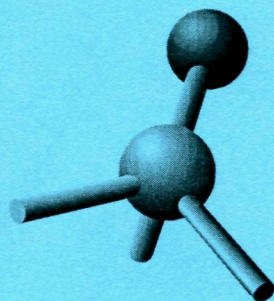


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 60  
январь  
2019

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 1

НОВОСИБИРСК

ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

ТОМ 60

Январь

№ 1, 2019

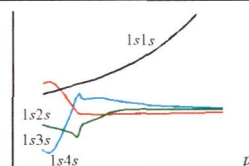
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Тапилин В.М.

Метод весовых функций конфигураций для решения уравнения Шредингера гелий-подобных ионов

Ключевые слова: уравнение Шредингера, корреляция, Не-подобные ионы, жесткие уравнения, метод прогонки

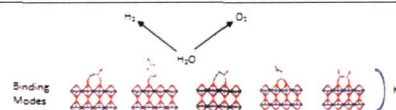


5

Zhang L., Wang Q.

Binding mode of malonic acid on IrO<sub>2</sub> surface

Keywords: anchoring group, DFT, water splitting



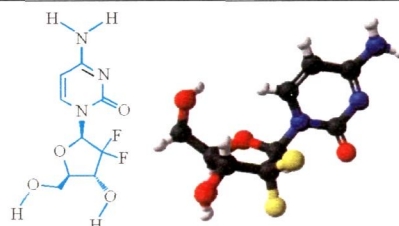
11

Ghasemi A.S., Ashrafi F., Babanejad S.A., Elyasi A.

Studying physicochemical properties of anti-cancer drug, Gemcitabine, on the surface of Al doped C<sub>60</sub> and C<sub>70</sub> fullerenes:

A computational DFT

Keywords: anti-cancer drug, gemcitabine, fullerenes, HOMO energy, LUMO energy

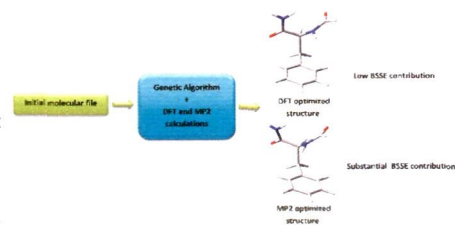


17

El Guerdaoui A., Tijar R., Bourjila M., El Merbouh B., El Bouzaidi R.D., El Gridani A.

Conformational space analysis of N-formyl-L-phenylalanine-N-amide protected amino acid: Effects of intramolecular basis set superposition error

Keywords: genetic algorithm, L-phenylalanine, DFT calculation, potential energy surface, basis set superposition error, protein data bank

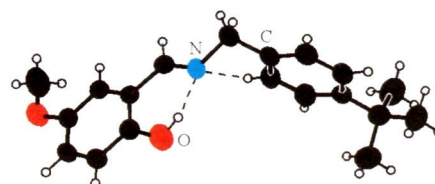


25

Zeyrek C.T., Tümer Y., Kiraz A., Demir N., Yapar G., Boyacıoğlu B., Yıldız M., Ünver H., Elmali A.

DFT calculation, molecular docking, biological activity and crystal structure of (E)-2-((4-tert-butylbenzylimino)methyl)-4-methoxyphenol

Keywords: Schiff base, DFT, molecular docking, antimutagenicity, CT-DNA



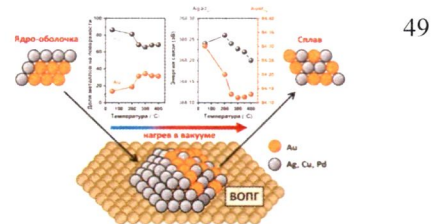
37

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Бухтияров А.В., Просвирин И.П., Четырин И.А.,  
Бухтияров В.И.

**Возможности метода РФЭС СИ для изучения особенностей приготовления модельных катализаторов М–Au/ВОПГ (М = Pd, Ag, Cu)**

**Ключевые слова:** биметаллические катализаторы, ВОПГ, РФЭС, синхротронное излучение

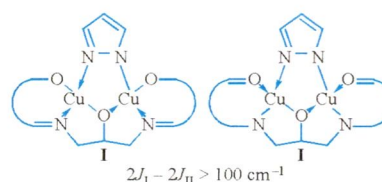


49

Щербаков И.Н., Левченков С.И., Попов Л.Д.,  
Туполова Ю.П., Морозов А.В., Распопова Е.А.,  
Любченко С.Н.

**К вопросу о влиянии природы немостиковых донорных атомов на структуру и магнитные свойства бинадерных комплексов меди(II) с гетероциклическими азометиновыми лигандами**

**Ключевые слова:** азометины, координационные соединения, магнетохимия, обменное взаимодействие, теория функционала плотности, метод нарушенной симметрии



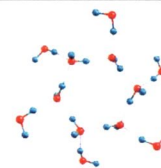
58

## СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Шайкомалова Е.С., Журавлёв Ю.Н.

**Структура и свойства фазовых состояний льда**

**Ключевые слова:** вода, лед, модули упругости, теория функционала плотности, упругие постоянные, уравнение состояния, заряд, колебательный спектр

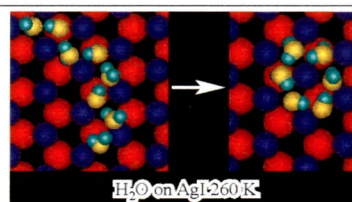


64

Шевкунов С.В.

**Молекулярные циклы (H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub> на подложке с гексагональной кристаллической структурой**

**Ключевые слова:** вода, структура молекулярных кластеров, водородные связи, свободная энергия, компьютерное моделирование



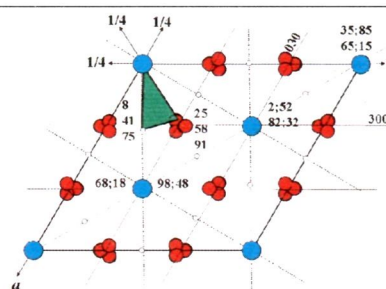
71

## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

**Кристаллографическая симметрия – фундаментальное свойство организации материи, определяющее преобразование энергии и пространства в конденсированных атомных системах**

**Ключевые слова:** симметрия–стабильность, степени свободы структуры, условия стабильности, популярные структурные типы, корунд, шпинель, гранат, апатит, турмалин, кристаллографический анализ

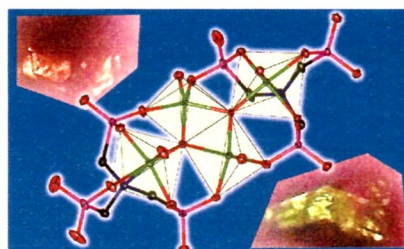


81

Сомов Н.В., Чаусов Ф.Ф., Ломова Н.В., Исупов Н.Ю.,  
Бельтюков А.Н., Закирова Р.М., Петров В.Г.,  
Шумилова М.А., Жиров Д.К.

**Икосагидрат бис-(нитрило-трис-метиленфосфonatoоксованадата(IV))-диоксо-бис-оксованадий(IV) октанатрия Na<sub>8</sub>[(VO)<sub>2</sub>(μ-O)<sub>2</sub>]{(VO)μ<sup>3</sup>-N(CH<sub>2</sub>PO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>}<sub>2</sub>] · 20H<sub>2</sub>O**

**Ключевые слова:** икосагидрат координационные полиэдры

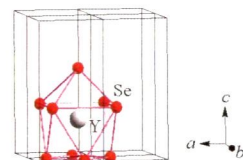


87

Подберезская Н.В., Комаров В.Ю., Николаев Р.Е.,  
Чусова Т.П., Зеленина Л.Н., Кучумов Б.М., Корольков И.В.

**Тетрагональный стехиометричный диселенид иттрия**

**Ключевые слова:** полиселениды иттрия,  
синтез полудторных селенидов РЗЭ, рентгеноструктурный анализ



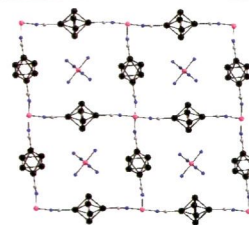
98

Муравьева В.К., Лемуан П., Кордиер С., Наумов Н.Г.

**Кристаллическая структура слоистых цианомостикивых координационных полимеров**

**[M(NH<sub>3</sub>)<sub>6</sub>]<sub>4</sub>[{M(NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>}{Re<sub>3</sub>Mo<sub>3</sub>Se<sub>8</sub>(CN)<sub>6</sub>}]<sub>2</sub>·15H<sub>2</sub>O**  
(M = Co, Ni)

**Ключевые слова:** гетерометаллический кластер, рений, молибден,  
координационные полимеры, кристаллическая структура

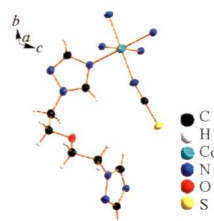


106

Zhang C., Wang J.

**Synthesis, crystal structure and magnetic property of a one-dimensional Co(II) coordination polymer based on 1,1'-(2,2'-oxybis(ethane-2,1-diyl))bis(1H-1,2,4-triazole)**

**Keywords:** Co(II) complex,  
1,1'-(2,2'-oxybis(ethane-2,1-diyl))bis(1H-1,2,4-triazole),  
crystal structure, one-dimensional chain

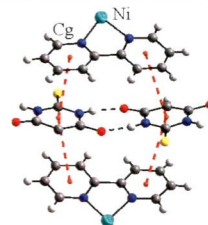


114

Головнев Н.Н., Молокеев М.С., Стерхова И.В.,  
Лесников М.К., Самойло А.С.

**Структура гексагидрата бис(2-тиобарбитурата)трис(2,2-дипиридил)никеля(II)**

**Ключевые слова:** никель(II), барбитуровая кислота,  
2,2'-дипиридил, смешаннолигандный комплекс, структура,  
термическая устойчивость

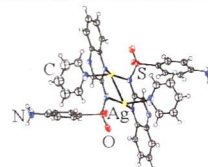


118

Dubey R.P., Patel U.H.

**Crystal structure of silver complex of sulfaquinoxaline with secondary ligand pyridine**

**Keywords:** Ag complex, sulfaquinoxaline, crystal structure, MIC,  
pyridine

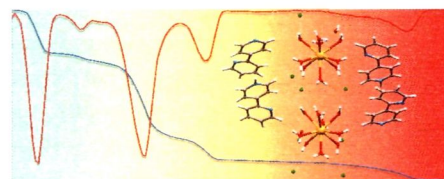


124

Sieroń L., Czyłkowska A., Raducka A.

**Crystal structure and thermoanalytical study of neodymium(III) complex with 2,4'-bipyridyne**

**Keywords:** 2,4'-bipyridyne, neodymium aqua-complex,  
9-coordinate geometry, X-ray structure analysis,  
translational pseudosymmetry, thermal decomposition

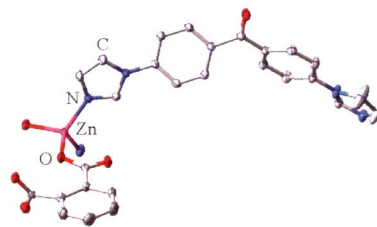


131

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

**A zinc coordination polymer assembled from bis(4-(1H-imidazol-1-yl)phenyl)methanone and phthalic acid: Synthesis, structural characterization, and fluorescent properties**

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

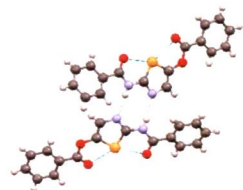


138

Odame F., Hosten E., Betz R., Tshentu Z.R.

**Characterization and computational studies of 2-(benzamido)thiazol-5-yl benzoate**

**Keywords:** synthesis, thiazole, benzoyl chloride, HOMO-LUMO,  
frontier orbitals



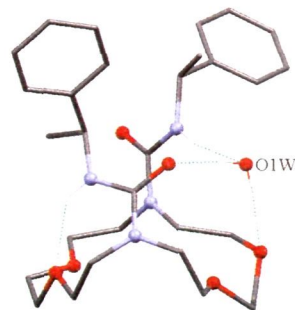
143

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ  
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Фонарь М.С., Плужник-Гладырь С.М., Камалов Г.Л.,  
Кравцов В.Х.

**Сокристаллизация хирального  
N7,N16-бис(S-1-фенилэтил)-1,4,10,13-тетраокса-  
7,16-дiazациклооктадекан-7,16-дикарбоксамида  
с гидрохлоридами метиловых эфиров  
энантиомеров лейцина и валина**

**Ключевые слова:** сокристаллизация, кристаллическая структура,  
энантиомер, краун-эфир, аминокислота, конформация,  
водородная связь

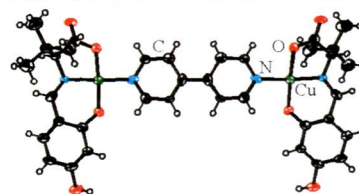


150

Celepçi D.B., Korkmaz N., Astley S.T., Aygün M.

**Synthesis and structural characterization of two novel  
copper(II) Schiff base complexes and their water-containing  
supramolecular structures**

**Keywords:** copper(II) complexes, crystal structure, Schiff bases,  
hydrogen bonding, supramolecular structure

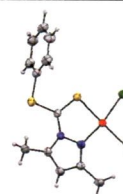
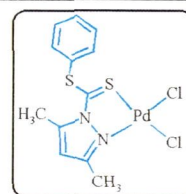


158

Khan S.A., Khan E., Noor A., Schwarz S.

**Palladium(II) complexes based on N,S-donor ligands:  
Synthesis, molecular structures**

**Keywords:** phenyl(chloro)dithioformate,  
phenyl(pyrazol-1-carbodithioate) derivatives, N,S ligands,  
palladacycles, DFT calculations



166

Содержание следующего номера — в конце журнала