

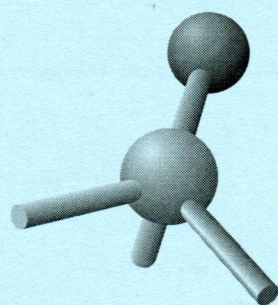


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 57
март
апрель
2016

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 3

НОВОСИБИРСК

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 57

Март-апрель

№ 3, 2016

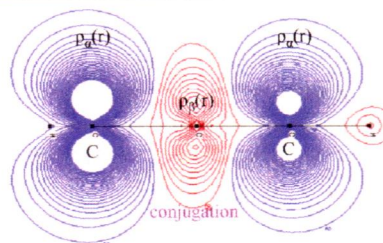
СО Д Е Р Ж А Н И Е

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Туровцев В.В., Чернова Е.М., Ситников В.Н.,
Емельяненко В.М., Орлов Ю.Д.

**Изучение электронного строения и свойств
пропаргильного радикала**

Ключевые слова: квантовая теория атомов в молекуле,
электронная плотность, сопряжение,
пропаргил, энтальпия образования,
энтальпия разрыва связи

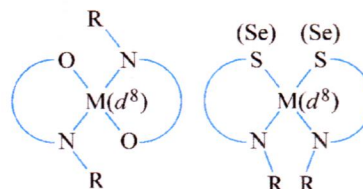


453

Харабаев Н.Н., Стариков А.Г., Минкин В.И.

**Квантово-химическое моделирование
транс- и цис-изомеров бис-хелатных азометиновых
комплексов Ni(II), Pd(II), Pt(II) с координационным
узлом MN₂Y₂ (Y = O, S, Se)**

Ключевые слова: квантовая химия,
молекулярная структура, хелатные комплексы металлов,
ароматические азометины

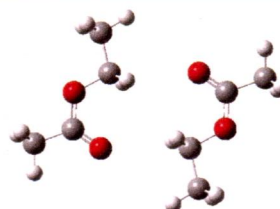


461

Красных Е.Л., Портнова С.В.

**Прогнозирование энтальпий испарения
на основе модифицированных индексов Рандича.
Сложные эфиры**

Ключевые слова: энтальпия испарения,
топологический индекс, индекс связанности,
сложные эфиры, прогнозирование

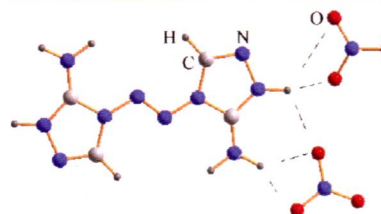


466

Корабельников Д.В., Журавлёв Ю.Н.

**Структура и электронные свойства
нитрата и перхлората
3,3'-диамино-4,4'-азо-1,2,4-триазола**

Ключевые слова: нитрат, перхлорат, комплексный
катион, кристаллическая структура, химическая связь,
электронные состояния

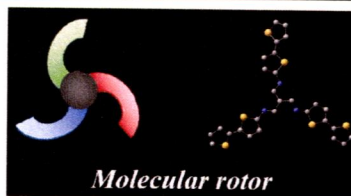


475

Gorgani S.S., Samadizadeh M.

**Design of a new rotary molecular machine based on nitrogen inversion:
DFT investigation**

Keywords: rotary molecular machines, configuration changes, nitrogen inversion, aziridine, *ab initio* calculations



484

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Рядун А.А., Трифонов В.А., Надолинный В.А.,
Павлюк А.А., Рахманова М.И.

**Структура и свойства кристаллов
 $\text{Li}_2 - 2x\text{Mg}_2 + x(\text{MoO}_4)_3$ активированных
ионами меди**

Ключевые слова: ЭПР ионов переходных металлов, люминесценция, сцинтилляторы, кристаллы двойного молибдата

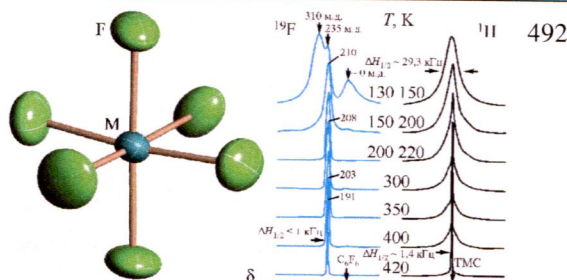


488

Давидович Р.Л., Удовенко А.А., Кавун В.Я.,
Логвинова В.Б., Ткачёв В.В.

**Кристаллическая структура и ЯМР исследование
гексафторидониобата(V)
и гексафторидотанталата(V)
4-амино-1,2,4-триазолия**

Ключевые слова: ниобий(V), тантал(V), фтор, 4-амино-1,2,4-триазол, кристаллическая структура, ЯМР, спектры

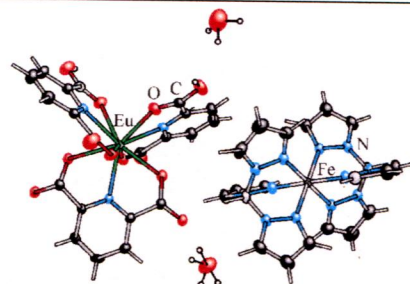


492

Шакирова О.Г., Лавренова Л.Г., Коротаев Е.В.,
Куратьева Н.В., Колоколов Ф.А., Бурдуков А.Б.

**Структура и спин-кроссовер в соединении
железа(II) с *трис*(пиразол-1-ил)метаном
и комплексным анионом $[\text{Eu}(\text{dipic})_2(\text{Hdipic})]^{2-}$**

Ключевые слова: координационное соединение, железо(II), *трис*(пиразол-1-ил)метан, комплексный анион $[\text{Eu}(\text{dipic})_2(\text{Hdipic})]^{2-}$, спин-кроссовер, термохроизм

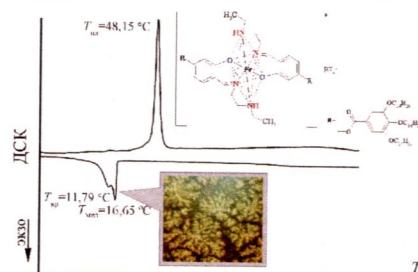


499

Червонова У.В., Груздев М.С., Колкер А.М.,
Акопова О.Б.

**Структура и фазовые переходы азометиновых
билигандных комплексов железа(III)
на основе 3,4,5-три(тетрадецилокси)бензоилокси-
4-салицилиден-N'-этил-N-этилендиамина**

Ключевые слова: комплексы железа(III), основание Шиффа, строение, масс-спектрометрия, мезоморфизм

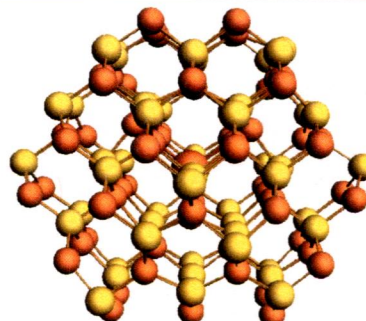


506

Кравцова А.Н., Сучкова С.А., Файн М.Б.,
Солдатов А.В.

***In silico* исследование атомной и электронной
структуры квантовых точек семейства CdTe,
допированных атомами редкоземельных
элементов**

Ключевые слова: квантовые точки, теллурид кадмия, допирование, редкоземельные элементы, атомная и электронная структура, компьютерное моделирование, XANES спектроскопия

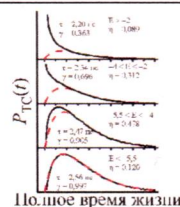


520

Волошин В.П., Наберухин Ю.И.

“Правильные” и “неправильные” водородные связи в жидкой воде

Ключевые слова: молекулярная динамика, структура воды, сетка водородных связей, время жизни водородных связей



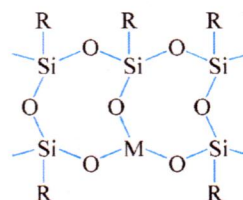
527

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Гардионов С.В., Шапкин Н.П., Баланов М.И., Васильева В.В., Разов В.И., Трухин В.О.

Исследование полиметаллоорганосилоксанов методами рентгеновской дифрактометрии и позитронной аннигиляционной спектроскопии

Ключевые слова: полиметаллоорганосилоксаны, рентгеновская дифрактометрия, позитронная аннигиляционная спектроскопия, области когерентного рассеяния, методика Миллера-Бойера

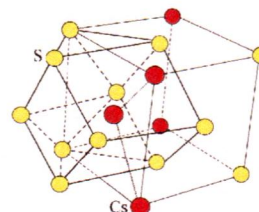


537

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

Структурообразующая роль крупных катионов в сульфидах с Cs⁺ и Tl⁺

Ключевые слова: кристаллографический анализ, крупные катионы Cs⁺, Tl⁺ в сульфидах, *F*-подрешетки, структурный тип PbS, "двумерные" упорядочения позиций атомов

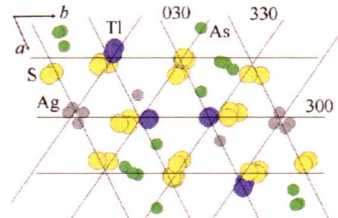


542

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

Кристаллографический анализ структур ряда Tl- и Ag- содержащих сульфидов. Корреляция состав–симметрия

Ключевые слова: кристаллографический анализ, катионные и анионные подрешетки, сульфиды с Tl⁺ и Ag⁺, стехиометрия катион/анион

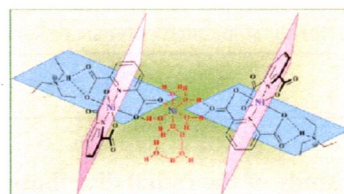


549

Jerome P., Bhuvanesh N.S.P., Karvembu R.

Synthesis and crystal structure of a trinuclear nickel(II) ONO pincer complex[Ni(Pydc)₂]₂[Ni(H₂O)₅]·2H₂O·2(C₆H₁₅N)

Keywords: trinuclear, Ni(II) pincer complex, 2,6-pyridinedicarboxylic acid, crystal structure

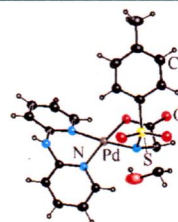


558

Mehdipour E., Bahrami H., Shamaei S., Amani V.

Crystal structure of palladium(II) complex with 2,2'-dipyridylamine and 4-toluenesulfonyl-L-serine

Keywords: crystal structure, palladium (II) complex, 4-toluenesulfonyl-L-serine, 2,2'-dipyridylamine, thermal gravimetric, differential thermal analyses, luminescent properties

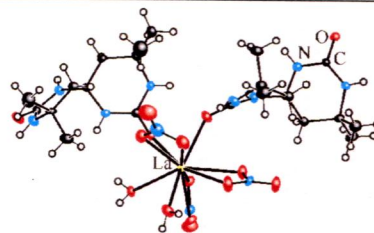


564

Нетребба Е.Е.

Кристаллическая структура нового комплекса бис(4,4,10,10-тетраметил-1,3,7,9-тетраазоспиро-[5.5]ундекан-2,8-дион-О)-диаква-трис-(нитрато-О,О')-лантана

Ключевые слова: лантан, спирокарбон, моноядерный, билигандный, комплекс, структура, ИК, РСА, РФА

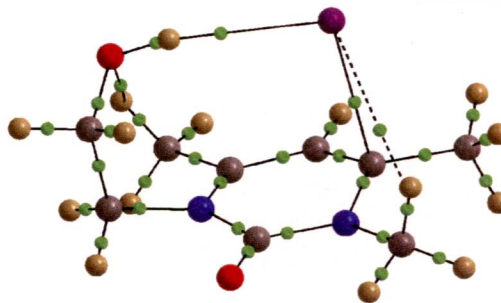


572

Литвинов И.А., Воронина Ю.К., Галяметдинова И.В., Шашин М.С., Семенов В.Э., Резник В.С.

Молекулярная и кристаллическая структура 1-(2-гидроксиэтил)-1,2-дигидро-3,4,6-триметил-2-оксопиримидинийиодида – продукта N-алкилирования ксимедона

Ключевые слова: ксимедон, молекулярная структура, кристаллическая структура, нековалентные взаимодействия, Г...л взаимодействия, электронная структура, топологический анализ



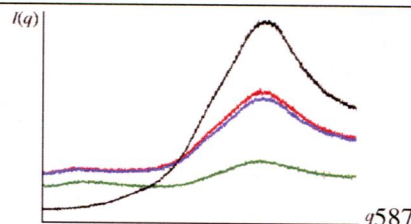
579

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Миргород Ю.А.

Малоугловое рентгеновское рассеяние системы триацетат гадолиния – ундекан – вода

Ключевые слова: малоугловое рентгеновское рассеяние, триацетат гадолиния, ундекан, вода, гидротропы, ламеллярные мицеллы, критический параметр упаковки, кооперативный эффект



587

ОБЗОР

Федотов М.А.

Применение ядерного магнитного резонанса для исследования строения комплексов платиновых металлов в водных растворах

Ключевые слова: $^{99,101}\text{Ru}$, ^{103}Rh , ^{105}Pd , ^{187}Os , ^{195}Pt ЯМР, комплексы платиновых металлов, водные растворы, координатный сдвиг, неорганические лиганды, аминокислотные лиганды, радиоактивные отходы

99, 101 Ru 3/2, 5/2	103 Rh 1/2	105 Pd 5/2
187 Os 1/2	Ir	195 Pt 1/2

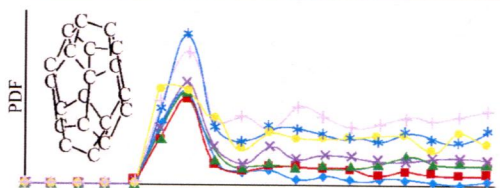
593

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Nikmaram F.R.

A comparative study of the radial distribution of hydrogen on C_{20} , C_{19}Si and C_{19}B cage fullerenes: A Monte Carlo simulation

Keywords: boron, silicon, C_{20} fullerene, H_2 radial distribution, Monte Carlo

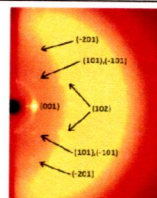


644

Сухих А.С., Басова Т.В., Громилов С.А.

Разработка методики рентгенографического исследования тонких слоев на примере фталоцианина кобальта

Ключевые слова: фталоцианин кобальта, рентгенографическое исследование тонких пленок

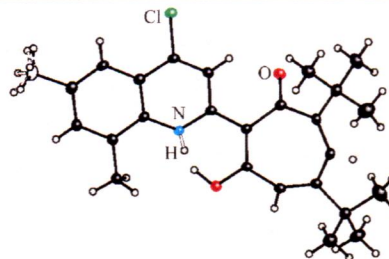


648

Ткачёв В.В., Саяпин Ю.А., Шилов Г.В.,
Комиссаров В.Н., Алдошин С.М., Минкин В.И.

**Молекулярная структура 5,7-ди(*трет*-бутил)-
2-(6,8-диметил-4-хлорхинолин-2-ил)-3-
гидрокситропона с двумя таутомерными
формами**

Ключевые слова: 1,3-трополоны, внутримолекулярная
водородная связь, рентгеноструктурный анализ

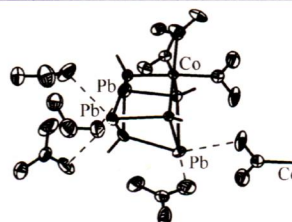


652

Храненко С.П., Куратьева Н.В., Корольков И.В.,
Громилов С.А.

**Кристаллическая структура
[Pb₃(OH)₄Co(NO₂)₃](NO₃)(NO₂) · 2H₂O**

Ключевые слова: свинец, кобальт, комплекс,
рентгеноструктурный анализ, рентгенофазовый анализ,
кристаллохимия

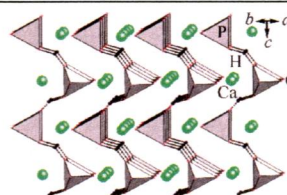


655

Ouerfelli N., Zid M.F.

**New polymorph of CaHPO₄ (monetite): synthesis
and crystal structure**

Keywords: calcium hydrogenphosphate, polymorphs,
synthesis, single crystal x-ray diffraction, monetite,
crystal structure

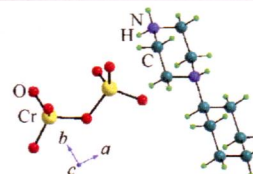


658

Chebhi H., Ben Smail R., Zid M.F.

**Crystal structure of 1-cyclohexylpiperazine-1,4-diium
dichromate (VI)**

Keywords: organic dichromate, synthesis,
single crystal X-ray diffraction, crystal structure



662

Содержание следующего номера — в конце журнала