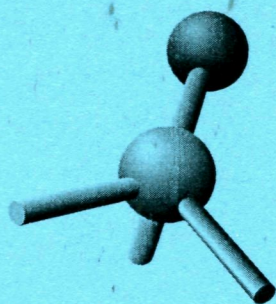


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 59  
Ноябрь  
Декабрь  
**2018**

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



**№ 8**

НОВОСИБИРСК



ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 59

Ноябрь-декабрь

№ 8, 2018

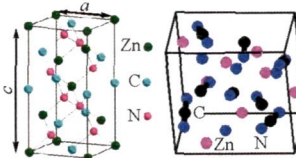
СО Д Е Р Ж А Н И Е

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Басалаев Ю.М., Емельянова А.М., Сидорова А.В.

**Особенности кристаллической, электронной и колебательной структуры цианидов цинка**

**Ключевые слова:** цианид,  $ZnCN_2$ ,  $Zn(CN)_2$ ,  $Zn(CN)_2$ , халькопирит, химическая связь

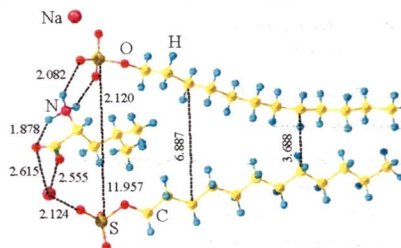


1827

Гиричева Н.И., Курбатова М.С., Тюнина Е.Ю., Баранников В.П.

**Квантово-химическое моделирование взаимодействия лейцина с димером додецилсульфата натрия**

**Ключевые слова:** аминокислота, лейцин, димер додецилсульфата натрия, комплексы, квантово-химические расчеты, метод DFT, геометрические и энергетические характеристики

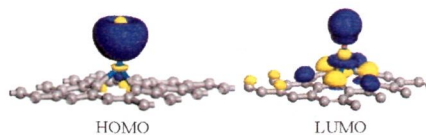


1834

Tong Y.C., Wang Q.Y., Li Z., Yu L.B.

**DFT study on the CO catalytic oxidation reaction on the PtCu-embedded graphene**

**Keywords:** CO catalytic oxidation, density functional theory, PtCu/graphene

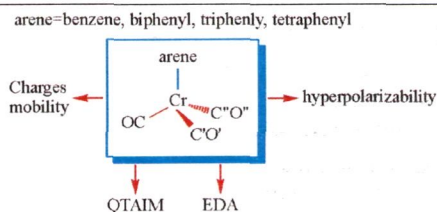


1842

Ardestani E., Ghiasi R., Tabatabai J.M.

**Theoretical study of arene ligand effect on the structure and properties of  $Cr(CO)_3(arene)$  complexes (arene=benzene, biphenyl, triphenyl, tetraphenyl)**

**Keywords:** arene complex, substituent effect, energy decomposition analysis (EDA), hyperpolarizability

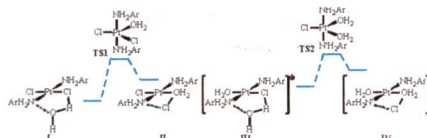


1849

Sadeghi N., Ghiasi R., Jamehbozorgi S.

**A computational approach for hydrolysis of the third-generation anticancer drug: trans-platinum(II) complex of 3-aminoflavone**

**Keywords:** transplatin, anticancer drug, solvent effect, hydrolysis, thermodynamics and kinetics

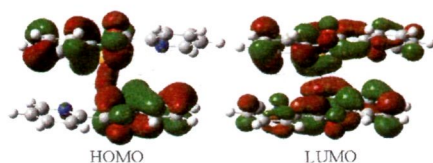


1856

Yıldırım S.Ö., Büyükmumcu Z., DoğanŞ.D., Butcher R.J.

**Redetermination and density functional studies of N,N'-(disulfanediyldibenzene-2,1-diyl)dipyridine-2-carboxamide**

**Keywords:** structural analysis, acyl azide, density functional theory, NBO analysis

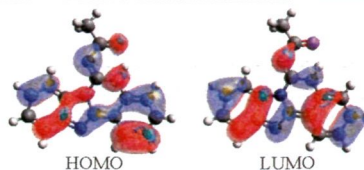


1861

Odame F., Hosten E.C.

**Synthesis, characterization and computational studies of triazatetracyclo acetamide**

**Keywords:** triazatetracyclic, acetyl chloride, frontier orbital, HOMO–LUMO

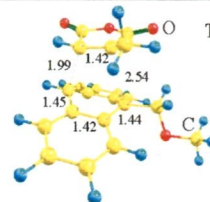


1868

Bazian A., Beyramabadi S.A., Davoodnia A., Bozorgmehr M.R., Pordel M.

**A theoretical investigation on the regioselectivity of the Diels–Alder cycloaddition of 9-(methoxymethyl)-anthracene and citraconic anhydride**

**Keywords:** DFT, Diels–Alder, cycloaddition, regioselectivity, anthracene



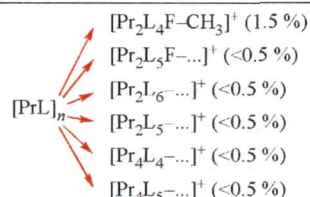
1874

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Костюк Н.Н., Дик Т.А.

**Масс-спектрометрическое исследование надмолекулярного строения *трис*-пивалоилтрифторацетоната празеодима**

**Ключевые слова:** празеодим, масс-спектр, пивалоилтрифторацетон, хелат, олигомеризация

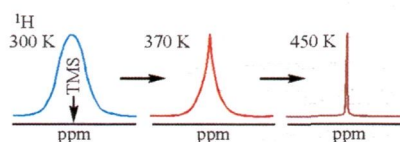


1881

Кавун В.Я., Антохина Т.Ф., Савченко Н.Н., Полянцев М.М., Бровкина О.В.

**Синтез, ионная подвижность и фазовый переход в соединении (NH<sub>4</sub>)<sub>6</sub>LiHf<sub>2</sub>Zr<sub>2</sub>F<sub>23</sub>**

**Ключевые слова:** фторид (NH<sub>4</sub>)<sub>6</sub>LiHf<sub>2</sub>Zr<sub>2</sub>F<sub>23</sub>, ионная подвижность, спектры ЯМР

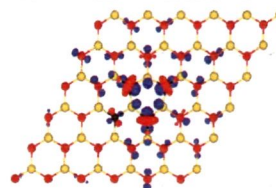


1888

Леднева А.Ю., Далматова С.А., Федоренко А.Д., Асанов И.П., Еняшин А.Н., Мазалов Л.Н., Фёдоров В.Е.

**РФЭС исследование твердых растворов Mo<sub>1-x</sub>Nb<sub>x</sub>S<sub>2</sub> (0 < x < 0.15)**

**Ключевые слова:** молибден, ниобий, дисульфиды, DFT, рентгенофотоэлектронные спектры

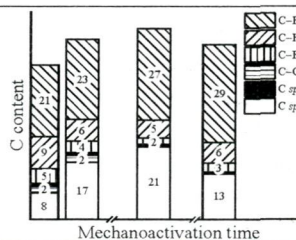


1896

Митькин В.Н., Асанов И.П., Сагидуллин А.К.

**Изучение особенностей строения углерод-фторуглеродных наноконкомпозитов методами РФЭС и низкотемпературной адсорбции азота**

**Ключевые слова:** сверхстехиометрический фторуглеродный материал, наноконкомпозиты, терморасширенный графит, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, текстура, мезопоры

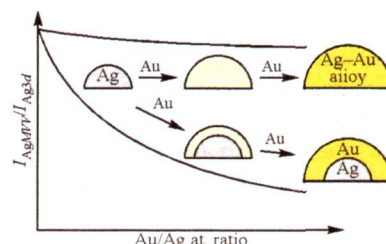


1904

Смирнов М.Ю., Калинин А.В., Бухтияров В.И.

**Использование данных метода РФЭС для определения пространственного распределения металлов в биметаллических частицах, нанесенных на плоскую поверхность**

**Ключевые слова:** серебро, золото, биметаллические частицы, структура ядро-оболочка, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия



1912



Гуда Л.В., Кравцова А.Н., Кубрин С.П., Мазурицкий М.И., Киричков М.В., Русалёв Ю.В., Шаповалов В.В., Солдатов А.В.

**Особенности структуры и химического состава обыкновенного хондрита Jiddat Al Harasis 055**

**Ключевые слова:** спектроскопия XANES, мессабаэровская спектроскопия, элементное картирование, зарядовое состояние, рентгеновская дифракция, обыкновенные хондриты, Jiddat Al Harasis 055



1921

Kichou N., Guechtouli N., Zaater S., Meghezzi H., Hank Z.

**DFT calculations and spectroscopic studies of some Ni-dimethylglyoxime based complexes isolated by hydrothermal process**

**Keywords:** nickel, dimethylglyoxime, hydrothermal process, metal complexes, DFT



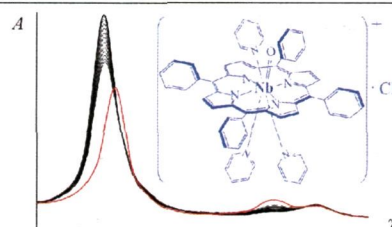
1929

**СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ**

Моторина Е.В., Можжухина Е.Г., Ломова Т.Н.

**Химическая структура пиридиновых комплексов оксо(5,10,15,20-тетрафенил21Н,23Н-порфинато)хлорониобия(V) по данным термодинамики/кинетики образования и спектроскопии**

**Ключевые слова:** ниобий(V)порфирин, пиридин, обратимая координация, спектроскопия, химическая структура



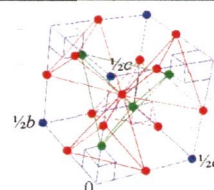
1942

**КРИСТАЛЛОХИМИЯ**

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

**Вариации атомных конфигураций в стабильных высокосимметричных (кубических) структурах**

**Ключевые слова:** кристаллографический анализ, стабильность – симметрия, шпинель, (Fe,Ni)<sub>8</sub>AgS<sub>8</sub>, KTb<sub>3</sub>F<sub>10</sub>, (Ba,Pb)<sub>6</sub>(Cu,Fe,Ni)<sub>25</sub>S<sub>27</sub>, кристаллодинамика (orderdynamics)

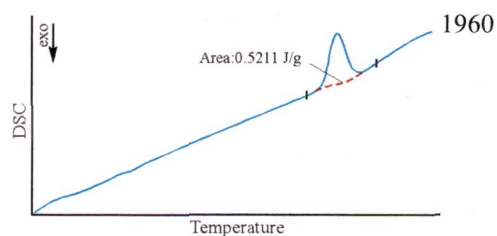


1953

Храненко С.П., Сухих А.С., Пищур Д.П., Бунеева П.С., Комаров В.Ю., Громилов С.А.

**[NiEn<sub>3</sub>]WO<sub>4</sub>. кристаллоструктурные особенности фазового перехода при 269 К**

**Ключевые слова:** биметаллическая комплексная соль, трис-этилендиаминникель, вольфрамат-анион, дифференциально-сканирующая калориметрия, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия

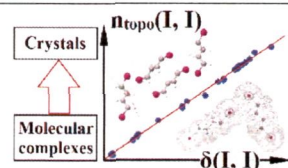


1960

Мухитдинова С.Э., Барташевич Е.В., Цирельсон В.Г.

**Индексы порядков связей иода: от молекулярных комплексов к кристаллам**

**Ключевые слова:** иод, индексы порядков связи, индексы делокализации электронов, галогенные связи

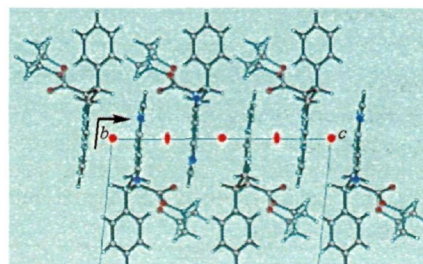


1966

Исмиев А.И., Потехин К.А., Малеев А.В., Аскеров Р.К., Магеррамов А.М.

**Синтез, молекулярная и кристаллическая структура этил 4,6(R,S)-дифенил-2-дицианометиленциклогекс-3-ен-1(R,S)-карбоксилата**

**Ключевые слова:** мультикомпонентная конденсация, ацетоуксусный эфир, бензальацетофенон, 1,3-дикарбонильные соединения, малондинитрил, молекулярные агломераты, атом-атомные потенциалы

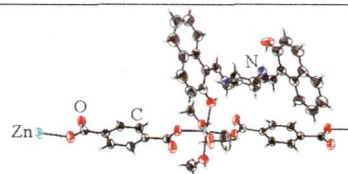


1975

Wang D.-W., Yang B., Zhao N., Shi Z.-J., Wang Y., Yang S.-L.

**Crystal structure of a new Zn(II) coordination polymer based on a chiral salen Schiff base**

**Keywords:** crystal structure, chiral Schiff base, Zn(II) complex, coordination polymer

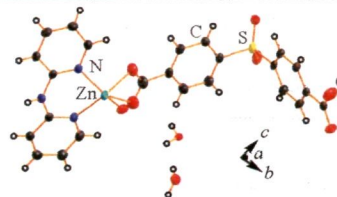


1982

Yuan C., Liu S.N., Xu X.J.

**Crystal structure and luminescence of a novel binuclear zinc(II) complex with di-2-pyridylamine and 4,4'-sulfonyldibenzoate**

**Keywords:** Zn(II) complex, di-2-pyridylamine, 4,4'-sulfonyldibenzoic acid, crystal structure, luminescence

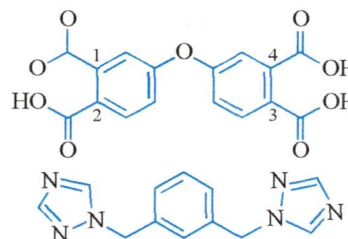


1986

Yuan C., Liu S.N., Xu X.J.

**Synthesis, crystal structure and fluorescent property of a one-dimensional coordination polymer constructed by 1,3-bis(1,2,4-triazol-1-ylmethyl)-benzene and 4,4'-oxydiphthalic acid**

**Keywords:** Cd(II) complex, 4,4'-oxydiphthalic acid, 1,3-bis(1,2,4-triazol-1-ylmethyl)benzene, crystal structure, fluorescent property

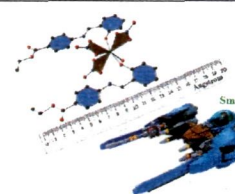


1992

Abu-Yamin A.A., AlDamen M.A., Sinnokrot M.O., Juwhari H.K., Salman M., Sarairah I., Al-hawarin J., Mubarak M.S.

**Synthesis, characterization, crystal structure and fluorescence of a new samarium Schiff base complex**

**Keywords:** samarium, Schiff base, fluorescence, crystal structure, Sparkle/PM7



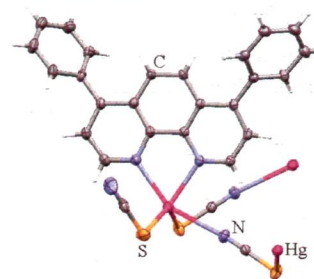
1998

Amani V., Alizadeh R., Khosrojerdy A.

**Mercury(II) mixed-ligand coordination polymer constructed from 4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline and thiocyanate ligands:**

**Crystal structure studies, spectroscopic characterization and thermal analyses**

**Keywords:** crystal structure, mercury(II) complex, 4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline, thermal gravimetric analysis, differential thermal analysis, luminescence spectroscopy



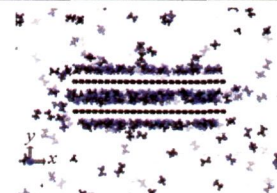
2006

**МАТЕРИАЛЫ XVIII СИМПОЗИУМА  
ПО МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОМУ ВЗАИМОДЕЙСТВИЮ  
И КОНФОРМАЦИЯМ МОЛЕКУЛ  
Ярославль, 20-24 июня 2016 г.**

Голмачев А.М., Анучин К.М., Фоменков П.Е., Гумеров М.Р.

**Исследование равновесия адсорбции и плотности адсорбатов методом молекулярной динамики**

**Ключевые слова:** адсорбция, изотермы адсорбции, численный эксперимент, молекулярная динамика, шелевидные микропоры, углеродные адсорбенты



2013

Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Каплунов И.А.

**Сравнение стандартных функционалов расчета свойств молекул на вариационном пределе**

**Ключевые слова:** слэтеровский базис, электронная энергия, энтальпия образования, энтальпия разрыва связи, погрешности обменно-корреляционных потенциалов, вариационный предел

$\Delta E_{elec} \rightarrow 0$   
method/ basis set = B1LYP, B1PW91, B3LYP, BHandH, BHandHLYP, BLYP, BP, CAMYB3LYP, HTBS, KMLYP, LCY-BLYP, LCY-BP86, LCY-PBE, LDA, M06, M06-2X, M06-HF, M06L, mPBE, mPW, MPWIK, MPW1PW, O3LYP, OLYP, OPBE, OPBE0, PBE, PBE0, PBEsol, PW91, revPBE, revTPSS, RPBE, TPSS, TPSSH, X3LYP, HF / QZ4P, aug-TZ2P, TZ2p

$\Delta \Delta_{298} H^0 \rightarrow 0$

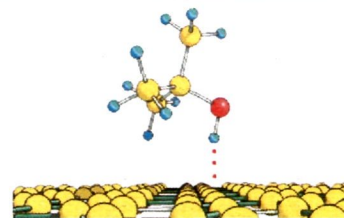
2021



Терентьев А.В., Варфоломеева В.В. 2028

**Водородная связь  $\text{OH}\cdots\pi_{\text{ГТС}}$  при адсорбции изобутанола, *трет*-бутанола и *трет*-амилового спирта на графитированной термической саже**

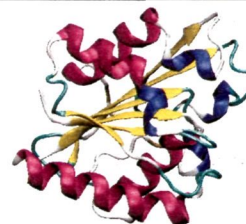
**Ключевые слова:** водородные связи, константа Генри, молекулярно-статистический расчет, графитированная термическая сажа, теория функционала плотности (DFT)



Кондратьев М.С., Кабанов А.В., Самченко А.А.,  
Комаров В.М., Хечинашвили Н.Н.

**Параллельные вычисления в разработке термостабильных мутантов липаз**

**Ключевые слова:** липаза, LipA, CLE, термостабильность, молекулярная динамика, биоинженерия, точечные мутации, ферменты

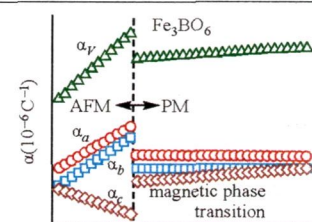


**ШКОЛА ДЛЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ  
"ТЕРМОРЕНТГЕНОГРАФИЯ И РЕНТГЕНОГРАФИЯ  
НАНОМАТЕРИАЛОВ-3"  
Екатеринбург, 3-6 апреля 2018 г.**

Бирюков Я.П., Филатов С.К., Вагизов Ф.Г., Зинатуллин А.Л.,  
Бубнова Р.С.

**Термическое расширение антиферромагнетиков  $\text{FeVO}_3$  и  $\text{Fe}_3\text{VO}_6$  вблизи температуры Нееля**

**Ключевые слова:** бораты железа, антиферромагнетики, терморентгенография, мессбауэровская спектроскопия, термическое расширение

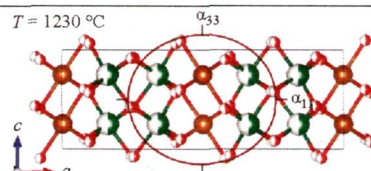


2041

Гуляева Р.И., Петрова С.А., Чумарев В.М.

**Высокотемпературные исследования термического расширения  $\text{FeNb}_2\text{O}_6$**

**Ключевые слова:** ниобат железа, рентгеноструктурный анализ, термическое расширение, анизотропия

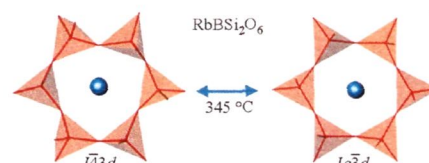


2049

Кржижановская М.Г., Бубнова Р.С., Филатов С.К.

**Полиморфизм  $\text{RbBSi}_2\text{O}_6$  и кристаллическая структура его высокотемпературной модификации по данным порошковой дифрактометрии**

**Ключевые слова:** боросиликаты, порошковая дифрактометрия, термическое поведение, полиморфизм

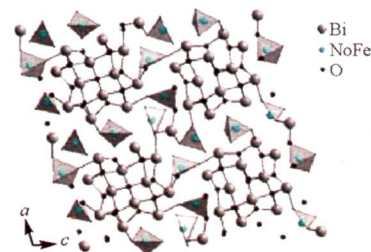


2055

Михайловская З.А., Петрова С.А., Буянова Е.С., Абрахамс А.

**Высокотемпературные исследования структуры сложных оксидов на основе  $\text{Bi}_{26}\text{Mo}_{10}\text{O}_{69-d}$**

**Ключевые слова:** молибдаты висмута, оксид висмута, кислородно-ионные проводники, высокотемпературная рентгеновская дифракция, высокотемпературная нейтронная дифракция, bismuth molybdate, bismuth oxide, oxygen ion conductors, HTXRPD, HTNPD

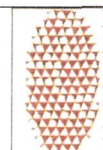


2061

Евтушок Б.Ю., Черепанова С.В., Козлова Е.А.

**Структура и морфология наночастиц CdS**

**Ключевые слова:** дефекты упаковки, форма частиц, моделирование, формула Дебая, DISCUS

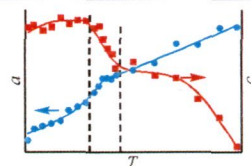


2071

Фёдорова О.М., Ведмидь Л.Б.

**Структурные изменения феррита иттербия  $\text{YbFe}_2\text{O}_4$  в интервале температур от  $-150$  до  $300$  °С**

**Ключевые слова:** феррит железа, рентгеноструктурный анализ, коэффициенты термического расширения

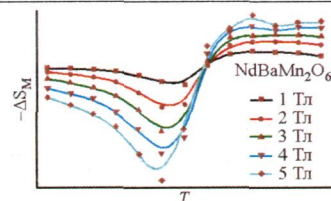


2079

Стерхов Е.В., Упоров С.А.

**Трансформация магнитных переходов и кристаллической структуры  $\text{NdBaMn}_2\text{O}_6$  при диамагнитном разбавлении ионами  $\text{Ti}^{4+}$  по Mn-подрешетке**

**Ключевые слова:** двойные манганиты, упорядочение, магнитокалорический эффект, магнитные фазовые переходы



2083

Указатель статей. Том 59 ..... 2090

Авторский указатель. Том 59 ..... 2103

Содержание следующего номера — в конце журнала