

№ 47-1  
2015-3



*Российская  
академия наук*

ISSN 0002—3353

# Известия Академии наук

Серия  
химическая

2015

3

стр. 475—742

Журнал издается одновременно на русском («Известия Академии наук. Серия химическая») и английском («Russian Chemical Bulletin») языках. Подробную информацию о журнале, содержания номеров журнала в графической форме и аннотации статей, а также годовые предметные и авторские указатели можно получить в Интернете по адресу: <http://russchembull.ru>

The Journal is published in Russian and English.

The International Edition is published under the title "Russian Chemical Bulletin" by Springer:  
233 Spring St., New York, NY 10013, USA. Tel.: 212 460 1572. Fax: 212 647 1898.

Detailed information concerning the journal, contents of issues with graphical and text abstracts, as well as annual subject and author indices can be found in the Internet at <http://russchembull.ru>

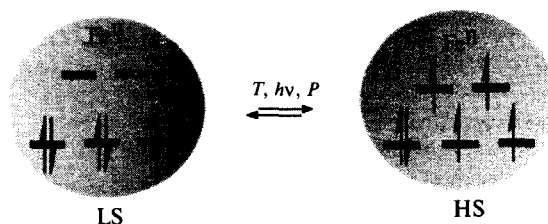
## Содержание

Владимир Исаакович Минкин (к восьмидесятилетию со дня рождения)

Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, xi

## Обзоры

Внутримолекулярные механизмы переключения спиновых состояний комплексов переходных металлов



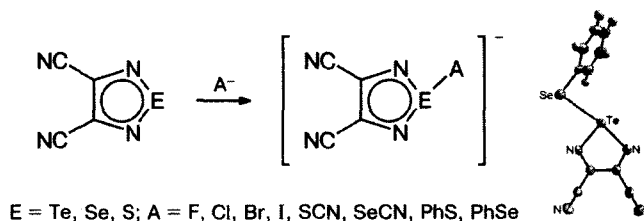
В. И. Минкин, А. Г. Стариков

Спин-кроссовер — перегруппировка между низкоспиновым (LS) и высокоспиновым (HS) состояниями на примере комплексов Fe<sup>II</sup>.

Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 475

Донорно-акцепторная координация анионов атомами халькогенов 1,2,5-халькогенадиазолов

Н. А. Семенов, А. В. Лончаков,  
Н. П. Грицан, А. В. Зибарев



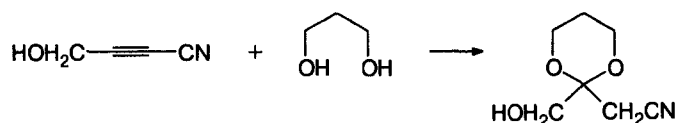
E = Te, Se, S; A = F, Cl, Br, I, SCN, SeCN, PhS, PhSe

Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 499

## Полные статьи

Квантово-химическое изучение механизмов органических реакций. Сообщение 3. Присоединение 1,3-пропандиола к цианацетиленовым спиртам

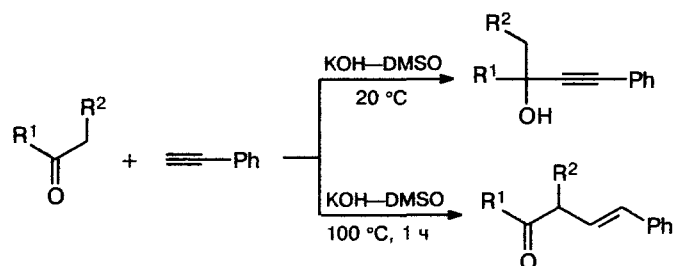
Е. А. Чиркина, Л. Б. Кривдин,  
А. Г. Малькина, Б. А. Трофимов



Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 511

**Квантово-химическое моделирование реакций алкил- и арилкетонов с фенилацетиленом под действием супероснования KOH–DMSO**

В. Б. Кобычев, Н. М. Витковская,  
В. Б. Орел, Е. Ю. Шмидт,  
Б. А. Трофимов

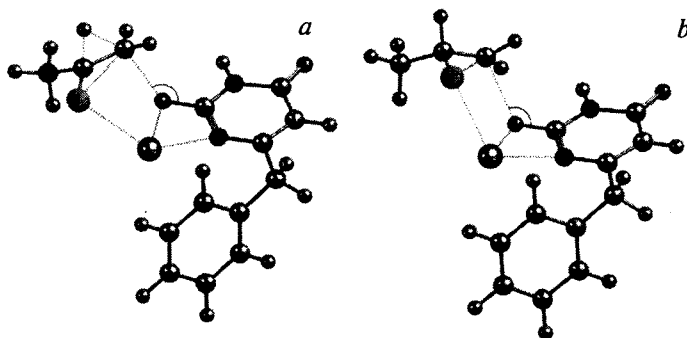


Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 518

MP2/6-31++G\*\*//B3LYP/6-31+G\*

**Экспериментальное и квантово-химическое исследование взаимодействия 2-метилоксирана с производными 5-алкил-6-(2,6-дигалогенбензил)-2-тиоксо-1,2-дигидропиримидин-4(3H)-она**

А. С. Яблоков, Д. В. Стегленко,  
Е. А. Ручко, М. Б. Навроцкий,  
Л. Л. Брунилина, И. А. Новаков,  
В. И. Минкин

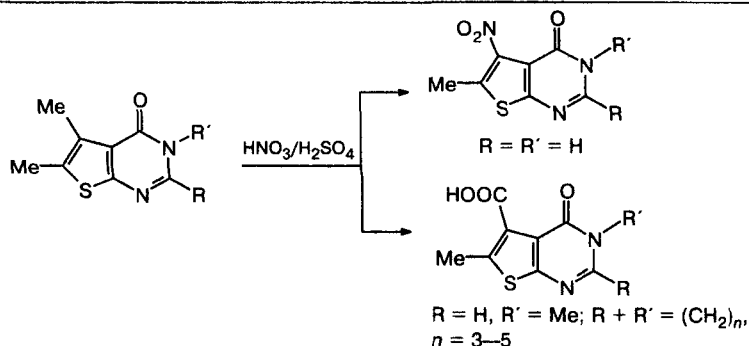


Структуры переходных состояний для процессов  $8 \rightarrow 10 + 9$  (a) и  $8 \rightarrow 10 + 4$  (b), отвечающих стадии отщепления нуклеофуга в реакции десульфуризации.

Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 525

**Квантово-химические исследования пиримидин-4-онов. Сообщение 5. Электронное строение и реакционная способность замещенных тиено[2,3-d]пиримидин-4-онов и их аналогов, аннелированных по грани b тиенопиримидинового фрагмента**

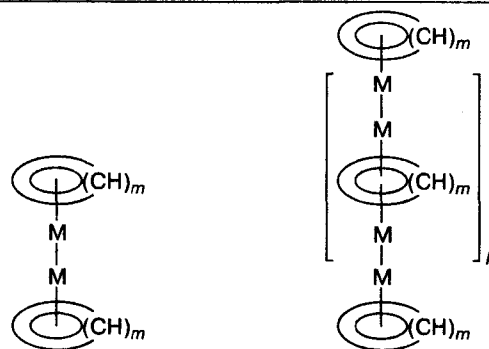
М. Х. Мамарахмонов, Л. И. Беленький,  
Н. Д. Чувылкин, М. А. Аширматов,  
Б. Ж. Элмуралов, И. С. Ортиков,  
Х. М. Шахидоятов



Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 534

**Квантово-химическое исследование биядерных сэндвичевых и полисандвичевых производных щелочных и щелочноземельных металлов**

Т. Н. Грибанова, О. А. Гапуренко,  
Р. М. Миняев, В. И. Минкин

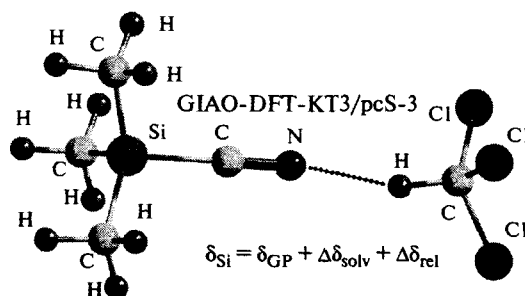


M = Li, Na, K, Be, Mg, Ca; m = 4–6; k = 0–2

Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 540

**Расчеты химических сдвигов ЯМР  $^{29}\text{Si}$  органоилсиланов в рамках теории функционала электронной плотности с учетом эффектов среды и релятивистских поправок**

С. В. Федоров, Ю. Ю. Русаков,  
Л. Б. Кривдин

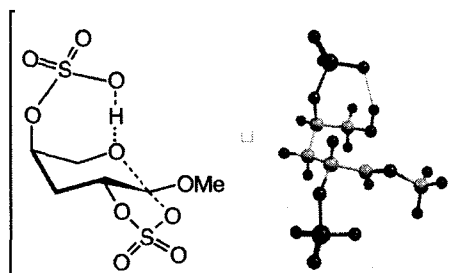


Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 551

**Выбор метода *ab initio* для расчета ключевых стадий механизма перегруппировки сульфатированных пиранозидов в фуранозиды**

А. Г. Гербст, В. Б. Крылов,  
Н. Э. Нифантьев

Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 558

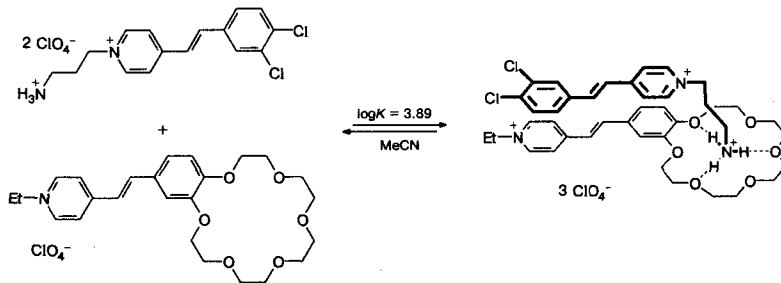


Использованы расчетные базисы  
6-31G  
6-31G\*  
6-31+G  
6-31+G\* (оптимальный)  
6-31++G  
6-31++G\*

**Синтез и фотохимическое исследование супрамолекулярного псевдодимерного комплекса производных 4-стирилпиридиния**

Е. Н. Ушаков, А. И. Ведерников,  
С. К. Сазонов, Л. Г. Кузьмина,  
М. В. Алфимов, Дж. А. К. Ховард,  
С. П. Громов

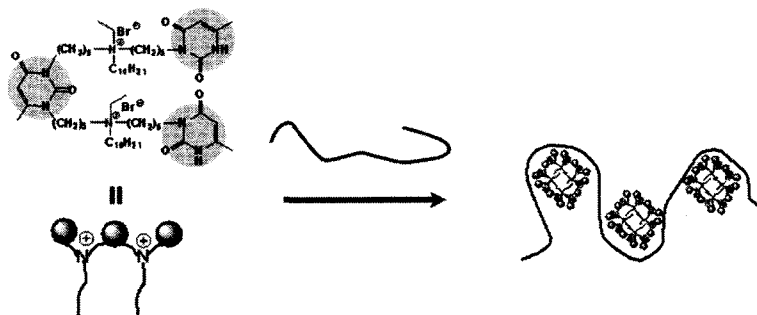
Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 562



**Супрамолекулярные системы на основе дикатионного пиримидинсодержащего ПАВ и полиэтиленimina**

Д. Р. Габдрахманов, Д. А. Самаркина,  
Ф. Г. Валеева, Л. Ф. Сайфина,  
В. Э. Семенов, В. С. Резник,  
Л. Я. Захарова, А. И. Коновалов

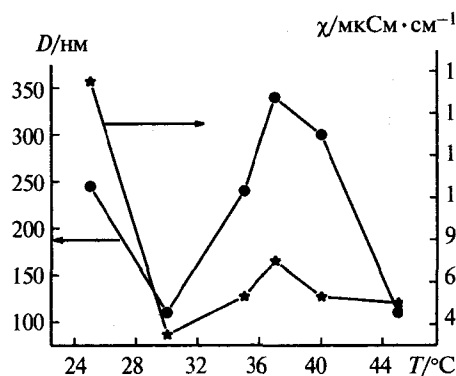
Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 573



**Самоорганизация и свойства разбавленных водных растворов бромида цетилтриметиламмония в интервале физиологически важных температур**

И. С. Рыжкина, Ю. В. Киселева,  
О. А. Мишина, Л. И. Муртазина,  
А. И. Литвинов, М. К. Кадиров,  
А. И. Коновалов

Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 579

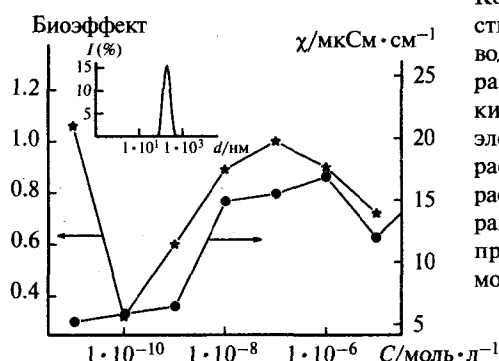


Зависимости удельной электропроводности ( $\chi$ ) высокоразбавленного раствора бромида цетилтриметиламмония ( $1 \cdot 10^9$  моль  $\cdot$  л $^{-1}$ ) и размера образующихся в нем частиц ( $D$ ) от температуры ( $T$ ).

**Взаимосвязь самоорганизации, физико-химических свойств и биологической активности растворов *l*-аминобензойной кислоты низких концентраций**

О. А. Мишина, Л. И. Муртазина,  
И. С. Рыжкина, А. И. Коновалов

Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 590

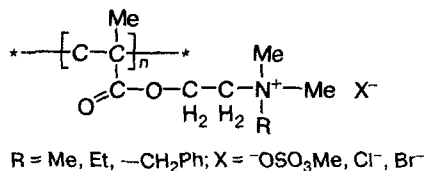


Концентрационные зависимости степени очистки сточной воды (биоэффект) в присутствии растворов *l*-аминобензойной кислоты (ПАБК) и удельной электропроводности ( $\chi$ ) водных растворов ПАБК. На вставке — распределение частиц по размерам в водных растворах ПАБК при концентрации  $1.0 \cdot 10^{-10}$  моль  $\cdot$  л $^{-1}$ ; 25 °С.

**Свойства полиэлектролитов, полученных полимеризацией ионогенных мономеров в мицеллярных растворах додецилсульфата натрия**

И. А. Новаков, Ю. В. Шулевич,  
Ю. А. Захарова, Ле Тхи Доан Чанг,  
Е. Г. Духанина, А. В. Навроцкий

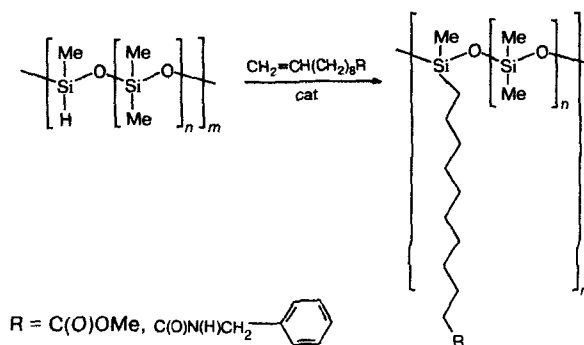
Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 597



**Синтез, реологические и термические свойства полидиметилсилоксанов, модифицированных длинноцепными углеводородными заместителями с полярными фрагментами**

Т. А. Пряхина, Д. И. Шрагин,  
Ю. Н. Кононевич, В. Г. Васильев,  
М. И. Бузин, В. С. Папков,  
А. М. Музафаров

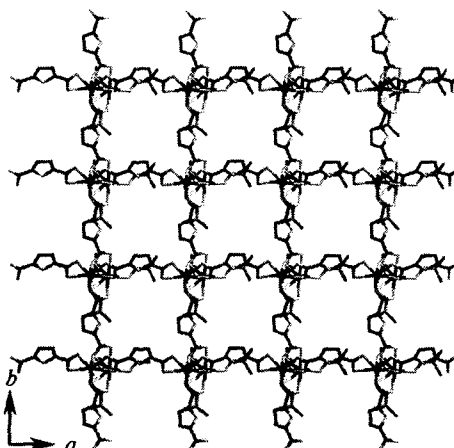
Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 605



**Синтез, строение и люминесцентные свойства слоистого координационного полимера на основе 2,5-фурандикарбоксилата кадмия(II)**

Э. С. Сапарбаев, С. А. Сапченко,  
Д. Г. Самсоненко, Д. Н. Дыбцев,  
В. П. Федин

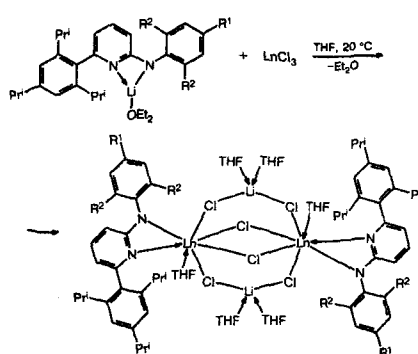
Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 613



**Синтез, строение и свойства хлоридных комплексов редкоземельных металлов {[Ar<sup>Y</sup>(THF)](μ<sup>2</sup>-Cl)<sub>2</sub>(μ<sup>3</sup>-Cl)Li(THF)<sub>2</sub>}, {[Ar<sup>9Me</sup>Ln(THF)](μ<sup>2</sup>-Cl)<sub>3</sub>Li(THF)<sub>2</sub>} (Ln = Y, Nd, Sm) и {[Ar<sup>\*</sup>Ln(THF)](μ<sup>2</sup>-Cl)<sub>3</sub>Li(THF)<sub>2</sub>} (Ln = Nd, Sm), содержащих амидопиридинатные лиганды**

Д. М. Любов, В. Ю. Радьков,  
А. О. Толпыгин, А. В. Черкасов,  
Г. К. Фукин, А. А. Трифонов

Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 618



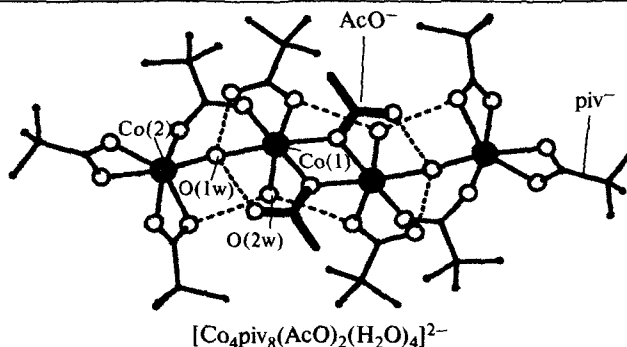
Ar<sup>Y</sup> — *N*-(2,6-диизопропилфенил)-6-(2,6-диметилфенил)пиридин-2-амин; Ar<sup>9Me</sup> — *N*-мезитил-6-(2,4,6-триизопропилфенил)пиридин-2-амин; Ar<sup>\*</sup> — *N*-(2,6-диизопропилфенил)-6-(2,4,6-триизопропилфенил)пиридин-2-амин.

$R^1 = R^2 = \text{Me, } R^1 = \text{H, } R^2 = \text{Pr}^i; R^1 = R^2 = \text{Me; Ln} = \text{Y, Nd, Sm};$   
 $R^1 = \text{H, } R^2 = \text{Pr}^i; \text{Ln} = \text{Nd, Sm}$

**Синтез тетраэдерного разнолигандного комплекса Co<sup>II</sup> с пивалатом и ацетатом**

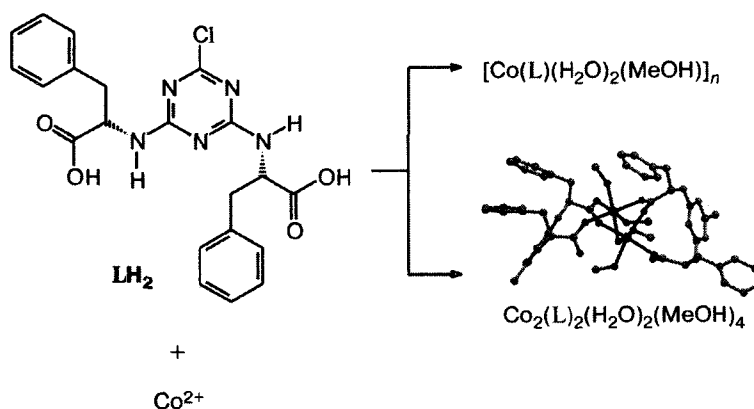
Е. Ю. Фурсова, Г. В. Романенко,  
Р. З. Сагдеев, В. И. Овчаренко

Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 626



Комплексы кобальта(II) с бис-2,4-[*N*-(*S*)-фенилаланил]-6-хлортриазином: синтез, строение и применение для разделения энантиомеров бутан-2-ола

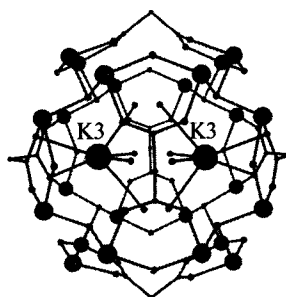
Ю. А. Сацкая, Н. П. Комарова,  
К. С. Гавриленко, О. В. Манойленко,  
М. А. Кискин, С. В. Колотилов,  
И. Л. Еременко, В. М. Новоторцев



Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 630

36-Ядерные диметилмалонатные комплексы  $\text{Co}^{\text{II}}$  и  $\text{Ni}^{\text{II}}$  с катионными фрагментами  $[\text{K}(\text{18-краун-6})]^+$ : синтез и строение

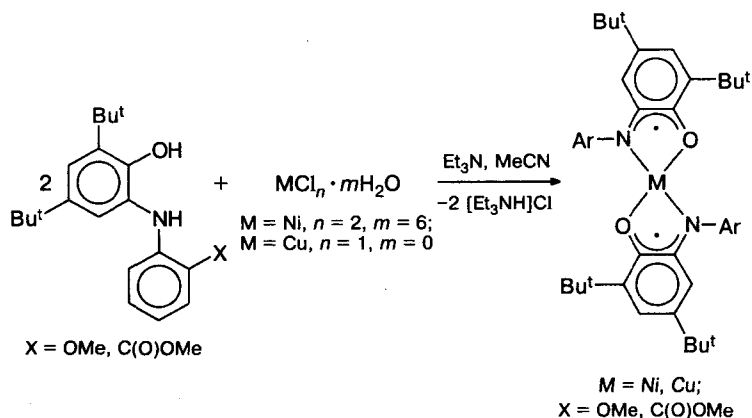
Е. Н. Зорина-Тихонова, Н. В. Гоголева,  
А. А. Сидоров, М. А. Кискин,  
И. Л. Еременко



Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 636

Влияние дополнительной функциональной группы на строение и свойства *o*-иминохиноновых комплексов меди(II) и никеля(II)

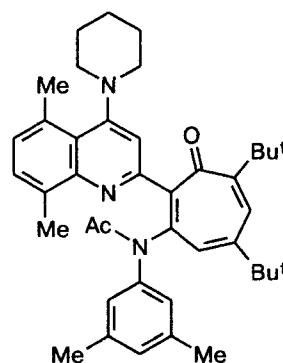
А. В. Пискунов, И. В. Ершова,  
М. В. Гуленова, К. И. Пашанова,  
А. С. Богомяков, И. В. Смолянинов,  
Г. К. Фукин, В. К. Черкасов



Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 642

Исследование структуры конформеров 3-(*N*-арил-*N*-ацетиламино)пропанов методами гетероядерной, двумерной, динамической спектроскопии ЯМР и рентгеноструктурным анализом

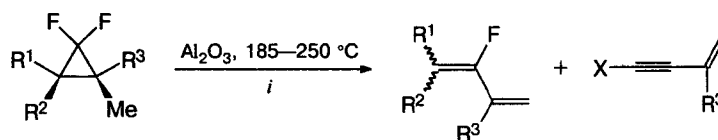
И. Г. Бородкина, А. А. Колодина,  
П. Б. Чепурной, Ю. А. Саяпин,  
Е. А. Гусаков, И. В. Дороган,  
Г. С. Бородкин, Г. В. Шилов,  
В. В. Ткачев



Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 650

Иницируемые оксидом алюминия газофазные скелетные превращения метилзамещенных гемдифторциклопропанов, приводящие к 2-фторбута-1,3-диенам и винилацетиленам

Н. В. Волчков, М. Б. Липкинд,  
М. А. Новиков, О. М. Нефедов

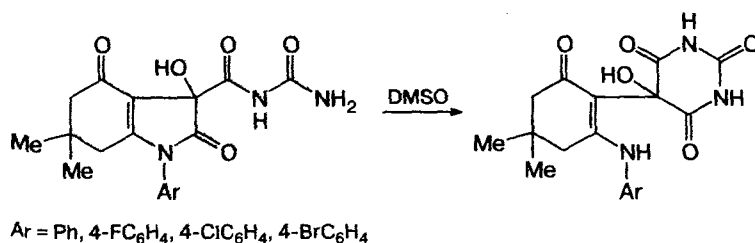


*i*. Проточный реактор.  
 $X = \text{R}^1$  или  $\text{R}^2$

Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 658

**Кольчато-кольчатая изомеризация в ряду *N*-(карбамоил)-1-арил-2,3,4,5,6,7-гексагидро-3-гидрокси-6,6-диметил-2,4-диоксо-1*H*-индол-3-карбоксамидов**

Г. С. Бородкин, С. Б. Зайченко,  
И. Г. Бородкина, Л. В. Белоусова,  
Л. Ю. Ухин



Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 664

**Новые ионохромные азометиниминные хемосенсоры**

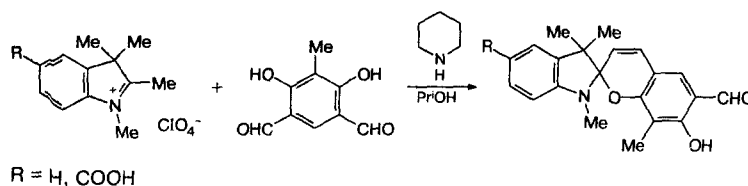
В. А. Брень, О. С. Попова,  
И. Е. Толпыгин, В. А. Черноиванов,  
Ю. В. Ревинский, А. Д. Дубоносос



Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 668

**Исследование строения и фотохромных свойств спиропиранов на основе 2-метил-4,6-диформил-резорцина**

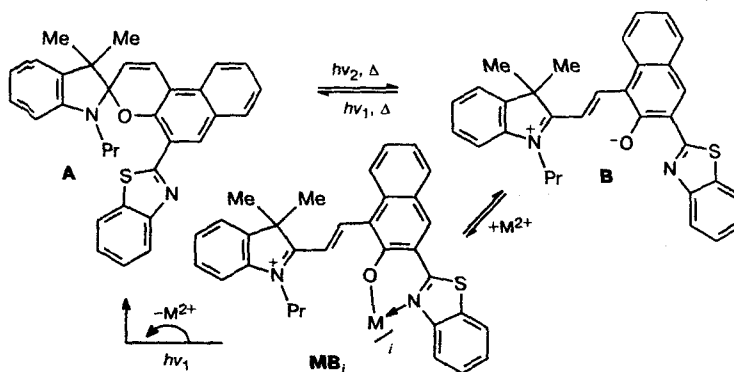
И. В. Ожогин, В. В. Ткачев,  
Е. Л. Муханов, Б. С. Лукьянов,  
А. В. Чернышев, М. Б. Лукьянова,  
С. М. Алдошин



Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 672

**Спиропираны и спирооксазины. Сообщение 11. Комплексообразование фотохромного 5-(1,3-бензотиазол-2-ил)замещенного 1',3'-дигидроспиро[бензо[*l*]хромен-3,2'-индола] с ионами металлов**

И. А. Ростовцева, А. В. Чернышев,  
В. В. Ткачев, С. М. Алдошин,  
Н. А. Волошин, А. В. Метелица,  
Н. И. Макарова, В. И. Минкин

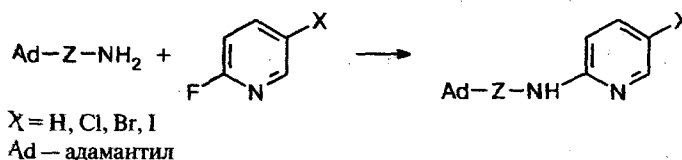


Примечание.  $h\nu_1$  и  $h\nu_2$  — облучение видимым и УФ-светом соответственно.

Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 677

**Некаталитическое аминирование 2-фторпиридина и 5-галоген-2-фторпиридинов адамантансодержащими аминами**

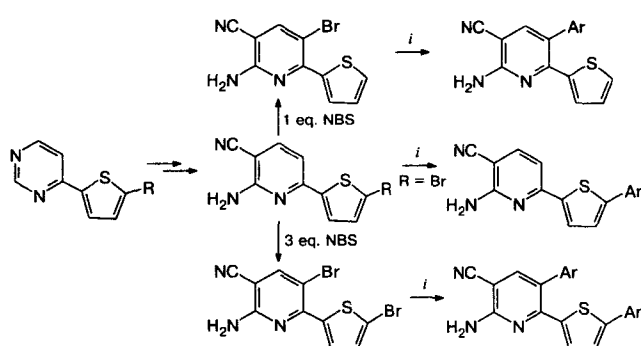
А. С. Абель, О. К. Григорова,  
А. Д. Аверин, О. А. Малошицкая,  
О. А. Попов, Г. М. Бутов,  
Е. Н. Савельев, Б. С. Орлинсон,  
И. А. Новаков, И. П. Белецкая



Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 683

**Синтез 6-тиенилзамещенных 2-амино-3-циано-пиридинов**

Е. В. Вербицкий, Е. М. Чепракова,  
М. Г. Первова, Г. Г. Данагулян,  
Г. Л. Русинов, О. Н. Чупахин,  
В. Н. Чарушин



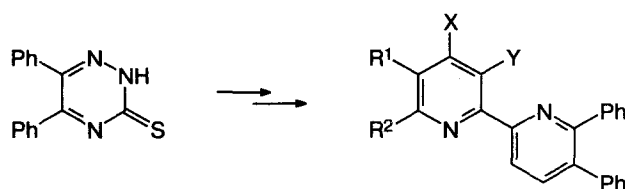
*i.* Ar—В(OH)<sub>2</sub>, ацетат *транс*-бис(дициклогексиламин)палладия(II) (DAPCy), K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>, 20 °С, 24 ч.  
R = H, Br, Ph, 2-тиенил; Ar = Ph, 2-тиенил, 3-тиенил, 2-фуранил

Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 689

**Получение несимметричных 6,6'-диарил-2,2'-бипиридинов с применением 1,2,4-триазиновой методологии**

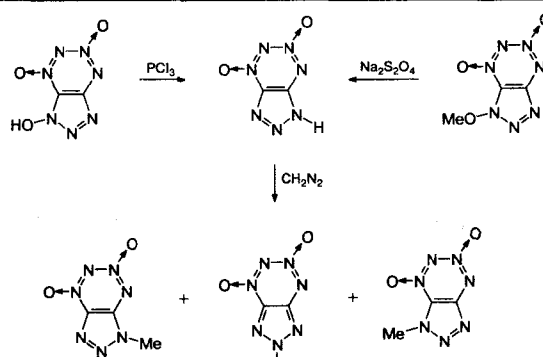
Д. С. Копчук, Н. В. Чепчугов,  
Г. А. Ким, Г. В. Зырянов,  
И. С. Ковалев, В. Л. Русинов,  
О. Н. Чупахин

Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 695


**Синтез 1H-[1,2,3]триазоло[4,5-е][1,2,3,4]тетразин-4,6-диоксида и его метильных производных**

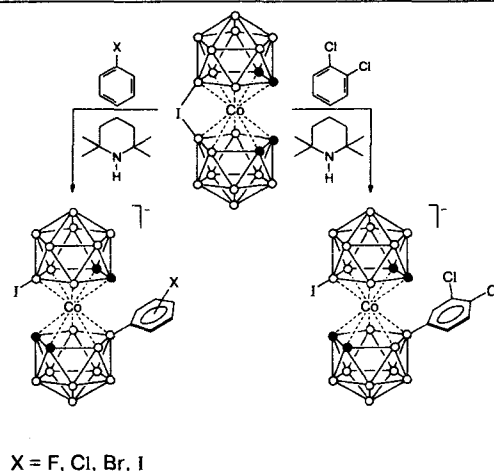
А. А. Воронин, В. П. Зеленев,  
А. М. Чураков, Ю. А. Стреленко,  
В. А. Тартаковский

Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 699


**Новые 8-арил-8'-идопродные бис(1,2-дикарболлид)кобальта**

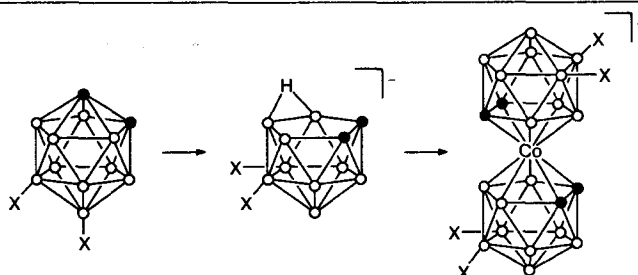
И. Д. Косенко, И. А. Лобанова,  
И. В. Ананьев, З. А. Старикова,  
Ю. Н. Ласькова, В. И. Брегадзе

Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 704


**Синтез 9,9',12,12'-замещенных производных бис(дикарболлида) кобальта**

С. А. Ануфриев, И. Б. Сиваев,  
В. И. Брегадзе

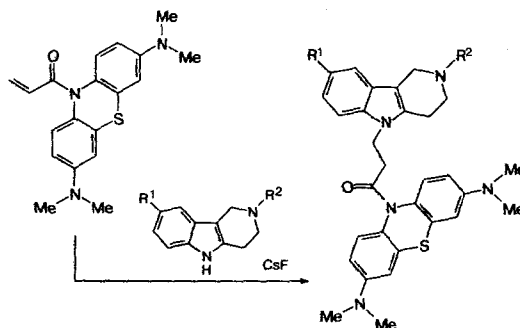
Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 712





Синтез и биологическая активность *N*-замещенных тетрагидро- $\gamma$ -карболинов, содержащих бис-(диметиламино)феноксиазинный фрагмент

В. Б. Соколов, А. Ю. Аксиненко,  
Т. А. Епишина, Т. В. Горева,  
В. В. Григорьев, А. В. Габрельян,  
С. О. Бачурин

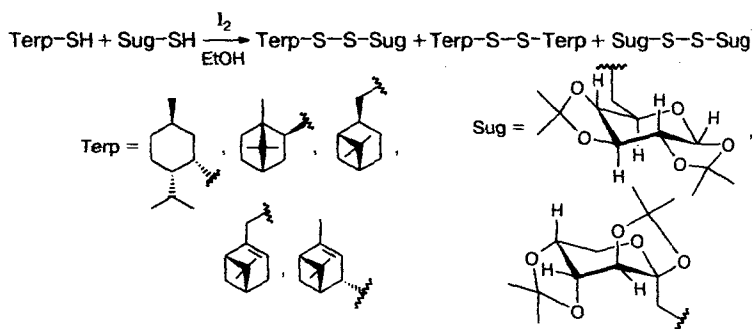


$R^1 = H, R^2 = Me, Et; R^1 = Me, R^2 = Me, Et, Pr^i, Pr^i;$   
 $R^1 = F, R^2 = Me$

Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 718

Синтез и мембранопротекторные свойства новых дисульфидов с монотерпеновыми и углеводными фрагментами

С. В. Пестова, Е. С. Измestьев,  
О. Г. Шевченко, С. А. Рубцова,  
А. В. Кучин

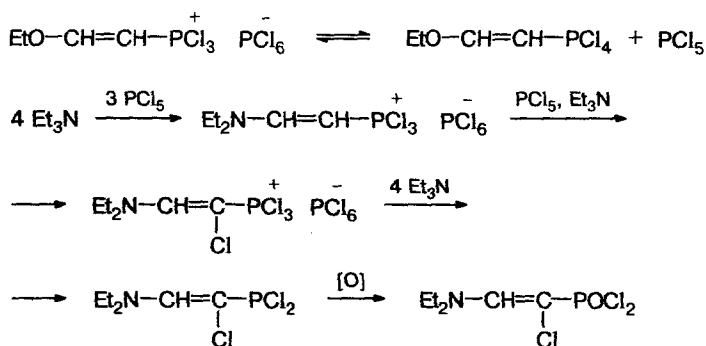


Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 723

### Краткие сообщения

Изучение реакций гексахлорфосфатов органилтрихлорфосфония с триэтиламином методами спектроскопии ЯМР

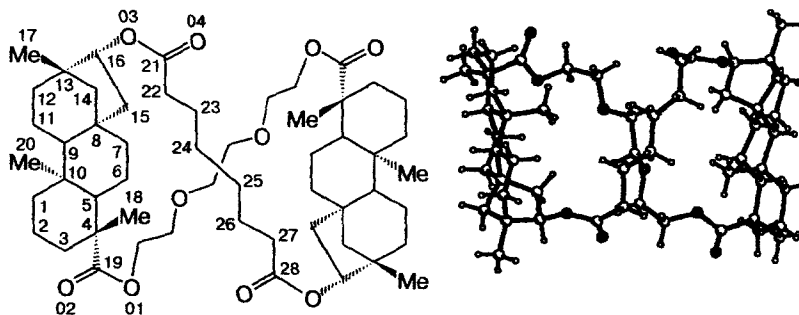
Л. И. Ларина, Т. Н. Комарова,  
В. Г. Розинов



Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 732

Молекулярная и кристаллическая структура 2,11,14,17,20,23-гексаокса-1,12(16,4а)-ди-(19-нор-энт-бейерана)тетракозафан-3,10,13,24-тетраона

А. Б. Добрынин, И. Ю. Стробыкина,  
И. А. Литвинов, В. Е. Катаев,  
О. Г. Синяшин



Изв. АН. Сер. хим., 2015, № 3, 738