

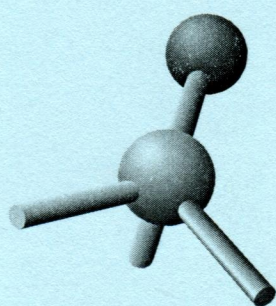


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

Том 57  
ноябрь  
декабрь  
**2016**

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



**№ 8**

НОВОСИБИРСК

ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 57

Ноябрь-декабрь

№ 8, 2016

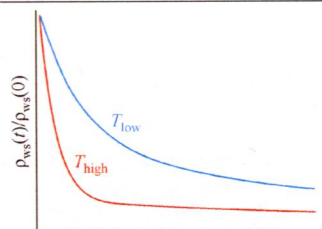
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Морозов В.А.

**Кинетика релаксации фотовозбужденных состояний в цепочке обменных кластеров в приближении среднего поля**

**Ключевые слова:** обменный кластер, спин-кроссовер, светоиндуцированные ян-теллеровские переходы, кинетика структурной релаксации

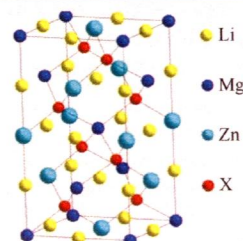


1585

Басалаев Ю.М., Стародубцева М.В.

**Моделирование кристаллов полухейслеровского типа со структурой халькопирита:  $\text{Li}_2\text{MgZnX}_2$  ( $X = \text{N, P, As, Sb}$ )**

**Ключевые слова:** халькопирит, полухейслеровское соединение, зонная структура, электронная плотность, деформационная плотность, химическая связь

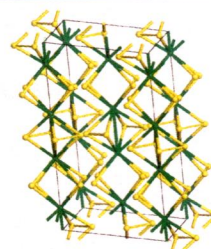


1591

Козлова М.Н., Еняшин А.Н., Фёдоров В.Е.

**Квантово-химическое исследование пайерлсовского состояния квазиодномерных сульфидов ванадия и ниобия**

**Ключевые слова:** сульфид ванадия, сульфид ниобия, хлорид ниобия, электронная структура, метод функционала электронной плотности

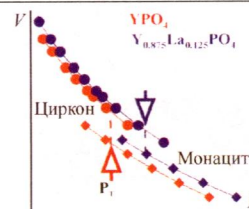


1597

Шеин И.Р., Шалаева Е.В.

**Барический фазовый переход циркон–монацит в  $\text{Y}_{1-x}\text{La}_x\text{PO}_4$ : расчеты из первых принципов**

**Ключевые слова:** ортофосфаты  $\text{LaPO}_4$ - $\text{YPO}_4$ , *ab initio* расчеты, барические превращения, фазовая стабильность

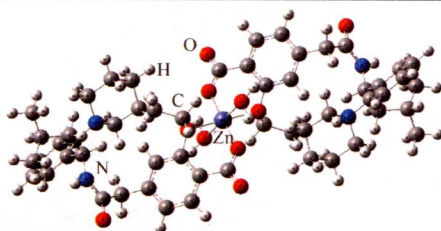


1606

Sadaoui-Kacel S., Zaater S., Bensouilah N., Djebbar S.

**Novel repaglinide complexes with manganese(II), iron(III), copper(II) and zinc(II): Spectroscopic, DFT characterization and electrochemical behavior**

**Keywords:** metal complexes, repaglinide ligand, synthesis, DFT, electrochemical behaviour

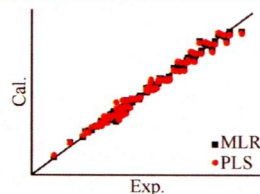


1613

Liao L.-M., Li J.-F., Lei G.-D.

**Structural characterization and prediction of kovats retention indices (RI) for alkylbenzene compounds**

**Keywords:** alkylbenzene, retention index, structural descriptors, QSRR

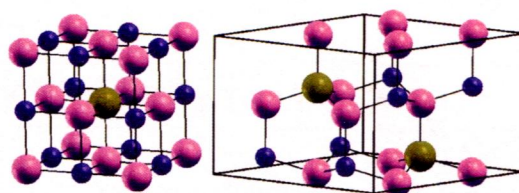


1625

Банников В.В., Кудрякова В.С., Елагин А.А., Баранов М.В., Бекетов А.Р.

**Электронное строение и магнитные свойства гексагональной и кубической модификаций нитрида алюминия, активированного примесями *sp*-элементов (В, С, О)**

**Ключевые слова:** нитрид алюминия, электронная плотность, химическая связь, *ab initio* моделирование



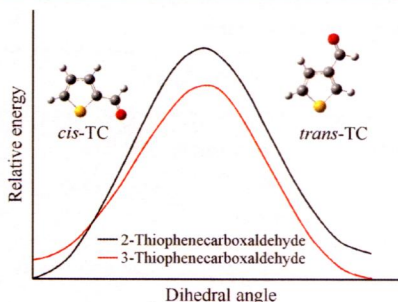
1633

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Umar Y., Tijani J., Abdalla S.

**Density functional theory studies of conformational stabilities and rotational barriers of 2- and 3-thiophenecarboxaldehydes**

**Keywords:** density functional method, rotational barrier, vibrational wavenumber, solvent effect, thiophenecarboxaldehyde, conformational preference, infrared spectra, geometry optimization, polarizable continuum model, potential energy distribution (PED)

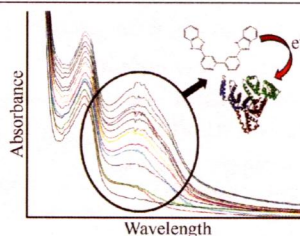


1640

Swarnalatha K., Rathnamala P., Babu A.A., Bhuvanesh N.

**Structural characterization, photophysical and BSA binding interaction studies of 4,4'-bis(benzimidazolyl)-2,2'-bipyridine**

**Keywords:** 4,4'-bis(benzimidazolyl)-2,2'-bipyridine, crystal structure, energy transfer, BSA binding



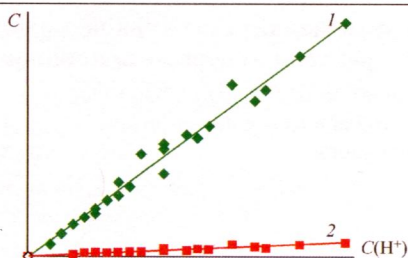
1649

**СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ**

Подлипская Т.Ю., Булавченко А.И.

**Структура и локализация гидратированного протона в обратных мицеллах TRITON N-42 при инъекционной солюбилизации растворов HCl**

**Ключевые слова:** обратные мицеллы, оксигетилированные ПАВ, солюбилизация, ИК-Фурье спектроскопия, ассоциаты гидратированного протона



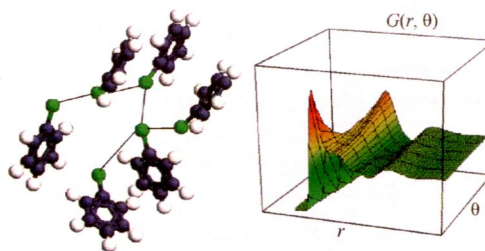
1655

Алексеев Е.С., Богдан Т.В.

1662

### Галоген-агрегация в растворах хлорбензол–*o*-дихлорбензол

**Ключевые слова:** растворы хлорбензол–*o*-дихлорбензол, молекулярно-динамическое моделирование, локальная структура, галоген-агрегация, функция радиально-углового распределения, функция радиального распределения, коэффициенты самодиффузии, локальные дипольные моменты



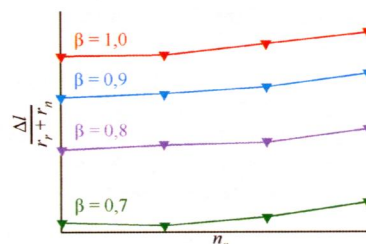
Кузнецов В.С., Усольцева Н.В., Блинов А.П., Жарникова Н.В., Смирнова А.И., Баделин В.Г.

1671

### Структурные, электростатические и термодинамические свойства поверхности сферических мицелл в растворах гомологов *n*-алкилсульфатов натрия.

#### I. Структурные характеристики

**Ключевые слова:** ионные сферические мицеллы, структура поверхности, двойной электрический слой, числа агрегации



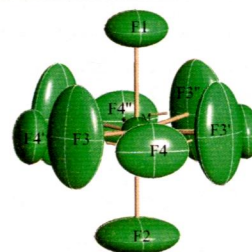
## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Удовенко А.А., Давидович Р.Л., Логвинова В.Б., Ткачѐв В.В.

1679

### Кристаллическая структура гексафторидониобата(V) и гексафторидотанталата(V) тетраметиламмония

**Ключевые слова:** ниобий(V), тантал(V), фтор, тетраметиламмоний, кристаллическая структура

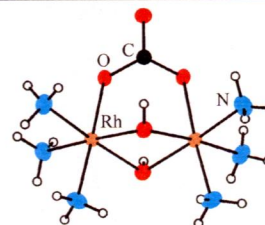


Воробѐва С.Н., Байдина И.А., Корольков И.В.

1683

### Исследование кристаллической структуры димерного комплекса родия(III) [(NH<sub>3</sub>)<sub>6</sub>Rh<sub>2</sub>(μ-CO<sub>3</sub>)(μ-OH)<sub>2</sub>](NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O

**Ключевые слова:** синтез, родий, триаммины, димерные комплексы, координационные соединения, кристаллическая структура

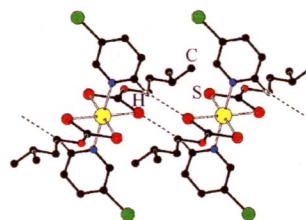


Neerupama, Kour G., Sachar R., Kant R.

1688

### Characterization of the adducts of bis(O-isoamyldithiocarbonato) nickel(II) with heterocyclic amines and X-ray structure of bis(O-isoamyldithiocarbonato)-bis(3-bromopyridine)nickel(II)

**Keywords:** synthesis, dithiocarbonates, crystal structure, direct methods, interactions, octahedral



Наумов Д.Ю., Храненко С.П., Куратѐва Н.В., Панченко А.В., Громилов С.А.

1695

### Новые данные о строении α-транс-[Pd(NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>]

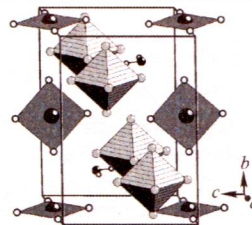
**Ключевые слова:** палладий, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия, неупорядоченная структура



Губанов А.И., Даниленко А.М., Смоленцев А.И.,  
Куратьева Н.В., Венедиктов А.Б., Коренев С.В.

**Структурное исследование солей,  
содержащих ионы  $[Pd(NH_3)_4]^{2+}$  и  $[IrF_6]^{2-}$**

**Ключевые слова:** синтез, координационные соединения,  
двойные комплексные соли, кристаллическая структура,  
палладий, иридий, фторокомплексы

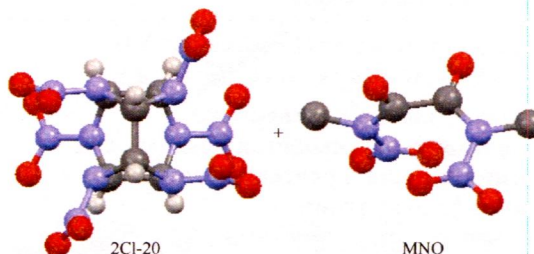


1701

Алиев З.Г., Гончаров Т.К., Алдошин С.М.,  
Дашко Д.В., Росляков А.Г., Шишов Н.И.,  
Милехин Ю.М.

**Структура и свойства бимолекулярного  
кристалла (2CL-20 + MNO)**

**Ключевые слова:** CL-20, 2,4,6,8,10,12-гексанитро-  
2,4,6,8,10,12-гексаазаизоворцитан,  
полициклический нитроамин,  $N^1-N^2$ -диметил- $N^1-N^2$ -  
динитрооксамид, рентгеноструктурный анализ,  
кристаллическая и молекулярная структура,  
энергетические бимолекулярные кристаллы,  
термостабильность

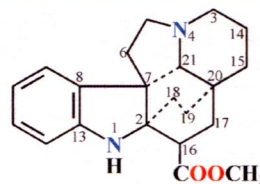


1708

Адизов Ш.М., Ташходжаев Б., Кунафиев Р.Ж.,  
Мирзаева М.М., Upadhyay P.P., Юлдашев П.Х.

**Кристаллическая структура индолиновых  
алкалоидов копсинилама, копсинина и его солей**

**Ключевые слова:** индолиновые алкалоиды, копсинилам,  
копсинин, галоидные солевые формы, PCA



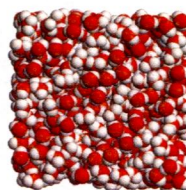
1715

**ОБОЗРЫ**

Теплухин А.В.

**Короткодействующие потенциальные функции  
в компьютерном моделировании воды  
и водных растворов**

**Ключевые слова:** вода, Монте-Карло, метод Эвальда,  
параллельные вычисления



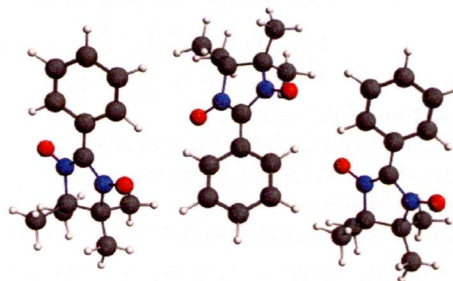
1723

**КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ**

Федоренко А.Д., Мазалов Л.Н., Калинин А.В.

**Применение метода РФЭС для изучения  
электронного строения диамагнитной молекулы  
*n*-нитроанилина и нитроксильного радикала  
4,4,5,5-тетраметил-2-фенил-4,5-дигидро-1*H*-  
имидазол-3-оксид-1-оксила**

**Ключевые слова:** *n*-нитроанилин,  
нитроксильный радикал, рентгеновская фотоэлектронная  
спектроскопия (РФЭС), сателлитная структура, TD-DFT

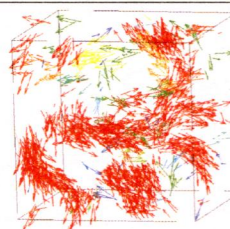


1753

Аникеенко А.В., Маленков Г.Г., Наберухин Ю.И.

**Визуализация вихреподобных коллективных  
движений в компьютерной модели жидкого  
аргона**

**Ключевые слова:** жидкости, вода, жидкий аргон,  
молекулярная динамика, коллективные эффекты,  
вихревые движения

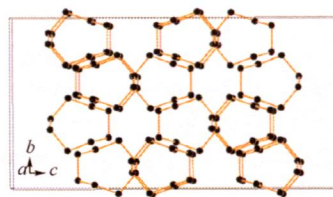


1758

Громилов С.А., Пирязев Д.А., Егоров Н.Б.,  
Акимов Д.В.

**Рентгеноструктурное исследование  $\alpha$ - $^{34}\text{S}$   
в интервале 100–363 К**

**Ключевые слова:** сера, изотоп,  
рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия

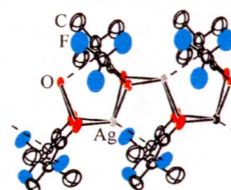


1761

Федосеев И.С., Викулова Е.С., Ильин И.Ю.,  
Смоленцев А.И., Галлямов М.Р., Морозова Н.Б.

**Кристаллическая структура (1,1,1-трифторо-5,5-  
диметилгексан-2,4-дионато)серебра(I)**

**Ключевые слова:** серебро(I),  $\beta$ -дикетонаты,  
рентгеноструктурный анализ, термогравиметрия

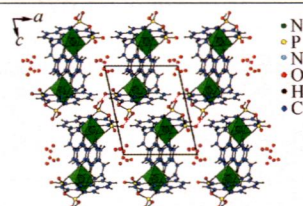


1765

Cherni S., Zid F., Driss A.

**Crystal structure of a [(dihydrogen pyrophosphato-  
 $\text{K}^2\text{O}, \text{O}'$ ) bis(1,10-phenanthroline- $\text{N}, \text{N}'$ )nickel(II)]2.5-  
hydrate  $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{P}_2\text{O}_7)(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_2] \cdot 2.5\text{H}_2\text{O}$**

**Keywords:** nickel pyrophosphate, hydrothermal synthesis,  
X-ray diffraction,  $\pi \cdots \pi$  stacking interactions, hydrogen bonds

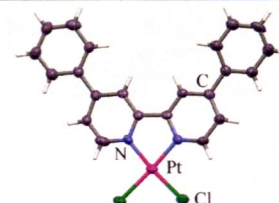


1769

Shamaei S., Heidari A., Amani V.

**Characterization, luminescent properties,  
and crystal structure determination  
of  $[\text{Pt}(\text{Ph}_2\text{bipy})\text{Cl}_2]$**

**Keywords:** synthesis, crystal structure, platinum(II) complex,  
4,4'-diphenyl-2,2'-bipyridine, luminescent properties

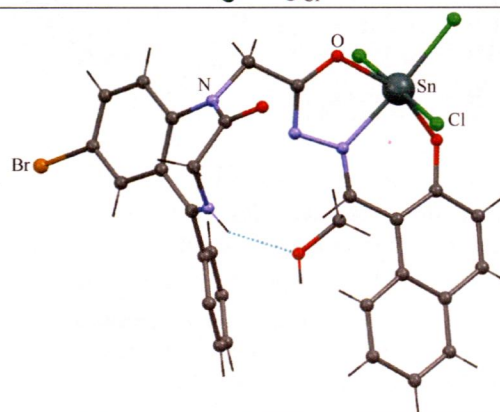


1773

Яловский Г.В., Сейфуллина И.И., Павловский В.И.,  
Андронати С.А., Кравцов В.Х.

**Молекулярная структура и свойства  
комплекса олова(IV) с 1-[(2-гидрокси-1-нафтил)  
метилен-гидразино]карбонилметил-7-бром-  
5-фенил-1,2-дигидро-3H-1,4-бенздиазепин-  
2-оном**

**Ключевые слова:** синтез, тетрагидрид олова,  
1-гидразинокрбонилметил-7-бром-5-фенил-  
1,2-дигидро-3H-1,4-бенздиазепин-2-он, гидазепам,  
2-гидрокси-1-нафтальдегид, гидразоны,  
координационные соединения, темплатный синтез,  
молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ

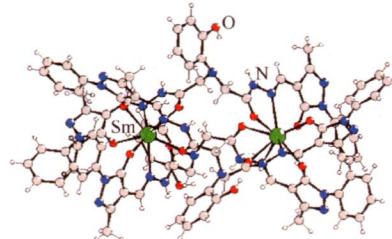


1778

Шульгин В.Ф., Бекирова З.З., Александров Г.Г.,  
Ерёменко И.Л.

**Координационное соединение самария(III)  
с ацилдигидразоном  
N-(2-гидроксифенил)иминодиуксусной кислоты  
и 5-гидрокси-3-метил-1-фенил-4-формилпиразола**

**Ключевые слова:** 4-формилпиразолон-5,  
ацилдигидразон, самарий(III), тройной геликат,  
рентгеноструктурный анализ

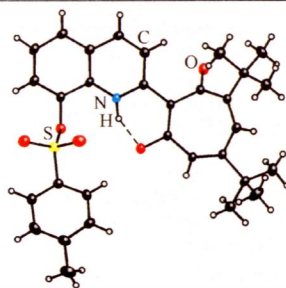


1782

Ткачёв В.В., Шилов Г.В., Алдошин С.М.

**Строение новой 8-гидроксихинолиновой  
лигандной системы с 1,3-трополоновым  
фрагментом**

**Ключевые слова:** 8-гидроксихинолин, 1,3-трополоны,  
рентгеноструктурный анализ,  
перспективы комплексообразования,  
перспективно новая полидентатная система  
с расширенными координационными возможностями

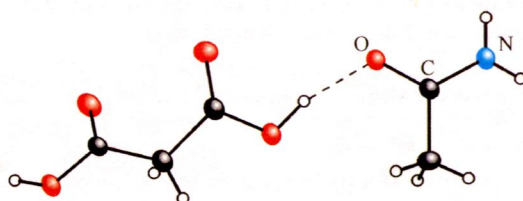


1786

Цыпленкова А.Ю., Кольцова О.В., Лобанов Н.Н.,  
Ершов М.А., Пыльчикова Ю.Ю.

**Кристаллическая и молекулярная структура  
двойного соединения малоновой кислоты  
с ацетамидом**

**Ключевые слова:** малоновая кислота, ацетамид,  
молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ



1789

**КОНФЕРЕНЦИИ, СИМПОЗИУМЫ, НАУЧНЫЕ ШКОЛЫ**

**ХIII МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
«СПЕКТРОСКОПИЯ КООРДИНАЦИОННЫХ  
СОЕДИНЕНИЙ»**

Туапсе, 11.09—17.09.2016



1792

**ХХII ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
«РЕНТГЕНОВСКИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ  
СПЕКТРЫ И ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ»**

Владивосток, 20.09—23.09.2016



1794

Указатель статей. Том 56 .....	1796
Авторский указатель. Том 56 .....	1806

Содержание следующего номера — в конце журнала