

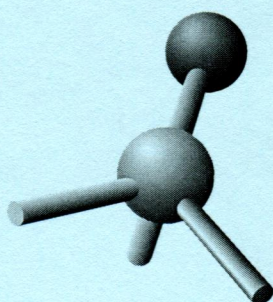


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 57  
ИЮНЬ  
ИЮЛЬ  
2016

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 5

НОВОСИБИРСК

**ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ**  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 57

Июнь-июль

№ 5, 2016

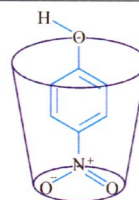
**СОДЕРЖАНИЕ**

**ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ**

Киселёв С.С., Борисов Ю.А.

**Комплексы  $\alpha$ -,  $\beta$ - и  $\gamma$ - циклодекстринов с нитрофенолами. Теоретическое исследование строения и энергетики**

**Ключевые слова:** циклодекстрины, нитрофенолы, комплексы внедрения, DFT

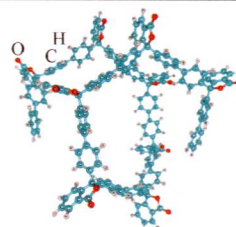


897

Мацевич О.В., Янборисов В.М., Самигуллина З.С.

**Квантово-химическое моделирование гомополиконденсации псевдохлорангидридов ароматических *o*-кетокарбоновых кислот**

**Ключевые слова:** поликонденсация, учет растворителя, активный центр, переходное состояние, энтальпия реакции, полиариленфтальды

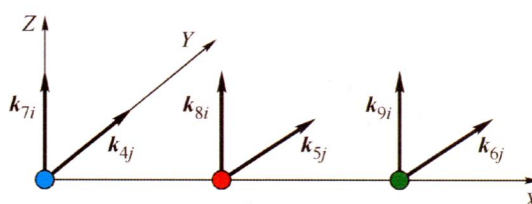


903

Ивашкевич О.А., Матулис В.Э., Нагорный Ю.Е., Репченков В.И.

**Гармоническое силовое поле системы связанных атомов**

**Ключевые слова:** квадратичное силовое поле, условия равновесия, структура матрицы силовых постоянных

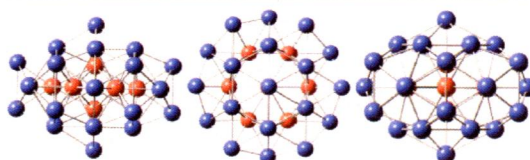


910

Song W., Wang B., Guo K., Zhang W.

**Structures and magnetic properties of  $Ni_n$  ( $n = 36 - 40$ ) clusters from first-principles calculations**

**Keywords:** nickel clusters, first-principle, magnetic properties

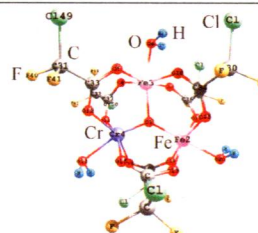


916

Morsali A., Beyramabadi S.A., Chegini H., Bozorgi N., Moghadam-Elahabad A.

**Experimental and theoretical characterization of  $Fe_2Cr$  trinuclear-oxo-centered complex with a  $CF_2ClCOO^-$  bridge**

**Keywords:** synthesis, oxo-centered, trinuclear, carboxylate,  $CF_2ClCOO^-$ , DFT, AIM



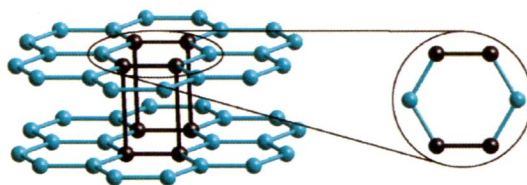
923

Беленков Е.А., Грешняков В.А.

932

### Структура и некоторые физико-химические свойства углеродной и кремниевой фаз с алмазоподобной решеткой LA3

**Ключевые слова:** моделирование, алмаз, кремний, алмазоподобные фазы, атомная структура, электронные свойства, фазовый переход

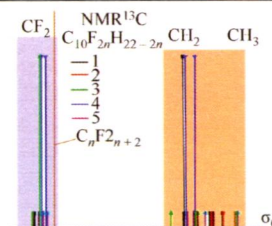


## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Игнатъева Л.Н., Бузник В.М.

### Квантово-химическое ЯМР исследование разветвленных и неразветвленных фторполимеров

**Ключевые слова:** квантово-химические расчеты, низкомолекулярные фторполимеры, спектры ЯМР  $^{19}\text{F}$  и  $^{13}\text{C}$  фторуглеродных молекул

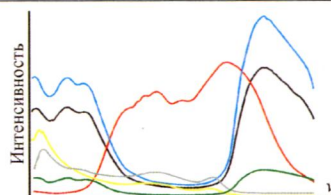


940

Полищук С.А., Игнатъева Л.Н., Марченко Ю.В., Бузник В.М.

### Висмутсодержащие фторидные стекла

**Ключевые слова:** фториды индия, циркония, висмута, бария, фторидные, фторцирконатные стекла, ИК, КР, ЯМР  $^{19}\text{F}$ , фотолюминесценция

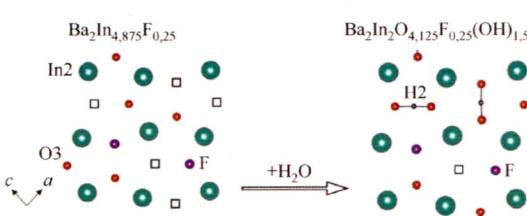


950

Анимица И.Е., Тарасова Н.А., Денисова Т.А., Бакланова Я.В.

### Состояние протонов в гидратированных фторзамещенных браунмиллеритах $\text{Ba}_2\text{In}_2\text{O}_{5-0.5y}\text{F}_y \cdot n\text{H}_2\text{O}$

**Ключевые слова:** браунмиллерит, анионное допирование, MAS ЯМР  $^1\text{H}$ , колебательная спектроскопия, протонная подвижность

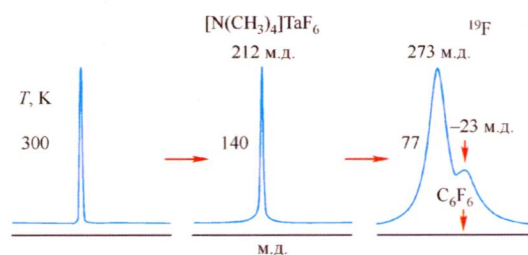


959

Кавун В.Я., Слободюк А.Б., Диденко Н.А., Давидович Р.Л.

### Особенности ионной подвижности и фазовые переходы в гексафторокомплексных соединениях тантала(V), ниобия(V) и титана(IV) с катионом тетраметиламмония

**Ключевые слова:** гексафторокомплексы, ниобий(V), тантал(V), титан(IV), тетраметиламмоний, ионная подвижность, фазовые переходы, спектры ЯМР  $^{19}\text{F}$ ,  $^1\text{H}$ , ДСК

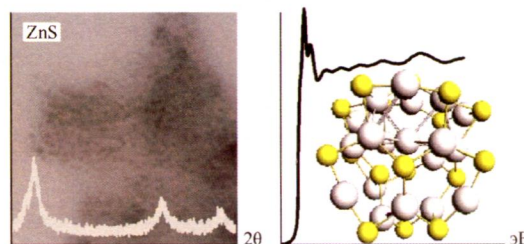


966

Кравцова А.Н., Панкин И.А., Будник А.П., Бутова В.В., Ластовина Т.А., Солдатов А.В.

### Синтез и моделирование структуры квантовых точек на основе ZnS

**Ключевые слова:** квантовые точки, сульфид цинка, микроволновый синтез, поверхностно-активные вещества, атомная и электронная структура, компьютерное моделирование, XANES спектроскопия



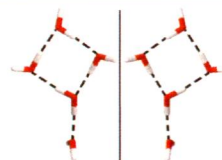
975

## СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Хахалин А.В., Градобоева О.Н.

**Метод определения и классификации хиральности водных сред**

**Ключевые слова:** хиральность, водные кластеры, численный метод, матрицы

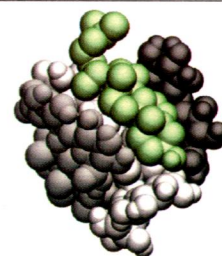


983

Зеликман М.В., Ким А.В., Медведев Н.Н.

**Структура малых ассоциатов глицирризиновой кислоты с холестерином в водном растворе. Молекулярно-динамическое моделирование**

**Ключевые слова:** молекулярно-динамическое моделирование, водные растворы, глицирризиновая кислота, холестерин, структура ассоциатов, механизм гость-хозяин

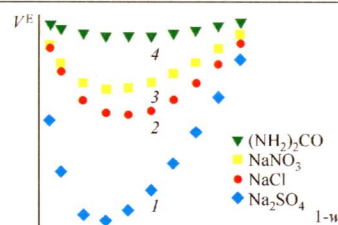


990

Королёв В.П.

**Объемные свойства и гидратные числа компонентов систем вода—соль, вода—мочевина и вода—мочевина—соль**

**Ключевые слова:** кажущиеся и парциальные объемы, гидратные числа, водные растворы, мочевины, соли натрия



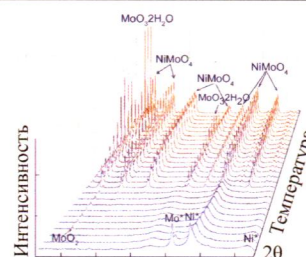
997

## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Булавченко О.А., Смирнов А.А. Хромова С.А.,  
Винокуров З.С., Ищенко А.В., Яковлев В.А.,  
Цыбуля С.В.

**Рентгенографическое исследование в условиях *in situ* процесса восстановления водородом  $\text{NiMoO}_4\text{-SiO}_2$**

**Ключевые слова:** смешанные оксиды, *in situ* рентгенография, восстановление

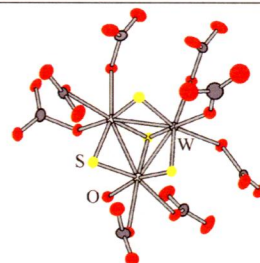


1005

Ларичева Ю.А., Гущин А.Л., Абрамов П.А.,  
Соколов М.Н.

**Строение и термические свойства сульфидного кластера вольфрама, координированного тиомочевинной**

**Ключевые слова:** трехъядерный сульфидный кластер, вольфрам, тиомочевина, кристаллическая структура, квантово-химические расчеты

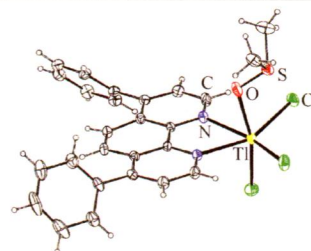


1012

Ghadermazi M.

**Characterization, luminescent properties, crystal structure determination, and thermal properties of  $[\text{Tl}(\text{Ph}_2\text{phen})\text{Cl}_3(\text{DMSO})]$**

**Keywords:** synthesis, Tl(III), 4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline, crystal structure, thermal gravimetric, differential thermal analysis, luminescent properties



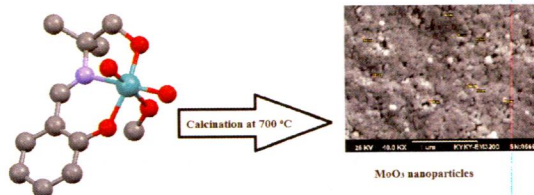
1020

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ  
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Saeednia S., Iranmanesh P., Hatefi Ardakani M., Ebadinejad N.

1026

**Sonochemical and solvothermal synthesis of methanol {2-[(2-hydroxy-1,1-dimethylethylimino)-methyl]phenolato} dioxidomolybdenum(VI) complex and its decomposition to MoO<sub>3</sub> nanoparticles**



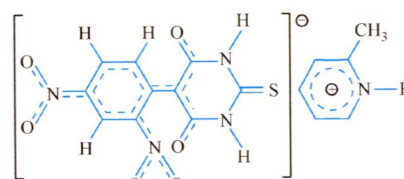
**Keywords:** nanosized MoO<sub>3</sub>, Mo(VI) tridentate Schiff base complex, solvothermal, sonochemical, thermal analysis

**СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ**

Mangaiyarkarasi G., Sridevi G., Poornima Devi P., Kalaivani D.

1035

**2-Methylpyridinium 5-(2,4-dinitrophenyl)-6-oxo-2-thioxo-1,2,3,6-tetrahydropyrimidin-4-olate: Synthesis, crystal structure, and biological evaluation**



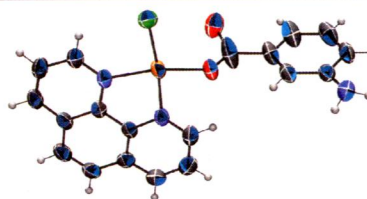
2-Methylpyridinium 5-(2,4-dinitrophenyl)-6-oxo-2-thioxo-1,2,3,6-tetrahydropyrimidin-4-olate (carbon-bonded anionic sigma complex)

**Keywords:** carbon-bonded anionic sigma complex, 2-thiobarbituric acid, 1-chloro-2,4-dinitrobenzene, single crystal X-ray diffraction studies, anticonvulsant activity, maximal electroshock method

Batool S.S., Gilani S.R., Tahir M.N., Harrison W.T.A.

1041

**Structural characterization of a mixed-ligand complex of copper(II) with 1,10-phenanthroline and the *m*-aminobenzoate ion**



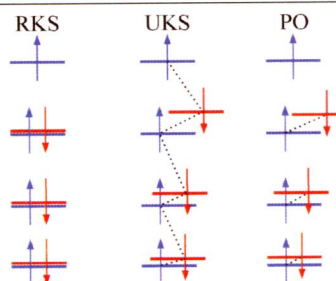
**Keywords:** synthesis, copper(II), 1,10-phenanthroline, *m*-aminobenzoate ion, coordination polymer

**ОБЗОРЫ**

Рузанкин С.Ф., Шубин А.А., Ковальский В.Ю., Зильберберг И.Л.

1047

**Анализ спин-поляризованных решений в базисе парных орбиталей**



**Ключевые слова:** теория функционала плотности, решения с нарушенной спиновой симметрией, базис парных орбиталей, спиновая плотность, гидроксид железа, диссоциация C—H связи, Fe(IV)=O, Fe(III)—O•, диссоциация группы V=O

**КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ**

Liu X., Li L., Qian Z., Wang X.

1066

**Theoretical investigation of the spectroscopic constants of aluminum carbide in the ground state**

AIC

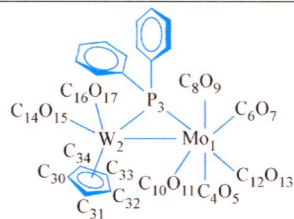
**Keywords:** spectroscopic constants, potential energy curves, extrapolation, AIC

Wang J., Shi X., Cao W.

**Geometries and properties of the heterobimetallic phosphido-bridged complex:**



**Keywords:** DFT, metal-metal bond, semi-bridging carbonyl, AIM, NBO

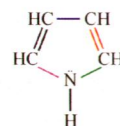


1070

Муллов Н.У., Файзиева М., Исломов З.З., Юсупова Дж.

**Протоноакцепторные способности гетероциклических соединений по полосам валентных колебаний групп N—H ассоциированных молекул**

**Ключевые слова:** гетероциклические соединения, производные пиррола, амфотерные свойства, протоноакцепторная способность, гетероатом, самоассоциация, индукционное влияние

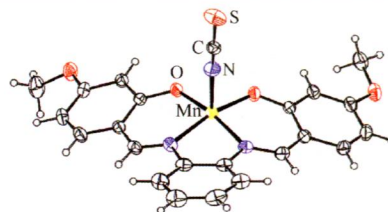


1075

Ghaemi A., Keyvani B., Rayati S., Zarei S., Notash B.

**Crystal structure of a new manganese(III) complex with tetradentate Schiff base N, N'-O-phenylenebis-(4-methoxysalicylideneimine)**

**Keywords:** synthesis, tetradentate Schiff base ligand, Mn(III), crystal structure, N,N'-O-phenylenebis-(4-methoxysalicylideneimine), X-ray diffraction analysis

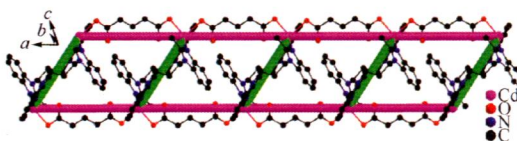


1078

Zhang X., Liu Y.G., Cui G.H.

**Crystal structures and luminescence properties of a one-dimensional cadmium coordination polymer derived from flexible bis(imidazole) ligand**

**Keywords:** Cd(II) complex, crystal structure, luminescence property

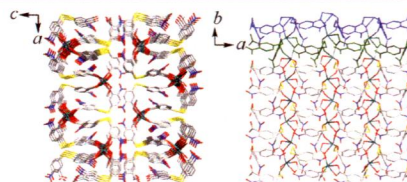


1082

Yuan X.-M., Sun D., Li D.-P., Xu H.-J.

**A new Cd(II) coordination polymer constructed by a flexible carboxylate ligand**

**Keywords :** Cd(II) complex, coordination polymer, disulfide ligand

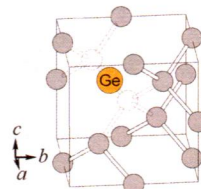


1087

Надолинный В.А., Комаровских А.Ю., Пальянов Ю.Н., Куприянов И.Н., Борздов Ю.М., Рахманова М.И., Юрьева О.П., Вебер С.Л.

**Исследование методом ЭПР германий-вакансионного дефекта в алмазе**

**Ключевые слова:** алмаз, электронный парамагнитный резонанс, люминесценция, дефект, германий

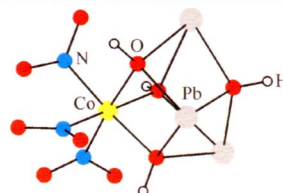


1092

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

**Семейство кристаллических структур с участием катионов  $[\text{Pb}_3(\text{OH})_4\text{Co}(\text{NO}_2)_3]^{2+}$**

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

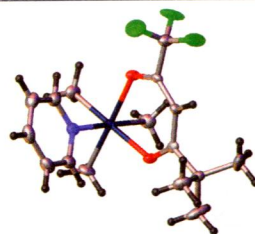


1095

Доровских С.И., Пирязев Д.А., Байдина И.А.,  
Жаркова Г.И., Морозова Н.Б.

**Строение и термические свойства  
триметилпивалоилтрифторацетонат  
пиридинплатины(IV)**

**Ключевые слова:** платина(IV), β-дикетон,  
рентгеноструктурный анализ, термогравиметрия

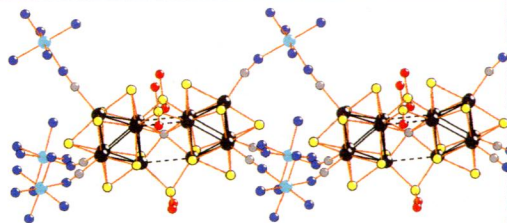


1100

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

**Строение координационного полимера на основе  
биооктаэдрического кластерного аниона  
[Re<sub>12</sub>CS<sub>14</sub>(SO<sub>2</sub>)<sub>3</sub>(CN)<sub>6</sub>]<sup>6-</sup> и аминоккомплексов Ni<sup>2+</sup>**

**Ключевые слова:** синтез, рений, биооктаэдрический  
кластерный комплекс, координационный полимер,  
кристаллическая структура



1104

**КОНФЕРЕНЦИИ, СИМПОЗИУМЫ, НАУЧНЫЕ ШКОЛЫ**

**VIII Национальная кристаллохимическая  
конференция  
Суздаль, 29.05-03.06.2016**



1107

**Содержание следующего номера — в конце журнала**