

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

ТОМ 58

Май-июнь

№ 4, 2017

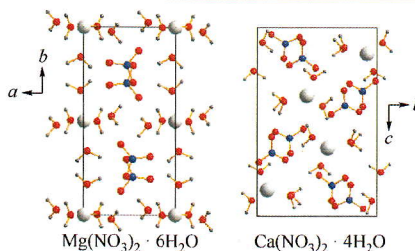
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Журавлёв Ю.Н., Корабельников Д.В.

Структура и электронные свойства нитратов магния и кальция и их кристаллогидратов из первых принципов

Ключевые слова: гексогидрат, тетрагидрат, нитрат, магний, кальций, кристаллическая структура, упругие постоянные, химическая связь, заряд, плотность электронных состояний

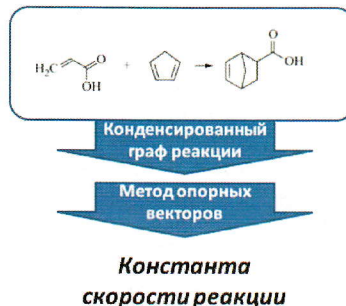


675

Маджидов Т.И., Гимадиев Т.Р., Малахова Д.А., Нугманов Р.И., Баскин И.И., Антипин И.С., Варнек А.А.

Соотношение «структура – реакционная способность» в реакциях Дильса–Альдера с использованием подхода конденсированных графов реакций

Ключевые слова: [4+2]π-циклоприсоединение, реакция Дильса–Альдера, константа скорости реакции, конденсированный граф реакции, химические реакции, хемоинформатика

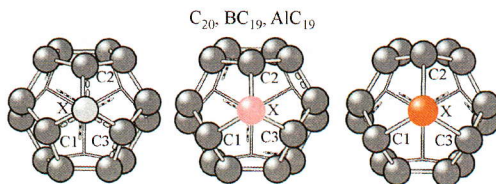


685

Molani F., Askari M.

A DFT study on the structural and electronic properties of small toxic gases on B- and Al-doped C₂₀ fullerene

Keywords: heterofullerene, electronic structure, toxic gas sensing, density functional theory

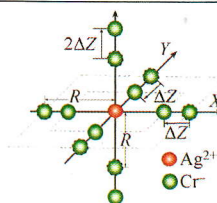


692

Zhang L.-J., Wu S.-Y., Kuang M.-Q., Hu X.-F., Li G.-L.

Theoretical studies of the spin Hamiltonian parameters and local structures for Ag²⁺ in AgCl and KCl crystals

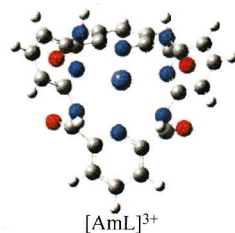
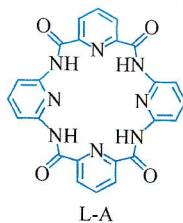
Keywords: electron paramagnetic resonance, defect structures, Ag²⁺, AgCl, KCl



702

Density functional theory insight into Eu(III) and Am(III) complexes with two 2,6-dicarboxypyridine diamide-type ligands

Keywords: density functional theory, second-order Moller-Plesset perturbation theory, selective extraction, natural bond orbital analysis



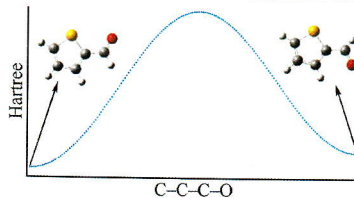
710

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Güneş E., Parlak C., Şenyel M.

DFT/TDDFT investigation on the electronic structures and spectral characteristics of C₅H₃XOS (X = H, F, Cl or Br)

Keywords: thiophene-2-carbaldehyde, DFT, TDDFT, halogen effect, solvent effect

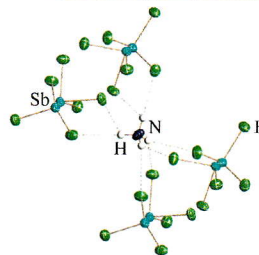


719

Земнухова Л.А., Удовенко А.А., Макаренко Н.В.,
Кузнецов С.И., Бабушкина Т.А.

Кристаллическая структура и параметры ЯКР ^{121,123}Sb тридекафторотетраантимоната(III) аммония NH₄Sb₄F₁₃

Ключевые слова: тридекафторотетраантимонат(III) аммония, синтез, кристаллическая структура, параметры ЯКР ^{121,123}Sb

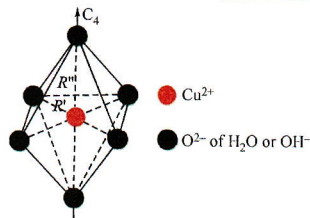


729

Li G.-L., Wu S.-Y., Kuang M.-Q., Hu X.-F., Xu Y.-Q.

Studies on the g-factors of the copper(II)-oxygen compounds

Keywords: electron paramagnetic resonance (EPR), local structures, Cu(UO₂)₂(AsO₄)₂ · 3H₂O, Na₂Cu(SO₄)₂ · 2H₂O, Cu(PhCO₂)₂ · 3H₂O, Pb₂Cu(OH)₄Cl₂



734

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Красных Е.Л., Портнова С.В.

Прогнозирование изменения теплоемкости фазового перехода жидкость–пар на основе модифицированных индексов Рандича. Алканы и кислородсодержащие соединения

Ключевые слова: теплоемкость, топологический индекс, индекс связанности, алканы, кислородсодержащие соединения

$$C_{p, \text{gas}}^0 \text{ gas} \xrightarrow{\Delta_1^g C_{p, \text{liq}}^0 (298,2)} C_{p, \text{liq}}^0 \text{ liquid}$$

739

Карцев В.Н., Штыков С.Н., Панкин К.Е.

К оценке состояния собственного макроскопического силового поля жидкостей

Ключевые слова: жидкости, внутреннее давление, шкала эволюции макроскопического поля

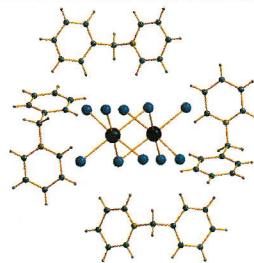
$$I_{\text{эв}} = - \left[\frac{2A \cdot t + B}{8,859} \right]$$

745

Адонин С.А., Горох И.Д., Самсоненко Д.Г.,
Корольков И.В., Соколов М.Н., Федин В.П.

**Кристаллические структуры биядерных
хлоридных и бромидных комплексов Bi(III)
с некоторыми катионами – алкилированными
производными пиридина**

Ключевые слова: висмут, галогенидные комплексы,
полиядерные комплексы, ароматические катионы

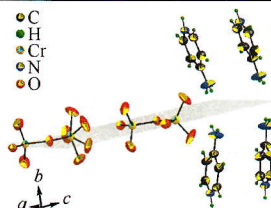


751

Ben Smail R., Chebbi H., Srinivasan B.R., Zid M.F.

**Spectroscopic characterization
and room-temperature structure
of bis(4-aminopyridinium) dichromate**

Keywords: crystal structure, infrared spectroscopy,
bis(4-aminopyridinium) dichromate

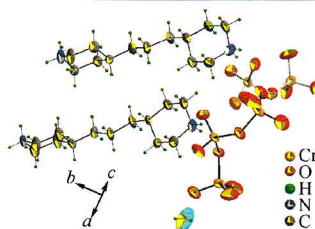


757

Ben Smail R., Zid M.F., Driss A.

**The first chromate containing both Cr_2O_7 and Cr_3O_{10}
groups, bis(1,3-bis(4-piperidinium)propane)
dichromate trichromate monohydrate:
Synthesis and crystal structure**

Keywords: X-ray diffraction, crystal structure,
dichromate trichromate, 1,3-bis(4-piperidinium)propane

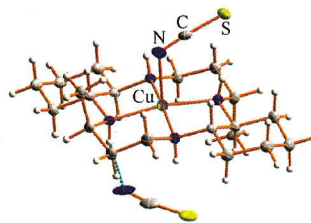


766

Subhan M.A., Ng S.W., Lee C.-S., Choi J.-H.

**Crystal structure and spectroscopic properties
of isothiocyanato[(3,14-dimethyl-2,6,13,17-
tetraazatricyclo(16.4.0.0^{7,12})docosane)]copper(II)
thiocyanate**

Keywords: square pyramidal geometry, copper(II),
macrocyclic ligand, thiocyanate, *trans*-III configuration

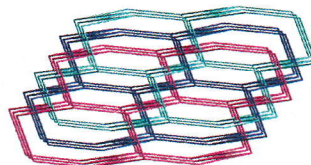


773

Liu X.-B., Zhao Y.-Q., Liu W.-L., Cui G.-H.

**Two new cadmium(II) coordination polymers
with bis(benzimidazole) ligands**

Keywords: bis(benzimidazole), cadmium(II) coordination
polymer, crystal structure, fluorescence property

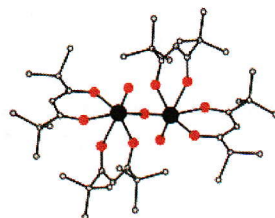


781

Леднева А.Ю., Артёмкина С.Б., Стабников П.А.,
Яньшолё Л.В., Фёдоров В.Е.

**Строение нового хелатного комплекса
 $\text{Mo}_2\text{O}_3(\text{DPM})_4$**

Ключевые слова: синтез, молибден,
кристаллическая структура, термический анализ,
масс-спектр



789

Зюзин И.Н., Алиев З.Г., Алдошин С.М.

**Молекулярная и кристаллическая структура
1,1-бис(метокси-*NNO*-азокси)-
3,3,3-тринитропропана**

Ключевые слова: алкокси-*NNO*-азоксисоединения,
1,1-бис(метокси-*NNO*-азокси)-3,3,3-тринитропропан,
(3*Z*,6*Z*)-5-(2,2,2-тринитроэтил)-2,8-диокса-3,4,6,7-
тетраазано-3,6-диен-4,6-диоксид,
тринитрометильная группа, кристаллическая структура

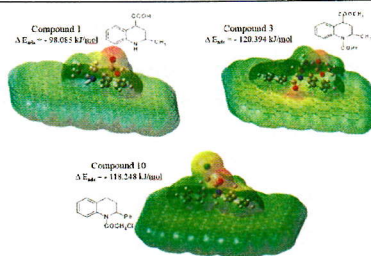


794

Некрасова Н.А., Курбатова С.В.

Взаимосвязь структуры и физико-химических характеристик производных 1,2,3,4-тетрагидрохинолина

Ключевые слова: 1,2,3,4-тетрагидрохинолин, высокоэффективная жидкостная хроматография, индексы связанности (индексы Рандича), факторы удерживания

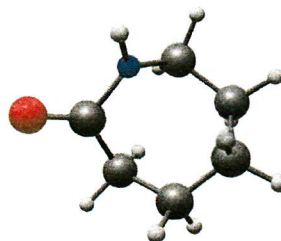


798

Ахмедов И.Д., Мельникова Н.Е., Бабаева А.З., Ахмедов В.М.

Палладийсодержащие композиционные наноматериалы на основе поликапролактама: формирование и структура

Ключевые слова: палладий, поликапролактан, нанокомпозит, физико-химические методы анализа, гетерогенный катализ

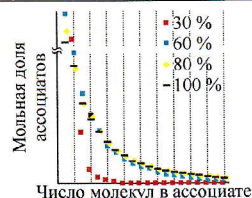


806

Толмачев А.М., Климов А.В., Анучин К.В., Фирсов Д.А.

Топология супрамолекулярных структур в растворах этанола

Ключевые слова: этанол, супрамолекулярные структуры, молекулярная динамика, топологический анализ



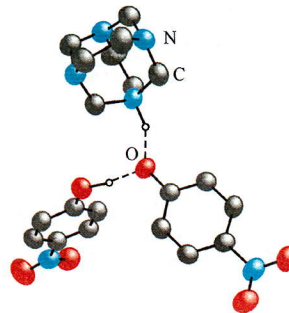
813

Rivera A., Uribe J.M., Ríos-Motta J., Bolte M.

Effect of protonation on the structure of 1,3,6,8-tetraazatricyclo[4.4.1.1^{3,8}]dodecane (TATD) adamantane:

Crystal structure and DFT analysis of 3,6,8-triaza-1-azoniatricyclo[4.4.1.1^{3,8}]dodecane 4-nitrophenolate 4-nitrophenol

Keywords: 1,3,6,8-tetraazatricyclo[4.4.1.1^{3,8}]dodecane, adamantane, crystal structure, proton transfer, hydrogen bond, amination cage, DFT calculations



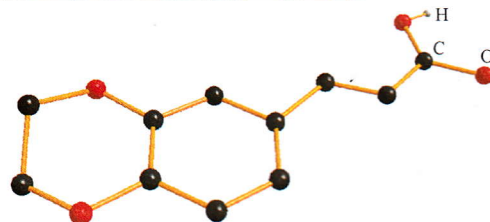
819

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Chen X.-F., Wang C.-F., Kong S., Li C., Zhou X., Zhang C.-Y., Sheng G.-H., Zhu H.-L.

Structure and urease inhibitory activity of copper(II) complex with (E)-3-(2,3-dihydrobenzo[B][1,4]dioxin-6-yl)acrylic acid

Keywords: caffeic acid, copper(II) complex, crystal structure, urease inhibitory

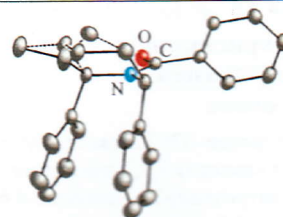


827

Sampath N.

X-ray crystal structure and conformational flexibility study of a N-substituted 2,6-diphenylpiperidine derivative

Keywords: piperidine, conformation, crystallography, chair, twisted boat, dihedral angle, PMDPM, phenyl ring

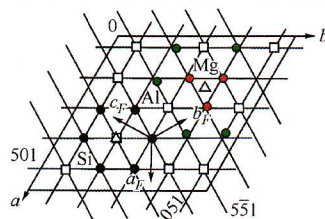


834

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

Кубический катионный каркас в тригональных структурах турмалинов – основа стабильности структурного типа

Ключевые слова: кристаллографический анализ, кубический катионный каркас, структурный тип турмалина, катионная подрешетка, феномен «биений»

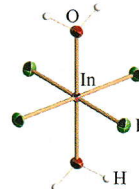


839

Давидович Р.Л., Логвинова В.Б., Ткачёв В.В., Шилов Г.В.

Кристаллическая структура дигидратов тетрафторидоиндатов(III) рубидия и цезия

Ключевые слова: индий(III), комплексный фторид, октаэдр, рубидий, цезий, кристаллическая структура, водородная связь.

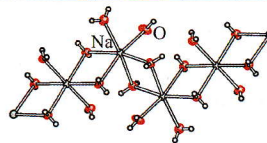


843

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

Кристаллическая структура $\text{Na}_3[\text{TaO}_8] \cdot 14\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: тантал, натрий, пероксокомплекс, кристаллическая структура

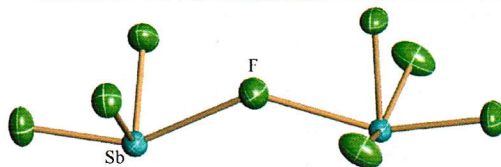


846

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

Кристаллическая структура β -тетрафтороантимоната(III) калия (β - KSbF_4)

Ключевые слова: синтез, кристаллическая структура, β -тетрафтороантимонат(III) калия

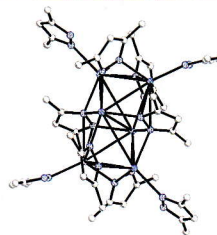


850

Виноградова К.А., Стабников П.А., Алфёрова Н.И., Наумов Д.Ю., Румянцев Ю.М.

Шестиядерный комплекс Na(I) с 3,5-диметил-1H-пиразолом и его анионом

Ключевые слова: комплекс натрия(I), 3,5-диметил-1H-пиразол, 3,5-диметил-1H-пиразолят-анион, кристаллическая структура, летучесть

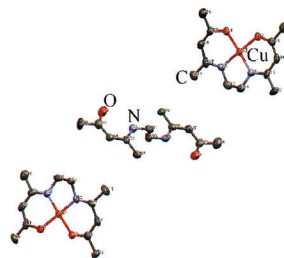


853

Магеррамов А.М., Цинцадзе М.Г., Алиева Р.А., Бахманова Ф.Н., Мамедова Ф.О., Аскеров Р.К., Алиева Ф.С., Чырагов Ф.М.

Кристаллическая структура комплекса меди(II) с ацетилацетоном и этилендиамином, полученного путем темплатного синтеза

Ключевые слова: PCA, монокристалл, медь, сингония, синтез

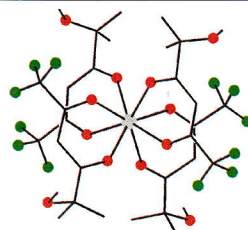


857

Крисюк В.В., Байдина И.А., Тургамбаева А.Е., Корольков И.В., Уркасым кызы С., Игуменов И.К.

Новый летучий комплекс циркония(IV) с метоксизамещенным β -дикетонатом

Ключевые слова: цирконий, дикетонаты, кристаллическая структура, летучий металлоорганический комплекс, МОСVD прекурсор

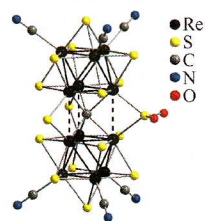


860

Лаппи Т.И., Гайфулин Я.М., Смоленцев А.И.,
Мионов Ю.В.

**Структурная характеристика биоктаэдрического
кластерного аниона $[\text{Re}_{12}\text{CS}_{14}(\mu\text{-SO}_2)(\mu\text{-S})_2(\text{CN})_6]^{6-}$**

Ключевые слова: рений, биоктаэдрический кластерный
комплекс, координационный полимер,
кристаллическая структура

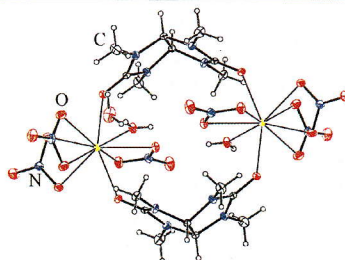


863

Нетреба Е.Е., Сомов Н.В.

**Кристаллическая структура нового биядерного
комплекса моногидрата бис(2,4,6,8-тетраметил-
2,4,6,8-тетраазабицикло(3.3.0)октан-3,7-дион-
O,O')-диаква-гексакис(нитрато-O,O')-
дигадолия(III)**

Ключевые слова: бициклические бисмочевины, мебикар,
гадолий(III), структура, девятивершинник, ИК, РСА

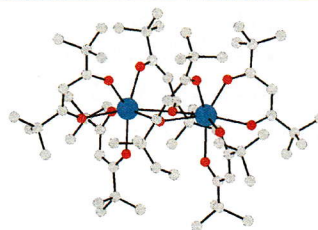


866

Лю Юйхань, Мосягина С.А., Стабников П.А.,
Алфёрова Н.И., Корольков И.В., Первухина Н.В.,
Морозова Н.Б.

**Структура трис-дипивалоилметаната
лантана(III)**

Ключевые слова: синтез, дипивалоилметанаты Ln(III),
кристаллическая структура, летучесть

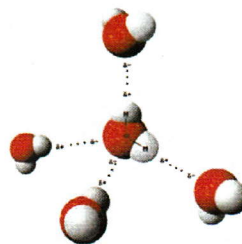


871

Муллоев Н.У., Юсупова Дж., Махсудов Б.И.

**ИК-спектроскопическое исследование
Н-комплексов производных диоксолана
с метанолом в растворах в CS_2**

Ключевые слова: гетероциклические соединения,
протоноакцепторная способность,
производные диоксоланов, индукционное влияние,
стерический фактор

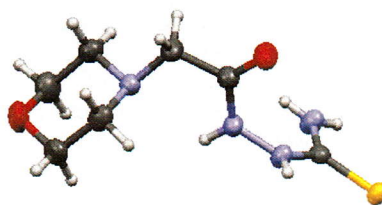


876

Турдыбеков К.М., Нуркенов О.А., Сатпаева Ж.Б.,
Фазылов С.Д., Талипов С.А., Ибрагимов Б.Т.,
Утегенова А.С.

**Кристаллическая структура
2-(2-морфолиноацетил)гидразинокарботиоамида**

Ключевые слова: РСА, тиосемикарбазид,
кристаллогидрат



879

Содержание следующего номера — в конце журнала