

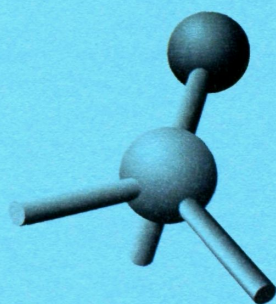


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 59
Март
Апрель
2018

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 3

НОВОСИБИРСК

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

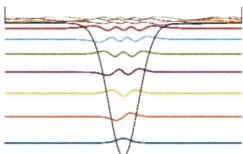
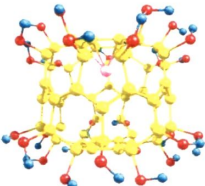
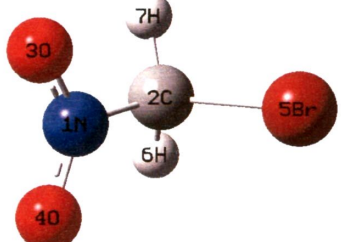
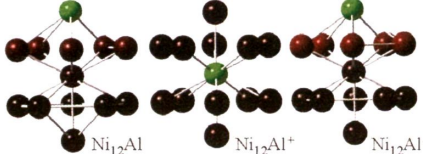
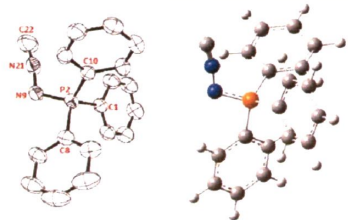
Т О М 59

Март-апрель

№ 3, 2018

СО Д Е Р Ж А Н И Е

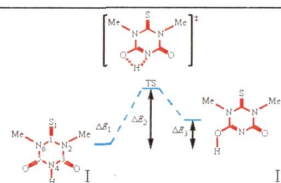
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

- | | | |
|--|--|-----|
| Грибов Л.А.
Задача о колебаниях молекул с гауссовым потенциалом
Ключевые слова: колебания молекул, потенциал, гауссова функция, вариационная процедура |  | 527 |
| Семёнов С.Г., Бедрина М.Е., Титов А.В.
Квантово-химическое исследование молекул C₆₀Cl₃₀, C₆₀(OH)₃₀ и эндокомплекса Fe@C₆₀(OH)₃₀
Ключевые слова: хлорированный фуллерен, гидроксильированный фуллерен, железо, эндокомплекс, структура, ТФП |  | 530 |
| Тарасов Ю.И., Кочиков И.В., Бажанова З.Г.
Внутреннее вращение и равновесная структура молекулы бромнитрометана на основе обработки данных газовой электронографии и результатов квантово-химических расчетов
Ключевые слова: бромнитрометан, нежесткие молекулы, внутреннее вращение, газовая электронография, квантово-химические расчеты, равновесная структура, ангармоничность |  | 536 |
| Song W., Wang B., Li H.-Q., Wang J.-l., He C.-Z.
First-principles study of the structures and electronic properties of Ni_{n-1}Al (n = 2 – 20) clusters
Keywords: magnetic property, charge transfer, ionization potential, electron affinity |  | 544 |
| Ramazani A., Sheikhi M., Hanifehpour Y., Asiabi P.A., Joo S.W.
Molecular structure, electronic properties, HOMO–LUMO, MEP and NBO analysis of (N-isocyanimino)-triphenylphosphorane (PH₃PNNC): DFT calculations
Keywords: N-isocyaniminotriphenylphosphorane (Ph ₃ PNNC), theoretical calculations, DFT, FMO, NBO analysis |  | 553 |

Shajari N., Ghiasi R.

Theoretical study of tautomerization in 1,5-dimethyl-6-thioxo-1,3,5-triazinane-2,4-dione

Keywords: triazines, heterocycles, DFT calculation, Kirkwood–Bauer–Magat (KBM) equation, NBO analysis

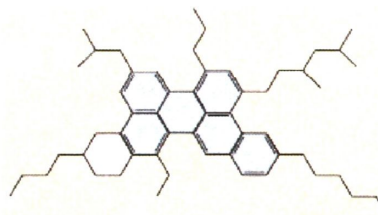


564

Шуткова С.А., Долوماتов М.Ю., Долوماتова М.М., Петров А.М., Хайрудинов И.Р.

Структурно-химические характеристики модельных молекулярных фрагментов нефтяных смол

Ключевые слова: нефтяные смолы, метод электронной спектроскопии, потенциал ионизации, сродство к электрону, структура нефтяных смол



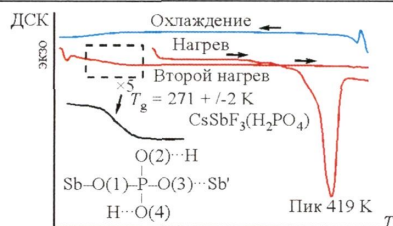
573

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Кавун В.Я., Земнухова Л.А., Слободюк А.Б., Ковалёва Е.В., Савченко Н.Н., Макаренко Н.В.

Структурные превращения и ионная подвижность в CsSbF₃(H₂PO₄)

Ключевые слова: фосфатофторидный комплекс сурьмы(III) CsSbF₃(H₂PO₄), ионная подвижность, фазовый переход, спектры ЯМР, ДСК, РФА

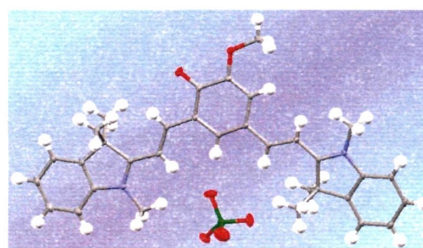


579

Лукиянова М.Б., Ткачёв В.В., Лукьянов Б.С., Пугачёв А.Д., Ожогин И.В., Комиссарова О.А., Алдошин С.М., Минкин В.И.

Исследование строения новых продуктов конденсации перхлората 1,2,3,3-тетраметиллиндоленилия с метоксизамещенными диформилфенолами

Ключевые слова: спиропиран, фотохромизм, молекулярный переключатель, рентгеноструктурный анализ, спектроскопия ЯМР

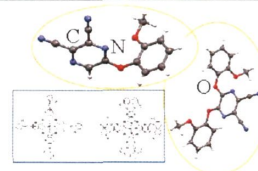


588

Kantar G.K., Kaya M., Şahin O., Şaşmaz S.

Guaiacol substituted AzaPCs: A novel synthesis method and investigation of photophysical properties

Keywords: AzaPC, guaiacol, fluorescence

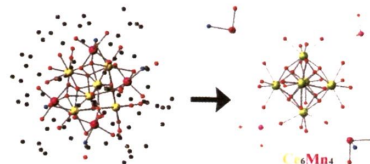


594

Akhtar M.N., AlDamen M.A., Ikram M., Ali S.

Structure and magnetic properties of new lattice system of heterometallic decanuclear Ce₆Mn₄ aggregate

Keywords: crystal structure, heterometallic Ce-Mn^{III} cluster, magnetic properties

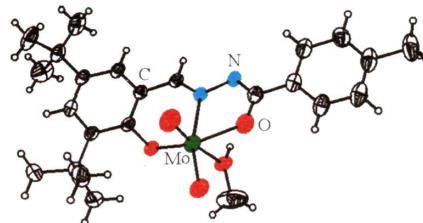


607

Peng D.-L.

Crystal structure and catalytic property of an oxidomolybdenum(VI) complex derived from N'-(2-hydroxy-3,5-di-tert-butylbenzylidene)-4-methylbenzohydrazide

Keywords: synthesis, Schiff base, molybdenum complex, crystal structure, catalytic property



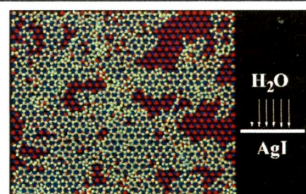
612

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Шевкунов С.В.

Структура воды в контактном слое на поверхности кристаллического иодистого серебра

Ключевые слова: вода, мономолекулярная пленка, дальний молекулярный порядок, водородные связи, послойная адсорбция, компьютерное моделирование

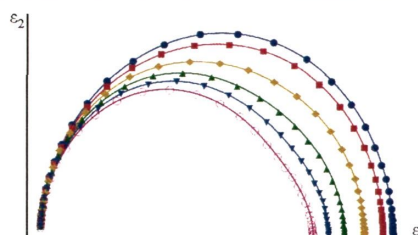


618

Одинаев С., Махмадбегов Р.С.

Численный расчет коэффициентов диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь водного раствора KF от параметров состояния

Ключевые слова: коэффициент диэлектрической проницаемости, диэлектрических потерь, потенциал межмолекулярного взаимодействия, радиальная функция распределения, коэффициент трения жидкости, времена релаксации



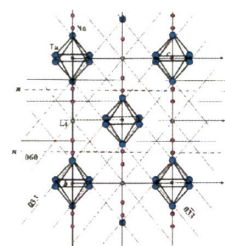
627

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

Кристаллографический анализ соединений с полианионами Линдквиста: когерентная сборка, симметрия, стабильность

Ключевые слова: полианион Линдквиста, кристаллографический анализ, катионные подрешетки, когерентная сборка, относительная стабильность кристаллических структур

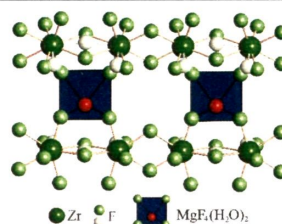


635

Гайворонская К.А., Герасименко А.В., Диденко Н.А.

Новый фторидоцирконат нестехиометрического состава $Cs_{1-x}(H_2O)_{1-x}MgZr_2F_{11+x} \cdot 2H_2O$ ($x \approx 0.73$): структура и термические свойства

Ключевые слова: кристаллическая структура, фторидоцирконат, кристаллогидрат, фазовый переход, дифференциальный термический анализ

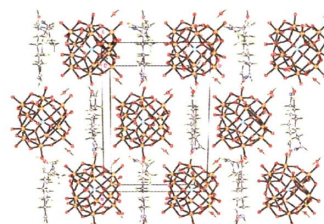


640

Степнова А.Ф., Казиев Г.З., Дороватовский П.В., Зубавичус Я.В., Quiñones S.H., Банг Н.В., Хрусталёв В.Н.

Исследование кислого (тетракапролактam) додекамолибдосиликата состава $(C_6H_{11}NO)_{4,5}H_4[SiMo_{12}O_{40}]$

Ключевые слова: синтез, гетерополиосоединения, полиоксометаллаты, капролактam, структурный анализ

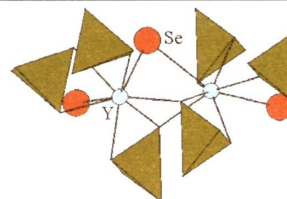


649

Кирыков А.С., Пирязев Д.А., Тарасенко М.С., Наумов Н.Г.

Кристаллическая структура новых халькогенидсодержащих ортосиликатов иттрия Y_2SiO_4Q ($Q = S, Se$)

Ключевые слова: синтез, иттрий, халькогенид, ортосиликат, кристаллическая структура



657

Васильев А.Д., Головинёв Н.Н.

Структура оксониевого соединения гексахлоридостанната(IV) пefлоксациниума

Ключевые слова: катион пefлоксациниума, катион оксония, хлорид-ион, гексахлоридостаннат(IV)-анион, ионное соединение, кристаллическая структура



663

Головнёв Н.Н., Молокеев М.С., Лесников М.К.

Кристаллическая структура и свойства тригидрата 2-тиобарбитурата левофлоксацина

Ключевые слова: левофлоксацин, 2-тиобарбитуровая кислота, соль, кристаллическая структура, термическая устойчивость, ИК спектр



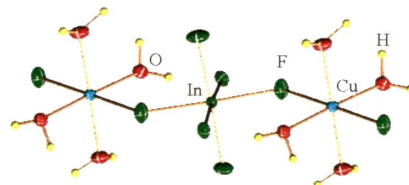
668

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

Кристаллическая структура новых комплексных фторидов индия(III)

$M[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]\text{InF}_6 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ($M = \text{Rb}, \text{Cs}, \text{NH}_4; n = 0, 1$)

Ключевые слова: синтез, индий(III), комплексный фторид, кристаллическая структура, одновалентные катионы, $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$, полимерная цепь, структурный тип

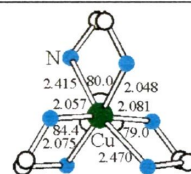


674

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

Эффект Яна—Теллера в структуре $[\text{CuEn}_3]\text{CrO}_4$

Ключевые слова: комплексная соль, трис-этилендиамин меди, хромат-анион, дифференциальная сканирующая калориметрия, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия

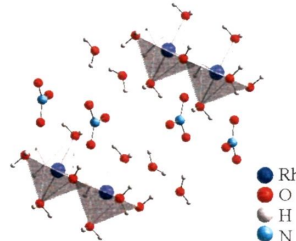


679

Бердюгин С.Н., Васильченко Д.Б., Байдина И.А., Коренев С.В., Корольков И.В.

Кристаллическая структура и свойства $[\text{Rh}_2(\text{H}_2\text{O})_8(\mu\text{-OH})_2](\text{NO}_3)_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: синтез, рентгеноструктурный анализ, полиядерные комплексы, мостиковый ОН-лиганд, комплексы родия, поликонденсация гидроксокомплексов, нитрат родия(III)

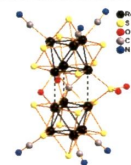


687

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

Строение кластерного аниона $[\text{Re}_{12}\text{CS}_{14}(\mu\text{-SO}_2)(\mu\text{-O})_2(\text{CN})_6]^{6-}$

Ключевые слова: рений, биоктаэдрический кластер, кристаллическая структура



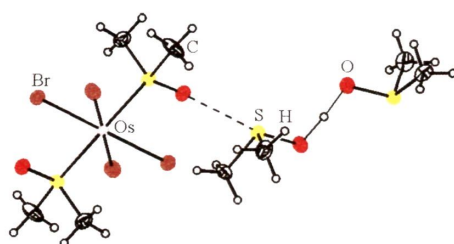
692

Рудницкая О.В., Култышкина Е.К., Доброхотова Е.В., Ананьев И.В.

Диметилсульфоксидные комплексы осмия.

Кристаллическая структура комплекса $[\text{H}(\text{DMSO})_2][\text{Os}^{\text{III}}\text{Br}_4(\text{DMSO})_2]$

Ключевые слова: осмий, диметилсульфоксид, галогенокомплексы осмия, диметилсульфоксидные комплексы осмия, рентгеноструктурный анализ

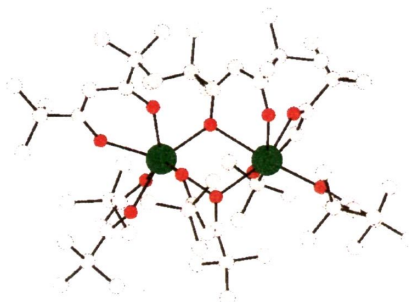


696

Хуан Шэнь, Берёзин А.С., Антонова О.В., Зверева В.В., Корольков И.В., Первухина Н.В., Прохорова С.А., Стабников П.А.

Кристаллические структуры $[\text{Dy}(\text{dpm})_3]_2$ и $\text{Dy}(\text{dpm})_3$, люминесцентное и рентгенофлуоресцентное исследование *трис*-дипивалоилметанатов лантаноидов(III)

Ключевые слова: дипивалоилметанаты Ln(III), кристаллическая структура, молекулярные пленки, люминесценция

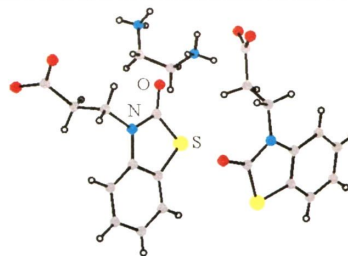


699

Ашуров Ж.М., Изотова Л.Ю., Ташходжаев Б.,
Олимова М.И., Ибрагимов Б.Т.

**Кристаллическая и молекулярная структура
 β -(N-бензотиазолин-2-он)пропионовой кислоты
и ее этилендиаммонийной соли**

Ключевые слова: бензотиазолы,
 β -(N-бензотиазолин-2-он)пропионовая кислота,
этилендиаммонийная соль, PCA

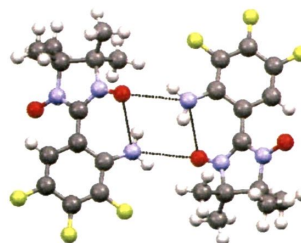


707

Третьяков Е.В., Махнева Т.В., Политанская Л.В.,
Багрянская И.Ю., Стась Д.В.

**Молекулярная и кристаллическая структура
2-амино-полифторфенил-4,4,5,5-тетраметил-4,5-дигидро-
1H-имидазол-3-оксид-1-оксилон**

Ключевые слова: нитронилнитроксилы,
полифторорганические соединения, анилины, водородные связи,
кристаллическая структура

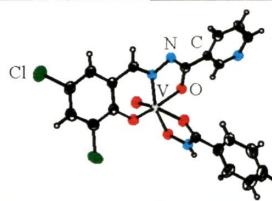


712

Zhang X.-Z., Chen X.-F., Li C., Kong S., Li H.-H., You Z.,
Zhu H.-L.

**Characterization and X-ray structures of oxovanadium(V)
complexes derived from hydrazone ligands**

Keywords: synthesis, oxovanadium complex, hydrazone ligand,
crystal structure, X-ray diffraction, thermal property

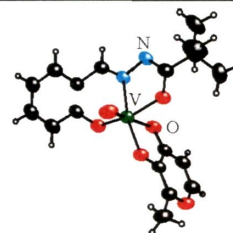


720

Sheng G.-H., Liu A.-D., Liu F.-Y., Liu H., Ye Y.-T., You Z.-L.,
Zhu H.-L.

**Characterization and crystal structures
of oxovanadium(V) complexes derived from
N'-(2-hydroxybenzylidene)pivalohydrazide**

Keywords: synthesis, hydrazone, maltol, 8-hydroxyquinoline,
oxovanadium complex, X-ray crystallography

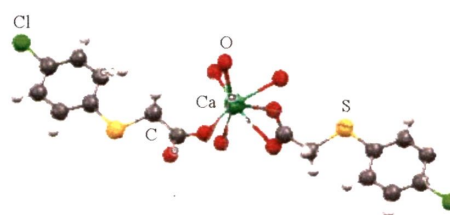


726

Адамович С.Н., Мирскова А.Н., Зельбст Э.А.,
Фундаменский В.С.

**Кристаллическая структура гидрата
ди-(4-хлорфенилсульфонацетата) кальция**

Ключевые слова: кристаллическая структура,
гидрат ди(4-хлорфенилсульфонацетат) кальция,
биологически активные, атраны, металлпротатраны, упаковка,
полиэдр, гептакоординация



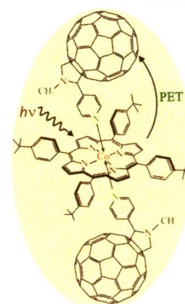
730

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Бичан Н.Г., Овченкова Е.Н., Груздев М.С., Ломова Т.Н.

**Реакция образования и химическая структура
новой супрамолекулярной триады на основе
5,10,15,20-(тетра-4-*трет*-бутилфенил)-21H,23H-
порфирина кобальта(II) и 1-метил-
2-(пиридин-4'-ил)-3,4-фуллера[60]пирролидина**

Ключевые слова: замещенный порфирин кобальта(II),
пирролидино-фуллерен, донорно-акцепторная триада,
кинетика образования, термодинамика образования,
спектроскопия

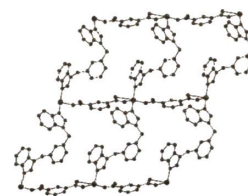


734

Hao S.Y., Hao Z.C., Liu Y.G., Dong G.Y.

Crystal structure and fluorescence properties of a two-dimensional zinc(II) coordination polymer containing isophthalate

Keywords: crystal structure, fluorescence property, hydrothermal synthesis, Zn(II) complex

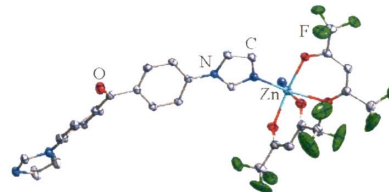


742

Wang G.-F., Sun S.-W.

Structural characterization of a zinc(II) bishexafluoroacetylacetonate coordination polymer with bis(4-(1*H*-imidazol-1-yl)phenyl)methanone ligands

Keywords: synthesis, helical chain, organic-inorganic hybrids, zinc complex, crystal structure, coordination polymer

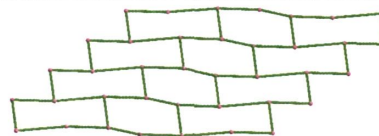


747

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

Crystal structure and thermal properties of a 2D silver(I) coordination polymer with semi-rigid bis(pyrazole)

Keywords: Ag(I) complex, bis(pyrazole), crystal structure

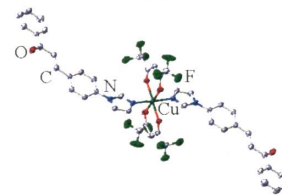


751

Wang Y.-C., Wang G.-F., Liu Z.-R.

Structural characterization of two copper(II) bishexafluoroacetylacetonate complexes with N-donor ligands

Keywords: synthesis, supramolecular arrangements, copper complex, crystal structure, coordination compound, hydrogen bond

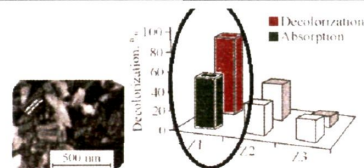


755

Anaraki Firooz A., Abdullah Mirzaie R., Kamrani F.

Effect of morphological ZnO nanostructures on optical and decolorization properties

Keywords: ZnO, photodecolorization, morphology, optical, solid state reaction

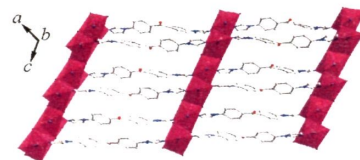


761

Sun S.-W., Wang G.-F.

Structural characterization of a Cu(I)/Br complex with bis(4-(1*H*-imidazol-1-yl)phenyl)methanone ligands

Keywords: synthesis, copper complex, bidentate ligand, crystal structure, semirigid ligand, imidazole

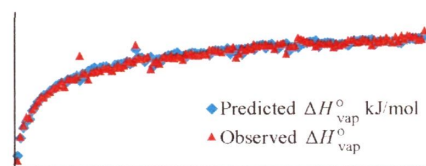


766

Arjmand F., Shafiei F.

Prediction of the normal boiling points and enthalpy of vaporizations of alcohols and phenols by using topological indices

Keywords: QSPR, molecular descriptors, graph theory, MLR, validation



770

Содержание следующего номера — в конце журнала