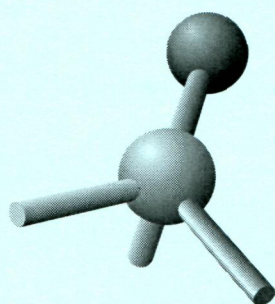


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 55  
январь  
февраль  
**2014**

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



**№ 1**

НОВОСИБИРСК

ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 55

Январь-февраль

№ 1, 2014

СО Д Е Р Ж А Н И Е

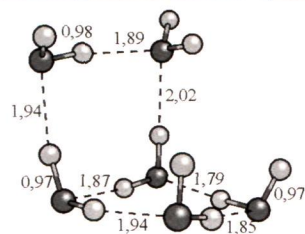
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Захаров И.И.

**Структура кластеров воды  $(\text{H}_2\text{O})_6^-$  и аммиака  $(\text{NH}_3)_6^-$  с избыточным электроном.**

**Квантово-химические исследования**

**Ключевые слова:** квантово-химические DFT и MP2 расчеты, молекулярные кластеры воды и аммиака, модель сольватированного электрона

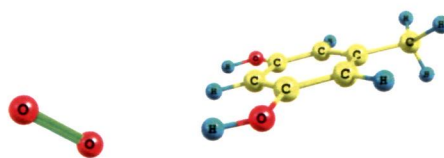


7

Кобзев Г.И., Казаева А.Н., Футтеркнехт З.

**Влияние 5-метилрезорцина на спиновую конверсию в молекулярном кислороде**

**Ключевые слова:** 5-метилрезорцин, возбужденные состояния кислорода, поверхность потенциальной энергии (ППЭ), спиновая конверсия

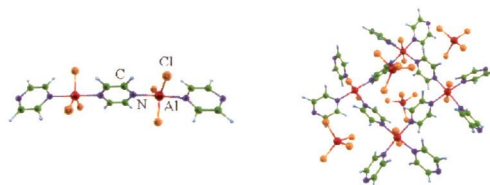


14

Давыдова Е.И., Тимошкин А.Ю., Френкинг Г.

**Структура и устойчивость молекулярных и ионных комплексов  $\text{AlCl}_3$  с пиразинном и 4,4'-бипиридиллом**

**Ключевые слова:** квантово-химические расчеты, молекулярные комплексы, ионные комплексы, хлорид алюминия, пиразин, 4,4'-бипиридил, структура, устойчивость

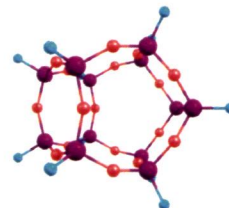


20

Семёнов С.Г., Бердина М.Е.

**Квантово-химическое исследование структуры додекасилсесквиоксана  $\text{H}_{12}\text{Si}_{12}\text{O}_{18}$**

**Ключевые слова:** додекасилсесквиоксан, эндокомплексы, симметрия, структура, ионизация, B3LYP, PBE0, MP2(full), cc-pVTZ



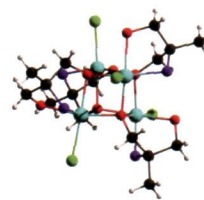
29

Abbas G., Mariya-al-Rashida, Irfan A., Ali Rana U., Shakir I.

36

**DFT studies on tetranuclear cubane complex  
[Ni<sub>4</sub>(ampd)<sub>4</sub>(Cl<sub>4</sub>)]·MeCN**

**Keywords:** Ni(II) cubane, 2-amino-2-methyl-2,3-propandiol, single crystal X-ray crystallography, density functional theory, time-dependent density functional theory

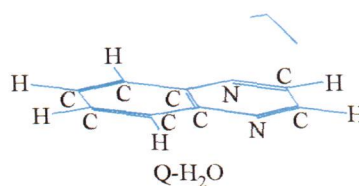


El Assyry A., Benali B., Boucetta A., Lakhrissi B.

43

**Application of the AMYR calculating method  
on quinoxaline, 3-chloroquinoxaline  
and 3-methylquinoxaline in interaction  
with *n* water molecules (*n* varies from 1 to 6)**

**Keywords:** quinoxaline, 3-chloroquinoxaline, 3-methylquinoxaline, AMYR, interaction energies, conformations



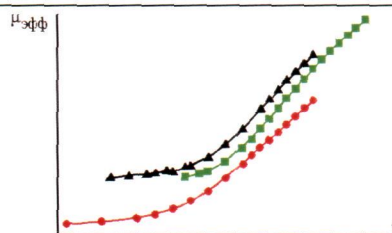
**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Шакирова О.Г., Далецкий В.А., Лавренова Л.Г., Варнек В.А., Рудаков Д.А., Поткин В.И.

50

**Спин-кроссовер в комплексах карборанов железа(II)  
с *трис*(пиразол-1-ил)метаном**

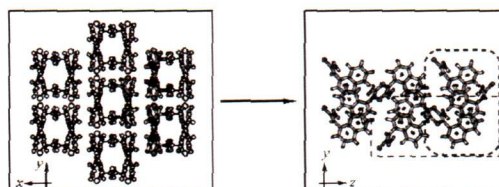
**Ключевые слова:** синтез, комплексы железа(II), карбораны, *трис*(пиразол-1-ил)метан, магнетохимия, электронная, ИК и мессбауэровская спектроскопия



AlDamen M.A., Sinnokrot M.

**Crystallographic and theoretical studies  
of 1-(1-naphthyl)-2-thiourea  
with intermolecular N—H...S heteroatom interaction  
and N—H...π interaction**

**Keywords:** 1-(1-naphthyl)-2-thiourea, S...H—N hydrogen bond, interaction energy, *ab initio*, RIMP2, B3LYP



58

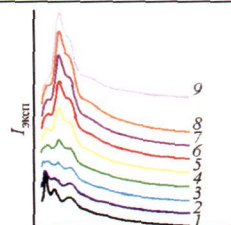
**СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ**

Гречин О.В., Смирнов П.Р., Тростин В.Н.

66

**Рентгенодифракционное исследование водных  
растворов трихлорида лютетия**

**Ключевые слова:** водные растворы лантанидов, структура, рентгенодифракционный анализ, малоугловые максимумы интенсивности рассеяния, функции радиального распределения

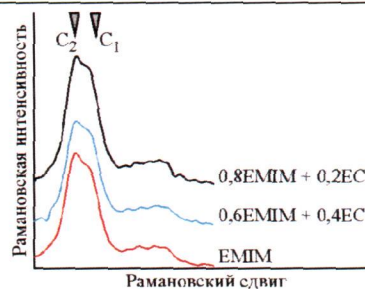


Гафуров М.М., Кириллов С.А., Рабаданов К.Ш., Атаев М.Б., Третьяков Д.О.

72

**Спектроскопическое исследование процессов  
сольватации и ассоциации в растворах соли лития  
в ионных и апротонных растворителях**

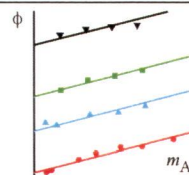
**Ключевые слова:** спектры комбинационного рассеяния, ионная жидкость, этилметилимидазолий бис(трифторметансульфонил)имид, литий бис(трифторметилсульфонил)имид, сольватация



Королёв В.П., Серебрякова А.Л.

### Гидратация аминокислот в водных растворах сульфатов магния и натрия

**Ключевые слова:** парциальный объем, аминокислоты, водно-солевые системы, вклады групп, гидратные числа



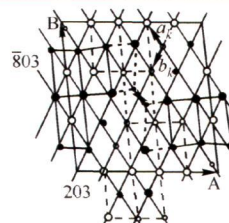
77

## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

### Кристаллографический анализ природных сульфидов тяжелых металлов: рукселита, фельберталита, марруччиита

**Ключевые слова:** кристаллографический анализ, структуры сульфидов, катионные и анионные подрешетки, рукселит, фельберталит, марруччиит

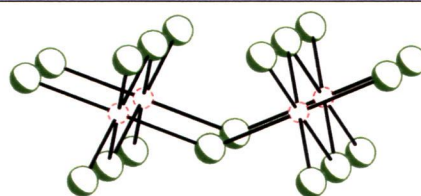


81

Тютюнник А.П., Дьячкова Т.В., Зайнулин Ю.Г., Громилов С.А.

### Структура моноклинной модификации Re<sub>3</sub>B

**Ключевые слова:** рений, бориды, высокое давление, высокая температура, рентгенофазовый анализ, кристаллохимия

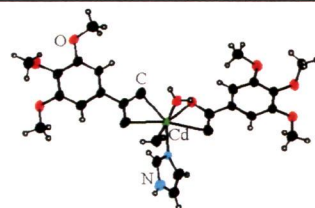


88

Chen H., Zhang L., Hu B., Wu X.-L., Wang T., Huang G., Wang Y.-Q., Liu C.-Z.

### Crystal structure and luminescence of two cadmium 3,4,5-trimethoxybenzoate complexes

**Keywords:** 3,4,5-trimethoxybenzoate, crystal structure, cadmium, spectral analysis, luminescence

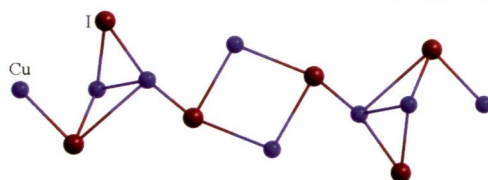


94

Li X., Zhao H., Zeng Q.

### Structure and photoluminescent property of a three-dimensional pillared-layer La(III)-Cu(I) heterometallic coordination polymer

**Keywords:** heterometallic coordination polymer, crystal structure, pillared-layer, photoluminescent property



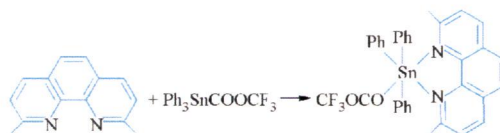
101

## СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Yousefi M., Safari M., Torbati M.B., Amanzadeh A.

### *In vitro* anti-proliferative activity of novel hexacoordinated triphenyltin(IV) trifluoroacetate containing a bidentate N-donor ligand

**Keywords:** organotin(IV) complex, 2,9-dimethyl-1,10-phenanthroline, spectroscopic study, anticancer drug, cell line

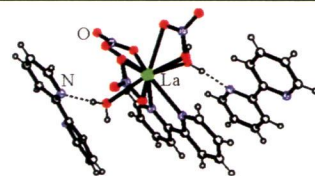


106

Александреску Л., Боурош П., Опря О., Житару И.

### Кристаллическая структура [La(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(BiPy)]·1,5(BiPy)

**Ключевые слова:** комплексное соединение La(III), синтез, строение, кристаллическая структура

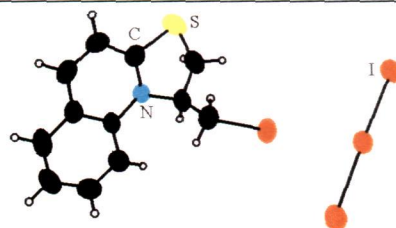


112

Барташевич Е.В., Юшина И.Д., Вершинина Е.А.,  
Слепухин П.А., Ким Д.Г.

**Три- и полииодиды комплексного строения  
продуктов иодциклизации 2-аллилтиохинолина**

**Ключевые слова:** трииодиды, полииодиды,  
галогенциклизация, галогенная связь,  
невалентные взаимодействия

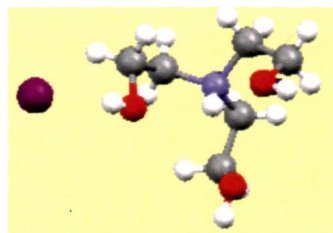


117

Воронков М.Г., Корлюков А.А., Зельбст Э.А.,  
Фундаменский В.С., Боррманн Х., Архипов Д.Е.,  
Агапова Я.В., Кочина Т.А.

**Кристаллическая и молекулярная структура  
иодпротатрана – иодида  
трис(2-гидроксиэтил)аммония**

**Ключевые слова:** соли трис(2-гидроксиэтил)аммония,  
иодпротатран, молекулярная структура,  
рентгеноструктурный анализ



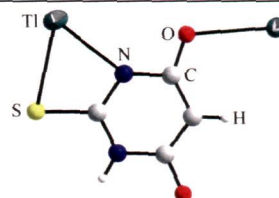
125

**КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ**

Головнёв Н.Н., Молокеев М.С.

**Кристаллическая структура  
катена-2-тиобарбитурата диталлия(I)**

**Ключевые слова:** кристаллическая структура,  
катена-2-тиобарбитурат диталлия(I), водородные связи,  
 $\pi$ – $\pi$ -взаимодействие

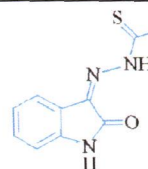


130

Xia J.-J.

**Crystal structure of a Mn(II) complex  
with isatin-hydrazone-S-benzylthiocarbamate**

**Keywords:** X-ray diffraction, dithiocarbamate, isatin,  
manganese(II) acetate

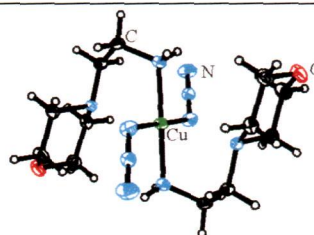


135

Liu H.-Y.

**Crystal structures of bis(azido)bis(2-morpholin-  
4-ylethylamino)copper(II) and bis{2,4-dibromo-6-  
[(2-morpholin-4-ylethylimino)methyl]phenolato}  
copper(II)**

**Keywords:** X-ray diffraction, copper complex, crystal structure,  
Schiff base, hydrogen bond

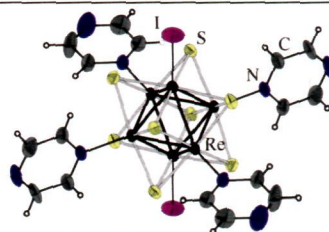


139

Шестопапов М.А., Иванов А.А., Смоленцев А.И.,  
Мионов Ю.В.

**Кристаллическая структура октаэдрического  
кластерного комплекса *транс*-[ $\{Re_6S_8\}(pyz)_4I_2\} \cdot 2pyz$**

**Ключевые слова:** рений,  
октаэдрические халькогенидные кластеры, пиразин,  
кристаллическая структура

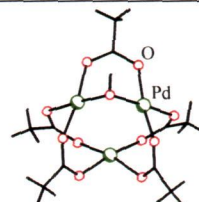


144

Татарчук В.В., Сергиевская А.П., Куратьева Н.В.,  
Корольков И.В., Шелудякова Л.А., Громилов С.А.

**Кристаллическая структура  
[Pd<sub>3</sub>( $\mu$ -OH)( $\mu$ -CH<sub>3</sub>COO)<sub>5</sub>]**

**Ключевые слова:** палладий, комплекс,  
рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия

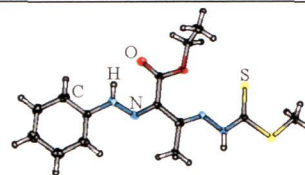


147

Wu P.

**Structural analysis of ethyl 2-Z-phenylhydrazono-3-E-methylthio(thioxo)methylhydrazone-butanoate**

**Keywords:** X-ray diffraction, phenylhydrazono, methylhydrazone, butanoate

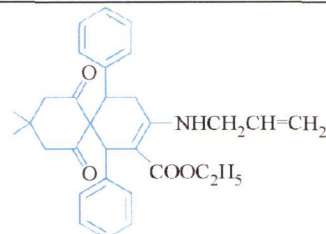


151

Магеррамов А.М., Исмиев А.И., Потехин К.А., Аскеров Р.К.

**Молекулярная и кристаллическая структура этил-3(аллиламино)-9,9-диметил-7,11-диоксо-1,5-дифенилспиро [5.5]ундец-2-ен-2-карбоксилата**

**Ключевые слова:** мультикомпонентная конденсация, 1,3-дикарбонильные соединения, спироциклы



155

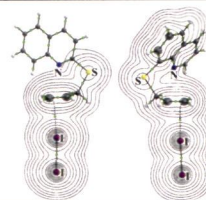
**МАТЕРИАЛЫ**

**XVI Симпозиума по межмолекулярному взаимодействию и конформациям молекул, 18-22 июня 2012 года, Иваново**

Барташевич Е.В., Шманина Е.А., Юшина И.Д., Ким Д.Г., Цирельсон В.Г.

**Энергетические характеристики и строение комплексов 2- и 8-аллилтиохинолинов с иодом**

**Ключевые слова:** галогенные связи, иод, комплексы с переносом заряда, энергия взаимодействия

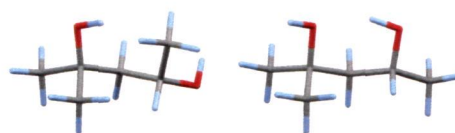


158

Гринёва О.В., Усачёва Т.М., Журавлёв В.И.

**“Кристаллические” конформации 2-метил-2,4-пентандиола: расчет дипольных моментов и оптимизация строения молекул**

**Ключевые слова:** Кембриджский банк структурных данных, квантово-химические расчеты, внутри- и межмолекулярные водородные связи, алифатические диолы

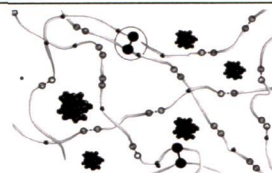


165

Баранова О.А., Хижняк С.Д., Пахомов П.М.

**Супрамолекулярный гидрогель на основе L-цистеина и наночастиц серебра**

**Ключевые слова:** супрамолекулярный гидрогель, наночастицы серебра, L-цистеин

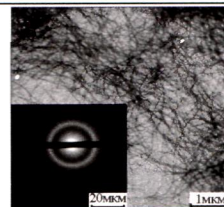


174

Хижняк С.Д., Овчинников М.М., Пахомов П.М.

**Гелеобразование в низкоконтрированных водных растворах, содержащих N-ацетил-L-цистеин и нитрат серебра**

**Ключевые слова:** N-ацетил-L-цистеин, нитрат серебра, кластер, супрамолекулярная структура, гидрогель

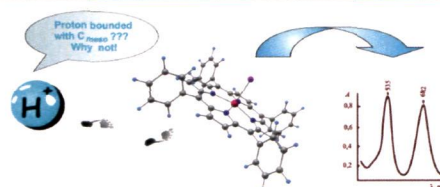


181

Ломова Т.Н., Клюева М.Е., Можжухина Е.Г., Тюляева Е.Ю., Бичан Н.Г., Зайцева С.В., Зданович С.А.

**Ион-молекулярные взаимодействия в системе металлопорфирина-кислота в жидких растворах**

**Ключевые слова:** порфирины, комплексы, образование H<sup>+</sup>-ассоциатов, свойства, структура



186

**Содержание следующего номера — в конце журнала**