

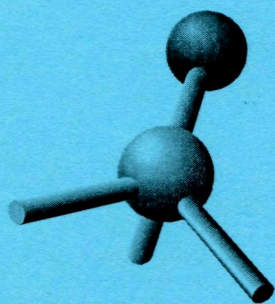
ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК



Том 59  
Сентябрь  
Октябрь  
**2018**

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



**№ 7**

НОВОСИБИРСК

**ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ**  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 59

Сентябрь-октябрь

№ 7, 2018

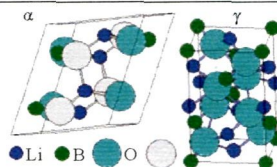
**СО Д Е Р Ж А Н И Е**

**ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ**

Басалаев Ю.М., Болдырева Е.С., Дугинова Е.Б.

**Первопринципное исследование  
электронной структуры метабората лития**

**Ключевые слова:** метаборат лития,  $\text{LiBO}_2$ ,  
электронное строение, химическая связь

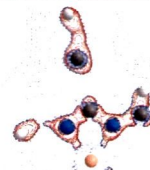


1563

Алексеев Н.В.

**Квантово-химическое исследование  
связей германий-заместитель  
в комплексных соединениях германия**

**Ключевые слова:** квантовая химия, метод AIM

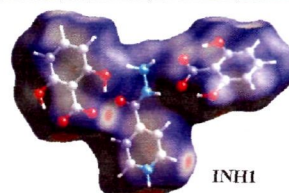


1569

Kamalakaran A.S.

**Molecular adducts of isoniazid:  
Crystal structures, electronic properties,  
and hirshfeld surface analysis**

**Keywords:** isoniazid, cocrystals, molecular salts,  
X-ray diffraction studies, hirshfeld analysis

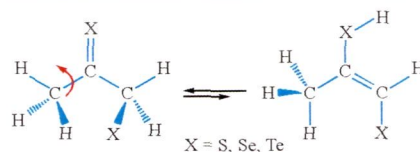


1580

Elambalassery J.G., Sreedevi S.

**Qualitative and quantitative study on internal rotation  
during tautomerization of thione, selenone and tellurone**

**Keywords:** tautomerization, thione, enethiol, internal rotation,  
selenone, tellurone

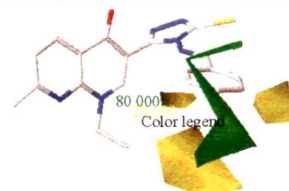


1596

Ghaleb A., Aouidate A., Sbai A., Bouachrine M.,  
Lakhlifi T.

**3D QSAR modeling and molecular docking studies  
on a series of triazole analogues as antibacterial agents**

**Keywords:** 3D QSAR, CoMFA, CoMSIA, molecular docking,  
antibacterial, triazole

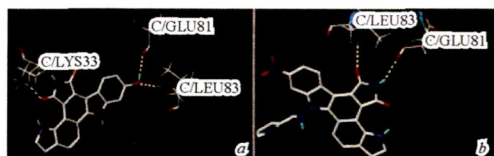


1606

Tong J., Jiang G., Li L., Li Y.

**Molecular docking and 3D QSAR research of indolocarbazole series as cyclin-dependent kinase inhibitors**

**Keywords:** Topomer CoMFA, Topomer search, molecular docking, CDKs

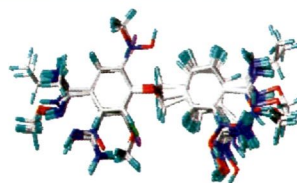


1616

Tong J., Wu Y., Bai M.

**3D QSAR studies on benzyl phenyl ether diamidine derivatives with antiprotozoal activities**

**Keywords:** benzyl phenyl ether derivatives, human African trypanosomiasis, trypanosoma brucei rhodesiense, 3D QSAR



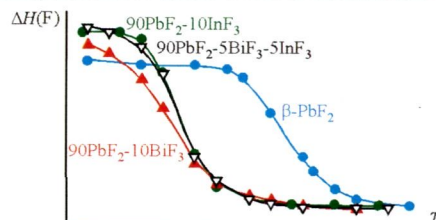
1624

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Кавун В.Я., Меркулов Е.Б., Слободюк А.Б., Полянцев М.М., Бровкаина О.В.

**Ионная подвижность в твердых растворах с флюоритовой структурой  $Pb_{0.9}M_{0.1}F_{2.1}$  ( $M = Bi, In$ ) и  $Pb_{0.9}Bi_{0.05}In_{0.05}F_{2.1}$  по данным ЯМР**

**Ключевые слова:** твердые растворы, ионная подвижность, РФА, спектры ЯМР  $^{19}F$

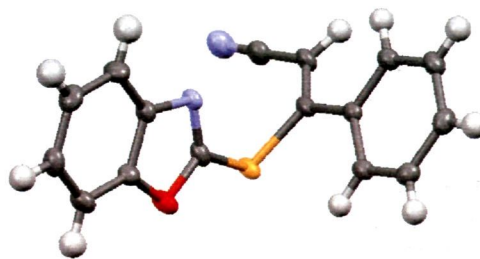


1632

Афонин А.В., Ващенко А.В., Никитина Л.П., Малькина А.Г.

**Изучение молекулярной и кристаллической структуры (*Z*)-3-(бензоксазол-2-илтио)-3-фенил-2-пропенонитрила методом РСА и его *E/Z* изомеризации в растворе по данным спектроскопии ЯМР  $^1H$**

**Ключевые слова:** (*Z*)-3-(бензоксазол-2-илтио)-3-фенил-2-пропенонитрил, рентгеноструктурный анализ, спектроскопия ЯМР  $^1H$ , *E/Z* изомеризация

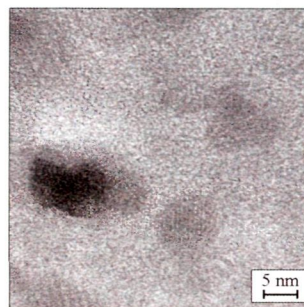


1640

Файнер Н.И., Пушкарев Р.В., Эренбург С.Б., Трубина С.В., Шестаков В.А., Меренков И.С., Terauchi M.

**Физико-химические свойства и строение пленок  $SiC_xN_y:Fe$ , выращенных из газовой смеси ферроцена, водорода и 1,1,3,3,5,5-гексаметилциклотрисилазана**

**Ключевые слова:** нанокompозитные пленки, термодинамическое моделирование, метод CVD, 1,1,3,3,5,5-гексаметилциклотрисилазан, ферроцен, спектроскопия КРС, ВРПЭМ, EXAFS

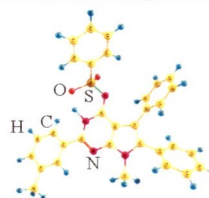


1648

Ettehadi Z., Davoodnia A., Khashi M., Ali Beyramabadi S.

**Tautomerism in the sulfonamide moiety: Synthesis, experimental and theoretical characterizations**

**Keywords:** pyrrolo[2,3-*d*]pyrimidine, DMAP, DFT, tautomerism, intramolecular proton transfer

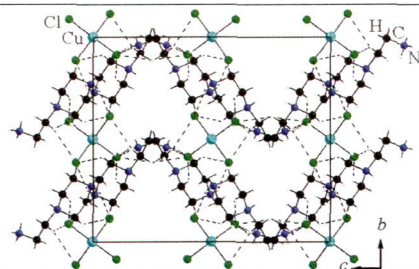


1656

Maroua El Glaoui, Maher El Glaoui, Jelsch C., Ben Nasr C.

**Hirshfeld surface analysis, crystal structure and spectroscopic studies of a new Cu(II) halocuprate salt with protonated N-amino-ethyl-piperazine**

**Keywords:** organic-inorganic hybrid material, Cu(II) complex, X-ray diffraction, coordination compound, Hirshfeld surface, infrared and ultraviolet-visible (UV-vis) spectroscopy

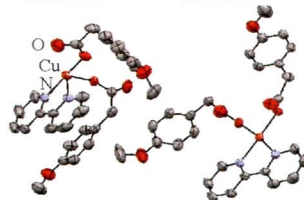


1669

Iqbal M., Ali S., Tahir M.N.

**Asymmetric oxygen bridged copper(II) carboxylate: Synthesis, complete characterization and crystal structure**

**Keywords:** bridged copper(II) complex, characterization, structural description



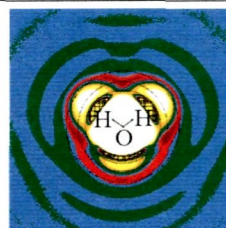
1678

**СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ**

Теплухин А.В.

**Изучение закономерностей ближнего упорядочения водных молекул методом Монте-Карло. II. Пространственные корреляции и водородные связи**

**Ключевые слова:** вода, Монте-Карло, структура, моделирование, функции распределения



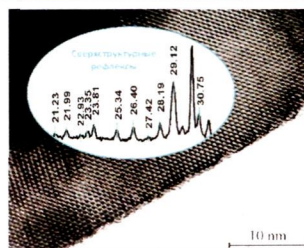
1682

**КРИСТАЛЛОХИМИЯ**

Венедиктова О.С., Булавченко О.А., Афонасенко Т.Н., Цырульников П.Г., Герасимов Е.Ю., Цыбуля С.В.

**Фазовые превращения в системе Mn—Ga—O в зависимости от условий приготовления**

**Ключевые слова:** фазовые превращения, марганецсодержащие двойные оксиды, марганец-галлиевая шпинель, порошковая рентгеновская дифракция

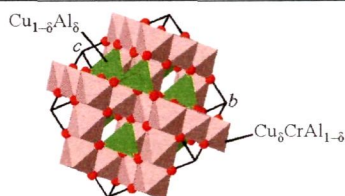


1689

Плясова Л.М., Довлитова Л.С., Сименцова И.И., Молина И.Ю., Штерцер Н.В., Минюкова Т.П.

**Влияние условий синтеза на формирование структуры шпинели CuCrAlO<sub>4</sub>**

**Ключевые слова:** шпинель CuCrAlO<sub>4</sub>, условия синтеза, структурные характеристики

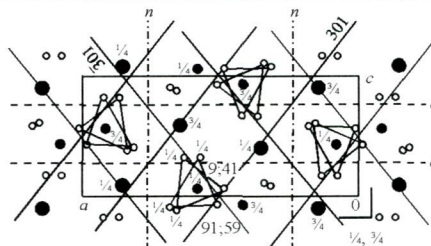


1697

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

**Структурообразующая роль тяжелых катионов в боросиликатах Sr<sub>3</sub>B<sub>2</sub>SiO<sub>8</sub> (Sr(B,Si)O<sub>2.67</sub>) и Ba<sub>3</sub>B<sub>6</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>16</sub>**

**Ключевые слова:** кристаллографический анализ, катионные подрешетки, боросиликаты, стабильность структуры, псевдосимметрия, кристаллографическая стехиометрия

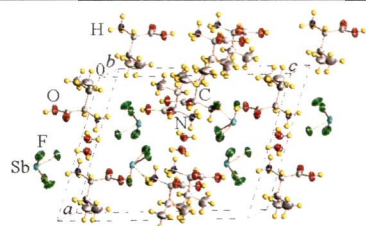


1706

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

**Кристаллическая структура моногидрата  
тетрафтороантимоната(III) *DL*-валиния**

**Ключевые слова:** кристаллическая структура,  
комплексное соединение, тетрафтороантимонат(III),  
*DL*-валин

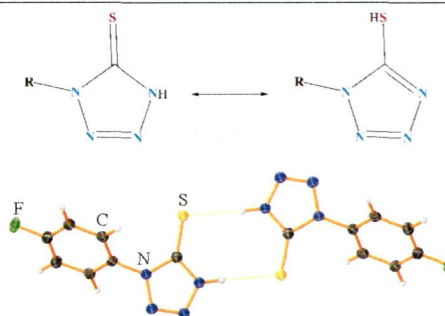


1712

Аскеров Р.К., Магеррамов А.М., Османов В.К.,  
Баранов Е.В., Борисова Г.Н., Дороватовский П.В.,  
Хрусталев В.Н., Борисов А.В.

**Молекулярная и кристаллическая структура  
1-(4-фторфенил)-1,4-дигидро-5-тетразол-5-тиона  
и его комплекса с кадмием(II)**

**Ключевые слова:** 1-(4-фторфенил)-1,4-дигидро-5-тетразол-  
5-тион, комплекс кадмия(II), кристаллическая структура,  
вторичные F...F взаимодействия,  
синхротронное излучение

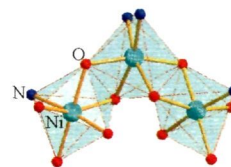


1717

Zhang Y., Liu L.-Z., Gao L., Akogun S.-F., Dong W.-K.

**An unprecedented trinuclear nickel(II) complex  
assembled from an asymmetric Salamo-type ligand**

**Keywords:** asymmetric Salamo-type ligand, Ni(II) complex,  
synthesis, crystal structure, fluorescent property

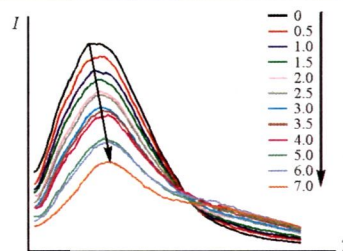


1723

Wang T.-R., Zhou Q.-C., Ren J.-L., Zhu M.-J., Xie R.-M.,  
Sheng G.-H.

**Fluorescence spectral study on the interaction between  
copper(II) complex  
with (E)-3-(2,3-dihydrobenzo[B][1,4]dioxin-6-yl)  
acrylic acid and urease**

**Keywords:** complex, urease binding quenching mechanism,  
 $K_{sv}$ ,  $K_q$

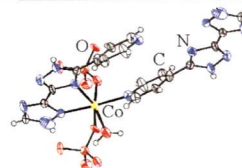


1732

Zhao D., Ma F.X., Zhang R.H.

**Syntheses and crystal structures of two coordination  
polymers based on a new N-donor aromatic ligand**

**Keywords:** hydrothermal, coordination polymer, X-ray  
diffraction, layer structure, hydrogen bond

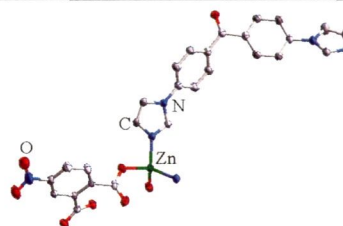


1736

Yang X., Wang G.-F., Yang L.

**Synthesis and structural characterization  
of a zinc coordination polymer  
with bis(4-(1H-imidazol-1-yl)phenyl)methanone  
and 4-nitrophthalate**

**Keywords:** coordination polymer, ribbon, zinc complex,  
crystal structure, N-donor ligand

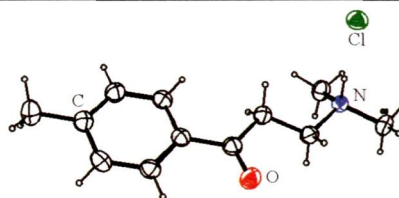


1742

Ayeni A.O., Watkins G.M., Hosten E.C.

**Molecular and crystal structure  
of a novel Mannich quaternary salt:  
3-(dimethylamino)-1-*p*-tolylpropan-1-one hydrochloride**

**Keywords:** Mannich base, aminomethylation, acetophenones,  
NMR, single crystal X-ray diffraction analysis



1746

ОБЗОР

Кравцова А.Н., Гуда Л.В., Положенцев О.Е.,  
Панкин И.А., Солдатов А.В.

**Диагностика 3D локальной атомной структуры наноструктурированных материалов на основе спектроскопии XANES**

**Ключевые слова:** 3D локальная атомная структура, спектроскопия XANES, теория функционала плотности, синхротронное излучение, наноструктурированные материалы

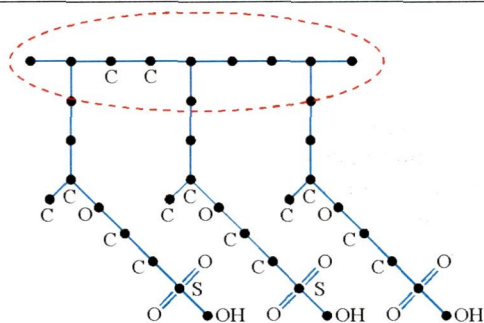


**СТРУКТУРА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ**

Алексеев Н.И., Бройко А.П., Калёнов В.Е., Корляков А.В., Лагош А.В., Лифшиц А.О., Лучинин В.В., Хмельницкий И.К.

**Структура электроактивного полимера, модифицированного графеном, для мембран биомиметических систем. Моделирование и эксперимент**

**Ключевые слова:** графен, биомиметические системы, электроактивные полимеры, искусственный мускул, восстановленный оксид графена

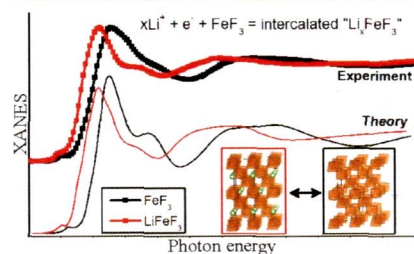


1766

Шаповалов В.В., Гуда А.А., Панкин И.А., Поль А., Солдатов А.В.

**Структурные деформации в ходе циклирования конверсионного катодного наноконкомпозита на основе FeF<sub>3</sub>**

**Ключевые слова:** фториды железа, литий-ионные аккумуляторы, катодные материалы, XRD, XANES, DFT, эволюционный алгоритм

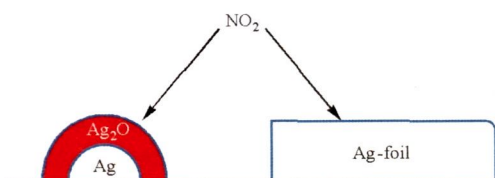


1778

Калинкин А.В., Смирнов М.Ю., Клембовский И.О., Сорокин А.М., Гладкий А.Ю., Бухтияров В.И.

**Размерный эффект при окислении серебра диоксидом азота**

**Ключевые слова:** серебро, РФЭС, СТМ, NO<sub>2</sub>, размерный эффект

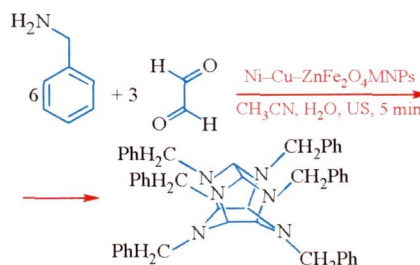


1785

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

**Green synthesis using tragacanth gum and characterization of Ni—Cu—Zn ferrite nanoparticles as a magnetically separable catalyst for the synthesis of hexabenzylhexaazaisowurtzitane (HBIW) under ultrasonic irradiation**

**Keywords:** ferrite, tragacanth gum, natural gel, hexabenzylhexaazaisowurtzitane (HBIW), ultrasonic irradiation

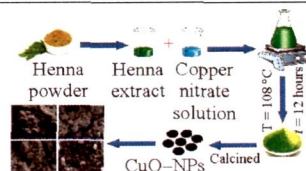


1789

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

**A novel green synthesis of copper oxide nanoparticles using a Henna powder extract**

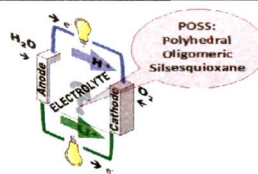
**Keywords:** Henna, copper oxide nanoparticles, nanobiotechnology, green method



1796

**Ion conducting behaviour of silsesquioxane-based materials used in fuel cell and rechargeable battery applications**

**Keywords:** silsesquioxane, electrolyte, fuel cell, Li-ion battery

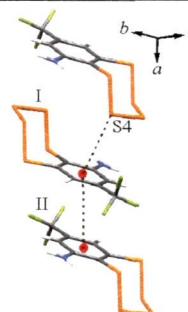


**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ  
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Рыбалова Т.В., Рогачев А.Д., Хоменко Т.М.,  
Волчо К.П., Салахутдинов Н.Ф.

**Молекулярная и супрамолекулярная структура  
8-(трифторметил)бензо[*f*][1,2,3,4,5]пентапиепин-6-  
амина – представителя конденсированных  
аренпентапиепинов**

**Ключевые слова:** 8-(трифторметил)бензо[*f*]-  
[1,2,3,4,5]пентапиепин-6-амин, аренпентапиепины,  
биологическая активность, рентгеноструктурный анализ,  
молекулярная и супрамолекулярная структура, полиморфы



**Содержание следующего номера — в конце журнала**