

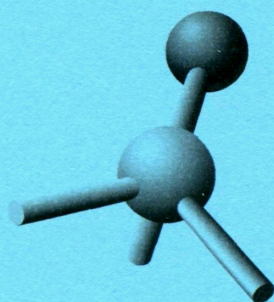


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 59
Февраль
март
2018

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 2

НОВОСИБИРСК

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

ТОМ 59

Февраль-март

№ 2, 2018

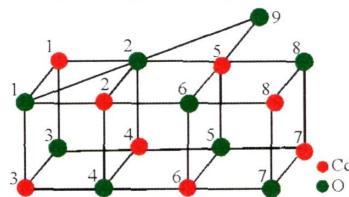
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Жуков В.П., Шеин И.Р.

Структура и термодинамические характеристики примесных центров в оксиде кадмия, допированном литием: первопринципный PAW-подход

Ключевые слова: оксид кадмия, электронная структура, примесные центры, проводимость

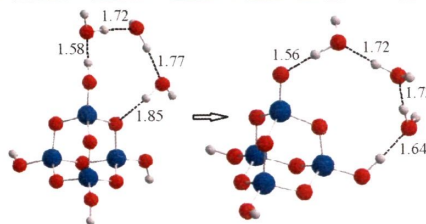


265

Онижук Н.О., Пантелеймонов А.В., Холин Ю.В.,
Иванов В.В.

Квантово-химические оценки констант диссоциации силанольных групп кремниевых кислот

Ключевые слова: кремнеземы, rK_a , квантовая химия, теория функционала плотности (DFT), поляризационно-континуальная модель растворителя (PCM)



273

Грибов Л.А.

Вариационный метод решения общей задачи о колебательно-вращательных состояниях молекул

Ключевые слова: спектры молекул, колебательно-вращательные состояния, энергетическая матрица, вариационное решение

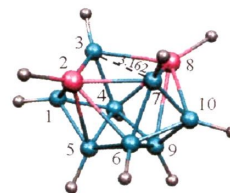
$$\hat{T}_{p, \text{vib,rot}} \rightarrow \begin{bmatrix} T_{\text{vib}} & T_{\text{vib,rot}} \\ T_{\text{vib,rot}} & T_{\text{rot}} \end{bmatrix}$$

284

Ababsa S., Zouchoune B.

Electronic structure and relative stabilities of 10- and 12-vertex. Closo- and nido-heteroborane clusters of Ga, Ge and As elements

Keywords: boron-boron interactions, counting rules, atomic charges, heteroatom substitution

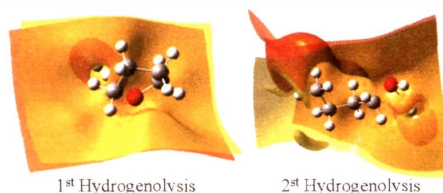


288

Koudjina S., Atohou Y.G.S., Houngue M.T.A.K., Kuevi U.A.,
Kprotin G.A., Kanhounon W.G., Mensah J.B.

Modeling of oxolane hydrodeoxygenation in the presence of tungsten disulfide

Keywords: oxolane, tungsten disulfide, hydrogenolysis, modeling, catalytic hydrotreating, DFT/B3LYP, 6-31G(d), LanL2DZ

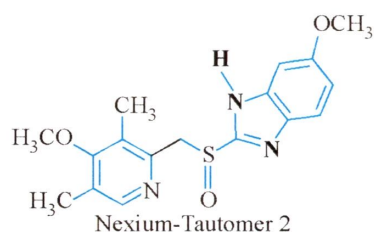


302

Sargolzaei M., Afshar M., Nikoofard H.

Solvent effect on equilibrium and rate constant of the tautomeric reaction in Nexium, Skelaxin, Aldara and Efavirenz drugs: A DFT study

Keywords: tautomer, solvent, density functional theory, RMSD, eyring



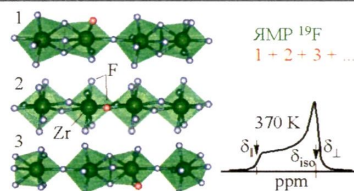
309

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Слободюк А.Б., Диденко Н.А., Кавун В.Я.

Фазовые переходы и ионная подвижность в твердых растворах в системе $(\text{NH}_4)_2\text{ZrF}_6\text{-InF}_3$

Ключевые слова: синтез, гексафторидоцирконат аммония, трифторид индия, твердые растворы, ионная подвижность, спектры ЯМР

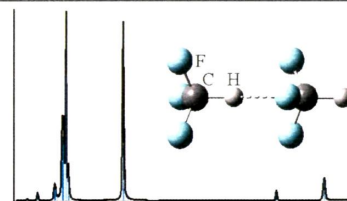


318

Гринвальд И.И., Калагаев И.Ю., Петухов А.Н., Грушевская А.И., Капустин Р.В., Воротынцеv И.В.

Ассоциация галоформов в конденсированной и газовой фазе. ИК спектроскопия и неэмпирические расчеты

Ключевые слова: водородная связь, ИК спектроскопия, неэмпирические расчеты (DFT), галоформы

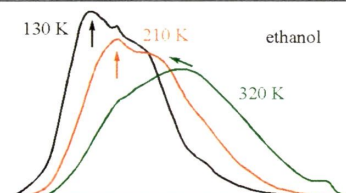


326

Зыкова В.А., Суровцев Н.В.

Структурные свойства стеклющихся этанола и глицерина по спектрам колебаний O—H

Ключевые слова: колебания O—H, структура стеклющихся жидкостей, локальные конфигурации, комбинационное рассеяние света

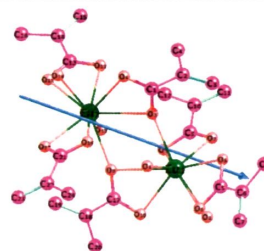


334

Курбатов И.А., Харченко В.И., Мирочник А.Г., Петроченкова Н.В., Жихарева П.А., Вовна В.И.

Колебательная структура метакрилатов европия(III) и лантана(III): исследование методами DFT и ИК спектроскопии

Ключевые слова: метакрилат европия(III), метакрилат лантана(III), биядерный комплекс, теория функционала плотности, квантовая химия, ИК спектры

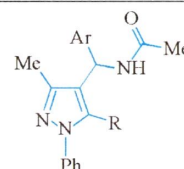


340

Vafae A., Davoodnia A., Bozorgmehr M.R., Pordel M.

Characterization and molecular docking study of new 4-acetamidoalkyl pyrazoles as B-raf/COX-2 inhibitors

Keywords: synthesis, 4-acetamidoalkyl pyrazoles, molecular docking, B-raf/COX-2 inhibitors

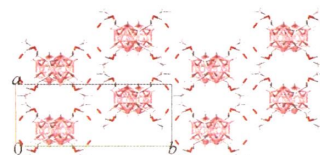


347

Suleimen Ye.M., Van Hecke K., Ibatayev Zh.A., Akatan K.

Crystal structure of 1,2-bis(acetoxymethyl)-o-carborane

Keywords: 1,2-bis(acetoxymethyl)-o-carborane, X-ray crystallographic analysis, NMR spectroscopy



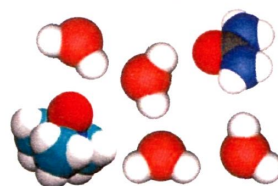
356

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Кадцын Е.Д., Аникеев А.В., Медведев Н.Н.

Строение водных растворов триметиламинооксида, мочевины и их смеси

Ключевые слова: молекулярно-динамическое моделирование, водные растворы, триметиламинооксид, мочевины, осмолиты-протекторы, денатуранты



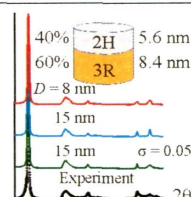
359

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Громилов С.А., Николаев Р.Е., Черепанова С.В.

Образование «сжатого» и смешаннослойного графита при нагревании импактных алмазов

Ключевые слова: импактный алмаз, алмаз, лонсдейлит, графит, сжатый графит, смешаннослойный графит, турбостратное разупорядочение, моделирование

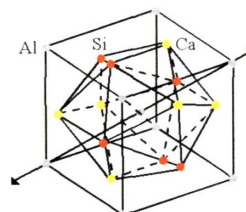


368

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

Кристаллографический анализ структурного типа граната: симметрия в анатомии структуры

Ключевые слова: кристаллографическая стабильность, кристаллографический анализ, катионные подрешетки, когерентная сборка, структурный тип граната, структура β-W, менецезит

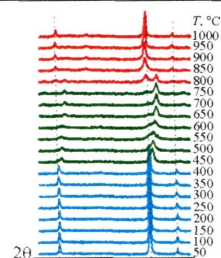


378

Венедиктова О.С., Булавченко О.А., Цырульников П.Г., Афонасенко Т.Н., Винокуров З.С., Цыбуля С.В.

Высокотемпературные дифракционные исследования процесса расслоения марганец-галлиевой шпинели состава $Mn_{1.5}Ga_{1.5}O_4$

Ключевые слова: высокотемпературная рентгенография, фазовые превращения, марганецсодержащие двойные оксиды, марганец-галлиевая шпинель, алюмомарганцевая шпинель

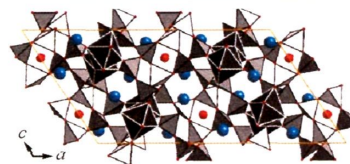


384

Канева Е.В., Суворова Л.Ф., Таусон В.Л.

Кристаллические структуры новых синтезированных КДу- и КТб-алюмосиликатов

Ключевые слова: гидротермальный синтез, KREE-алюмосиликаты, кристаллическая структура



391

Романенко Г.В., Фурсова Е.Ю., Летягин Г.А., Овчаренко В.И.

Строение разнолигандного комплекса Ni(II) с 3-имидазолиновым нитроксилом, изо-пропанолом и водой

Ключевые слова: никель, 3-имидазолиновый нитроксилол, пропанол, разнолигандный комплекс

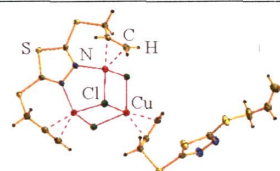


398

Слывка Ю.И., Ардан Б.Р., Мыськив М.Г.

π-Комплексы хлорида меди(I) с 2,5-бис(аллилтио)-1,3,4-тиадиазолом: синтез и особенности строения

Ключевые слова: хлорид меди(I), π-комплекс, 1,3,4-тиадиазол, аллильное производное, кристаллическая структура

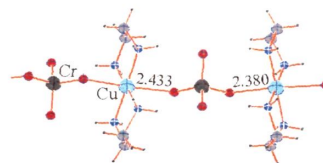


402

Сухих А.С., Храненко С.П., Громилов С.А.

Структура координационного полимера $[\text{Cu}(\text{En})_2\text{CrO}_4]_n$

Ключевые слова: бис-этилендиамин меди, хромат-анион, координационный полиэдр, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ

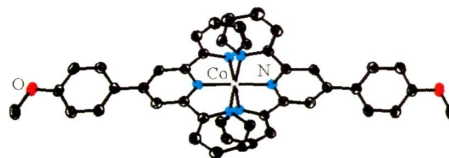


409

Fu W.-W., Shu X., Luo Y.-L., Tang Z.-Q., Li Q., Liu H.-J., Cheng Q.-W., Wang H.-Y., Liu Y.

New Co(II) and Mn(II) complexes with 4'-substituted 2,2':6',2''-terpyridine ligands

Keywords: Co(II) complex, Mn(II) complex, 4'-(4-methoxyphenyl)-2,2':6',2''-terpyridine, 4'-(4-aminophenyl)-2,2':6',2''-terpyridine, 4'-(furan-2-yl)-2,2':6',2''-terpyridine



412

Ibragimov A.B., Englert U., Ashurov J.M., Wang A.

Dimorphism of hexaaquanickel(II) bis(p-nitrobenzoate) dihydrate salt:

A new triclinic crystal form

Keywords: polymorphism, p-nitrobenzoic acid, Ni(II) complex, hexaaqua cation, crystal structure, X-ray crystallography

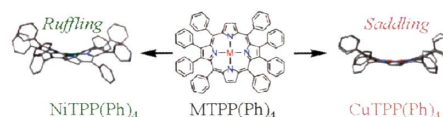


425

Bhyrappa P., Sankar M., Karunanithi K., Varghese B.

Highly nonplanar macrocyclic ring conformation in the crystal structures of Ni(II) and Cu(II) octaphenylporphyrins

Keywords: substituted porphyrin, octaphenylporphyrin, X-ray crystal structures, Hirshfeld surface analysis

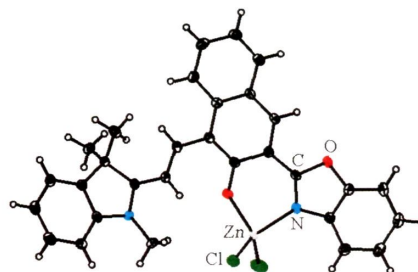


428

Ткачёв В.В., Утёнышев А.Н., Чернышев А.В., Ковальчукова О.В.

Особенности молекулярного строения нового комплекса 3-(бензо[d]оксазол-2-ил)-1-(2-(1,3,3-триметилиндолин-2-илиден)этилиден) нафталин-2(1H)-она хлорида цинка

Ключевые слова: рентгеноструктурное исследование, спиропираны, 3-(бензо[d]оксазол-2-ил)-1-(2-(1,3,3-триметилиндолин-2-илиден)этилиден)-нафталин-2(1H)-она хлорид цинка

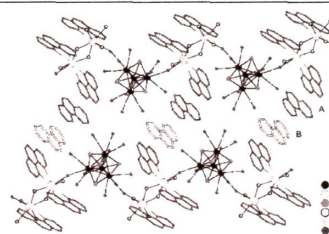


438

Литвинова Ю.М., Куратьева Н.В., Гайфулин Я.М., Миронов Ю.В.

Строение цепочечного координационного полимера $\{\{\text{Nd}(\text{phen})_2(\text{H}_2\text{O})\text{Nd}(\text{phen})(\text{H}_2\text{O})_3(\mu\text{-OH})_2\} \times [\text{Re}_4\text{S}_4(\text{CN})_{12}]\} \cdot \text{phen} \cdot 3.5\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: синтез, кластеры рения, координационный полимер, лантаниды, кристаллическая структура

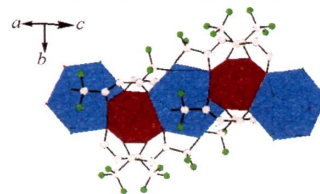


442

Уркасым кызы С., Шэнь Хуан, Мосягина С.А., Корольков И.В., Первухина Н.В., Крисюк В.В., Стабников П.А.

Кристаллическая структура двух β-дикетонатов самария и их свойства

Ключевые слова: β-дикетонаты самария, кристаллическая структура, летучесть

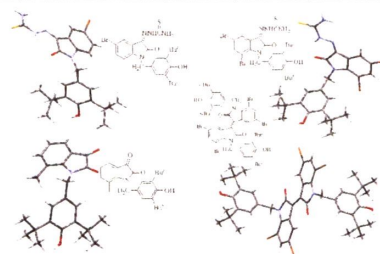


446

Миронова Е.В., Богданов А.В., Нугуманова Г.Н.,
Бухаров С.В., Миронов В.Ф., Литвинов И.А.

**Особенности кристаллической и молекулярной
структуры производных индолин-2-она, содержащих
стерически затрудненные фенольные фрагменты**

Ключевые слова: изатин, индолин-2-оны, рентгеноструктурный
анализ, кристаллическая и молекулярная структура, стерически
загруженные фенолы, межмолекулярные взаимодействия

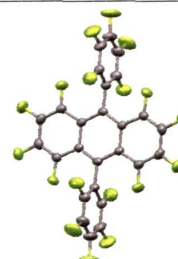


451

Гатиллов Ю.В., Меженкова Т.В., Карпов В.М.

**Рентгеноструктурное исследование
перфтор-9,10-дифенилантрацена
и перфтор-9,10-дифенилдигидроантрацена**

Ключевые слова: перфтор-9,10-дифенилантрацен,
перфтор-9,10-дифенилдигидроантрацен,
рентгеноструктурный анализ, межмолекулярные взаимодействия,
квантово-химические расчеты, супрамолекулярная архитектура



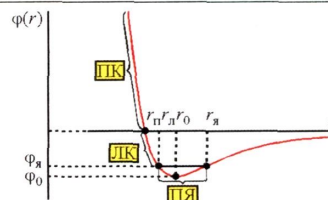
461

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Малеев А.В., Геворгян А.А., Потехин К.А.

**Новый подход к анализу молекулярных упаковок
в кристаллах с использованием атом-атомных
потенциалов**

Ключевые слова: молекулярные кристаллы, молекулярные
агломераты, атом-атомные потенциалы, потенциальная яма

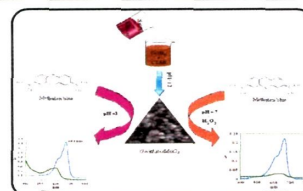


467

Sabbaghan M., Adhami F., Aminnezhad M.

**Mesoporous jarosite/MnO₂ and goethite/MnO₂
nanocomposites:
Synthesis and application for oxidation
of methylene blue**

Keywords: MnO₂, jarosite, goethite, Fenton-like catalyst,
methylene blue



476

Aribi K., Ghelamallah M., Bellifa A., Granger P.,
Choukchou-Braham A.

**Structural and textural modifications of ZrO₂ induced by
La₂O₃ addition, thermal treatment and reducing process**

Keywords: ZrO₂, La₂O₃, surface, structure, TPRH₂, pyrochlore oxide

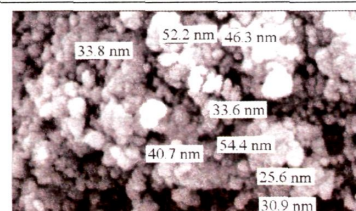


486

Fardood S. Taghavi, Ramazani A., Joo S.W.

**Green chemistry approach for the synthesis of copper oxide
nanoparticles using tragacanth gel and their structural
characterization**

Keywords: tragacanth gel, copper oxide nanoparticles,
nanobiotechnology, natural hydrogel, sol-gel

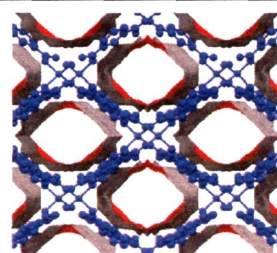


494

Сапьяник А.А., Семененко Е.Э., Самсоненко Д.Г.,
Дыбцев Д.Н., Федин В.П.

**Кристаллическая структура координационных
полимеров, полученных на основе гетерометаллического
карбоксилатного комплекса**

Ключевые слова: литий, цинк, координационные полимеры,
металл-органические каркасы, полиядерные комплексы,
карбоксилатные комплексы, рентгеноструктурный анализ



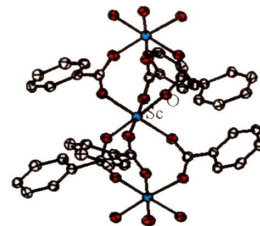
499

Чеплакова А.М., Федосеев И.С., Дороватовский П.В.,
Лазаренко В.А., Зубавичус Я.В., Хрусталеv В.Н., Федин В.П.

505

Кристаллическая структура трис-(2,3,5,6-тетрафторбензоато)скандия [Sc(C₆F₄HCO₂)₃]

Ключевые слова: комплексы скандия, координационный полимер, тетрафтортерефталевая кислота, тетрафторбензойная кислота, кристаллическая структура



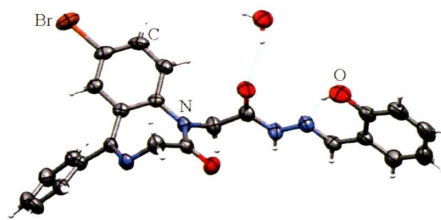
СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Пуля А.В., Сейфуллина И.И., Скороход Л.С.,
Павловский В.И., Кравцов В.Х., Богза С.Л., Суйков С.Ю.

509

Молекулярная и кристаллическая структура продукта конденсации 2-(7-бromo-2-оксо-5-фенил-3H-1,4-бенздиазепин-1-ил)ацетогидразида (гидазепам) с салициловым альдегидом

Ключевые слова: синтез, 2-(7-бromo-2-оксо-5-фенил-3H-1,4-бенздиазепин-1-ил)ацетогидрид, гидазепам, гидразон, салициловый альдегид, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ



Содержание следующего номера — в конце журнала