

ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 56

Сентябрь-октябрь

№ 5, 2015

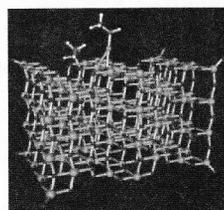
СО Д Е Р Ж А Н И Е

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Воронцов А.В.

**Молекулярная и диссоциативная адсорбция молекулы диэтилсульфида на гранях (010) и (001) наночастицы  $\text{TiO}_2$  модификации анатаз**

**Ключевые слова:** полуэмпирические методы PM6 и PM7, квантовые расчеты, замороженная поверхность, хемосорбция, дегазация, обессеривание, фотокатализ

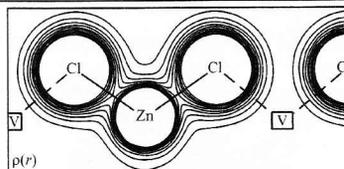


871

Басалаев Ю.М., Маринова С.А.

**Электронная структура и динамика решетки кристалла  $\alpha\text{-ZnCl}_2$**

**Ключевые слова:** хлорид цинка,  $\text{ZnCl}_2$ , халькопирит, метод подрешеток

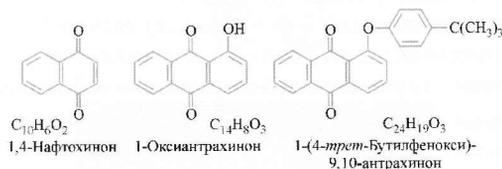


881

Доломатов М.Ю., Ковалёва Э.А.

**Новый молекулярный дескриптор модели «структура–свойство» для оценки потенциалов ионизации нафто- и антрахинонов**

**Ключевые слова:** молекулярный дескриптор, производные хинонов, потенциалы ионизации, интегральная сила осциллятора, топологические индексы, QSPR

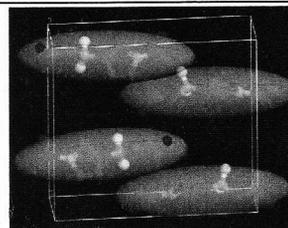


887

Gong X.-Y., Li X.-H., Zhang R.-Z.

**Theoretical investigation on nitrogen-rich energetic compounds 5-nitro-2-nitratomethyl-1,2,3,4-tetrazole**

**Keywords:** density functional theory, detonation performance, bond dissociation energy, 5-nitro-2-nitratomethyl-1,2,3,4-tetrazole, frontier molecular orbital

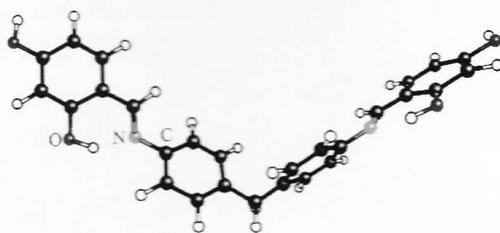


894

Eshtiagh-Hosseini H., Beyramabadi S.A., Mirzaei M., Morsali A., Naseri M.A., Chegini H., Elahi M.

**Intramolecular-proton transfer, experimental and theoretical characterization of 3,3'-dihydroxy-4,4'-[4,4'-diphenylmethanebis(nitrilomethylidyne)]-bis-phenol**

**Keywords:** Schiff base, DFT, tautomerism, assignment, proton transfer, synthesis, intramolecular hydrogen bond, AIM

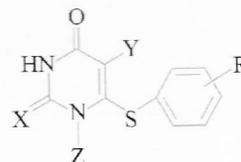


902

Tong J., Zhao X., Zhong L., Chang J.

**QSAR studies of HEPT derivatives as anti-HIV drugs using RASMS method**

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



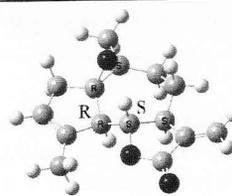
914

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Абуляисова Л.К., Адекенов С.М.

**Квантово-химический анализ молекулярной структуры и колебательного спектра арглабина**

**Ключевые слова:** арглабин, квантово-химические методы Хартри-Фока и теории функционала плотности, колебательный ИК спектр

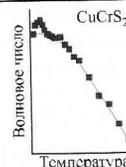


922

Селиванова А.В., Соколов В.В., Колесов Б.А.

**КР-спектральное исследование кристаллов CuCrS<sub>2</sub> в области температур 5–300 К**

**Ключевые слова:** КР спектроскопия, слоистые кристаллы, низкие температуры

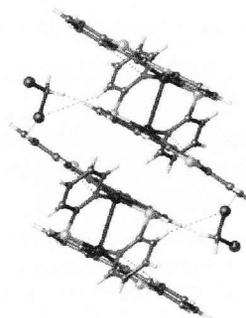


931

Катленок Е.А., Золотарев А.А, Иванов А.Ю, Смирнов С.Н, Балашев К.П.

**Строение, оптические и электрохимические свойства биядерных комплексов с платинированным 2-фенилбензотиазолом и мостиковыми 2-меркапто-производными пиридина, пиримидина, бензотиазола и бензоксазола**

**Ключевые слова:** биядерные циклометаллированные комплексы Pt(II), РСА, ЯМР <sup>1</sup>H, <sup>195</sup>Pt спектроскопия, электронная спектроскопия поглощения и испускания, вольтамперометрия окисления и восстановления

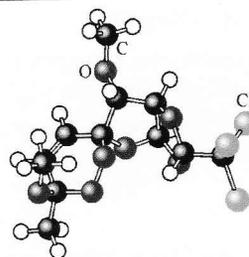


937

Karakurt T., Dinçer M., Çetin F.

**Molecular structure and vibrational and chemical shift assignments of (4R)-5-eno-4,7-epidioxy-3,7-O-methyl-1,2-O-(S)-trichloroethylidene-5,6,8-trideoxy-α-D-threo-1,4-furano-4,7-diulo-octose by DFT and *ab initio* HF calculations**

**Keywords:** X-ray structure determination, DFT, HF, GIAO, <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C NMR, IR spectra, vibrational assignment

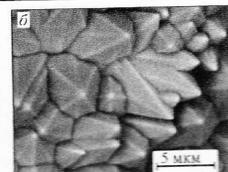
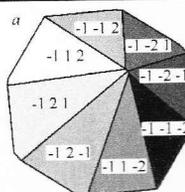


945

Лозанов В.В., Бакланова Н.И., Морозова Н.Б.

**Газофазное осаждение комплексных тугоплавких покрытий на углеродном волокнистом материале**

**Ключевые слова:** осаждение из газовой фазы, карбид гафния, иридий, покрытия, углеродный волокнистый материал

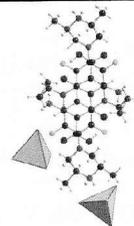


958

Васильев А.Д., Головнёв Н.Н.

**Кристаллическая структура двух ионных соединений спарфлоксацина**

**Ключевые слова:** кристаллическая структура, катион спарфлоксациниума, тетрагалогенид-анионы цинка и кадмия, водородные связи, π-π-взаимодействие

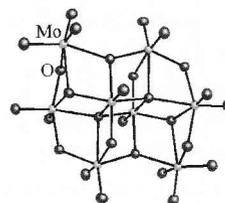


966

Казиев Г.З., Сауль Киньонес О., Степнова А.Ф., Хрусталёв В.Н., де Ита А., Панурина Н.А.

**Физико-химическое исследование октамолибденодикобальтата(II) аммония состава  $(\text{NH}_4)_2[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4]_2[\text{Mo}_8\text{O}_{27}] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$**

**Ключевые слова:** синтез, гетерополисоединения, октамолибденодикобальтат(II), РСА, ИК спектроскопия, ТГА

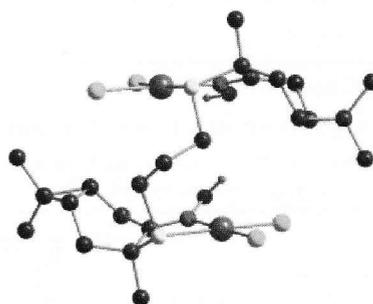


971

Кокина Т.Е., Глинская Л.А., Горшков Н.Б., Куратьева Н.В., Корольков И.В., Ткачёв А.В., Ларионов С.В.

**Строение соединений  $[\text{Pd}_2(\text{H}_2\text{L}^1)\text{Cl}_4]$  и  $[\text{Pd}_2(\text{H}_2\text{L}^1)\text{Cl}_4] \cdot 0,5\text{CH}_2\text{Cl}_2$  с хиральным бис-α-сульфанилоксимом – производным природного монотерпеноида (+)-3-карена ( $\text{H}_2\text{L}^1$ )**

**Ключевые слова:** комплекс, бис-α-сульфанилоксим, Pd, кристаллическая и молекулярная структура

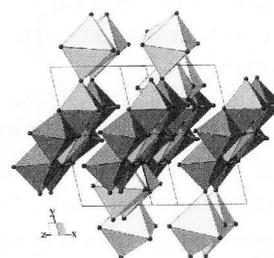


978

Гумерова Н.И., Мельник Н.А., Розанцев Г.М., Баумер В.Н., Радио С.В.

**Гетерополигексамолибдоникелат(II) натрия  $\text{Na}_4[\text{Ni}(\text{OH})_6\text{Mo}_6\text{O}_{18}] \cdot 16\text{H}_2\text{O}$  с анионом со структурой Андерсона: синтез и кристаллическая структура**

**Ключевые слова:** гетерополисоединение, молибдат, структура Андерсона, рентгеноструктурный анализ, ИК спектроскопия, кристаллическая структура

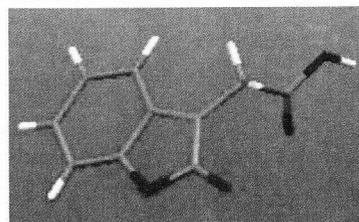


985

Hussain S., Khan I.U., Harrison W.T.A., Tahir M.N.

**Crystal structures and characterization of two rare-earth-glutarate coordination networks: one-dimensional  $[\text{Nd}(\text{C}_5\text{H}_6\text{O}_4)(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot \text{Cl}$  and three-dimensional  $[\text{Pr}(\text{C}_5\text{H}_6\text{O}_4)(\text{C}_5\text{H}_7\text{O}_4)(\text{H}_2\text{O})] \cdot \text{H}_2\text{O}$**

**Keywords:** synthesis, crystal structure, coordination polymer, neodymium, praseodymium

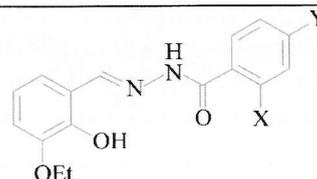


993

Sheng G.-H., Cheng X.-S., You Z.-L., Zhu H.-L.

**Two isomeric structures of oxovanadium(V) complexes with hydrazone and 8-hydroxyquinoline ligands**

**Keywords:** hydrazone ligand, 8-hydroxyquinoline, oxovanadium complex, crystal structure, thermal property

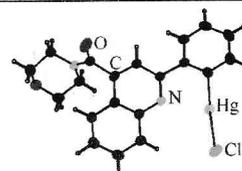


1001

Lin J., Henderson W., Nicholson B.K.

**X-ray structure of an amide-appended chloromercurated derivative of 2-phenylquinoline**

**Keywords:** synthesis, mercury complexes, orthometallation reactions, crystal structure



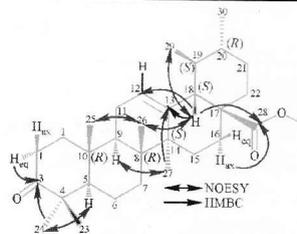
1006

Медведева Н.И., Супоницкий К.Ю.,  
Лопатина Т.В., Лобов А.Н., Попцов А.И.,  
Казакова О.Б.

1010

### Молекулярная структура ангидрида 3-оксо-урс-12-ен-28-овой кислоты

**Ключевые слова:** ангидрид 3-оксо-урс-12-ен-28-овой  
кислоты, синтез, рентгеноструктурный анализ



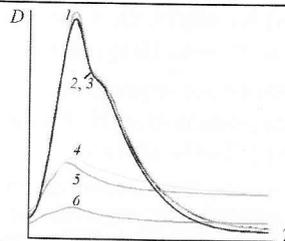
## СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Куцевол Н.В., Чумаченко В.А., Равизо М.,  
Шкодич В.Ф., Стоянов О.В.

1016

### Звездообразные полимеры декстран–полиакриламид: перспективы применения в нанотехнологиях

**Ключевые слова:** декстран, полиакриламид,  
разветвленный полимер, полиэлектролит, наночастица



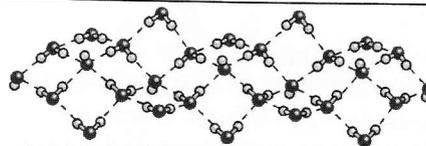
## ОБЗОРЫ

Банару А.М., Словохотов Ю.Л.

### Кристаллогидраты органических соединений

**Ключевые слова:** кристаллогидрат, водный ассоциат,  
планарный граф, протоноизбыточность

1024



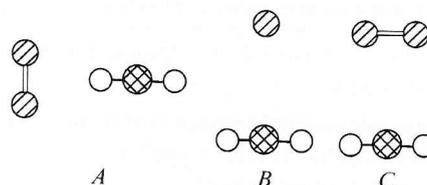
## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Богданчиков Г.А., Бакланов А.В.

### Расчет геометрии и энергии связи в ван-дер-ваальсовом комплексе этилена с кислородом C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>-O<sub>2</sub>

**Ключевые слова:** квантовая химия, MP2-расчеты,  
ван-дер-ваальсовы комплексы с молекулярным кислородом,  
энергия связи

1041

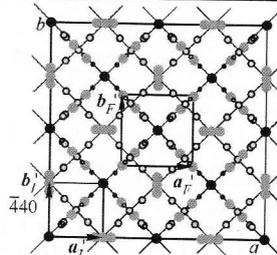


Борисов С.В., Магарилл С.А., Первухина Н.В.

### Кристаллографический анализ структуры борокарбосилицида скандия. Иерархия высокосимметричного упорядочения атомных групп и атомов

**Ключевые слова:** кристаллографический анализ,  
катионные и анионные подрешетки,  
борокарбосилицид скандия, иерархия упорядочения

1047

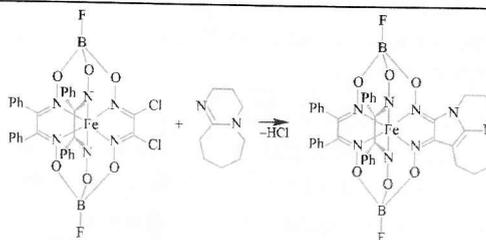


Вершинин М.А., Бурдуков А.Б., Первухина Н.В.,  
Ельцов И.В.

### Строение продукта замещения атомов хлора в дихлорзамещенном клатрохелате Fe(II) на 1,8-дизабицикло[5.4.0]ундекан-7-ен

**Ключевые слова:** клатрохелаты, нуклеофильное замещение,  
РСА, ЯМР

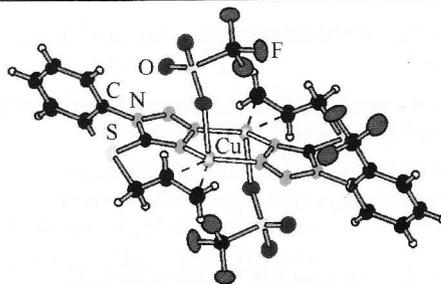
1052



Слывка Ю.И.

**Кристаллическая структура  $\pi$ -комплекса  $\text{Cu}(\text{CF}_3\text{SO}_3)$  с 5-(аллилтио)-1-[2-(трифлорометил)-фенил]-1*h*-тетразолом состава  $[\text{Cu}_2(\text{C}_{11}\text{H}_9\text{F}_3\text{N}_4\text{S})_2(\text{CF}_3\text{SO}_3)_2]$**

**Ключевые слова:** синтез, медь(I),  $\pi$ -комплекс, тетразол, кристаллическая структура

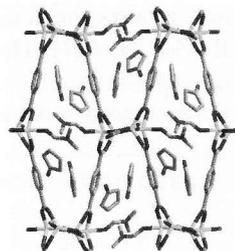


1056

Хан И.С., Самсоненко Д.Г., Федин В.П.

**Кристаллическая структура соединения включения пористого металл-органического полимера с 2-циклопентен-1-оном**

**Ключевые слова:** кристаллическая структура, пористые координационные полимеры, соединение включения, цинк

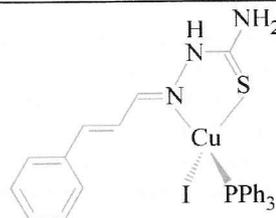


1058

Shahsavani E., Feizi N., Eigner V., Dusek M., Khalaji A.D.

**Crystal structure of copper(I) thiosemicarbazone complex  $[\text{CuI}(\text{PPh}_3)(\text{catsc})]$**

**Keywords:** copper(I), thiosemicarbazone, crystal structure, single crystal

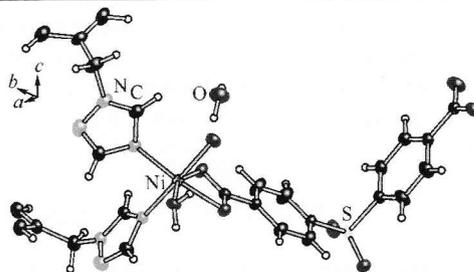


1061

Xu X.J.

**Crystal structure and magnetic property of a new two-dimensional coordination polymer constructed by 1,4-bis(1,2,4-triazol-1-ylmethyl)-benzene and 4,4'-sulfonyldibenzoic acid**

**Keywords:** Ni(II) complex, 4,4'-sulfonyldibenzoic acid, 1,4-bis(1,2,4-triazol-1-ylmethyl)-benzene, crystal structure, magnetic property

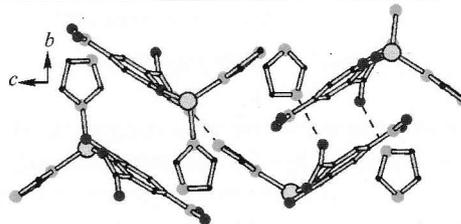


1066

Xu X.-J.

**Crystal structure and fluorescent properties of a 1D Zn(II) coordination polymer based on 5-nitro-1,3-benzenedicarboxylic acid**

**Keywords:** Zn(II) complex, 5-nitro-1,3-benzenedicarboxylic acid, crystal structure, one-dimensional chain, fluorescent property

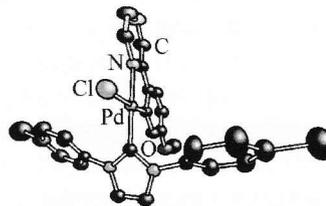


1071

Li H.M., Liu X.Q., Wang Z.Q., Fu W.J., Xu C.

**Crystal structures of two *N*-heterocyclic carbene-palladacycles**

**Keywords:** *N*-heterocyclic carbene, palladacycle, C-H...Cl hydrogen bond,  $\pi$ ... $\pi$  interaction



1075

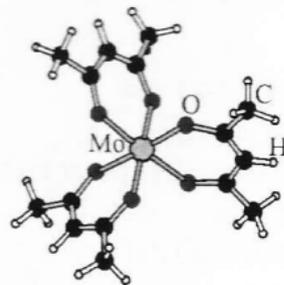
---

Леднева А.Ю., Артёмкина С.Б., Пирязев Д.А.,  
Фёдоров В.Е.

**Строение и термические свойства комплекса  
молибдена  $\text{Mo}(\text{acac})_3$**

**Ключевые слова:** молибден, ацетилацетон, синтез,  
кристаллическая структура, термический анализ

---



1079

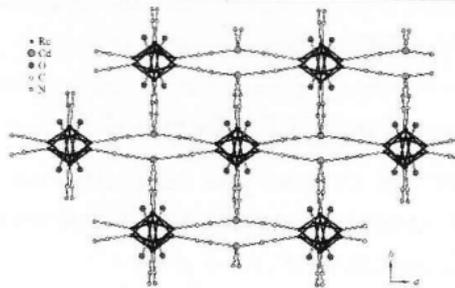
---

Леднева А.Ю., Вировец А.В., Наумов Н.Г.

**Строение каркасного кластерного комплекса  
 $\text{K}_{0,4}\text{Cs}_{0,6}\{\text{Cd}(\text{H}_2\text{O})_2\text{Re}_6\text{S}_8(\text{CN})_4(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})\} \cdot 8\text{H}_2\text{O}$**

**Ключевые слова:** синтез, рений, октаэдрический кластер,  
кадмий, топологическая кристаллохимия, водородная связь

---



1082

---

**Содержание следующего номера — в конце журнала**