



ISSN 0136-7463

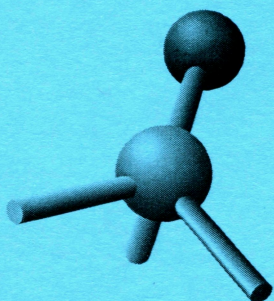
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 60

март

2019

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 3

НОВОСИБИРСК



**ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ**  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 60

Март

№ 3, 2019

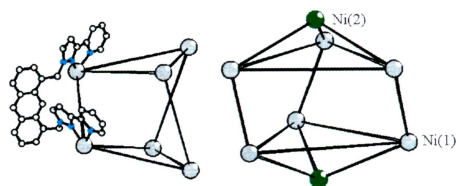
**СОДЕРЖАНИЕ**

**ОБЗОРЫ**

Гусев А.Н., Шульгин В.Ф., Кискин М.А.

**Самоорганизация полиядерных комплексов на основе спейсерированных пиридилазолов**

**Ключевые слова:** полиядерные комплексы, пиразолы, триазолы, спейсер, PCA, самоорганизация, кристаллическая структура



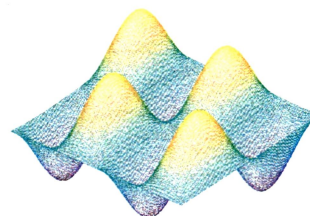
353

**ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ**

Грибов Л.А.

**Решение задачи об электронно-колебательно-вращательных уровнях энергии многоатомной молекулы произвольного строения в обобщенных координатах**

**Ключевые слова:** квантовая теория молекул, обобщенные координаты, уровни энергии

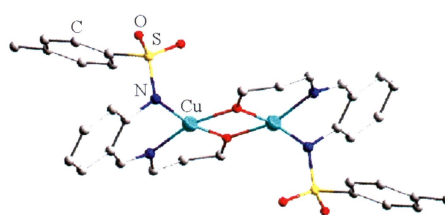


375

Бурлов А.С., Старикова А.А., Власенко В.Г., Кошкин Ю.В.

**Теоретическое моделирование строения N-[2-[(гидроксиалкилимино)метил]фенил]-4-метилбензолсульфамидов и их моно- и биядерных комплексов меди(II)**

**Ключевые слова:** азометины, металлохелаты, магнитные свойства, квантово-химические расчеты

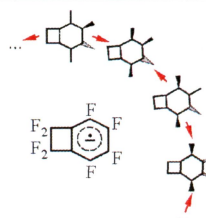


384

Береговая И.В., Щеголева Л.Н., Боровков В.И., Карпов В.М.

**Анион-радикал перфторбензоциклобутена – структурно нежесткая частица**

**Ключевые слова:** перфторбензоциклоалкены, метод времязрешенного магнитного эффекта, анион-радикалы, поверхность потенциальной энергии, псевдovращение, константы сверхтонкого взаимодействия

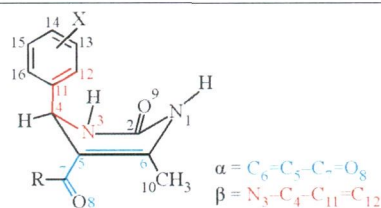


392

Memarian H.R., Amini S.

**Computational studies on the rotamers of 4-aryl-2-oxo-1,2,3,4-tetrahydropyrimidines and 4-aryl-2-oxo-1,2-dihydropyrimidines**

**Keywords:** conformational analysis, dihydropyrimidines, tetrahydropyrimidines, steric effect, bond rotation, solvent effect

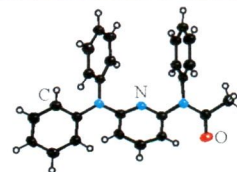


396

Okuda T., Umezono S., Okuno T.

**Crystal structure and DFT study of N-(6-(diphenylamino)pyridin-2-yl)-N-phenylacetamide**

**Keywords:** crystal structure, theoretical calculation, acetamide, pyridine, hydrogen bond



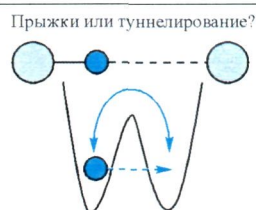
412

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Галкина Ю.А., Вершинин М.А., Колесов Б.А.

**Спектры КР молекулярных кристаллов с сильными водородными связями N-H...N в интервале температур 5 – 300 К**

**Ключевые слова:** спектры КР, сильные водородные связи, квантово-химический расчет, протонный таутомеризм

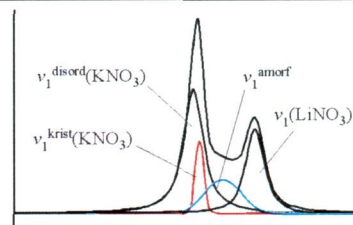


415

Гафуров М.М., Рабаданов К.Ш., Амиров А.М., Атаев М.Б., Кубатаев З.Ю., Какагасанов М.Г.

**Колебательные спектры и структура системы  $(1-x)\text{Li}_{0.42}\text{K}_{0.58}\text{NO}_3 - x\text{Al}_2\text{O}_3$**

**Ключевые слова:** композит, бинарная система, нитрат лития, нитрат калия, комбинационное рассеяние, инфракрасное поглощение, рентгенофазовый анализ



422

Saouli I., Landron S., Peric B., Boutarfaia A., Kouvatas C., Le Pollès L., Cuny J., Gautier R.

**Computing  $^{93}\text{Nb}$  NMR parameters of solid-state niobates. The geometry matters**

**Keywords:** NMR, DFT, niobates, chemical shift, quadrupolar interaction



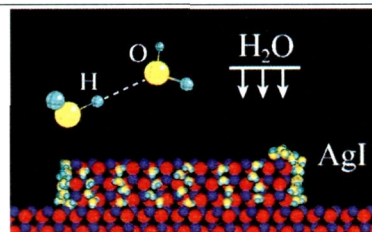
430

**СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ**

Шевкунов С.В.

**Структура зародыша водного конденсата в поле поверхностных кристаллических дефектов на базовой грани  $\beta\text{-AgI}$**

**Ключевые слова:** вода, кристаллическая поверхность, структура контактного слоя, водородные связи, компьютерное моделирование

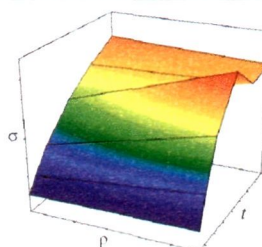


437

Одинаев С., Акдолов Д.М., Идибегзода Х.И.

**Исследование частотной дисперсии коэффициента удельной электропроводности водных растворов электролитов**

**Ключевые слова:** коэффициенты трения, времена релаксации, потенциальная энергия межчастичного взаимодействия, радиальная функция распределения, модуль электроупругости, коэффициент удельной электропроводности



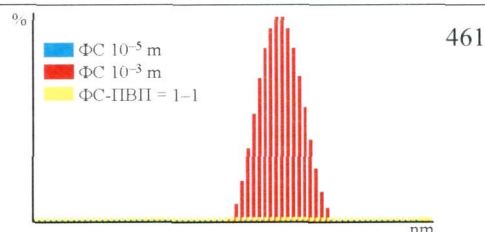
452



Батов Д.В., Кустов А.В., Кручин С.О., Макаров В.В., Березин Д.Б.

### Агрегация катионных производных хлорина $e_6$ в воде и водных растворах поливинилпирролидона

**Ключевые слова:** катионные производные хлорина  $e_6$ , фотосенсибилизаторы, водные растворы, поливинилпирролидон, динамическое рассеяние света, агрегация, диаметр частиц

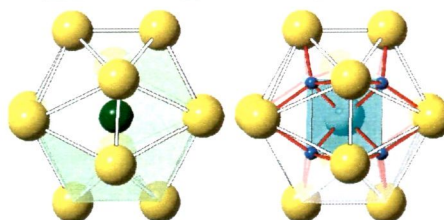


## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Бакакин В.В.

### Интригующая структурно-функциональная аналогия крупных катионов и анионоцентрированных кластеров ( $X^{2+}M_n^+$ ) на примере двойных халькогенидов K, Rb, Cs, Tl<sup>(I)</sup> и Ag<sup>(I)</sup>, Cu<sup>(I)</sup>

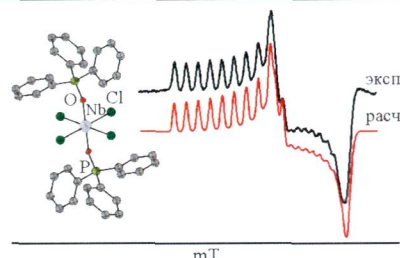
**Ключевые слова:** халькогениды, кристаллическая структура, кристаллохимический анализ, анионоцентрированные кластеры



Полтарак П.А., Комаров В.Ю., Козлова С.Г., Надолинный В.А., Полтарак А.А., Артемкина С.Б., Федоров В.Е.

### Новые молекулярные комплексы ниобия (IV) $NbX_4(OPPh_3)_2$ ( $X = Cl, Br$ ): синтез, кристаллическая и электронная структура

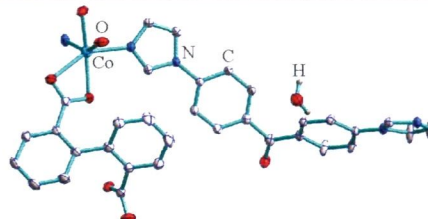
**Ключевые слова:** ниобий, синтез, кристаллическая структура, ЭПР спектроскопия, хлорид, бромид, трифенилфосфин оксид



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

### Synthesis and characterization of a cobalt coordination polymer with bis(4-(1H-imidazol-1-yl)phenyl)methanone and 1,1'-biphenyl-2,2'-dicarboxylate

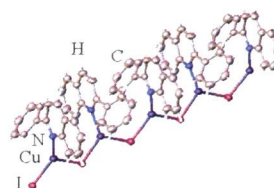
**Keywords:** N-donor ligand, cobalt complex, crystal structure, coordination polymer, thermal stability



Aguirrechu-Comerón A., Hernández-Molina R., González-Platas J.

### Structure of one dimensional copper(I) polymer with iodine bridges

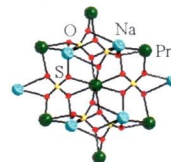
**Keywords:** copper(I), polymeric structures, iodine bridging structures, structural versatility



Paul A.K., Kanagaraj R.

### Synthesis, characterizations and crystal structure analysis of a new mixed metal sulfate, $PrNa(SO_4)_2(H_2O)$

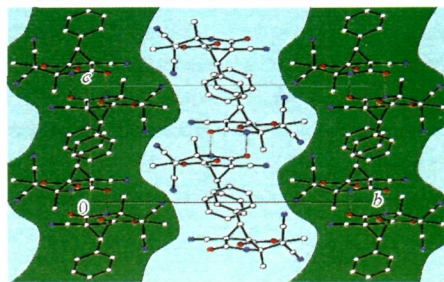
**Keywords:** mixed metal, praseodymium sulfate, single crystal, FT-IR, TGA



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

### Синтез, молекулярная и кристаллическая структура этил 5-циано-2-(дицианометил)-2-метил-4-оксо-6-фенил-3-азабицикло[3.1.0]гексан-1-карбоксилата

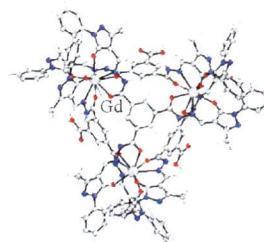
**Ключевые слова:** мультикомпонентная каскадная конденсация, малонодинитрил, 3-азабицикло[3.1.0]гексан, атом-атомные потенциалы, молекулярные агломераты, молекулярные слои, водородная связь



Шульгин В.Ф., Балуда Ю.И., Гусев А.Н.,  
Паниковровский Т.Л., Кискин М.А., Ерёменко И.Л.

**Координационные соединения лантанидов  
с гидразонами 3-метил-1-фенил-4-формилпиразол-5-она  
и 1,3,5-бензолтрикарбоновой кислоты**

**Ключевые слова:** 1,3,5-бензолтрикарбоновая кислота,  
3-метил-1-фенил-4-формилпиразол-5-он, гидразон, гадолиний,  
диспрозий, PCA



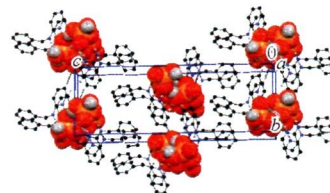
511

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ  
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Jagan R., Sivakumar K.

**Dihydrogenphosphate anionic template assisted  
hydrogen bonded networks in 2-benzylaminopyridinium  
and 4-ethoxyanilinium dihydrogenphosphate salts**

**Keywords:** crystal structure, supramolecular network,  
dihydrogenphosphate, Cambridge Structural Database, SHELX



517

Содержание следующего номера — в конце журнала