



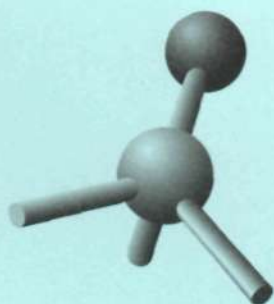
П
*92

ISSN 00136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

Том 54
март
апрель
2013

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 2

НОВОСИБИРСК

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 54

Март-апрель

№ 2, 2013

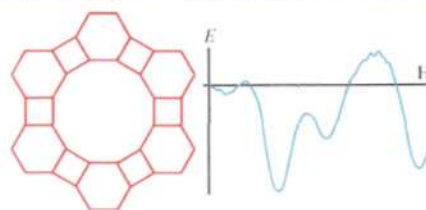
СО Д Е Р Ж А Н И Е

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Лузанов А.В.

**Магнетизм и бирадикалоидный характер
 π -ароматических и антиароматических систем
в сильном магнитном поле**

Ключевые слова: диамагнетизм, парамагнетизм,
 π -электронная корреляция,
число эффективно распаренных электронов, ароматичность

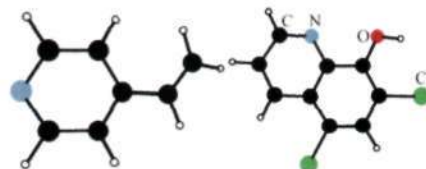


213

Hosseinnejad T., Ahmadi S.J., Karimi-Jafari M.H.

**Computational study on the structure and properties
of ternary complexes of Ln^{3+} ($\text{Ln} = \text{La}, \text{Ce}, \text{Nd}$ and Sm) with
5,7-dichloro quinoline-8-ol and 4-vinyl pyridine**

Keywords: ion imprinting, lanthanide complexes,
density functional theory, polarized continuum model, conformational
distribution



220

Liang J.X., Wang Y.B., Geng Z.Y., Wang Y.Z., Wang Y.C.

**Gas-phase reaction of isobutenyl anion with N_2O
from *ab initio* calculations**

Keywords: isobutenyl anion, reaction mechanism,
second-order Møller-Plesset perturbation theory (MP2)

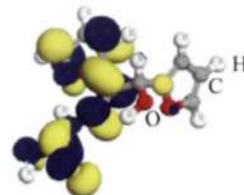


228

Musa A.Y., Ahmoda W., Al-Amiery A.A., Kadhum A.A.H.,
Mohamad A.B.

**Quantum chemical calculation for the inhibitory effect
of compounds**

Keywords: corrosion inhibition, quantum chemical parameter,
thio, QSAR



237

Грибов Л.А., Новосадов Б.К.

**О численном решении электронно-ядерной задачи
для молекул при использовании интегрального
оператора электронно-ядерного взаимодействия**

Ключевые слова: уравнение Шредингера, гамильтониан молекулы,
квантовая химия, численное решение

$$\hat{W}_{en}(r) = \int dQ \Psi_n^2(Q) \hat{V}_{en}(r, Q)$$

245

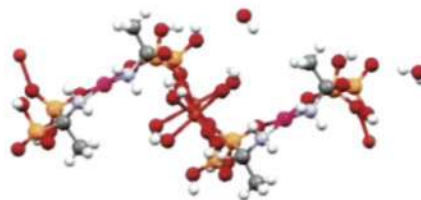
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Козачкова А.Н., Царик Н.В., Дудко А.В., Пехньо В.И.,
Новоторцев В.М., Ерёменко И.Л., Минин В.В.,
Ефимов Н.Н., Уголкина Е.А.

251

**Синтез, кристаллическая структура, магнитные свойства
гетерометаллического комплекса Pd(II)–Cu(II)
с 1-аминоэтилиден-1,1-дифосфоновой кислотой**

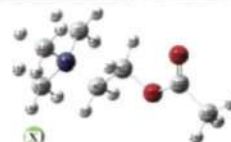
Ключевые слова: гетерометаллический комплекс Pd(II) и Cu(II),
аминодифосфонат, рентгеноструктурный анализ, магнитные свойства



Karakaya M., Uzun F.

**Spectral analysis of acetylcholine halides by density functional
theory calculations**

Keywords: acetylcholine halide, vibration, DFT, IR, Raman, NMR



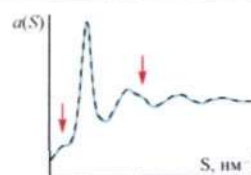
258

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Роик А.С., Аникеенко А.В., Медведев Н.Н.

**Политетраэдрический порядок и локальное химическое
упорядочение в металлических расплавах**

Ключевые слова: металлические расплавы, рентгеноструктурный
анализ, префик, икосаэдрический ближний порядок,
химический ближний порядок, политетраэдрические кластеры

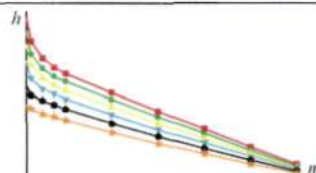


269

Афанасьев В.Н., Устинов А.Н.

**Концентрационная зависимость NaCl в широком
интервале температуры и давления**

Ключевые слова: условная сжимаемость гидратных комплексов,
условная сжимаемость свободного растворителя, гидратация



278

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Кажева О.Н., Рудаков Д.А., Шилов Г.В., Дьяченко О.А.,
Поткин В.И.

**Структура 6,11-дихлор-9-диметилтио-7,8-дикарба-нидо-
ундекаборана [6,11-Cl₂-9-SMe₂-7,8-C₂B₉H₉]**

Ключевые слова: галогенирование, дикарба-нидо-ундекаборат,
рентгеноструктурный анализ, ядерный магнитный резонанс



287

Алиев С.Б., Самсоненко Д.Г., Федин В.П.

**Кристаллическая структура слоистых металл-
органических координационных полимеров
на основе трехъядерных карбоксилатных комплексов
цинка [Zn₃(DMA)₂(bpdca)₃]·3DMA
и [Zn₃(im)₂(bdc)₃]·1,5H₂O**

Ключевые слова: цинк, кристаллическая структура,
координационные полимеры, металл-органические каркасы,
карбоновые кислоты

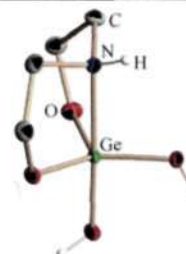


293

Воронков М.Г., Корлюков А.А., Хамитова Д.Р.,
Бузин М.И., Самохин Г.С., Кочина Т.А.

**Кристаллическая и молекулярная структура
1,1-квазигерматрандиола – 1,1-дигидрокси-2,8-диокса-5-
азагермакана**

Ключевые слова: квазигерматрандиола,
молекулярная и кристаллическая структура, рентгеноструктурный
анализ, фазовый переход



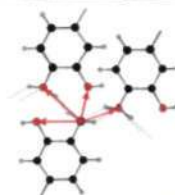
299

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Дребушак Т.Н., Болдырева Е.В., Фуке К.

Водородные связи между катехоловыми группами в кристаллической структуре дигидрокофеиновой кислоты

Ключевые слова: катехоловые соединения, водородные связи, дигидрокофеиновая кислота, рентгеноструктурный анализ

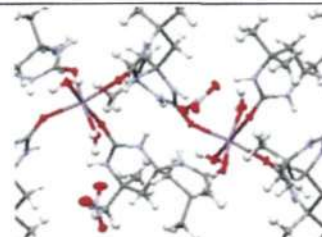


306

Нетреба Е.Е., Федоренко А.М.

Исследование новой молекулярно-кристаллической структуры координационного полимера нитрата марганца(II) с 4,4,10,10-тетраметил-1,3,7,9-тетраазоспиро[5.5]ундекан-2,8-дионом

Ключевые слова: марганец(II), спирокарбон, координационный полимер, кристаллическая структура, PCA

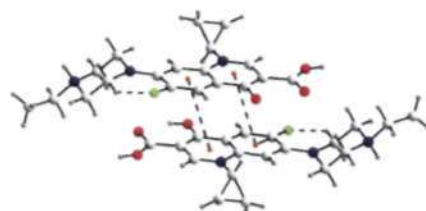


312

Головнёв Н.Н., Молокеев М.С., Головнёва И.И., Глушенко Г.А.

Кристаллическая структура моногидрата тетрабромидодихлоридостанната(IV) энрофлоксацина

Ключевые слова: кристаллическая структура, катион энрофлоксацина, анион тетрабромидодихлоридостанната(IV), водородные связи

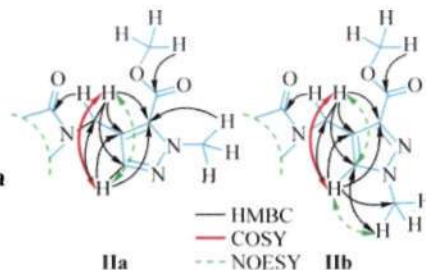


317

Сахутдинов И.М., Батыршин И.Р., Фатыхов А.А., Юмабаева В.М., Супоницкий К.Ю., Антипин М.Ю., Юнусов М.С.

Молекулярные структуры метил 4-[(1,3-диоксо-1,3-дигидро-2*H*-изоиндол-2-ил)метил]-1-метил-1*H*-пиразол-5-карбоксилата и метил 4-[(1,3-диоксо-1,3-дигидро-2*H*-изоиндол-2-ил)метил]-1-метил-1*H*-пиразол-3-карбоксилата

Ключевые слова: метил 4-[(1,3-диоксо-1,3-дигидро-2*H*-изоиндол-2-ил)метил]-1-метил-1*H*-пиразол-5-карбоксилат, метил 4-[(1,3-диоксо-1,3-дигидро-2*H*-изоиндол-2-ил)метил]-1-метил-1*H*-пиразол-3-карбоксилат, ЯМР спектроскопия, рентгеноструктурный анализ



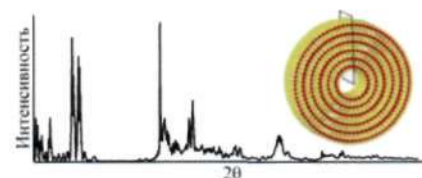
323

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Еняшин А.Н., Ивановский А.Л.

О возможностях метода рентгеновской дифракции в определении политипов в наноструктурированных слоистых дисульфидах металлов

Ключевые слова: слоистый дисульфид молибдена, наноструктуры, политипизм, рентгеновская дифракция, моделирование

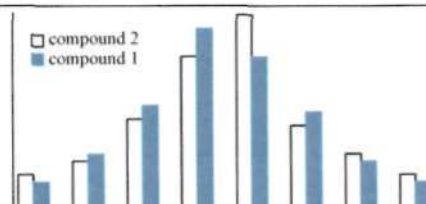


328

Hosseini-fard M., Hashemi L., Amani V., Morsali A.

Characterization of pure phase Zn(II) oxide nanoparticles via thermal decomposition of two zinc(II) complexes of the 6,6'-dimethyl-2,2'-bipyridine ligand

Keywords: nano-particle, 6,6'-dimethyl-2,2'-bipy, Zn(II), surfactant

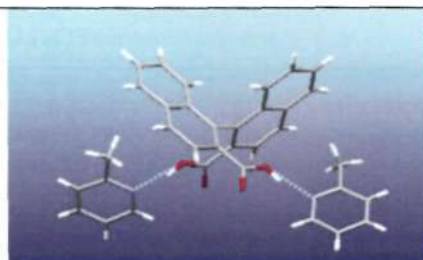


336

Изотова Л.Ю., Ашууров Д.М., Талипов С.А.,
Ибрагимов Б.Т., Вебер Э.

Кристаллическое строение трех сольватов 1,1'-бинафтил-2,2'-бикарбоновой кислоты с 2-пиколином

Ключевые слова: 1,1'-бинафтил-2,2'-бикарбоновая кислота, полиморфизм сольватобразования, 2-пиколин, кристаллическая структура



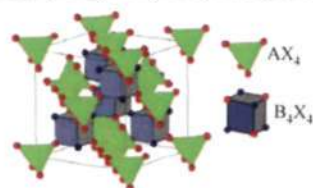
339

ОБЗОРЫ

Иванов В.В., Таланов В.М.

Символьное описание упаковок модулей и коды структур кристаллов

Ключевые слова: базовый структурный модуль, структурный тип кристаллов, модулярные структуры, структурные коды кристаллов



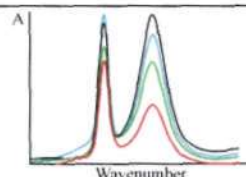
346

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Jović B., Nikolić A., Holló B.

Intermolecular hydrogen bonding between N-substituted caproamides and tetrahydrofuran

Keywords: hydrogen bonding, N-substituted caproamide, tetrahydrofuran, DFT

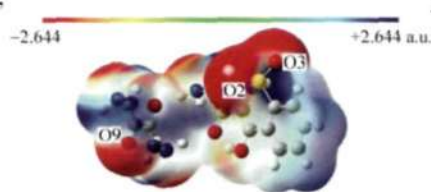


369

Arshad M.N., Şahin O., Zia-ur-Rehman M., Khan I.U., Asiri A.M.,
Rafique H.M.

4-Hydroxy-2H-1,2-benzothiazine-3-carbohydrazide 1,1-dioxide-oxalohydrazide (1:1): X-ray structure and DFT calculations

Keywords: X-ray diffraction analysis, benzothiazine, oxalohydrazide, DFT, Mulliken atomic charge, molecular electrostatic potential

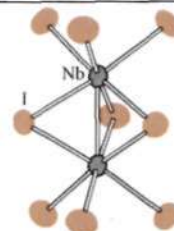


375

Артёмкина С.Б., Наумов Н.Г., Вировец А.В.,
Далецкий В.А., Козлова С.Г., Фёдоров В.Е.

Кристаллическая структура и магнитные свойства биоктаэдрического комплекса Cs₃Nb₂I₉

Ключевые слова: ниобий, кластер, синтез, кристаллическая структура, магнитные свойства, спин-орбитальное взаимодействие

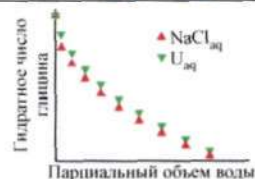


381

Королёв В.П.

Гидратные числа глицина в водных растворах хлорида натрия и мочевины

Ключевые слова: хлорид натрия, мочевины, глицин, водные растворы, парциальные объёмы, гидратные числа

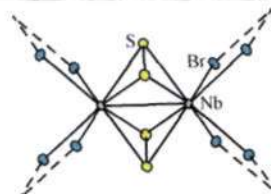


384

Соколов М.Н., Рогачев А.В., Вировец А.В., Яровой С.С.,
Мионов Ю.В., Федин В.П.

Кристаллическая структура двух полиморфных модификаций тиобромиды ниобия NbS₂Br₂

Ключевые слова: ниобий, сера, бром, полиморфизм, кристаллическая структура

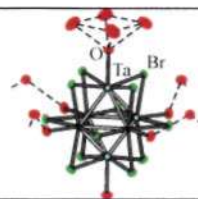


389

Анюшин А.В., Соколов М.Н., Пересыпкина Е.В., Федин В.П.

Кристаллическая структура кластера тантала с тетрафенилборат-анионом: $[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{BPh}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: тантал, бром, кластер, кристаллическая структура, водородные связи



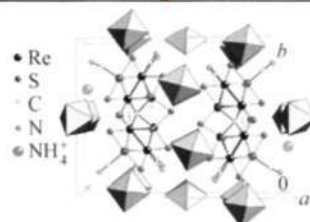
392

Гайфулин Я.М., Смоленцев А.И., Миронов Ю.В.

Кристаллическая структура ионного биоктаэдрического кластерного комплекса

$[\text{Ni}(\text{NH}_3)_6]_{2,5}\text{NH}_4[\text{Re}_{12}\text{CS}_{17}(\text{CN})_6] \cdot 8,5\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: рений, биоктаэдрический кластерный комплекс, никель, кристаллическая структура

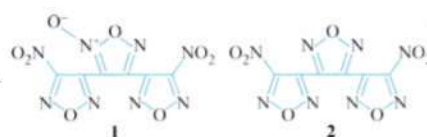


396

Алдошин С.М., Алиев З.Г., Астратъев А.А., Гончаров Т.К., Дашко Д.В., Милёхин Ю.М., Степанов А.И., Шишов Н.И.

Кристаллическая структура 4,4''-динитро-(3,3',4',3'')-трис-[1,2,5]-оксадиазола

Ключевые слова: оксадиазол, фуразан, кристаллическая структура

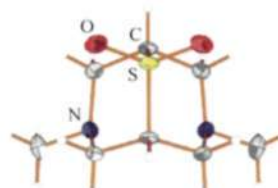


399

Власова Л.И., Байбулатова Н.З., Грабовский С.А., Хаукка М., Докичев В.А., Томилов Ю.В.

Молекулярная структура 3,7-диметил-9-тиа-3,7-диазабицикло[3.3.1]нонан-9,9-диоксида

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, 3,7-диметил-9-тиа-3,7-диазабицикло[3.3.1]нонан-9,9-диоксид

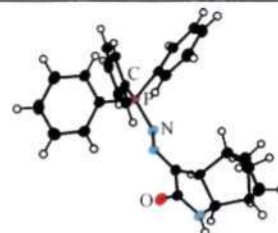


402

Галина Ю.Р., Лобов А.Н., Султанова Р.М., Спирихин Л.В., Докичев В.А., Супоницкий К.Ю.

Молекулярная структура 5-[(трифенилфосфоранилиден)гидразоно]-экто-3-азатрицикло[5.2.1.0^{2,6}]декан-4-она

Ключевые слова: 5-диазо-экто-3-азатрицикло[5.2.1.0^{2,6}]декан-4-он, фосфазины, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ

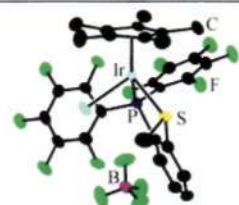


405

Bellabarba R.M., Nieuwenhuyzen M., Saunders G.C.

Crystal structure of $(\eta^5\text{-pentamethylcyclopentadienyl})\{\text{bis}(\text{pentafluorophenyl})\text{thiomethylphenylphosphine-}\kappa_2\text{S}, P\}\text{chloroiridium(III) tetrafluoroborate}$

Keywords: conglomerate, $\eta^5\text{-pentamethylcyclopentadienyl}$, iridium, X-ray structure

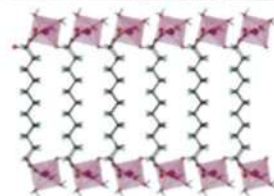


408

Price D.J., Coles S.J., Hursthouse M.B.

Crystal structure of cobalt(II) 1,12-dodecanedioate trihydrate: a new layered coordination network

Keywords: cobalt, layered compound, carboxylate bridge, pseudopolymorphism



411

Содержание следующего номера — в конце журнала