



ISSN 0136-7463

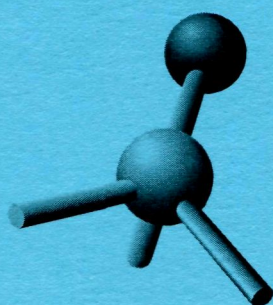
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 60

июнь

2019

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 6

НОВОСИБИРСК

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 60

Июнь

№ 6, 2019

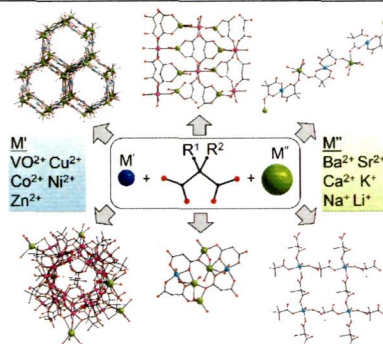
СОДЕРЖАНИЕ

ОБЗОРЫ

Бажина Е.С., Гоголева Н.В., Зорина-Тихонова Е.Н.,
Кискин М.А., Сидоров А.А., Еременко И.Л.

Гомо- и гетероядерные архитектуры полиядерных комплексов, содержащие анионы замещенных малоновых кислот: синтетические подходы и анализ молекулярного и кристаллического строения

Ключевые слова: оксованадий(IV), медь(II), кобальт(II), никель(II), цинк(II), литий, барий, натрий, калий, малоновая кислота, гидроксомалонатные комплексы, гетерометаллические комплексы, координационные полимеры, кристаллическая структура



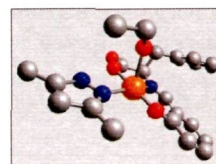
893

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Massoud R.A., Makhyoun M.A.

Theoretical study of the interaction of ethanol with the (3, 5-dimethylpyrazole- N^2) (N-salicylidene-phenyl-alaninato-O,N,O')copper(II) complex

Keywords: DFT methods, energy scan curve, ethanol adduct

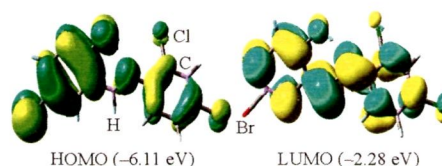


921

Soltani A., Mashkoor R., Khalaji A.D., Raz S.G., Ghoran S.H.,
Dusek M., Fejfarova K., Kanani Y.

Synthesis, characterization, crystal structure, and DFT study of 4-bromo-2-(4,6-dichloro-phenylimino)-phenol

Keywords: Schiff base, single crystal, DFT calculation, electronic structure, NMR

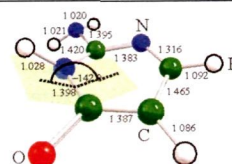


929

Dimitrov B.H., Bakalska R.I., Delchev V.B.

Phototautomerism of isocytosine in a water medium: Theoretical and experimental study

Keywords: conical intersections, isocytosine, phototautomerism, TDDFT calculations



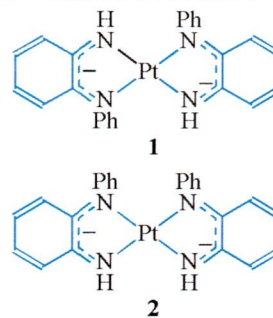
937

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Иванова Т.М., Сидоров А.А., Мазалов Л.Н., Федоренко А.Д., Кискин М.А., Савилов С.В., Лунин В.В., Новоторцев В.М., Еременко И.Л., Калинин А.В., Федосеева Ю.В., Окотруб А.В.

Рентгеноспектральное изучение электронного строения неинноцентных моно- и биядерных комплексов платины с N-фенил-*o*-бензосемихинондиимин

Ключевые слова: редокс-активные лиганды, РФЭС, анион-радикал N-фенил-*o*-бензосемихинондиимин, комплексы платины(II), электронное строение, DFT, NEXAFS

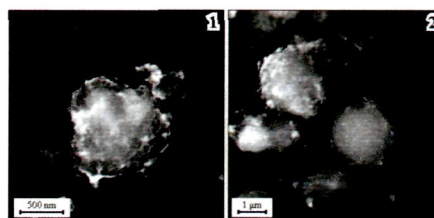


948

Свиницкий Д.А., Славинская Е.М., Столкус О.А., Романенко А.В., Стадниченко А.И., Кибис Л.С., Деревянникова Е.А., Евтушкова А.А., Боронин А.И.

Состояние платины и структурные особенности катализаторов Pt/Al₂O₃ в реакции окисления NH₃

Ключевые слова: окисление остаточного аммиака, Pt/Al₂O₃, нанесенные катализаторы, оксид алюминия, наночастицы платины, скрининг катализаторов, РФА, ПЭМ, РФЭС

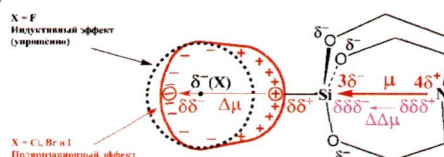


959

Тандура С.Н., Беляева В.В., Барышок В.П., Гостевский Б.А., Смирнов В.И.

Структурные проявления поляризационного эффекта в 1-галогенсилатранах по механизму диполь-индуцированный диполь

Ключевые слова: 1-галогенсилатраны, поляризационный эффект, индуктивный эффект, индуцированный диполь



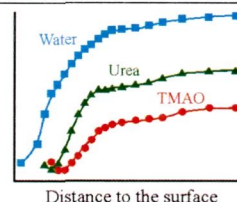
973

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Волошин В.П., Медведев Н.Н.

Подвижность молекул воды, мочевины и триметиламиноксида вблизи глобулярного белка

Ключевые слова: молекулярно-динамическое моделирование, водные растворы, триметиламиноксид, мочевины, гидратная оболочка, косольвенты



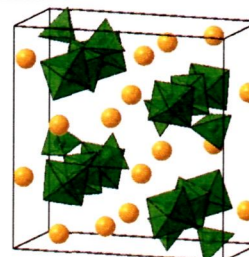
983

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Солодовников С.Ф., Золотова Е.С., Солодовникова З.А., Корольков И.В., Юдин В.Н., Уваров Н.Ф., Плюсин П.Е., Саранчина Е.М.

Строение и свойства твердых растворов α-Cs₂Mo_{2-x}W_xO₇

Ключевые слова: цезий, димолибдат, молибден, вольфрам, синтез, замещение, кристаллизация, структура, термические свойства, ионная проводимость

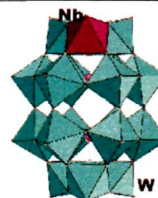


993

Шмакова А.А., Гущин А.Л., Абрамов П.А., Соколов М.Н.

Синтез и электрохимические свойства ((CH₃)₂NH₂)₇[P₂W₁₇NbO₆₂]

Ключевые слова: ниобий, анион Доусона, ЯМР, циклические вольтамперограммы

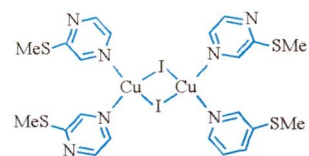


1002

Artem'ev A.V., Beresin A.S., Bagryanskaya I.Y.

Synthesis, structure and emission properties of $[\text{Cu}_2(\mu_2\text{-I})_2\text{L}_4]$ complex based on 2-(methylthio)pyrazine

Keywords: copper(I), pyrazines, sulfide ligands, photoluminescence, crystal structure

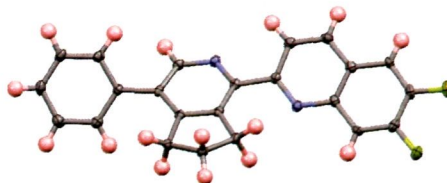


1008

Копчук Д.С., Слепухин П.А., Носова Э.В., Хасанов А.Ф.,
Зырянов Г.В., Русинов В.Л., Чупахин О.Н.

Рентгеноструктурные исследования в ряду замещенных (фторированных) 2-(2-пиридил)хинолинов

Ключевые слова: 2-(2-пиридил)хинолины, 1,2,4-триазины, реакция Боджера, фторорганические соединения, PCA

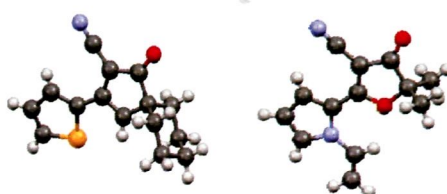


1013

Афонин А.В., Вашенко А.В., Волостных О.Г.,
Степанов А.В., Малькина А.Г.

Молекулярная и кристаллическая структура 4-циано-3(2H)-фуранонов и структурные эффекты в спектрах ЯМР ^1H

Ключевые слова: 4-циано-3(2H)-фураноны, рентгеноструктурный анализ, спектры ЯМР ^1H



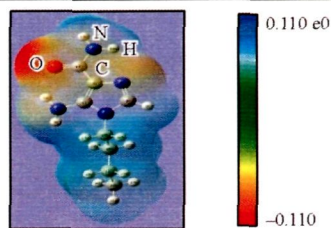
1020

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Das A.

Experimental and theoretical studies on molecular structures, nanostructural features and photophysical properties of 5-amino-1-alkylimidazole-4-carboxamide compounds

Keywords: 1-alkylAICA, DFT calculations, TDDFT study, nanostructural property, photophysical study



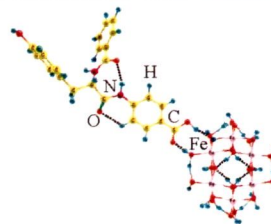
1031

Tanhaei R., Ali Beyramabadi S., Behmadi H.

Geometry, tautomerism and non-covalent interaction of the bentiromide with a carbon nanotube and $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ nanoparticles:

A quantum mechanical study

Keywords: bentiromide, drug, DFT, tautomerization, $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ nanoparticle, carbon nanotube



1049

Содержание следующего номера — в конце журнала