

ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 58

Сентябрь-октябрь

№ 7, 2017

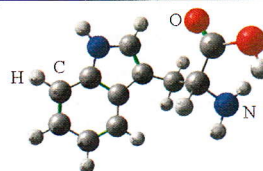
СО Д Е Р Ж А Н И Е

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Крауклис И.В., Тулуб А.В., Штыров А.А.

**Сравнительные характеристики молекулы триптофана в газовой фазе и в воде**

**Ключевые слова:** L и D изомеры, триптофан, влияние воды, метод DFT, цвиттер-ионные структуры

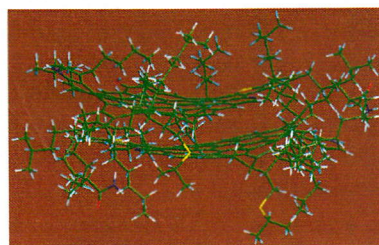


1305

Шуткова С.А., Доломатов М.Ю.

**Надмолекулярная структура нефтяных асфальтенов «континентального» типа**

**Ключевые слова:** нефтяные асфальтены, электронная структура, химическая структура, методы квантовой химии, метод молекулярной механики, димеры, тримеры, потенциал ионизации, родство к электрону, структура нефтяных асфальтенов

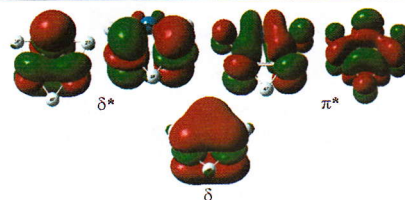


1311

Jin B., Jin Q., Jin F.-K.

**Theoretical predictions on the structure and  $d$ -AO-based aromaticity of  $\text{Re}_3\text{F}_3^{2+/0/4-}$ ,  $\text{Re}_3\text{F}_3\text{X}^+$  ( $\text{X} = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$ ),  $\text{Re}_3\text{F}_3\text{Y}^{2+}$  ( $\text{Y} = \text{Be}, \text{Mg}, \text{Ca}$ ) clusters**

**Keywords:** rhenium low-fluoride cluster, aromaticity, DFT calculations

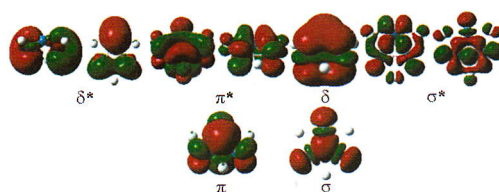


1316

Jin Q., Jin B., Jin F.K.

**Probing the electronic structure and aromaticity in  $\text{W}_3\text{F}_3^{+/-}$ ,  $\text{W}_3\text{F}_3\text{X}$  ( $\text{X} = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$ ), and  $\text{W}_3\text{F}_3\text{Y}^+$  ( $\text{Y} = \text{Be}, \text{Mg}, \text{Ca}$ ) clusters**

**Keywords:** tungsten low-fluoride cluster,  $\delta$  aromaticity, DFT calculation

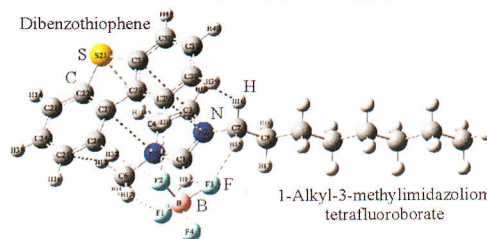


1327

Niknam M., Vatanparast M., Shekaari H.

**Theoretical study on interactions between 1-alkyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate and dibenzothiophene: DFT, NBO, and AIM analysis**

**Keywords:** dibenzothiophene, desulfurization, ionic liquid, density functional theory, interaction energy

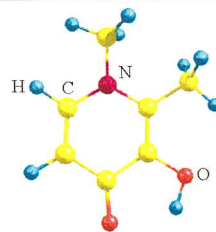


1336

Valizadeh A., Ghiasi R.

**Theoretical approach on the molecular structure, chemical reactivity, molecular orbital analysis, spectroscopic properties (IR, UV, NMR), and NBO analysis of deferiprone**

**Keywords:** deferiprone, frontier orbital analysis,  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR calculations, NBO analysis



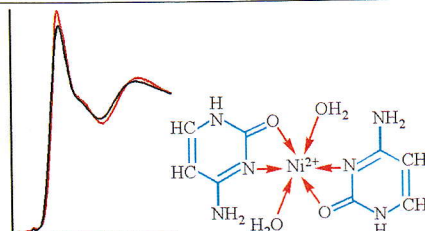
1347

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Пугачев Д.В., Есина Н.Я., Курасова М.Н.,  
Фортальнова Е.А., Венковский Н.У.,  
Лазаренко В.А., Тригуб А.Л., Хрусталев В.Н.

**Комплексы никеля(II) с цитозином и треонином: синтез и строение**

**Ключевые слова:** комплексные соединения никеля, треонин, цитозин, EXAFS, XANES

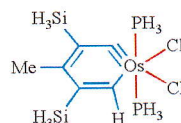


1358

Zafarnia F., Ghiasi R., Jamehbozorgi S.

**Computational study of osmabenzynes: the solvent effects on the structure and spectroscopic properties (IR, NMR)**

**Keywords:** metallabenzynes, osmabenzynes,  $^1\text{H}$  NMR chemical shift, solvent effect, infrared spectrum



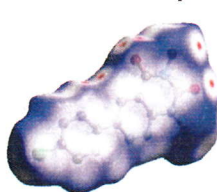
1364

Poursattar Marjani A., Taghartapeh M.R., Soltani A.R.,  
Khalafy J., Kanani Y.

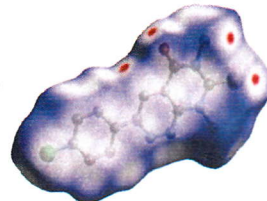
**Molecular structures, Hirshfeld surface analysis, and spectroscopic properties of 6,8-dimethyl-3-(4-chlorophenyl)-7-oxo-7,8-dihydropyrimido-[4,5-c]pyridazin-5(6H)-one and 6,8-dimethyl-3-(4-chlorophenyl)-7-thioxo-7,8-dihydropyrimido-[4,5-c]pyridazin-5(6H)-one**

**Keywords:** X-ray crystallography, DFT, electronic properties, hirshfeld surface analysis

Hirshfeld surface map A



Hirshfeld surface map B

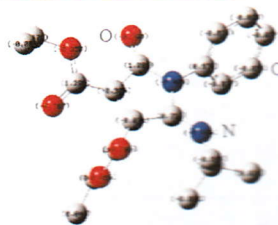


1371

Yahyaei S., Vessally E., Hashemi M.

**Experimental and theoretical studies on diethyl 2-(ter-butylimino)-2,5-dihydro-5-oxo-1-phenyl-1H-pyrrole-3,4-dicarboxylate using DFT calculations**

**Keywords:** diethyl 2-(ter-butylimino)-2,5-dihydro-5-oxo-1-phenyl-1H-pyrrole-3,4-dicarboxylate, DFT, FT-IR, GIAO, NMR chemical shifts, NICS calculation



1379

## СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Маленков Г.Г.

**Система аргон–вода при низких температурах**

**Ключевые слова:** система аргон–вода, /растворы, тонкие пленки, молекулярная динамика



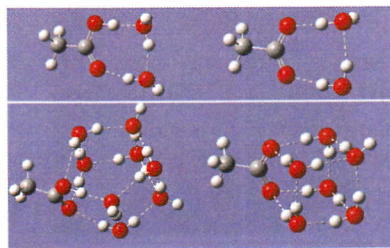
1388



Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В.

### Состав и строение гидратов молекул $\text{CH}_3\text{COOH}$ и гидратов анионов $\text{CH}_3\text{CO}_2^-$ в водных растворах

**Ключевые слова:** уксусная кислота, ацетат натрия, водные растворы, гидратация молекул и анионов, колебательный спектр, расчет методом ТФП, строение гидратов молекул  $\text{CH}_3\text{COOH}$ , строение гидратов анионов  $\text{CH}_3\text{CO}_2^-$

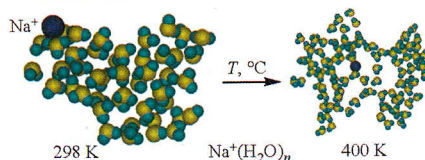


1395

Шевкунов С.В.

### Структура гидратной оболочки катиона $\text{Na}^+$ в условиях нагрева в плоской нанопоре

**Ключевые слова:** ион, гидратная оболочка, координация, вытеснение, нанопора, компьютерное моделирование



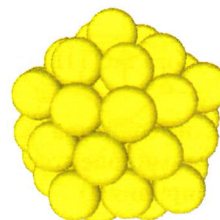
1406

## СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Самсонов В.М., Васильев С.А., Самсонов М.В., Бембель А.Г., Белоцерковский А.В., Рыбаков Д.И.

### Нахождение магических чисел для кластеров серебра и меди методом молекулярной динамики

**Ключевые слова:** магические числа, металлические кластеры, молекулярная динамика, потенциал сильной связи, метод погруженного атома

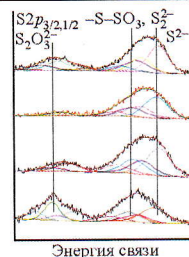


1415

Мурашева К.С., Сайкова С.В., Воробьев С.А., Романченко А.С., Михлин Ю.Л.

### Характеристики наночастиц сульфидов меди, полученных в системе сульфат меди – тиосульфат натрия

**Ключевые слова:** наночастицы, сульфиды меди, гидрозоль, оптическая спектроскопия, РФЭС, РФА, ПЭМ, динамическое рассеяние света

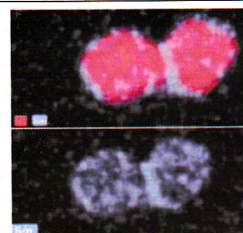


1421

Ластовина Т.А., Будник А.П., Поляков В.А., Солдатов А.В.

### Магнитно-структурные свойства наночастиц маггемита, полученных с использованием различных стабилизаторов

**Ключевые слова:** магнитные частицы, маггемит, сурфактанты

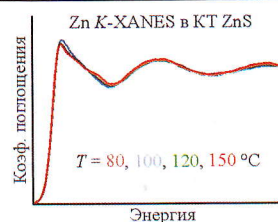


1429

Кравцова А.Н., Будник А.П., Цатурян А.А., Панкин И.А., Бугаев А.Л., Солдатов А.В.

### Влияние температуры на структуру и характеристики квантовых точек на основе ZnS

**Ключевые слова:** квантовые точки, сульфид цинка, тиомочевина, микроволновой синтез, флуоресценция, XANES спектроскопия

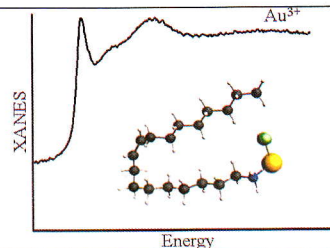


1435

Киричков М.В., Гуда А.А., Будник А.П., Ластовина Т.А., Бугаев А.Л., Шаповалов В.В., Русалев Ю.В., Чернышев А.В., Солдатов А.В.

### In situ анализ стадий формирования наночастиц золота восстановлением олеиламином

**Ключевые слова:** ПЭМ, ДРС, XANES спектроскопия, UV-vis, наночастицы золота, олеиламин

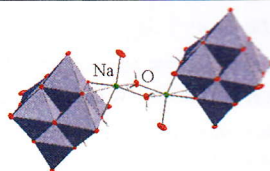


1442

Абрамов П.А., Соколов М.Н.

**Кристаллическая структура**  
 $\text{Na}_{10}[\{\text{Na}(\text{H}_2\text{O})\text{H}_2\text{Nb}_6\text{O}_{19}\}_2(\mu\text{-H}_2\text{O})_2] \cdot 46\text{H}_2\text{O}$

**Ключевые слова:** гексаниобат, натрий,  
рентгеноструктурный анализ



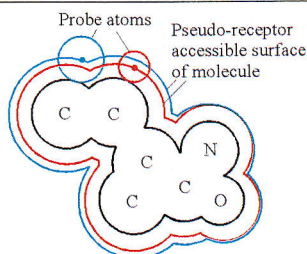
1450

## СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Tong J.-B., Bai M., Zhao X.

**QSAR study by the RASMS method**  
**of DABO derivatives as HIV-1 reverse transcriptase**  
**non-nucleoside inhibitors**

**Keywords:** random sampling analysis on molecular surface  
(RASMS), dihydroalkoxybenzoxypyrimidines (DABO)  
derivatives, quantitative structure activity relationship (QSAR),  
multiple linear regression (MLR)



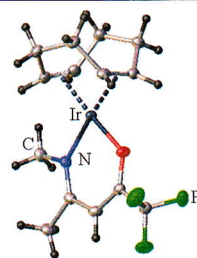
1457

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Караковская К.И., Викулова Е.С., Пирязев Д.А.,  
Морозова Н.Б.

**Строение и термические свойства**  
**(1,1,1-трифтор-4-метилюминопентаноато-**  
**2)(циклооктадиен-1,5)иридия(I)**

**Ключевые слова:** иридий(I),  $\beta$ -иминокетонаты,  
циклооктадиен, МОСVD прекурсор,  
рентгеноструктурный анализ, термогравиметрия

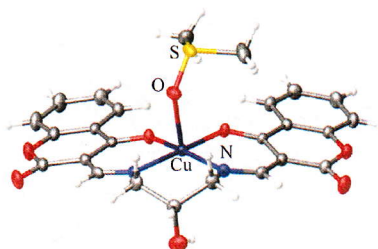


1466

Попов Л.Д., Щербаков И.Н., Власенко В.Г.,  
Левченков С.И., Александров Г.Г.

**Кристаллическая структура комплекса**  
**(N,N'-бис[хромен-2,4-дион]-3-**  
**{2'-гидроксипропилендиамин-N,N',O,O'})**  
**(диметил-сульфоксид)меди(II)**

**Ключевые слова:** комплекс меди(II), основание Шиффа,  
рентгеноструктурный анализ

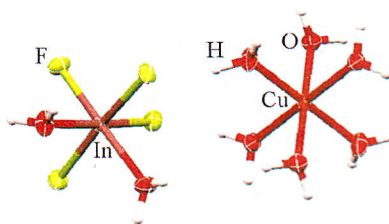


1471

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

**Кристаллическая структура фториоиндата(III)**  
**меди(II)  $\text{Cu}(\text{InF}_4)_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$**

**Ключевые слова:** синтез, индий(III), комплексный  
фторид, кристаллическая структура, Cu(II), октаэдр,  
структурный тип

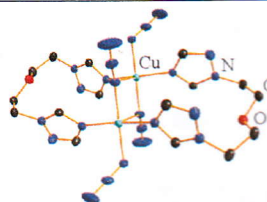


1475

Xu X.-J., Fang X., Yu H.-N., Zhou Z., Wang J.

**A novel dinuclear  $\text{Cu}^{\text{II}}$  complex based**  
**on flexible bis(triazole):**  
**Synthesis, structure and physical properties**

**Keywords:** Cu(II) complex, 1,1'-(2,2'-oxybis(ethane-2,1-  
diyl))bis(1H-1,2,4-triazole), dinuclear, photocatalytic activity



1479



Громилов С.А., Герасимов Е.Ю., Храненко С.П.,  
Комаров В.Ю., Задесенец А.В.

**[ZnEn<sub>3</sub>]CrO<sub>4</sub> – предшественник  
цинкохромитной шпинели**

**Ключевые слова:** комплексная соль, цинк, хромат-анион,  
этилендиамин, шпинель, кристаллохимия,  
рентгеноструктурный анализ

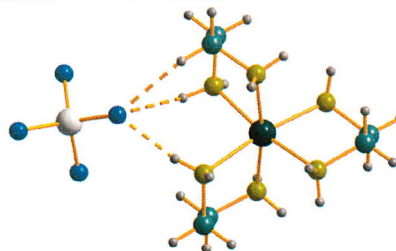


1482

Храненко С.П., Комаров В.Ю., Герасимов Е.Ю.,  
Задесенец А.В., Максимовский Е.А., Громилов С.А.

**[NiEn<sub>3</sub>]CrO<sub>4</sub>. Структура, термические свойства,  
псевдоморфизм**

**Ключевые слова:** комплексная соль,  
этилендиаминникель, хромат-анион, термические  
свойства, псевдоморфизм, рентгеноструктурный анализ,  
кристаллохимия

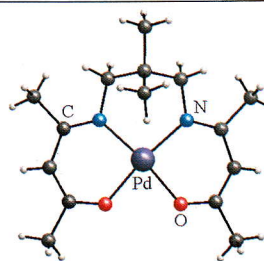


1487

Черкасов С.А., Викулова Е.С., Николаева Н.С.,  
Смоленцев А.И., Морозова Н.Б.

**Кристаллическая структура и термические  
свойства N,N'-(2,2-диметилпропилен)-  
bis(ацетилацетониминато)палладия(II)**

**Ключевые слова:** палладий(II), основания Шиффа,  
МОСVD прекурсор, рентгеноструктурный анализ,  
термогравиметрия

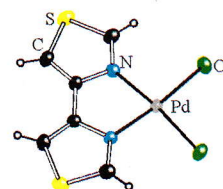


1492

Ebadi A., Shojaei S.

**Characterization, crystal structure determination,  
and luminescent properties  
of [Pd(4,4'-bit)Cl<sub>2</sub>]**

**Keywords:** crystal structure, palladium(II) complex,  
4,4'-bithiazole, luminescent properties

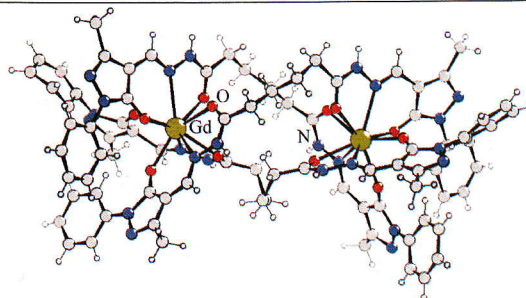


1496

Шульгин В.Ф., Конник О.В., Бекирова З.З.,  
Александров Г.Г., Кискин М.А., Еременко И.Л.

**Строение координационного соединения  
гадолиния с ацилдигидразоном адипиновой  
кислоты и 3-метил-1-фенил-4-формилпиразол-  
5-она**

**Ключевые слова:** 4-ацилпиразолон-5, ацилдигидразон,  
гадолиний, биядерные комплексы, тройной геликат,  
рентгеноструктурный анализ

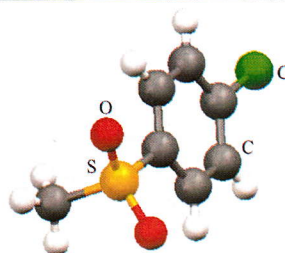


1502

Адамович С.Н., Мирскова А.Н., Зельбст Э.А.,  
Фундаменский В.С.

**Кристаллическая и молекулярная структура  
метил-(4-хлорфенил)сульфона**

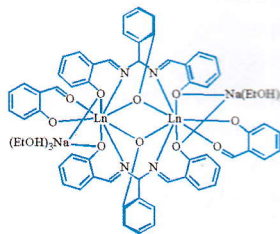
**Ключевые слова:** метил-(4-хлорфенил)сульфон,  
кристаллическая и молекулярная структура,  
арилсульфонилацетонные кислоты, протатраны,  
биологически активные производные



1506

**Unexpected C=N bond cleavage in H<sub>3</sub>salmp:  
Synthesis and structures  
of [LnNa(salmp)(sal)]<sub>2</sub>·6EtOH (Ln = Sm, Er;  
H<sub>3</sub>salmp = 2-bis(salicylideneamino)methylphenol;  
sal = salicylaldehydato)**

**Keywords:** samarium, erbium, Schiff base, crystal structure



**Содержание следующего номера — в конце журнала**

© Сибирское отделение РАН, 2017  
© Институт неорганической химии  
им. А.В. Николаева СО РАН, 2017