



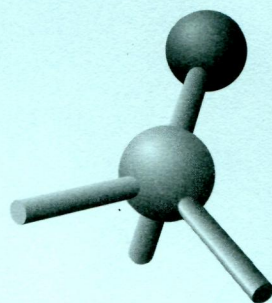
11  
\*92

ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

Том 54  
сентябрь  
октябрь  
**2013**

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



**№ 5**

НОВОСИБИРСК

**ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ**  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 54

Сентябрь-октябрь

№ 5, 2013

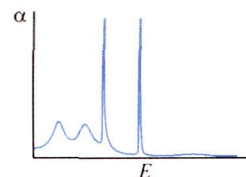
**СО Д Е Р Ж А Н И Е**

**ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ**

Лузанов А.В.

**$\pi$ -Система в сильном электрическом поле.  
Анализ электронного распаривания**

**Ключевые слова:** полное конфигурационное взаимодействие, индекс распаривания, бирадикалоидность, ароматичность, антиароматичность



797

Копытов А.В., Поплавной А.С., Уфимцев М.К.

**Генезис фононных спектров кристаллов  $A^2B^4C_2^5$   
и  $A^1B^3C_2^6$  с решеткой халькопирита  
из колебательных состояний их подрешеток**

**Ключевые слова:** фононный спектр, динамика решетки, плотность состояния, подрешетки, халькопирит

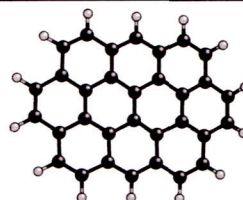


805

Hosseinnejad T., Abdullah Mirzaei R., Nazari F.,  
Karimi-Jafari M.H.

**Adsorption behavior of CO and C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> on the graphite  
basal surface: a quantum chemistry study**

**Keywords:** graphite basal surface, carbon monoxide, acetylene,  
physical interaction energy, quantum chemical calculations

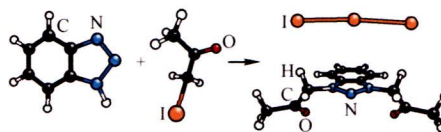


812

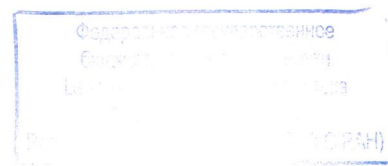
Шагун В.А., Дорофеев И.А., Шагун Л.Г.

**Механизм образования трииодида  
1,3-бис-(2-оксопропил)-3H-1,2,3-бензотриазолия  
в реакции алкилирования 1,2,3-бензотриазола  
1-иодпропан-2-оном**

**Ключевые слова:** квантово-химический расчет,  
ионная жидкость, механизм реакции, алкилирование,  
1,2,3-бензотриазол, 1-иодпропан-2-он



819

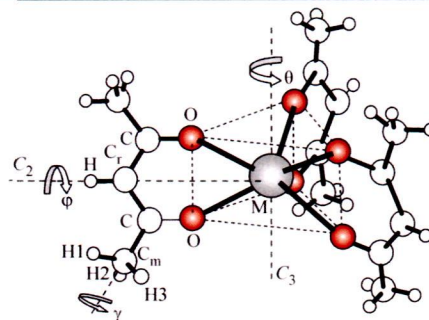


Твердова Н.В., Гиричев Г.В., Шлыков С.А.,  
Кузьмина Н.П., Петрова А.А., Зайцева И.Г.

825

**Исследование структуры и энергетики  $\beta$ -дикетонатов. XVIII. Молекулярное строение *трис*-ацетилацетонатов хрома и кобальта по данным квантово-химических расчетов и метода газовой электронографии**

**Ключевые слова:** *трис*-ацетилацетонаты, хром, кобальт, молекулярная структура, газовая электронография, квантовая химия, масс-спектр

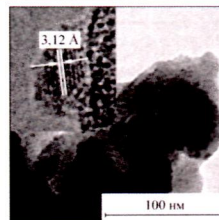


Якушкин С.С., Бухтиярова Г.А., Мартыанов О.Н.

838

**Условия формирования магнитоупорядоченной фазы  $\epsilon$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Исследование методом ФМР *in situ***

**Ключевые слова:** ферромагнитный резонанс, суперпарамагнитные наночастицы, гетерогенные катализаторы, *in situ*

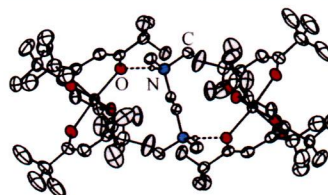


Викулова Е.С., Пирязев Д.А., Жерикова К.В.,  
Алфёрова Н.И., Морозова Н.Б., Игуменов И.К.

845

**Кристаллическая структура двух комплексов, содержащих *трис*-( $\beta$ -дикетонато)магнат-анион**

**Ключевые слова:** магний,  $\beta$ -дикетонаты, диамины, рентгеноструктурный анализ, термогравиметрия

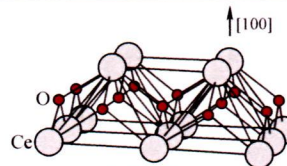


Мороз Э.М., Пахарукова В.П., Зюзин Д.А.

852

**Структурные особенности компонентов оксидных медно-церий-циркониевых катализаторов**

**Ключевые слова:** структура наноматериалов, оксид церия, оксид циркония, оксид меди, катализатор

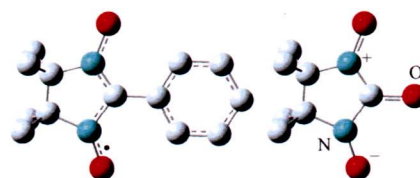


Мазалов Л.Н., Федоренко А.Д., Овчаренко В.И.,  
Третьяков Е.В., Фурсова Е.Ю., Крючкова Н.А.,  
Калинкин А.В., Трушин Е.В.

860

**Интерпретация рентгеновских фотоэлектронных спектров свободных нитроксильных радикалов**

**Ключевые слова:** свободные нитроксильные радикалы, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, эффективные заряды, спиновая плотность, модель переноса заряда

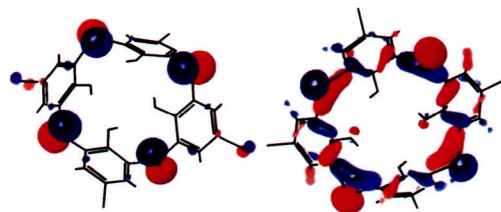


Крючкова Н.А., Лаврухина С.А., Костин Г.А.,  
Мазалов Л.Н., Торгов В.Г., Калинкин А.В.,  
Драпайло А.Б.

869

**Рентгеноспектральное и квантово-химическое изучение электронного строения тиакаликс[4]аренов и их ациклических аналогов**

**Ключевые слова:** тиакаликс[4]арены, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, рентгеновская эмиссионная спектроскопия, метод DFT

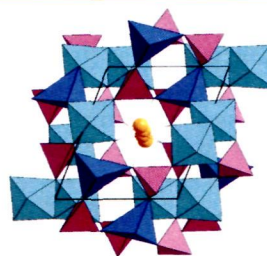


## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Солодовников С.Ф., Солодовникова З.А., Гудкова И.А.,  
Золотова Е.С., Юдин В.Н.

**Области гомогенности двойных молибдатов в системе  $\text{Na}_2\text{MoO}_4\text{-MgMoO}_4$  и строение триклинных  $\text{Na}_{1,51}\text{Mg}_{2,245}(\text{MoO}_4)_3$  и  $\text{Na}_{1,66}\text{Mn}_{2,17}(\text{MoO}_4)_3$**

**Ключевые слова:** натрий, магний, марганец, двойные молибдаты, нестехиометрия, область гомогенности, кристаллическая структура

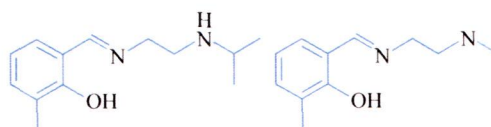


879

Qian S.-S., Zhang M., You Z.-L., Zhu H.-L.

**Crystal structures of azido or thiocyanato-coordinated nickel(II) complexes with tridentate Schiff bases**

**Keywords:** Schiff base, nickel complex, azide, thiocyanate, crystal structure

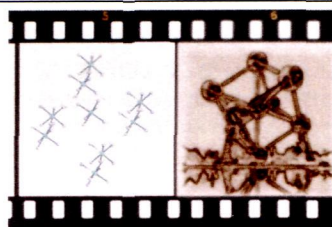


888

Храненко С.П., Быкова Е.А., Юсенко К.В.,  
Тютюнник А.П., Громилов С.А.

**$[\text{Ru}(\text{NH}_3)_6](\text{MoO}_4)\text{Cl} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  и  $[\text{M}(\text{NH}_3)_6](\text{ReO}_4)_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  ( $\text{M} = \text{Ru}, \text{Ir}$ ). Синтез и кристаллическая структура**

**Ключевые слова:** рутений, молибден, рений, иридий, комплексная соль, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ

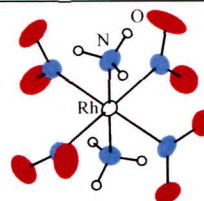


893

Беляев А.В., Смоленцев А.И., Байдина И.А, Ткачёв С.В.

**Кристаллическая структура солей аниона *транс*- $[\text{Rh}(\text{NH}_3)_2(\text{NO}_2)_4]^-$  с катионами  $\text{K}^+$ ,  $\text{Cs}^+$ ,  $\text{Ag}^+$  и  $(\text{CH}_3)_4\text{N}^+$**

**Ключевые слова:** родий, *транс*-диамминтетранитриты, соли, кристаллическая структура, ЯМР<sup>14,15</sup>N

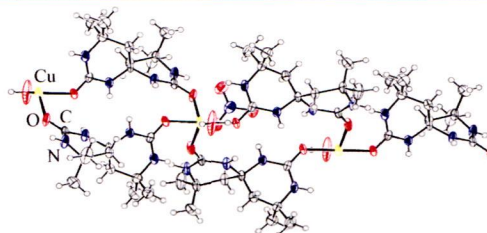


900

Нетреба Е.Е.

**Исследование молекулярной и кристаллической структуры нового координационного полимера нитрата меди(II) с 4,4,10,10-тетраметил-1,3,7,9-тетраазоспиро[5.5]ундекан-2,8-дионом**

**Ключевые слова:** медь(II), тригональная бипирамида, спирокарбон, координационный полимер, структура, PCA



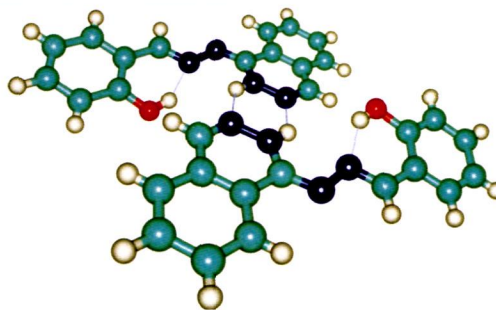
907

## СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Левченков С.И., Попов Л.Д., Щербаков И.Н.,  
Александров Г.Г., Зубенко А.А., Коган В.А.

**Таутомерия 1'-фталазинилгидразонов замещенных салициловых альдегидов и 2-дифенилфосфинобензальдегида: рентгеноструктурное исследование и квантово-химическое моделирование**

**Ключевые слова:** гидразоны, таутомерия, рентгеноструктурный анализ, водородная связь, теория функционала плотности

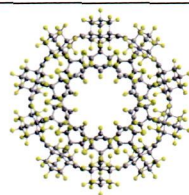


914

Семёнов С.Г., Сиголаев Ю.Ф., Беляков А.В.

**Адамант-1,3,5-триильные супердодекаэдраны**

**Ключевые слова:** наноструктуры, полициклические соединения, кавитанды, икосаэдрическая симметрия, M06-2X/6-31G(*d,p*), M06-2X/6-311G(*d*)

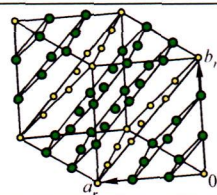


923

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

**Кристаллографический анализ  $Tl_2S$  – пример "слоевого изоморфизма"**

**Ключевые слова:** псевдотрансляционные подрешетки атомов, вариация структурного типа  $PbS$ , "слоевой изоморфизм" катионных и анионных слоев

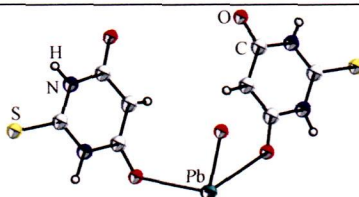


926

Головнёв Н.Н., Молокеев М.С.

**Кристаллическая структура катена-ди(2-тиобарбитурато-О,S)аквасвинца(II)**

**Ключевые слова:** катена-ди(μ<sub>2</sub>-2-тиобарбитурато-О,S)аквасвинец(II), кристаллическая структура, водородные связи, π-π-взаимодействие

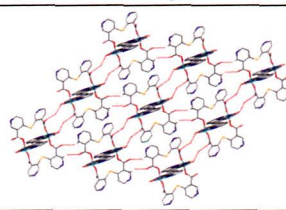


931

Gao E.-J., Liu T.-L., Jiao W., Jiang L.-L., Zhang D., Zhang Y.-J., Xu J., Wu G.-L.

**Crystal structure of a new transition metal-organic Zn(II) complex**

**Keywords:** Zn(II) complex, 2-mercaptionicotinic acid, crystal structure, coordination

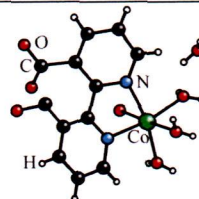


935

Gao E.-J., Jiang L.-L., Zhang D., Jiao W., Liu T.-L., Zhang Y.-J., Wu G.-L., Xu J.

**Crystal structure of a novel complex [Co(3,3'-bpbc)(H<sub>2</sub>O)<sub>3</sub>] · H<sub>2</sub>O**

**Keywords:** 2,2'-bipyridine-3,3'-dicarboxylic acid (3,3'-bpbc), cobalt(II) complex crystal structure, coordination

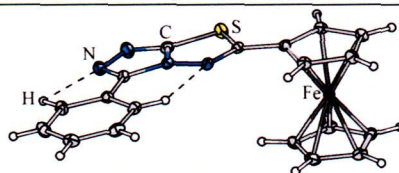


940

Wu P.

**Crystal structure of 6-ferrocenyl-3-phenyl-[1,2,4]triazolo[3,4-b][1,3,4]thiadiazole**

**Keywords:** X-ray diffraction, monoclinic symmetry, triazole, thiadiazole, ferrocenyl

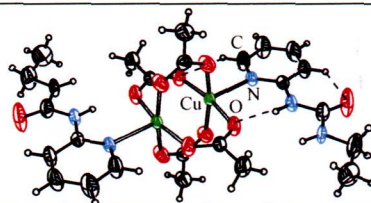


944

Чумаков Ю.М., Кэпэцына Т.Б., Петренко П., Цапков В.И., Гуля А.П.

**Кристаллическая структура тетра(μ-ацетато)-бис{[1-этил-3-(пиридин-2-ил)карбамид]меди}**

**Ключевые слова:** комплексы 3*d*-металлов, рентгеноструктурный анализ, производные карбамида

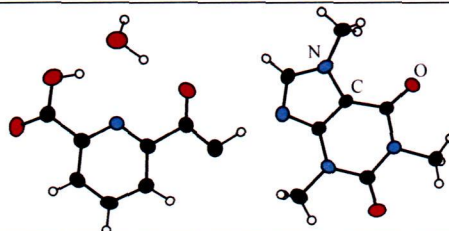


947

Moghimi A., Khavasi H.R., Dashtestani F., Kordestani D., Behboodi E., Maddah B.

**A cocrystal of caffeine and dipicolinic acid: synthesis, characterization, X-ray crystallography and solution studies**

**Keywords:** crystal chemistry, single crystal X-ray diffraction, proton transfer, hydrogen bonding, caffeine, dipicolinic acid



950

Содержание следующего номера — в конце журнала

© Сибирское отделение РАН, 2013

© Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 2013