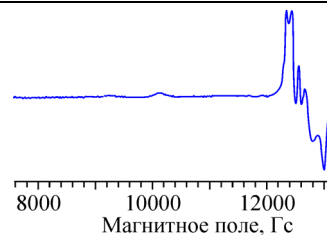


Надолинный В.А., Небогатикова Н.А., Плюснин П.Е., Корнев С.В.

951

Исследование методом ЭПР твердых растворов состава $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]_x[\text{Rh}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]_{1-x}[\text{PdCl}_4] \cdot n\text{H}_2\text{O}$ и $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]_x[\text{Rh}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]_{1-x}[\text{PtCl}_4]$

Ключевые слова: ЭПР спектроскопия, хром, родий, палладий, платина, хлоропентаминовые комплексы

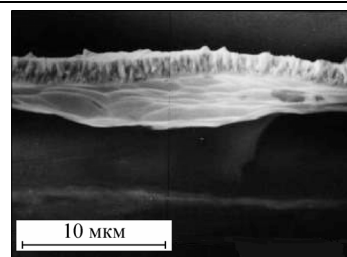


Гельфонд Н.В., Морозова Н.Б., Игуменов И.К., Филатов Е.С., Громилов С.А., Квон Р.И.

955

Структура покрытий $\text{Ir}-\text{Al}_2\text{O}_3$, полученных методом химического осаждения из паровой фазы в атмосфере водорода

Ключевые слова: композиционные покрытия Ir и $\text{Ir}-\text{Al}_2\text{O}_3$, химическое осаждение из паровой фазы, иридий(III), алюминий(III), *трис*-ацетилацетонаты

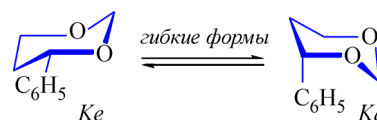


Кузнецов В.В., Курамшина А.Е., Бочкор С.А.

960

Пути конформационной изомеризации 4-фенил-1,3-диоксана

Ключевые слова: 4-фенил-1,3-диоксан, конформер, минимум поверхности потенциальной энергии, *твист*-форма, квантовая химия

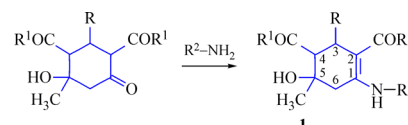


Кривенько А.П., Григорьева Э.А., Григорьев А.В., Сорокин В.В., Солодовников С.Ф.

963

Молекулярная и кристаллическая структура 2,4-дизтоксикарбонил-5-гидрокси-5-метил-3-фенил-(3-хлорфенил)-1-циклогексениламина

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, сенаминоэфиры, циклогексены



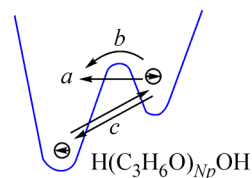
**МАТЕРИАЛЫ XIV СИМПОЗИУМА ПО МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОМУ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЮ И КОНФОРМАЦИЯМ МОЛЕКУЛ
15 – 21 июня 2008 г., ЧЕЛЯБИНСК**

Усачева Т.М., Лифанова Н.В., Журавлев В.И., Матвеев В.К.

967

**Анализ релаксационных процессов
в полипропиленгликолях выше
температуры стеклования**

Ключевые слова: полипропиленгликоли, диэлектрические спектры, дипольные моменты кластеров, дипольные моменты молекул, межмолекулярные взаимодействия

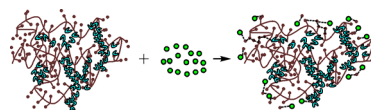


Павлычева Н.А., Попова Т.Е., Лебедева Н.Ш., Хаширова С.Ю.,
Вьюгин А.И.

980

**Взаимодействие полиметакрилата гуанидина с натриевой
солью цинк(II)тетра-4-сульфофталицианина
в водной среде**

Ключевые слова: иммобилизация водорастворимых
металлофталицианинов на полимерах, натриевая соль цинк(II)тетра-
4-сульфофталицианина, полиметакрилат гуанидина, конформация,
квантово-химические расчеты, вискозиметрия, ИК спектроскопия

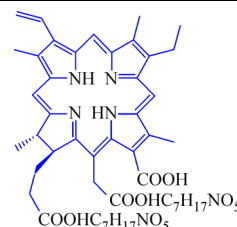


Кульвелис Ю.В., Трунов В.А., Лебедев В.Т., Орлова Д.Н.,
Торок Д., Гельфонд М.Л.

986

**Комплексы феррожидкостей с фотодитазином
и перспективы их применения
в фотодинамической терапии**

Ключевые слова: фотодинамическая терапия, фотодитазин,
магнитные жидкости, рассеяние нейтронов

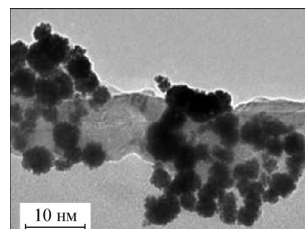


Довбешко Г.И., Фесенко О.М., Образцова Е.Д.,
Аллахвердиев К.Р., Кайя А.Э.

991

**Конформационный анализ нуклеиновых кислот
и белков при их адсорбции на углеродные одностенные
нанотрубки**

Ключевые слова: углеродные нанотрубки (УНТ), ДНК,
polyadenylic acid Potassium salt (PolyA), рибонуклеаза А (РНаз А),
сывороточный альбумин быка (БСА)

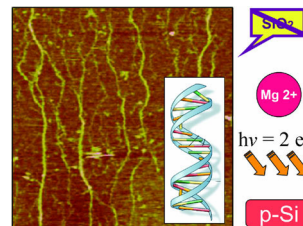


Волков И.Л., Базлов Н.В., Бондаренко А.С., Вывенко О.Ф.,
Касьяненко Н.А.

999

**Светоиндуцированная нековалентная фиксация ДНК
и синтетических полиионов на поверхности
монокристаллов кремния**

Ключевые слова: ДНК, полиионы, поверхность кремния,
нековалентная фиксация, свет, АСМ

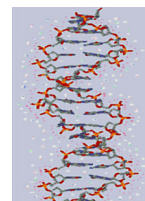


Пастон С.В., Замотин В.В.

1007

**Конформационные изменения молекулы ДНК,
вызванные γ -облучением в растворах
в присутствии алифатических спиртов**

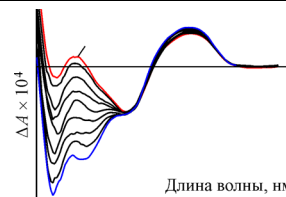
Ключевые слова: конформация ДНК, качество растворителя,
водно-спиртовые растворы, γ -излучение, ОН-радикалы



Родионова Т.Ю., Чихиржина Е.В., Воробьев В.И.,
Поляничко А.М.

Изменение вторичной структуры белка HMGB1 при связывании с ДНК

Ключевые слова: HMGB1, ДНК, ДНК – белковые взаимодействия,
круговой дихроизм

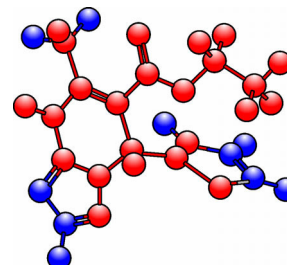


1014

Афонькина Е.С., Переяславская Е.С., Потемкин В.А.,
Гришина М.А., Русинов Г.Л., Федорова О.В.

Теоретическое исследование электронных и структурных особенностей фрагментов ингибиторов дигидрофолатредуктазы

Ключевые слова: 3D и 4D QSAR, биологическая активность,
дигидрофолатредуктаза, ингибитор, фармакофор,
мультиконформационный анализ

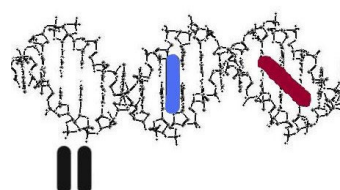


1021

Морошкина Е.Б., Богданов А.А., Колонистова М.О.,
Седова О.Б., Урусова Т.А.

Влияние природы противоионов в растворе на взаимодействие с ДНК производных феноксазона, ксантона и карбазола, содержащих бензо-краунгруппировки

Ключевые слова: ДНК, бензо-краунсодержащие производные
феноксазона, ксантона и карбазола, спектрофотометрия, круговой
дихроизм, вискозиметрия, оптическая анизотропия, взаимодействие,
интеркаляция

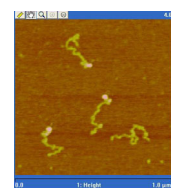


1027

Касьяненко Н.А., Левыкина Е.В., Ерофеева О.С.,
Иванова Н.А., Ефименко И.А.

Изучение влияния ацидокомплексов палладия [L_n]_m[PdX₄] на конформацию ДНК *in vitro*

Ключевые слова: ДНК, морфодон, ацидокомплексы палладия,
атомная силовая микроскопия

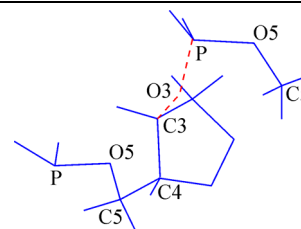


1034

Нечипуренко Ю.Д., Головкин М.В., Нечипуренко Д.Ю.,
Ильичева И.А., Панченко Л.А., Полозов Р.В., Гроховский С.Л.

Характерные особенности расщепления ДНК ультразвуком

Ключевые слова: ультразвуковое расщепление ДНК,
конформационная гетерогенность ДНК, электрофорез на геле,
позиционная специфичность, футпринтинг



1045

Содержание следующего номера — в конце журнала