

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

ТОМ 59

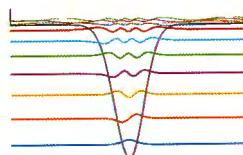
Март-апрель

№ 3, 2018

СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Грибов Л.А.



527

Задача о колебаниях молекул
с гауссовым потенциалом

Ключевые слова: колебания молекул, потенциал,
гауссова функция, вариационная процедура

Семёнов С.Г., Бедрина М.Е., Титов А.В.

Квантово-химическое исследование молекул $C_{60}Cl_{30}$,
 $C_{60}(OH)_{30}$ и эндокомплекса $Fe@C_{60}(OH)_{30}$

Ключевые слова: хлорированный фуллерен,
гидроксилированный фуллерен, железо, эндокомплекс,
структура, ТФП

Тарасов Ю.И., Кочиков И.В., Бажанова З.Г.

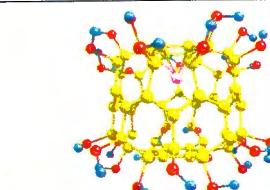
Внутреннее вращение и равновесная структура
молекулы бромнитрометана на основе обработки
данных газовой электронографии
и результатов квантово-химических расчетов

Ключевые слова: бромнитрометан, нежесткие молекулы,
внутреннее вращение, газовая электронография,
квантово-химические расчеты, равновесная структура,
ангармоничность

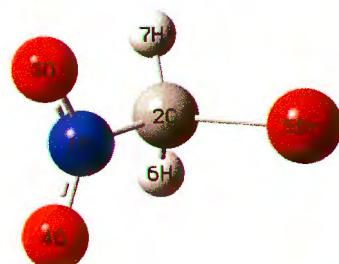
Song W., Wang B., Li H.-Q., Wang J.-l., He C.-Z.

First-principles study of the structures
and electronic properties of $Ni_{n-1}Al$ ($n = 2 - 20$) clusters

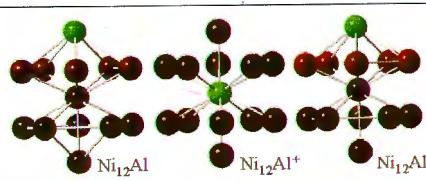
Keywords: magnetic property, charge transfer, ionization potential,
electron affinity



530



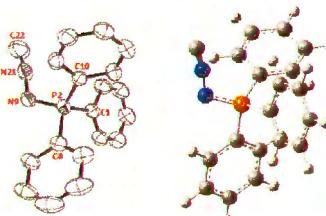
536



544

Ramazani A., Sheikhi M., Hanifehpour Y., Asiabi P.A., Joo S.W.
Molecular structure, electronic properties, HOMO-LUMO,
MEP and NBO analysis
of (*N*-isocyanimino)-triphenylphosphorane (PH_3PNNC):
DFT calculations

Keywords: *N*-isocyanimino-triphenylphosphorane (PH_3PNNC),
theoretical calculations, DFT, FMO, NBO analysis



553

ИНХ СО РАН
НОВОСИБИРСК
2018

СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
БИБЛИОТЕКА
ПО ЕСТЕСТВЕННЫМ НАУКАМ РАН
Адрес: 119991, г. Москва, ГСП-1,
ул. Энгельса, 11/11

Shajari N., Ghiasi R.

Theoretical study of tautomerization in 1,5-dimethyl-6-thioxo-1,3,5-triazinane-2,4-dione

Keywords: triazines, heterocycles, DFT calculation, Kirkwood–Bauer–Magat (KBM) equation, NBO analysis

Шуткова С.А., Доломатов М.Ю., Доломатова М.М., Петров А.М., Хайрудинов И.Р.

Структурно-химические характеристики модельных молекулярных фрагментов нефтяных смол

Ключевые слова: нефтяные смолы, метод электронной спектроскопии, потенциал ионизации, средство к электрону, структура нефтяных смол

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Кавун В.Я., Земнухова Л.А., Слободюк А.Б., Ковалёва Е.В., Савченко Н.Н., Макаренко Н.В.

Структурные превращения и ионная подвижность в $\text{CsSbF}_3(\text{H}_2\text{PO}_4)$

Ключевые слова: фосфатофтогидный комплекс сурьмы(III) $\text{CsSbF}_3(\text{H}_2\text{PO}_4)$, ионная подвижность, фазовый переход, спектры ЯМР, ДСК, РФА

Лукьянова М.Б., Ткачёв В.В., Лукьянов Б.С., Пугачёв А.Д., Ожогин И.В., Комиссарова О.А., Алдошин С.М., Минкин В.И.

Исследование строения новых продуктов конденсации перхлората 1,2,3,3-тетраметилиндоленилия с метоксизамещенными диформилфенолами

Ключевые слова: спиропиран, фотохромизм, молекулярный переключатель, рентгеноструктурный анализ, спектроскопия ЯМР

Kantar G.K., Kaya M., Şahin O., Şaşmaz S.

Guaiacol substituted AzaPCs: A novel synthesis method and investigation of photophysical properties

Keywords: AzaPC, guaiacol, fluorescence

Akhtar M.N., AlDamen M.A., Ikram M., Ali S.

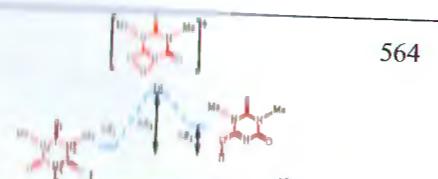
Structure and magnetic properties of new lattice system of heterometallic decanuclear Ce_6Mn_4 aggregate

Keywords: crystal structure, heterometallic Ce-Mn^{III} cluster, magnetic properties

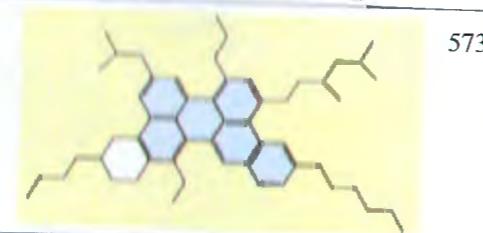
Peng D.-L.

Crystal structure and catalytic property of an oxidomolybdenum(VI) complex derived from N' -(2-hydroxy-3,5-di-*tert*-butylbenzylidene)-4-methylbenzohydrazide

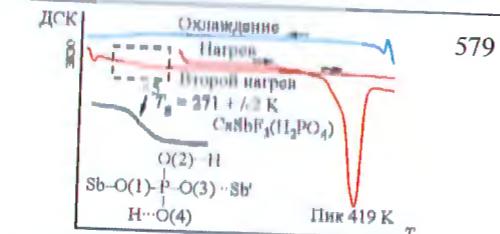
Keywords: synthesis, Schiff base, molybdenum complex, crystal structure, catalytic property



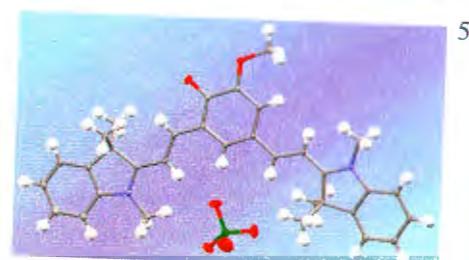
564



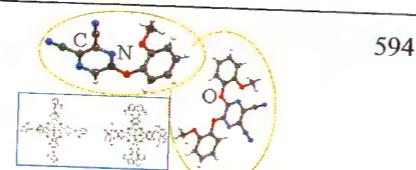
573



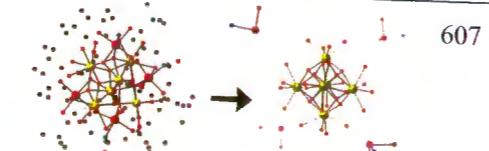
579



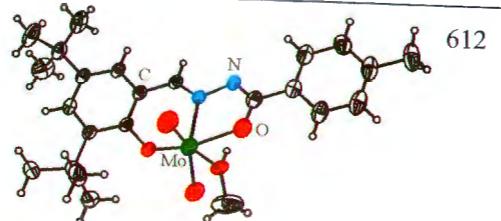
588



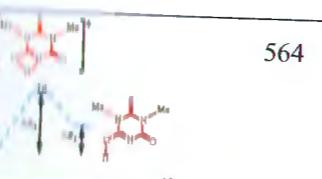
594



607



612



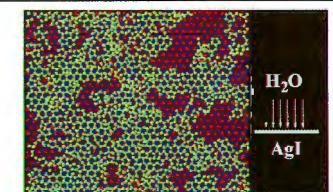
564

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Шевкунов С.В.

Структура воды в контактном слое на поверхности кристаллического иодистого серебра

Ключевые слова: вода, мономолекулярная пленка, дальний молекулярный порядок, водородные связи, постайная адсорбция, компьютерное моделирование

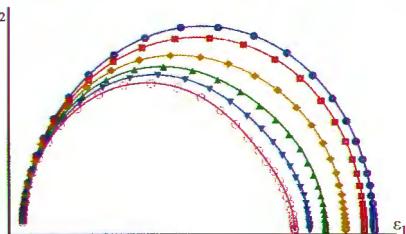


618

Одинаев С., Махмадбеков Р.С.

Численный расчет коэффициентов диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь водного раствора KF от параметров состояния

Ключевые слова: коэффициент диэлектрической проницаемости диэлектрических потерь, потенциал межмолекулярного взаимодействия, радиальная функция распределения, коэффициент трения жидкости, времена релаксации



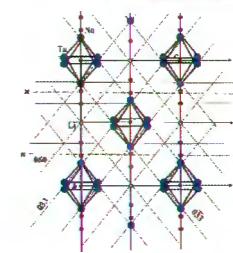
627

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

Кристаллографический анализ соединений с полианионами Линдквиста: когерентная сборка, симметрия, стабильность

Ключевые слова: полианион Линдквиста, кристаллографический анализ, катионные подрешетки, когерентная сборка, относительная стабильность кристаллических структур

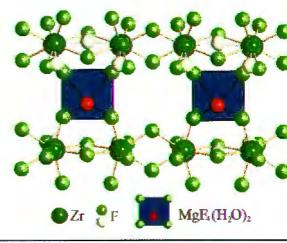


635

Гайворонская К.А., Герасименко А.В., Диценко Н.А.

Новый фторидоцирконат нестехиометрического состава $\text{Cs}_{1+x}(\text{H}_2\text{O})_{1-x}\text{MgZr}_2\text{F}_{11+x}\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ($x \approx 0.73$): структура и термические свойства

Ключевые слова: кристаллическая структура, фторидоцирконат, кристаллогидрат, фазовый переход, дифференциальный термический анализ

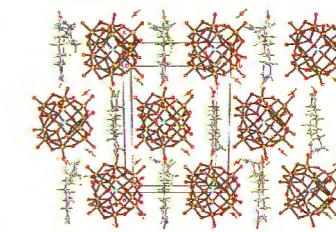


640

Степнова А.Ф., Казиев Г.З., Дороватовский П.В., Зубавичус Я.В., Quiñones S.H., Банг Н.В., Хрусталёв В.Н.

Исследование кислого (тетракапролактам) додекамолибдосиликата состава $(\text{C}_6\text{H}_{11}\text{NO})_{4.5}\text{H}_4[\text{SiMo}_{12}\text{O}_{40}]$

Ключевые слова: синтез, гетерополисоединения, поликомплексаллы, капролактам, структурный анализ

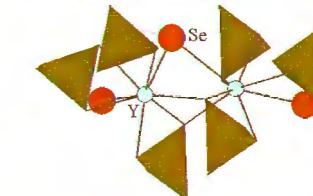


649

Киряков А.С., Пирязев Д.А., Тарасенко М.С., Наумов Н.Г.

Кристаллическая структура новых халькогенидодержащих ортосиликатов иттрия $\text{Y}_2\text{SiO}_4\text{Q}$ ($\text{Q} = \text{S}, \text{Se}$)

Ключевые слова: синтез, иттрий, халькогенид, ортосиликат, кристаллическая структура

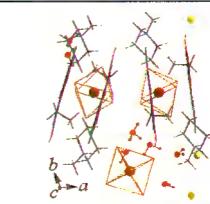


657

Васильев А.Д., Головнёв Н.Н.

Структура оксониевого соединения гексахлоридостанната(IV) пефлоксациниума

Ключевые слова: катион пефлоксациниума, катион оксония, хлорид-ион, гексахлоридостанната(IV)-анион, ионное соединение, кристаллическая структура



663

Головнёв Н.Н., Молокеев М.С., Лесников М.К.

**Кристаллическая структура и свойства
тригидрата 2-тиобарбитурата левофлоксацина**

Ключевые слова: левофлоксацин, 2-тиобарбитуровая кислота, соль, кристаллическая структура, термическая устойчивость, ИК спектр

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

**Кристаллическая структура новых комплексных
фторидов индия(III)**



Ключевые слова: синтез, индий(III), комплексный фторид, кристаллическая структура, одновалентные катионы, $[Cu(H_2O)_4]^{2+}$, полимерная цепь, структурный тип

Сухих А.С., Храненко С.П., Пишур Д.П., Громилов С.А.

Эффект Яна—Теллера в структуре $[CuEn_3]CrO_4$

Ключевые слова: комплексная соль, трис-этилендиамин меди, хромат-анион, дифференциальная сканирующая калориметрия, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия

Бердюгин С.Н., Васильченко Д.Б., Байдина И.А., Коренев С.В., Корольков И.В.

Кристаллическая структура и свойства



Ключевые слова: синтез, рентгеноструктурный анализ, полиядерные комплексы, мостиковый OH-лиганд, комплексы родия, поликонденсация гидроксокомплексов, нитрат родия(III)

Гайфулин Я.М., Смоленцев А.И., Миронов Ю.В.

Строение кластерного аниона



Ключевые слова: рений, биоктаэдрический кластер, кристаллическая структура

Рудницкая О.В., Култышкина Е.К., Доброхотова Е.В., Ананьев И.В.

Диметилсульфоксидные комплексы осмия.

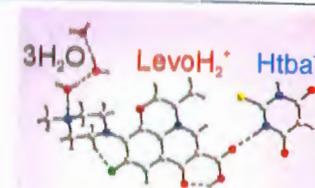
**Кристаллическая структура комплекса
 $[H(DMSO)_2][Os^{III}Br_4(DMSO)_2]$**

Ключевые слова: осмий, диметилсульфоксид, галогенокомплексы осмия, диметилсульфоксидные комплексы осмия, рентгеноструктурный анализ

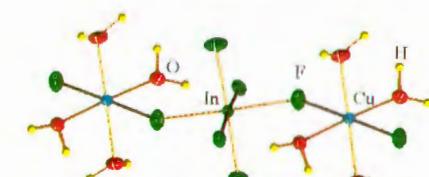
Хуан Шэнь, Берёзин А.С., Антонова О.В., Зверева В.В., Корольков И.В., Первухина Н.В., Прохорова С.А., Стабников П.А.

Кристаллические структуры $[Dy(dpm)_3]_2$ и $Dy(dpm)_3$, люминесцентное и рентгенофлуоресцентное исследование *трис*-дипивалоилметанатов лантаноидов(III)

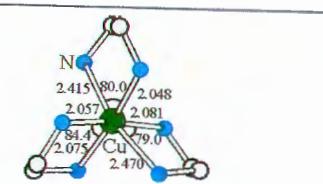
Ключевые слова: дипивалоилметанаты Ln(III), кристаллическая структура, молекулярные пленки, люминесценция



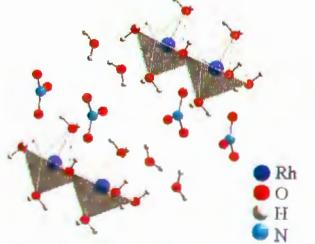
668



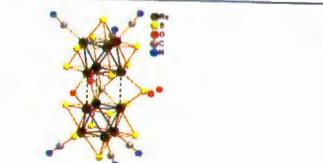
674



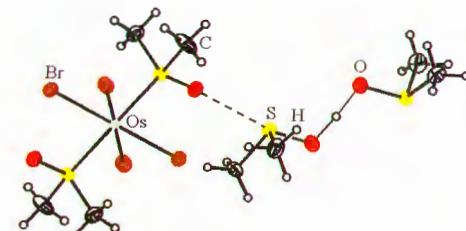
679



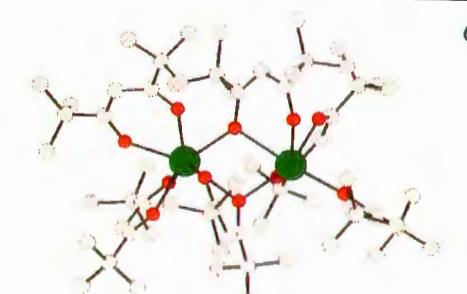
687



692



696



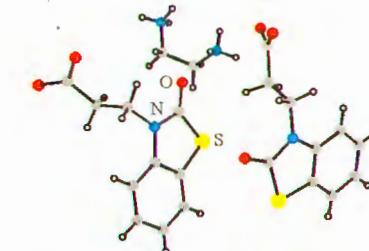
699

Ашурев Ж.М., Изотова Л.Ю., Ташходжаев Б.,
Олимова М.И., Ибрагимов Б.Т.

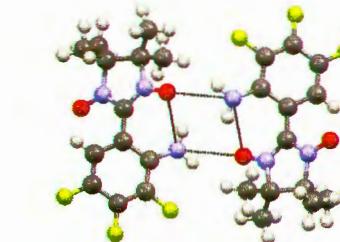
**Кристаллическая и молекулярная структура
 β -(N-бензотиазолин-2-он)пропионовой кислоты
и ее этилендиаммонийной соли**

Ключевые слова: бензотиазолы,
 β -(N-бензотиазолин-2-он)пропионовая кислота,
этилендиаммонийная соль, PCA

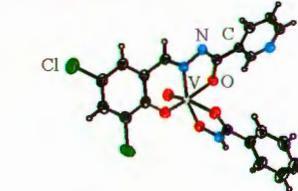
Третьяков Е.В., Махнева Т.В., Политанская Л.В.,
Багрянская И.Ю., Стась Д.В.



707



712



720

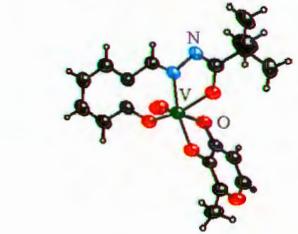
**Zhang X.-Z., Chen X.-F., Li C., Kong S., Li H.-H., You Z.,
Zhu H.-L.
Characterization and X-ray structures of oxovanadium(V)
complexes derived from hydrazone ligands**

Keywords: synthesis, oxovanadium complex, hydrazone ligand, crystal structure, X-ray diffraction, thermal property

Sheng G.-H., Liu A.-D., Liu F.-Y., Liu H., Ye Y.-T., You Z.-L.,
Zhu H.-L.

**Characterization and crystal structures
of oxovanadium(V) complexes derived from
 N' -(2-hydroxybenzylidene)pivalohydrazide**

Keywords: synthesis, hydrazone, maltol, 8-hydroxyquinoline, oxovanadium complex, X-ray crystallography

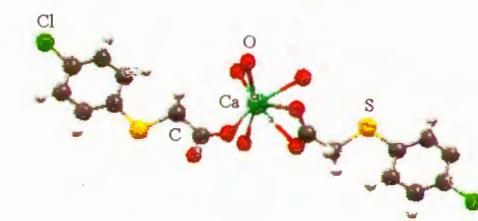


726

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

**Кристаллическая структура гидрата
ди-(4-хлорфенилсульфоната) кальция**

Ключевые слова: кристаллическая структура, гидрат ди(4-хлорфенилсульфоната) кальция, биологически активные, атраны, металлпротатраны, упаковка, полизэр, гептакоординация



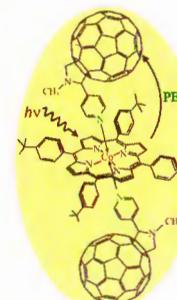
730

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Бичан Н.Г., Овченкова Е.Н., Груздев М.С., Ломова Т.Н.

**Реакция образования и химическая структура
новой супрамолекулярной триады на основе
5,10,15,20-(тетра-4-*трем*-бутилфенил)-21Н,23Н-
порфирина кобальта(II) и 1-метил-
2-(пиридин-4'-ил)-3,4-фуллеро[60]пирролидина**

Ключевые слова: замещенный порфирина кобальта(II), пирролидино-фуллерен, донорно-акцепторная триада, кинетика образования, термодинамика образования, спектроскопия



734

Hao S.Y., Hao Z.C., Liu Y.G., Dong G.Y.

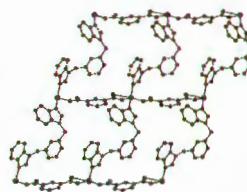
**Crystal structure and fluorescence properties
of a two-dimensional zinc(II) coordination polymer
containing isophthalate**

Keywords: crystal structure, fluorescence property, hydrothermal synthesis, Zn(II) complex

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

**Structural characterization of a zinc(II)
bishexafluoroacetylacetone coordination polymer
with bis(4-(1*H*-imidazol-1-yl)phenyl)methanone ligands**

Keywords: synthesis, helical chain, organic-inorganic hybrids, zinc complex, crystal structure, coordination polymer

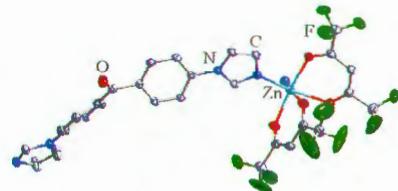


742

Cheng J., Wang G.-H., Wang Y.-W.

**Crystal structure and thermal properties of a 2D silver(I)
coordination polymer with semi-rigid bis(pyrazole)**

Keywords: Ag(I) complex, bis(pyrazole), crystal structure

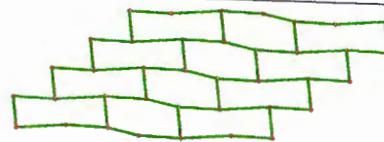


747

Wang Y.-C., Wang G.-F., Liu Z.-R.

**Structural characterization of two copper(II)
bishexafluoroacetylacetone complexes
with N-donor ligands**

Keywords: synthesis, supramolecular arrangements, copper complex, crystal structure, coordination compound, hydrogen bond

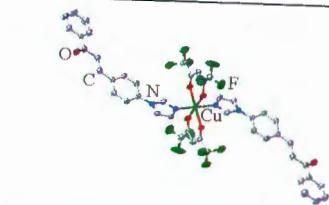


751

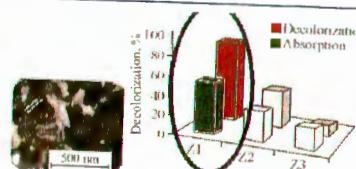
Anaraki Firooz A., Abdullah Mirzaie R., Kamrani F.

**Effect of morphological ZnO nanostructures
on optical and decolorization properties**

Keywords: ZnO, photodecolorization, morphology, optical, solid state reaction



755

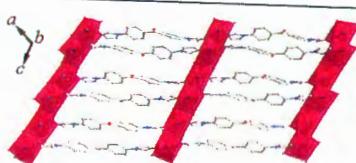


755

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

**Structural characterization of a Cu(I)/Br complex
with bis(4-(1*H*-imidazol-1-yl)phenyl)methanone ligands**

Keywords: synthesis, copper complex, bidentate ligand, crystal structure, semirigid ligand, imidazole

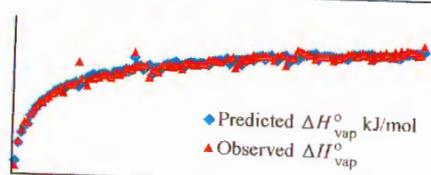


766

Arjmand F., Shafiei F.

**Prediction of the normal boiling points
and enthalpy of vaporizations of alcohols
and phenols by using topological indices**

Keywords: QSPR, molecular descriptors, graph theory, MLR, validation



770