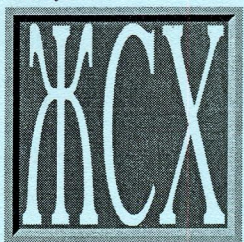


П
Ж92

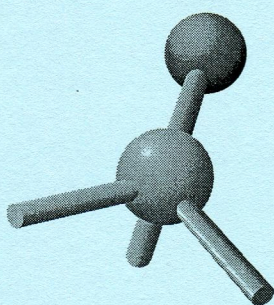


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 56
сентябрь
октябрь
2015

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 5

НОВОСИБИРСК

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

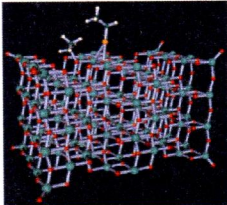
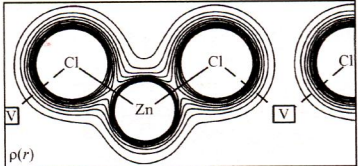

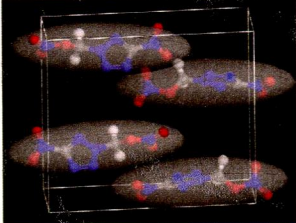
Т О М 56

Сентябрь-октябрь

№ 5, 2015

СОДЕРЖАНИЕ

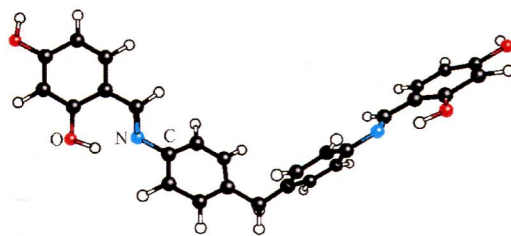
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

- Воронцов А.В. 871
Молекулярная и диссоциативная адсорбция молекулы диэтилсульфида на гранях (010) и (001) наночастицы TiO₂ модификации анатаз
Ключевые слова: полуэмпирические методы PM6 и PM7, квантовые расчеты, замороженная поверхность, хемосорбция, дегазация, обессеривание, фотокатализ
- 
- Басалаев Ю.М., Маринова С.А. 881
Электронная структура и динамика решетки кристалла α-ZnCl₂
Ключевые слова: хлорид цинка, ZnCl₂, халькопирит, метод подрешеток
- 
- Доломатов М.Ю., Ковалёва Э.А. 887
Новый молекулярный дескриптор модели «структура–свойство» для оценки потенциалов ионизации нафто- и антрахинонов
Ключевые слова: молекулярный дескриптор, производные хинонов, потенциалы ионизации, интегральная сила осциллятора, топологические индексы, QSPR
- 
- Gong X.-Y., Li X.-H., Zhang R.-Z. 894
Theoretical investigation on nitrogen-rich energetic compounds 5-nitro-2-nitratomethyl-1,2,3,4-tetrazole
Keywords: density functional theory, detonation performance, bond dissociation energy, 5-nitro-2-nitratomethyl-1,2,3,4-tetrazole, frontier molecular orbital
- 

Eshtiagh-Hosseini H., Beyramabadi S.A., Mirzaei M., Morsali A., Naseri M.A., Chegini H., Elahi M.

Intramolecular-proton transfer, experimental and theoretical characterization of 3,3'-dihydroxy-4,4'-[4,4'-diphenylmethanebis(nitrilomethylidyne)]-bis-phenol

Keywords: Schiff base, DFT, tautomerism, assignment, proton transfer, synthesis, intramolecular hydrogen bond, AIM

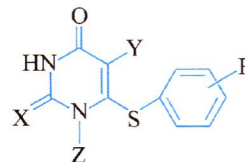


902

Tong J., Zhao X., Zhong L., Chang J.

QSAR studies of HEPT derivatives as anti-HIV drugs using RASMS method

Keywords: RASMS (random sampling analysis on molecular surface), HEPT derivatives, quantitative structure activity relationship (QSAR), multiple linear regression (MLR)



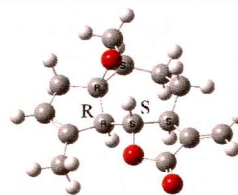
914

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Абуляисова Л.К., Адекенов С.М.

Квантово-химический анализ молекулярной структуры и колебательного спектра арглабина

Ключевые слова: арглабин, квантово-химические методы Хартри-Фока и теории функционала плотности, колебательный ИК спектр

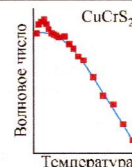


922

Селиванова А.В., Соколов В.В., Колесов Б.А.

KР-спектральное исследование кристаллов CuCrS₂ в области температур 5–300 К

Ключевые слова: КР спектроскопия, слоистые кристаллы, низкие температуры

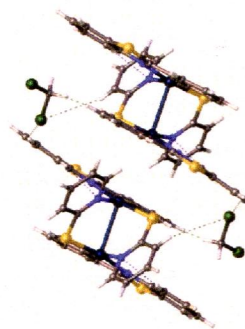


931

Катленок Е.А., Золотарев А.А, Иванов А.Ю, Смирнов С.Н, Балашев К.П.

Строение, оптические и электрохимические свойства биядерных комплексов с платинированным 2-фенилбензотиазолом и мостиковыми 2-меркапто-производными пиридина, пиримидина, бензотиазола и бензоксазола

Ключевые слова: биядерные циклометаллированные комплексы Pt(II), РСА, ЯМР ¹H, ¹⁹⁵Pt спектроскопия, электронная спектроскопия поглощения и испускания, вольтамперометрия окисления и восстановления

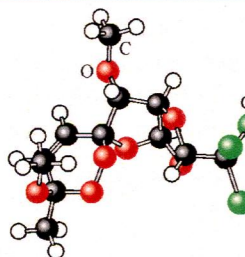


937

Karakurt T., Dincer M., Cetin F.

Molecular structure and vibrational and chemical shift assignments of (4R)-5-eno-4,7-epidioxy-3,7-O-methyl-1,2-O-(S)-trichloroethylidene-5,6,8-trideoxy-α-D-threo-1,4-furano-4,7-diulo-octose by DFT and *ab initio* HF calculations

Keywords: X-ray structure determination, DFT, HF, GIAO, ¹H, ¹³C NMR, IR spectra, vibrational assignment

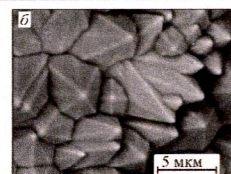
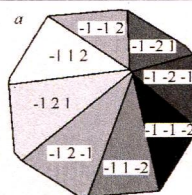


945

Лозанов В.В., Бакланова Н.И., Морозова Н.Б.

Газофазное осаждение комплексных тугоплавких покрытий на углеродном волокнистом материале

Ключевые слова: осаждение из газовой фазы, карбид гафния, иридий, покрытия, углеродный волокнистый материал

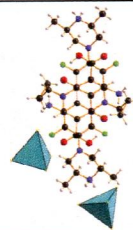


958

Васильев А.Д., Головнёв Н.Н.

Кристаллическая структура двух ионных соединений спарфлоксацина

Ключевые слова: кристаллическая структура, катион спарфлоксациниума, тетрагалогенид-анионы цинка и кадмия, водородные связи, π - π -взаимодействие

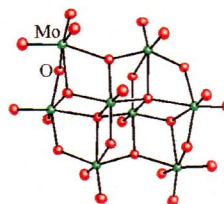


966

Казиев Г.З., Сауль Киньонес О., Степнова А.Ф., Хрусталёв В.Н., де Ита А., Панурина Н.А.

Физико-химическое исследование октамолибденодикобальтата(II) аммония состава $(\text{NH}_4)_2[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4]_2[\text{Mo}_8\text{O}_{27}] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: синтез, гетерополисоединения, октамолибденодикобальтат(II), РСА, ИК спектроскопия, ТГА

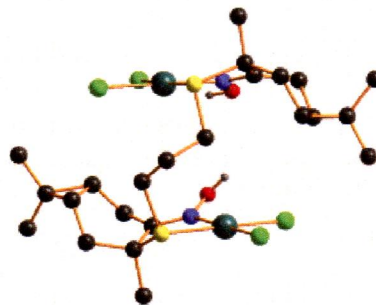


971

Кокина Т.Е., Глинская Л.А., Горшков Н.Б., Куратьева Н.В., Корольков И.В., Ткачёв А.В., Ларионов С.В.

Строение соединений $[\text{Pd}_2(\text{H}_2\text{L}^1)\text{Cl}_4]$ и $[\text{Pd}_2(\text{H}_2\text{L}^1)\text{Cl}_4] \cdot 0,5\text{CH}_2\text{Cl}_2$ с хиральным бис- α -сульфанилоксимом – производным природного монотерпеноида (+)-3-карена (H_2L^1)

Ключевые слова: комплекс, бис- α -сульфанилоксим, Pd, кристаллическая и молекулярная структура

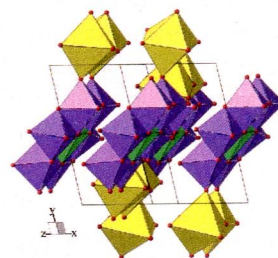


978

Гумерова Н.И., Мельник Н.А., Розанцев Г.М., Баумер В.Н., Радио С.В.

Гетерополигексамолибдоникелат(II) натрия $\text{Na}_4[\text{Ni}(\text{OH})_6\text{Mo}_6\text{O}_{18}] \cdot 16\text{H}_2\text{O}$ с анионом со структурой Андерсона: синтез и кристаллическая структура

Ключевые слова: гетерополисоединение, молибдат, структура Андерсона, рентгеноструктурный анализ, ИК спектроскопия, кристаллическая структура

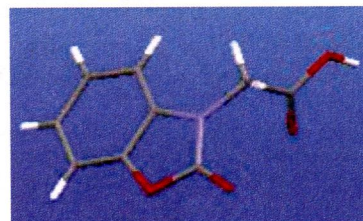


985

Hussain S., Khan I.U., Harrison W.T.A., Tahir M.N.

Crystal structures and characterization of two rare-earth-glutarate coordination networks: one-dimensional $[\text{Nd}(\text{C}_5\text{H}_6\text{O}_4)(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot \text{Cl}$ and three-dimensional $[\text{Pr}(\text{C}_5\text{H}_6\text{O}_4)(\text{C}_5\text{H}_7\text{O}_4)(\text{H}_2\text{O})] \cdot \text{H}_2\text{O}$

Keywords: synthesis, crystal structure, coordination polymer, neodymium, praseodymium

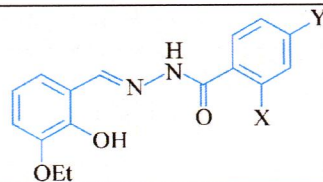


993

Sheng G.-H., Cheng X.-S., You Z.-L., Zhu H.-L.

Two isomeric structures of oxovanadium(V) complexes with hydrazone and 8-hydroxyquinoline ligands

Keywords: hydrazone ligand, 8-hydroxyquinoline, oxovanadium complex, crystal structure, thermal property

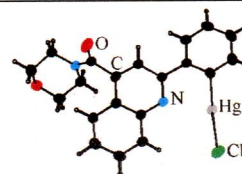


1001

Lin J., Henderson W., Nicholson B.K.

X-ray structure of an amide-appended chloromercurated derivative of 2-phenylquinoline

Keywords: synthesis, mercury complexes, orthometallation reactions, crystal structure



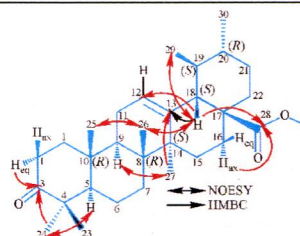
1006

Медведева Н.И., Супоницкий К.Ю.,
Лопатина Т.В., Лобов А.Н., Попцов А.И.,
Казакова О.Б.

1010

Молекулярная структура ангидрида 3-оксо-урс-12-ен-28-овой кислоты

Ключевые слова: ангидрид 3-оксо-урс-12-ен-28-овой
кислоты, синтез, рентгеноструктурный анализ



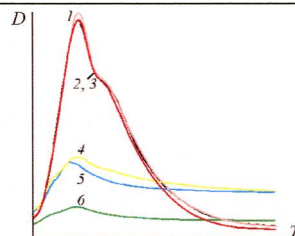
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Куцевол Н.В., Чумаченко В.А., Равизо М.,
Шкодич В.Ф., Стоянов О.В.

1016

Звездообразные полимеры декстран–полиакриламид: перспективы применения в нанотехнологиях

Ключевые слова: декстран, полиакриламид,
разветвленный полимер, полиэлектролит, наночастица



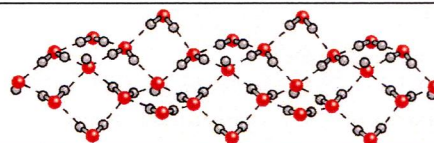
ОБЗОРЫ

Банару А.М., Словохотов Ю.Л.

1024

Кристаллогидраты органических соединений

Ключевые слова: кристаллогидрат, водный ассоциат,
планарный граф, протоноизбыточность



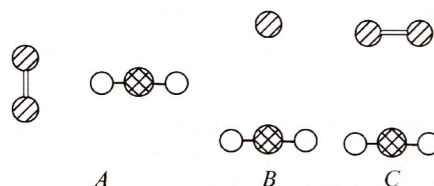
КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Богданчиков Г.А., Бакланов А.В.

1041

Расчет геометрии и энергии связи в ван-дер-ваальсовом комплексе этилена с кислородом C₂H₄-O₂

Ключевые слова: квантовая химия, MP2-расчеты,
ван-дер-ваальсовы комплексы с молекулярным кислородом,
энергия связи

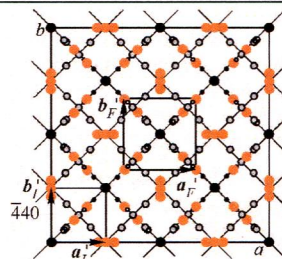


Борисов С.В., Магарилл С.А., Первухина Н.В.

1047

Кристаллографический анализ структуры борокарбосилицида скандия. Иерархия высокосимметричного упорядочения атомных групп и атомов

Ключевые слова: кристаллографический анализ,
катионные и анионные подрешетки,
борокарбосилицид скандия, иерархия упорядочения

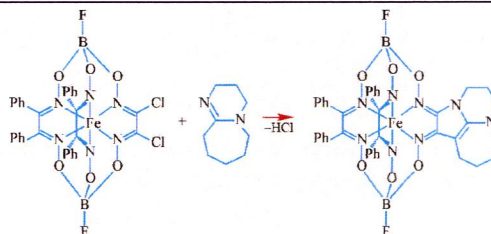


Вершинин М.А., Бурдуков А.Б., Первухина Н.В.,
Ельцов И.В.

1052

Строение продукта замещения атомов хлора в дихлорзамещенном клатрохелате Fe(II) на 1,8-диазабицикло[5.4.0]ундекан-7-ен

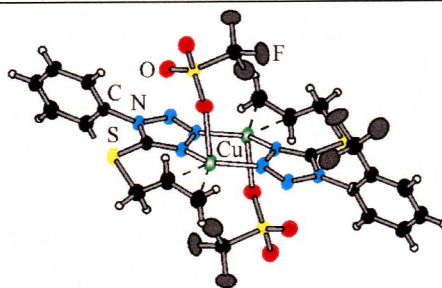
Ключевые слова: клатрохелаты, нуклеофильное замещение,
PСА, ЯМР



Слывка Ю.И.

**Кристаллическая структура
 π -комплекса $\text{Cu}(\text{CF}_3\text{SO}_3)$
с 5-(аллилтио)-1-[2-(трифторометил)-фенил]-
1*h*-тетразолом состава
[$\text{Cu}_2(\text{C}_{11}\text{H}_9\text{F}_3\text{N}_4\text{S})_2(\text{CF}_3\text{SO}_3)_2$]**

Ключевые слова: синтез, медь(I), π -комплекс, тетразол, кристаллическая структура

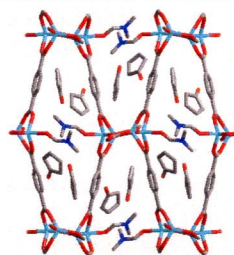


1056

Хан И.С., Самсоненко Д.Г., Федин В.П.

**Кристаллическая структура соединения
включения пористого металл-органического
полимера с 2-циклопентен-1-оном**

Ключевые слова: кристаллическая структура, пористые координационные полимеры, соединение включения, цинк

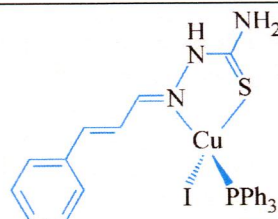


1058

Shahsavani E., Feizi N., Eigner V., Dusek M.,
Khalaji A.D.

**Crystal structure of copper(I) thiosemicarbazone
complex [CuI(PPh₃)(catsc)]**

Keywords: copper(I), thiosemicarbazone, crystal structure, single crystal

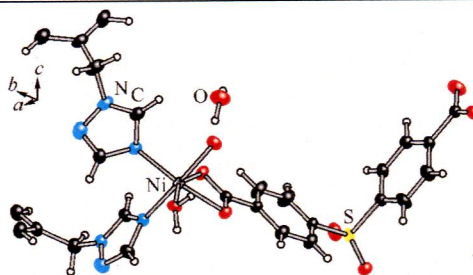


1061

Xu X.J.

**Crystal structure and magnetic property of a new
two-dimensional coordination polymer constructed
by 1,4-bis(1,2,4-triazol-1-ylmethyl)-benzene
and 4,4'-sulfonyldibenzoic acid**

Keywords: Ni(II) complex, 4,4'-sulfonyldibenzoic acid, 1,4-bis(1,2,4-triazol-1-ylmethyl)-benzene, crystal structure, magnetic property

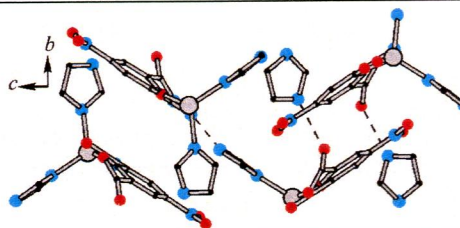


1066

Xu X.-J.

**Crystal structure and fluorescent properties
of a 1D Zn(II) coordination polymer based
on 5-nitro-1,3-benzenedicarboxylic acid**

Keywords: Zn(II) complex, 5-nitro-1,3-benzenedicarboxylic acid, crystal structure, one-dimensional chain, fluorescent property

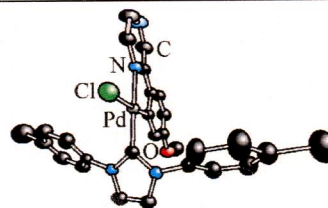


1071

Li H.M., Liu X.Q., Wang Z.Q., Fu W.J., Xu C.

**Crystal structures of two *N*-heterocyclic
carbene-palladacycles**

Keywords: *N*-heterocyclic carbene, palladacycle, C-H...Cl hydrogen bond, π - π interaction



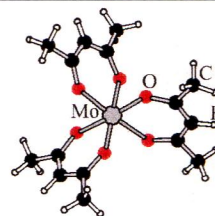
1075

Леднева А.Ю., Артёмкина С.Б., Пирязев Д.А.,
Фёдоров В.Е.

1079

**Строение и термические свойства комплекса
молибдена Mo(acac)₃**

Ключевые слова: молибден, ацетилацетон, синтез,
кристаллическая структура, термический анализ

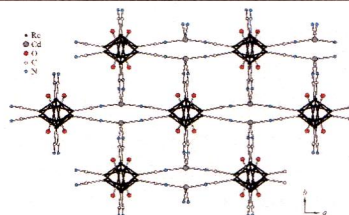


Леднева А.Ю., Вировец А.В., Наумов Н.Г.

1082

**Строение каркасного кластерного комплекса
K_{0,4}CS_{0,6}{Cd(H₂O)₂Re₆S₈(CN)₄(OH)(H₂O)} · 8H₂O**

Ключевые слова: синтез, рений, октаэдрический кластер,
кадмий, топологическая кристаллохимия, водородная связь



Содержание следующего номера — в конце журнала