

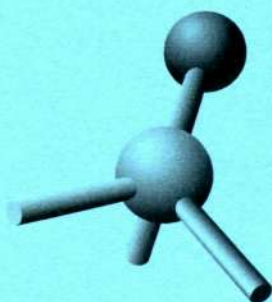


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 59  
январь  
февраль  
**2018**

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



**№ 1**

НОВОСИБИРСК

**ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ**  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 59

Январь-февраль

№ 1, 2018

**СО Д Е Р Ж А Н И Е**

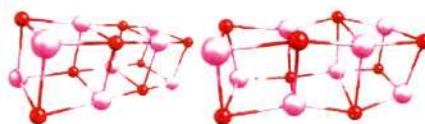
**ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ**

Ермаков А.И., Хоришко Б.А.

7

**Симбатность энтальпий образования, энергий активации электропроводности вюстита и кластеров его кристаллической решетки**

**Ключевые слова:** квантово-химическое моделирование, кластеры, кристаллическая решетка, вюстит, энтальпия образования, энергия активации электропроводности



Новосадов Б.К.

18

**Силы в молекулах. Новые квантовые соотношения**

**Ключевые слова:** волновое уравнение, оператор силы, теорема Гельмана – Фейнмана

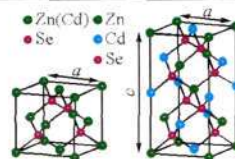
$$\hat{F}_i = \sum_{a=1}^N \nabla_i \frac{-Z_a}{r_{ia}} + \sum_{j=1, j \neq i}^n \nabla_i \frac{1}{2r_{ij}}$$

Басалаев Ю.М., Сидорова А.В.

23

**Электронное строение и упругие свойства кристалла ZnCdSe<sub>2</sub> со структурой халькопирита**

**Ключевые слова:** халькопирит, ZnCdSe<sub>2</sub>, ZnZnSe<sub>2</sub>, CdCdSe<sub>2</sub>, зонная структура, деформационная плотность, химическая связь

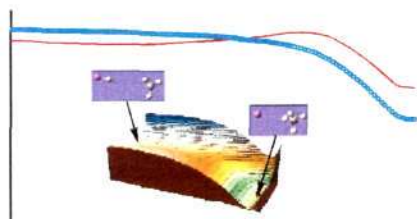


Tag El-Din Kamal M., El-Wallid S. Sedik, Talaat H.

28

**Variation of the intersection point of the potential surface crossing induced by the laser phase along the reaction path in ion-molecule reactions: Application to Li<sup>+</sup> + CH<sub>4</sub>**

**Keywords:** intense laser fields, dipole moment, polarizability, reaction path, unrestricted second order Møller-Plesset calculations (UMP2), ion-molecule reaction, potential energy surface crossings

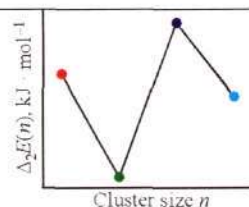


Ma D.X., Xia Q.Y.

36

**A systematic search for structures and stabilities of asymmetric clusters (HFInN<sub>3</sub>)<sub>n</sub> (n = 1 – 6)**

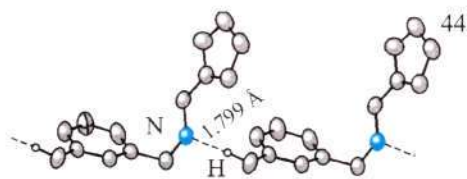
**Keywords:** asymmetric clusters (HFInN<sub>3</sub>)<sub>n</sub> (n = 1 – 6), single source precursors, density functional theory (DFT), structures, stabilities, IR spectra



Sathiyaraj E., Thirumaran S., Ciattini S.

**Crystallographic and computational studies on N-furfuryl-N-(3-hydroxybenzyl)amine and N-furfuryl-N-(4-hydroxybenzyl)amine**

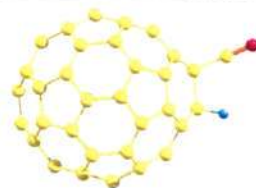
**Keywords:** crystal structures, DFT, HOMO-LUMO, vibrational spectra



Макарова М.В., Семёнов С.Г., Костиков Р.Р.

**Квантово-химическое исследование кислотности производных ацетилена и 1,2-дигидробакминстерфуллера**

**Ключевые слова:** ацетилены, фуллерен, СН-кислота, карбанион, неподеленная электронная пара, эффект растворителя, DFT

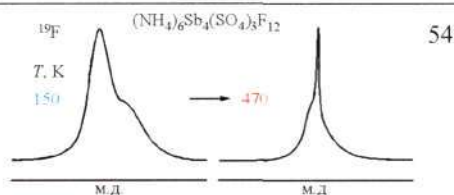


**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Кавун В.Я., Земнухова Л.А., Полянцев М.М.

**Ионная подвижность в сульфатофторидных комплексах сурьмы(III) состава  $M_6Sb_4(SO_4)_3F_{12}$  ( $M = Rb, Cs, NH_4$ ) и  $(NH_4)_2Sb(SO_4)F_3$  по данным ЯМР  $^{19}F$  и  $^1H$**

**Ключевые слова:** сульфатофториды сурьмы(III), спектры ЯМР  $^{19}F$ ,  $^1H$



Al-Barody S.M.

**Characterization and thermal study of Schiff-base monomers and its transition metal polychelates and their photovoltaic performance on dye sensitized solar cells**

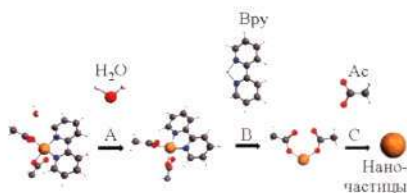
**Keywords:** synthesis, bis-azo dye, polychelates, coordinate polymer, poly Schiff-base, dye-sensitized solar cell (DSSC)



Кременная М.А., Будник А.П., Солдатов М.А., Ластовина Т.А., Солдатов А.В.

**Рентгеноспектральное исследование атомной структуры ацетатно-бипиридинового комплекса меди(II) в процессе термического разложения**

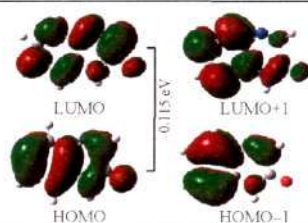
**Ключевые слова:** ацетатно-бипиридиновый комплекс меди(II), прекурсор наночастиц оксида меди, термогравиметрия, ИК спектроскопия, XANES, теория функционала плотности, локальная атомная и электронная структура



Makhloufi A., Ghemit R., Baitiche M., Merbah M.

**Theoretical and experimental investigation on 2-hydroxyquinoxaline structure: Study of tautomerization equilibrium system and analysis of electronic proprieties**

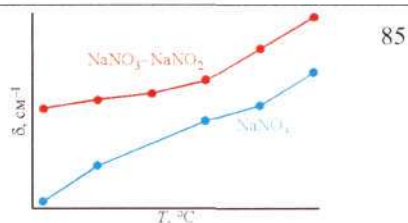
**Keywords:** 2-hydroxyquinoxaline, tautomerism, DFT, analysis spectral, electronic proprieties



Алиев А.Р., Ахмедов И.Р., Какагасанов М.Г., Алиев З.А., Амиров А.М.

**Молекулярная релаксация бинарных систем  $LiNO_3—LiClO_4$ ,  $NaNO_3—NaNO_2$ ,  $K_2CO_3—K_2SO_4$**

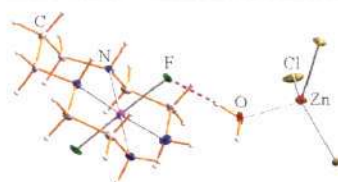
**Ключевые слова:** молекулярная релаксация, бинарные системы, ионные кристаллы, комбинационное рассеяние, колебательные спектры



Moon D., Tanaka S., Akitsu T., Choi J.-H.

**Crystal structure, spectroscopic and magnetic properties of *trans*-difluoro(1,4,8,11-tetraazaundecane)chromium(III) aquatrichlorozincate**

**Keywords:** synthesis, crystal structure, 1,4,8,11-tetraazaundecane, chromium(III), Zn(II), physical properties, *trans-meso*(*RS*)-conformer



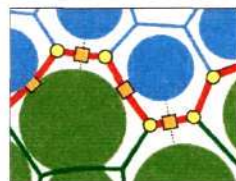
92

**СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ**

Волошин В.П., Ким А.В., Шелепова Е.А.,  
Медведев Н.Н.

**Определение границы между липидным бислоем и водой**

**Ключевые слова:** метод молекулярной динамики, метод Вороного–Делоне, липидные мембраны, профиль атомной плоскости, профиль свободного объема



101

Siddiqui K.A.

**Structural diversity of metal-organic hydrates: A crystallographic structural database study**

**Keywords:** lattice water, metal-organic coordination complexes, hydrogen bonding, metallo-supramolecular chemistry



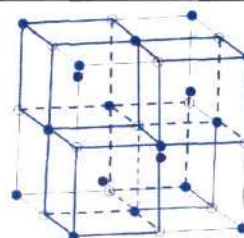
111

**КРИСТАЛЛОХИМИЯ**

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

**Кристаллографическая основа стабильности распространенных (популярных) структурных типов**

**Ключевые слова:** кристаллографический анализ, катионные и анионные подрешетки, механико-волновая концепция кристаллического состояния, структурные типы алмаза и шпинели, структурные типы турмалина и апатита, критерии стабильности и упаковки

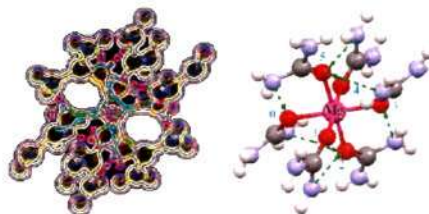


118

Рай В.Г., Рай Т.Ф., Ломтев Л.А., Никитин О.Р.

**Группа нарушенной симметрии в октаэдрическом катионе  $[Me(urea)_6]^{2+,3+}$  с внутрикомплексными водородными связями**

**Ключевые слова:** комплексные катионы с карбамидом, группы симметрии подстановок, таблицы Кэли, полугруппы, принцип Кюри–Неймана, группы нарушенной симметрии, таблицы и структуры групп с нарушенной симметрией, дивергентные и конвергентные оргграфы структуры

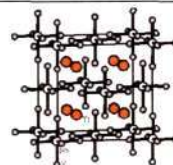


124

Соколов М.Н., Рогачев А.В., Вировец А.В.,  
Богомяков А.С.

**Кристаллическая структура  $Tl_2[NbCl_6]$  и  $Tl_2[NbBr_6]$**

**Ключевые слова:** таллий, ниобий, кристаллическая структура, магнетизм

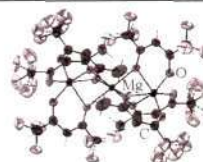


124

Куратьева Н.В., Викулова Е.С., Жерикова К.В.

**Кристаллохимическое исследование двух комплексов магния с трифторацетилацетоном**

**Ключевые слова:** магний, трифторацетилацетон, синтез, рентгеноструктурный анализ

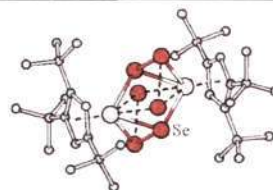


131

Афонин М.Ю., Сухих Т.С., Конченко С.Н.

**Кристаллическая структура биядерных комплексов кобальта  $[(\text{Cr}^{\text{III}}\text{Co})_2(\mu_2\text{-}\eta^1\text{:}\eta^2\text{-S}_2)_2]$  и  $[(\text{Cr}^{\text{III}}\text{Co})_2(\mu_2\text{-}\eta^1\text{:}\eta^2\text{-Se}_2)_2]$**

**Ключевые слова:** биядерные комплексы, кобальт, сера, селен, кристаллическая структура

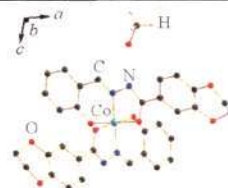


140

Sheng G.-H., Wang C.-F., Feng S., Gao X., Zhu H.-L.

**Characterization and crystal structure of a novel mononuclear cobalt(II) complex with hydrazone derived from protocatechuic acid**

**Keywords:** complex, hydrazone, protocatechuic acid, crystal structure, thermal stability

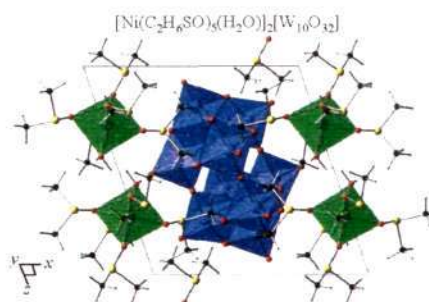


144

Пойманова Е.Ю., Медведь А.О., Радио С.В., Баумер В.Н., Арзуманян Г.М., Дорошкевич Н.В., Хомутова Е.В., Белоусова Е.Е., Розанцев Г.М., Панюшкин В.Т.

**Декавольфрамат никеля  $[\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_6\text{SO})_5(\text{H}_2\text{O})_2][\text{W}_{10}\text{O}_{42}]$ : синтез из водно-диметилсульфоксидного раствора, определение кристаллической структуры, ИК- и КР-спектроскопический анализ, микроморфология поверхности**

**Ключевые слова:** кристаллическая структура, изополивольфрамат, декавольфрамат-анион, никель(II)

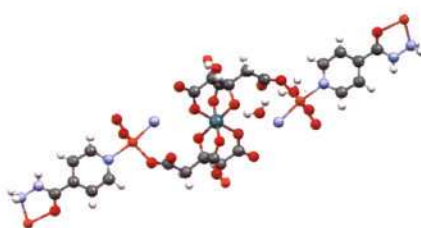


149

Сейфуллина И.И., Марцинко Е.Э., Чебаненко Е.А., Дьяконенко В.В., Шишкина С.В., Пирожок О.В.

**Структура координационного полимера  $\{[\text{Cu}_2\text{Ge}(\mu\text{-Cit})_2(\mu\text{-INH})_2] \cdot 4\text{H}_2\text{O}\}_n$ , где  $\text{H}_4\text{Cit}$  – лимонная кислота,  $\text{INH}$  – гидразид изоникотиновой кислоты**

**Ключевые слова:** синтез, диоксид германия, лимонная кислота, гидразид изоникотиновой кислоты, ацетат меди(II), координационный полимер, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ

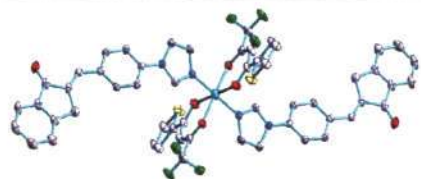


158

Wang G.-F., Zhang X., Sun S.-W., Li H., Meng L.-X., Yao C.-Z., Zhao Y.-F., Wei B.-H.

**Structural characterization of two copper complexes with 2-arylidenebenzocycloalkanone ligands**

**Keywords:** synthesis, copper complex, crystal structure,  $\beta$ -diketonate complexes, ketone

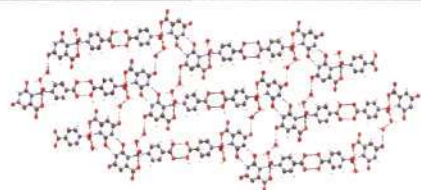


164

Siddiqui K.A., Lama P.

**First orotic acid and isonicotinic acid based Zn-complex: Hydrothermal synthesis, crystal structure and thermogravimetric analysis**

**Keywords:** crystal engineering, orotate complex, hydrogen bonding

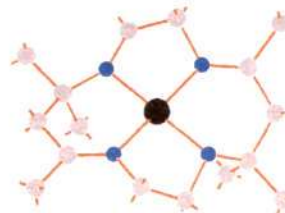


170

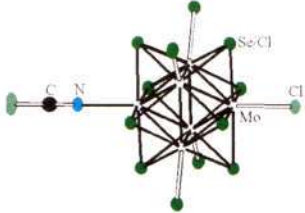
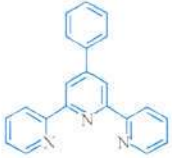
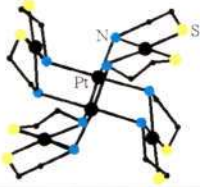
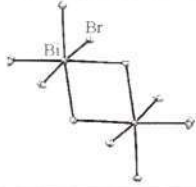
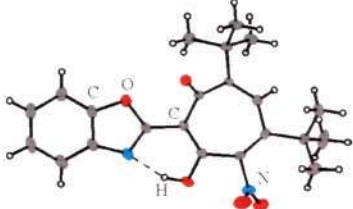
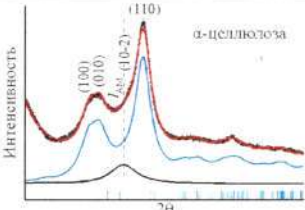
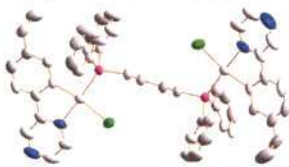
Быкова Е.А., Храненко С.П., Громилов С.А.

**Особенности упаковки структур  $[ML_2](\text{ReO}_4)_2$  ( $M = \text{Cu}, \text{Ni}$ ;  $L = 5,5,7,12,12,14$ -гексаметил-1,4,8,11-тетрааза-циклотетрадекан)**

**Ключевые слова:** медь, никель, макроциклический лиганд, перренат-анион, кристаллохимия, упаковка структуры, рентгеноструктурный анализ



176

<p>Михайлов М.А., Вировец А.В., Пересыпкина Е.В., Брылёв К.А., Соколов М.Н.</p>		181
<p><b>Строение и люминесцентные свойства кластерных комплексов с ядром <math>\{Mo_6(\mu_3-SeCl_7)\}^{3+}</math></b></p>		
<p><b>Ключевые слова:</b> синтез, кластерные комплексы молибдена, замещение мостиковых хлоридных лигандов, сольватация, кристаллическая структура, люминесценция</p>		
<p>Huang Y., Wang Q., Ma Z.</p>		186
<p><b>A neutral dinuclear silver(I) 4'-phenyl-terpyridine compound</b></p>		
<p><b>Keywords:</b> silver compound, 4'-phenyl-terpyridine, thermal synthesis, X-ray diffraction</p>		
<p>Азизова А.Н., Тагиев Д.Б., Османова С.Н., Касумов Ш.Г., Гасанов Х.И.</p>		191
<p><b>Кристаллическая и молекулярная структура комплекса платины(II) с <math>\beta</math>-меркаптоэтиламин гидрохлоридом</b></p>		
<p><b>Ключевые слова:</b> платина, лиганд, координация, дентантность, металлохелат, меркамин</p>		
<p>Коваленко Е.А., Кочелаков Д.В., Самсоненко Д.Г., Федин В.П.</p>		196
<p><b>Кристаллическая структура биядерного комплекса висмута <math>[H_2dabco]_2[Bi_2Br_{10}]4H_2O</math></b></p>		
<p><b>Ключевые слова:</b> синтез, висмут, dabco, рентгеноструктурный анализ, кристаллическая структура</p>		
<p>Ткачев В.В., Саяпин Ю.А., Тупаева И.О., Гусаков Е.А., Шилов Г.В., Алдошин С.М., Минкин В.И.</p>		200
<p><b>Строение 2-(бензоксазол-2-ил)-5,7-ди(<i>tert</i>-бутил)- 4-нитро-1,3-триазолон</b></p>		
<p><b>Ключевые слова:</b> синтез, бензоксазолы, 1,3-триазолон, внутримолекулярная водородная связь, рентгеноструктурный анализ</p>		
<p>Подгорбунских Е.М., Бычков А.Л., Булина Н.В., Ломовский О.И.</p>		204
<p><b>Разупорядочение кристаллической структуры целлюлозы при механической активации</b></p>		
<p><b>Ключевые слова:</b> степень кристалличности, аморфизация целлюлозы, разупорядочение структуры, механическая активация</p>		
<p>Li H.M., Wang Z.Q., Fu W.J., Xu C.</p>		212
<p><b>Crystal structures of two luminescent mononuclear and dinuclear cyclopalladated 2-(4-ethylphenyl)pyrazine complexes</b></p>		
<p><b>Keywords:</b> palladacycle, C-H...N(Cl) hydrogen bond, <math>\pi</math>-<math>\pi</math> interaction</p>		

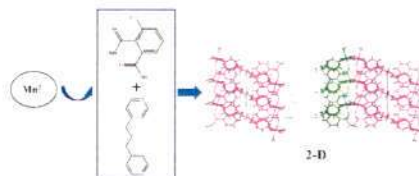
**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ  
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Choiset S., Kantacha A., Nimthong A., Zeller M.,  
Wongnawa S.

217

**X-ray crystal structure of a novel 2D Mn(II)  
coordination polymer with 4,4'-trimethylenedipyridine  
and 3-nitrophthalate as ligands**

**Keywords:** synthesis, manganese(II) complexes,  
supramolecular chemistry, coordination polymer,  
2-dimentionalpolymer, dicarboxylate complexes

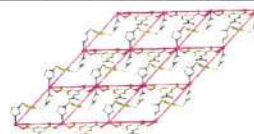


Cheng J., Wang G.-H., Wang Y.-W.

225

**Crystal structure of a 2D cadmium(II) coordination  
polymer containing flexible bis(imidazole) ligand**

**Keywords:** bis(imidazole), cadmium complex, crystal structure

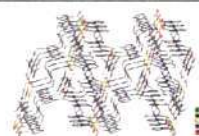


Cui J.W., Wang S.C., Wang Y.Y., Dong G.Y.

229

**Crystal structure of a 1D silver(I) coordination polymer  
containing flexible bis(benzimidazole)**

**Keywords:** Ag(I) complex, bis(benzimidazole), crystal structure



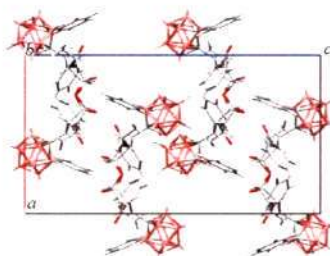
**СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ**

Сулеймен Е.М., Казанцев А.В., Van Hecke K.,  
Искакова Ж.Б., Акатан К.

233

**Кристаллическая, молекулярная структура  
и цитотоксическая активность диэтилового эфира  
2-[(Фенил-(Фенил-*o*-карборанил)-метил]  
малоновой кислоты**

**Ключевые слова:** производные *o*-карборана, производные  
малоновой кислоты, рентгеноструктурный анализ,  
ЯМР спектроскопия, цитотоксическая активность

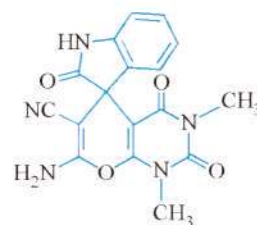


Sharma S., Brahmachari G., Kumar A., Misra N.,  
Kant R., Gupta V.K.

237

**Molecular modeling, spectroscopic investigations, and  
computational studies of DMSO solvated 7'-amino-1',3'-  
dimethyl-2,2',4'-trioxo-1',2',3',4',4a',8a'-tetrahydrospiro-  
[indoline-3,5'-pyrano[2,3-*d*]pyrimidine]-6'-carbonitrile**

**Keywords:** green synthesis, spiro-oxindole, X-ray diffraction,  
direct methods, interactions, DFT calculations

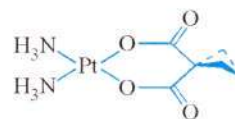


Rezazadeh M., Ghiasi R., Jamehbozorgi S.

247

**Solvent effects on the structure and spectroscopic  
properties of the second-generation  
anticancer drug carboplatin:  
A theoretical insight**

**Keywords:** carboplatin, anticancer drug, frontier orbitals analysis,  
solvent effect, hyperpolarizability



Содержание следующего номера — в конце журнала