



ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

Том 58
май
июнь
2017

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 4

НОВОСИБИРСК

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

ТОМ 58

Май-июнь

№ 4, 2017

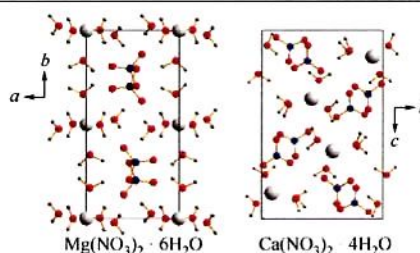
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Журавлёв Ю.Н., Корабельников Д.В.

Структура и электронные свойства нитратов магния и кальция и их кристаллогидратов из первых принципов

Ключевые слова: гексогидрат, тетрагидрат, нитрат, магний, кальций, кристаллическая структура, упругие постоянные, химическая связь, заряд, плотность электронных состояний



675

Маджидов Т.И., Гимадиев Т.Р., Малахова Д.А.,
Нугманов Р.И., Баскин И.И., Антипин И.С.,
Варнек А.А.

Соотношение «структура – реакционная способность» в реакциях Дильса–Альдера с использованием подхода конденсированных графов реакций

Ключевые слова: [4+2]π-циклоприсоединение, реакция Дильса–Альдера, константа скорости реакции, конденсированный граф реакции, химические реакции, хемоинформатика

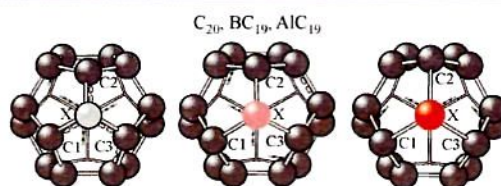


685

Molani F., Askari M.

A DFT study on the structural and electronic properties of small toxic gases on B- and Al-doped C_{20} fullerene

Keywords: heterofullerene, electronic structure, toxic gas sensing, density functional theory

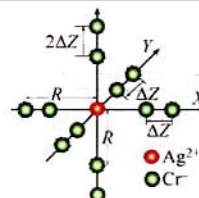


692

Zhang L.-J., Wu S.-Y., Kuang M.-Q., Hu X.-F., Li G.-L.

Theoretical studies of the spin Hamiltonian parameters and local structures for Ag^{2+} in AgCl and KCl crystals

Keywords: electron paramagnetic resonance, defect structures, Ag^{2+} , AgCl, KCl



702

Yang Y., Fang Y., Liu Q., Yang L., Hu S., Hu S., Wang D., Zhang H., Luo S.

Density functional theory insight into Eu(III) and Am(III) complexes with two 2,6-dicarboxypyridine diamide-type ligands

Keywords: density functional theory, second-order Moller-Plesset perturbation theory, selective extraction, natural bond orbital analysis



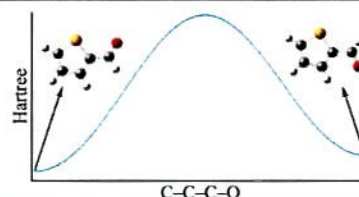
710

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Güneş E., Parlak C., Şenyel M.

DFT/TDDFT investigation on the electronic structures and spectral characteristics of C₅H₃XOS (X = H, F, Cl or Br)

Keywords: thiophene-2-carbaldehyde, DFT, TDDFT, halogen effect, solvent effect

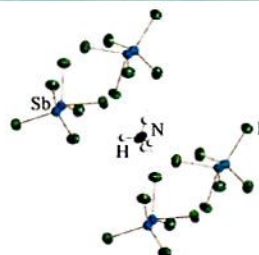


719

Земнухова Л.А., Удовенко А.А., Макаренко Н.В., Кузнецов С.И., Бабушкина Т.А.

Кристаллическая структура и параметры ЯКР ^{121,123}Sb тридекафторотетраантимоната(III) аммония NH₄Sb₄F₁₃

Ключевые слова: тридекафторотетраантимонат(III) аммония, синтез, кристаллическая структура, параметры ЯКР ^{121,123}Sb

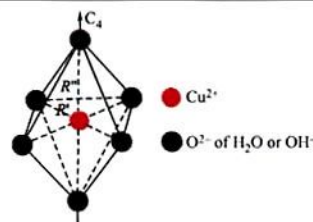


729

Li G.-L., Wu S.-Y., Kuang M.-Q., Hu X.-F., Xu Y.-Q.

Studies on the g-factors of the copper(II)-oxygen compounds

Keywords: electron paramagnetic resonance (EPR), local structures, Cu(UO₂)₂(AsO₄)₂ · 3H₂O, Na₂Cu(SO₄)₂ · 2H₂O, Cu(PhCO₂)₂ · 3H₂O, Pb₂Cu(OH)₄Cl₂



734

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Красных Е.Л., Портнова С.В.

Прогнозирование изменения теплоемкости фазового перехода жидкость–пар на основе модифицированных индексов Рандича. Алканы и кислородсодержащие соединения

Ключевые слова: теплоемкость, топологический индекс, индекс связанности, алканы, кислородсодержащие соединения

$$Cp_{\text{gas}}^0 \text{ gas} \xrightarrow{\Delta T} \Delta T^{\xi} Cp_{\text{liq}}^0 (298,2) \text{ liquid}$$

739

Карцев В.Н., Штыков С.Н., Панкин К.Е.

К оценке состояния собственного макроскопического силового поля жидкостей

Ключевые слова: жидкости, внутреннее давление, шкала эволюции макроскопического поля

$$H_{\text{эв}} = - \left[\frac{2A \cdot t + B}{8,859} \right]$$

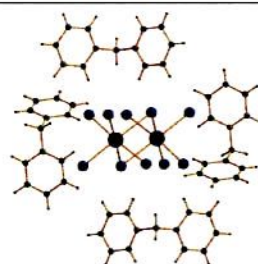
745

Адонин С.А., Горох И.Д., Самсоненко Д.Г.,
Корольков И.В., Соколов М.Н., Федин В.П.

751

**Кристаллические структуры биядерных
хлоридных и бромидных комплексов Bi(III)
с некоторыми катионами – алкилированными
производными пиридина**

Ключевые слова: висмут, галогенидные комплексы,
полиядерные комплексы, ароматические катионы

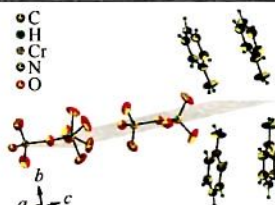


Ben Smail R., Chebbi H., Srinivasan B.R., Zid M.F.

757

**Spectroscopic characterization
and room-temperature structure
of bis(4-aminopyridinium) dichromate**

Keywords: crystal structure, infrared spectroscopy,
bis(4-aminopyridinium) dichromate

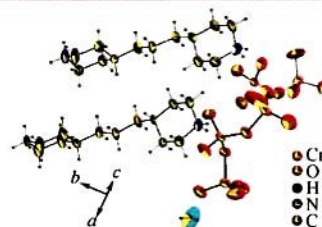


Ben Smail R., Zid M.F., Driss A.

766

**The first chromate containing both Cr₂O₇ and Cr₃O₁₀
groups, bis(1,3-bis(4-piperidinium)propane)
dichromate trichromate monohydrate:
Synthesis and crystal structure**

Keywords: X-ray diffraction, crystal structure,
dichromate trichromate, 1,3-bis(4-piperidinium)propane

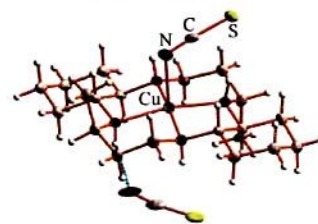


Subhan M.A., Ng S.W., Lee C.-S., Choi J.-H.

773

**Crystal structure and spectroscopic properties
of isothiocyanato[(3,14-dimethyl-2,6,13,17-
tetraazatricyclo(16.4.0.0^{7,12})docosane)]copper(II)
thiocyanate**

Keywords: square pyramidal geometry, copper(II),
macrocyclic ligand, thiocyanate, *trans*-III configuration

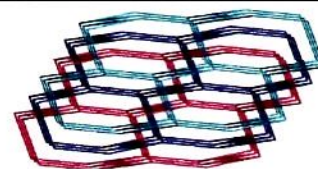


Liu X.-B., Zhao Y.-Q., Liu W.-L., Cui G.-H.

781

**Two new cadmium(II) coordination polymers
with bis(benzimidazole) ligands**

Keywords: bis(benzimidazole), cadmium(II) coordination
polymer, crystal structure, fluorescence property



Леднева А.Ю., Артёмкина С.Б., Стабников П.А.,
Яньшолё Л.В., Фёдоров В.Е.

789

**Строение нового хелатного комплекса
Mo₂O₃(DPM)₄**

Ключевые слова: синтез, молибден,
кристаллическая структура, термический анализ,
масс-спектр

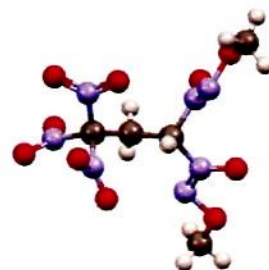


Зюзин И.Н., Алиев З.Г., Алдошин С.М.

794

**Молекулярная и кристаллическая структура
1,1-бис(метокси-*NNO*-азокси)-
3,3,3-тринитропропана**

Ключевые слова: алкокси-*NNO*-азоксисоединения,
1,1-бис(метокси-*NNO*-азокси)-3,3,3-тринитропропан,
(3*Z*,6*Z*)-5-(2,2,2-тринитроэтил)-2,8-диокса-3,4,6,7-
тетраазанона-3,6-диен-4,6-диоксид,
тринитрометильная группа, кристаллическая структура

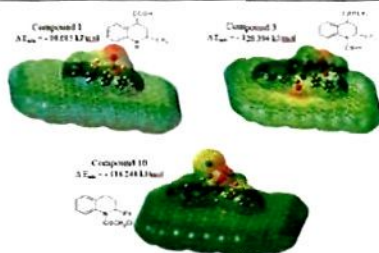


**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Некрасова Н.А., Курбатова С.В.

Взаимосвязь структуры и физико-химических характеристик производных 1,2,3,4-тетрагидрохинолина

Ключевые слова: 1,2,3,4-тетрагидрохинолин, высокоэффективная жидкостная хроматография, индексы связанности (индексы Рандича), факторы удерживания

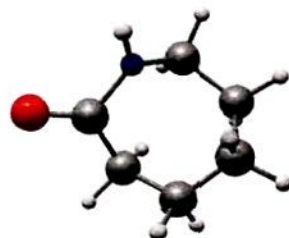


798

Ахмедов И.Д., Мельникова Н.Е., Бабаева А.З.,
Ахмедов В.М.

Палладийсодержащие композиционные наноматериалы на основе поликапролактама: формирование и структура

Ключевые слова: палладий, поликапролактан, нанокомпозит, физико-химические методы анализа, гетерогенный катализ

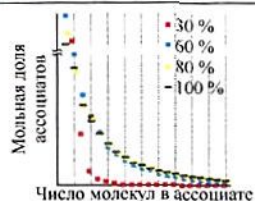


806

Толмачев А.М., Климов А.В., Анучин К.В.,
Фирсов Д.А.

Топология супрамолекулярных структур в растворах этанола

Ключевые слова: этанол, супрамолекулярные структуры, молекулярная динамика, топологический анализ



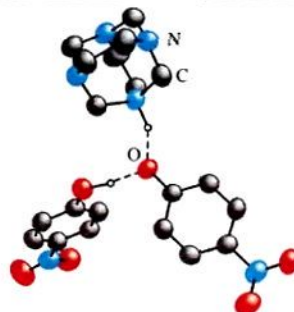
813

Rivera A., Uribe J.M., Ríos-Motta J., Bolte M.

Effect of protonation on the structure of 1,3,6,8-tetraazatricyclo[4.4.1.1^{3,8}]dodecane (TATD) adamantane:

Crystal structure and DFT analysis of 3,6,8-triaza-1-azoniatricyclo[4.4.1.1^{3,8}]dodecane 4-nitrophenolate 4-nitrophenol

Keywords: 1,3,6,8-tetraazatricyclo[4.4.1.1^{3,8}]dodecane, adamantane, crystal structure, proton transfer, hydrogen bond, amination cage, DFT calculations



819

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Chen X.-F., Wang C.-F., Kong S., Li C., Zhou X.,
Zhang C.-Y., Sheng G.-H., Zhu H.-L.

Structure and urease inhibitory activity of copper(II) complex with (E)-3-(2,3-dihydrobenzo[B][1,4]dioxin-6-yl)acrylic acid

Keywords: caffeic acid, copper(II) complex, crystal structure, urease inhibitory

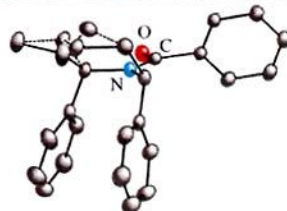


827

Sampath N.

X-ray crystal structure and conformational flexibility study of a N-substituted 2,6-diphenylpiperidine derivative

Keywords: piperidine, conformation, crystallography, chair, twisted boat, dihedral angle, PMDPM, phenyl ring



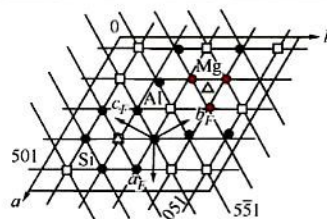
834

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

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

Кубический катионный каркас в тригональных структурах турмалинов – основа стабильности структурного типа

Ключевые слова: кристаллографический анализ, кубический катионный каркас, структурный тип турмалина, катионная подрешетка, феномен «биений»

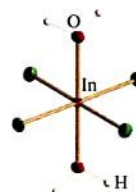


839

Давидович Р.Л., Логвинова В.Б., Ткачёв В.В., Шилов Г.В.

Кристаллическая структура дигидратов тетрафторидоиндатов(III) рубидия и цезия

Ключевые слова: индий(III), комплексный фторид, октаэдр, рубидий, цезий, кристаллическая структура, водородная связь.

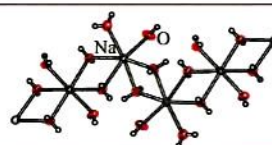


843

Абрамов П.А., Шмакова А.А., Соколов М.Н.

Кристаллическая структура $\text{Na}_3[\text{TaO}_8] \cdot 14\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: тантал, натрий, пероксокомплекс, кристаллическая структура

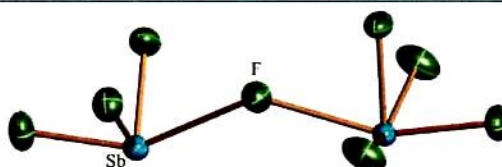


846

Удовенко А.А., Земнухова Л.А., Макаренко Н.В.

Кристаллическая структура β -тетрафтороантимоната(III) калия (β - KSbF_4)

Ключевые слова: синтез, кристаллическая структура, β -тетрафтороантимонат(III) калия

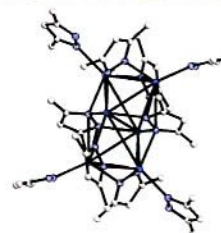


850

Виноградова К.А., Стабников П.А., Алфёрова Н.И., Наумов Д.Ю., Румянцев Ю.М.

Шестиядерный комплекс Na(I) с 3,5-диметил-1H-пиразолом и его анионом

Ключевые слова: комплекс натрия(I), 3,5-диметил-1H-пиразол, 3,5-диметил-1H-пиразолят-анион, кристаллическая структура, летучесть

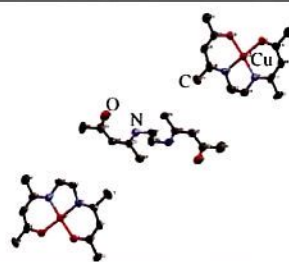


853

Магеррамов А.М., Цинцадзе М.Г., Алиева Р.А., Бахманова Ф.Н., Мамедова Ф.О., Аскеров Р.К., Алиева Ф.С., Чырагов Ф.М.

Кристаллическая структура комплекса меди(II) с ацетилацетоном и этилендиамином, полученного путем темплатного синтеза

Ключевые слова: РСА, монокристалл, медь, сингония, синтез

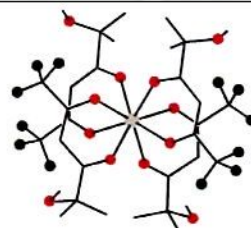


857

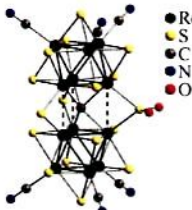
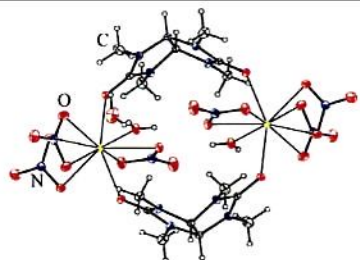

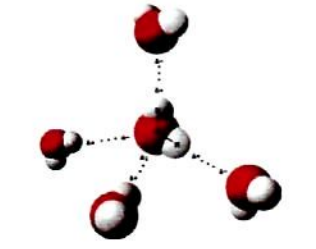
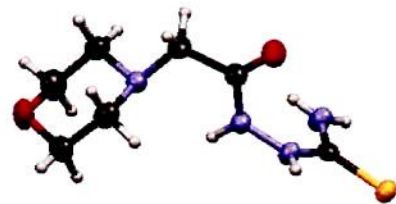
Крисюк В.В., Байдина И.А., Тургамбаева А.Е., Корольков И.В., Уркасым кызы С., Игуменов И.К.

Новый летучий комплекс циркония(IV) с метоксизамещенным β -дикетонатом

Ключевые слова: цирконий, дикетонаты, кристаллическая структура, летучий металлоорганический комплекс, MOCVD прекурсор



860

<p>Лаппи Т.И., Гайфулин Я.М., Смоленцев А.И., Миронов Ю.В.</p>		863
<p>Структурная характеристика биоктаэдрического кластерного аниона $[\text{Re}_{12}\text{CS}_{14}(\mu\text{-SO}_2)(\mu\text{-S})_2(\text{CN})_6]^{6-}$ Ключевые слова: рений, биоктаэдрический кластерный комплекс, координационный полимер, кристаллическая структура</p>		866
<p>Нетреба Е.Е., Сомов Н.В.</p> <p>Кристаллическая структура нового биядерного комплекса моногидрата бис(2,4,6,8-тетрамethyl-2,4,6,8-тетраазабицикло(3.3.0)октан-3,7-дион-O,O')-диаква-гексакис(нитрато-O,O')-дигадолинния(III) Ключевые слова: бициклические бисмочевины, мекбикар, гадолиний(III), структура, девятивершинник, ИК, РСА</p>		871
<p>Лю Юйхань, Мосягина С.А., Стабников П.А., Алфёрова Н.И., Корольков И.В., Первухина Н.В., Морозова Н.Б.</p> <p>Структура трис-дипивалоилметаната лантана(III) Ключевые слова: синтез, дипивалоилметанаты Ln(III), кристаллическая структура, летучесть</p>		876
<p>Муллоев Н.У., Юсупова Дж., Махсудов Б.И.</p> <p>ИК-спектроскопическое исследование Н-комплексов производных диоксолана с метанолом в растворах в CCl_4 Ключевые слова: гетероциклические соединения, протонноакцепторная способность, производные диоксоланов, индукционное влияние, стерический фактор</p>		879
<p>Турдыбеков К.М., Нуркенов О.А., Сатпаева Ж.Б., Фазылов С.Д., Талипов С.А., Ибрагимов Б.Т., Утегенова А.С.</p> <p>Кристаллическая структура 2-(2-морфолиноацетил)гидразинокарботиоамида Ключевые слова: РСА, тиосемикарбазид, кристаллогидрат</p>		

Содержание следующего номера — в конце журнала