

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 56

Январь-февраль

№ 1, 2015

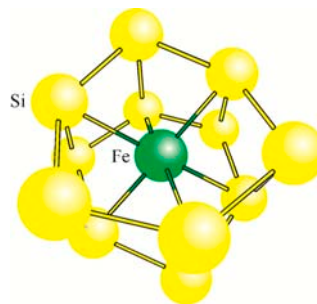
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Симон К.В., Тулуб А.В.

**Структура и магнитные свойства
железосилициевых кластеров
в многоконфигурационном расчете**

Ключевые слова: железосилициевые кластеры, многоконфигурационные неэмпирические расчеты, магнитные моменты, основные и электронно-возбужденные состояния, расчеты DFT, стабильность магнитных свойств при изменении температуры, магма

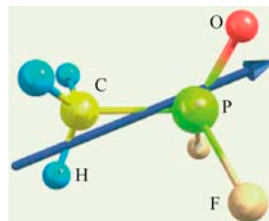


7

Лебедев А.В.

**Выбор квантово-химических методов и расчет
строения, дипольного момента и поляризуемости
фосфорильных соединений в газовой фазе**

Ключевые слова: фосфорильные соединения, квантово-химический расчет, длина связи, валентный угол, дипольный момент, поляризуемость

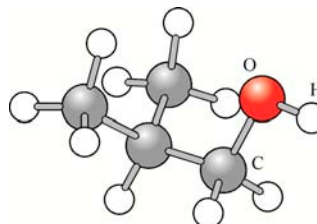


16

Каджар Ч.О., Исмаилзаде Г.И., Мензелев М.Р., Мовсумов И.З.

**К вопросу о молекулярной структуре молекулы
изобутанола**

Ключевые слова: структура, конформация, изобутанол, микроволновая спектроскопия, вращательные постоянные, структурные параметры

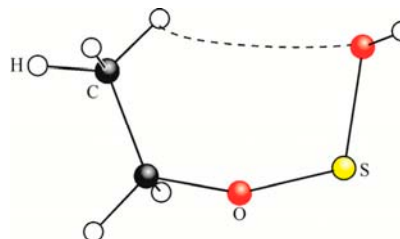


23

Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д.

**Сравнительный анализ электронного строения
и электроотрицательности групп неразветвленных
простых эфиров сульфоксиловой кислоты**

Ключевые слова: индуктивный эффект, квантовая теория атомов в молекуле (QTAИМ), электроотрицательность, шкала электроотрицательности, электронная плотность, эффективный заряд, функциональная группа



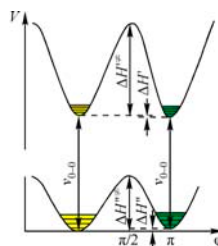
29

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Королёва Л.А., Тюлин В.И., Матвеев В.К.,
Пентин Ю.А.

Потенциальные функции внутреннего вращения молекулы акрилоилфторида в основном (S_0) и возбужденном (S_1) электронных состояниях

Ключевые слова: параметры потенциальной функции внутреннего вращения, *транс*- и *цис*-изомер, основное (S_0) и возбужденное (S_1) электронные состояния

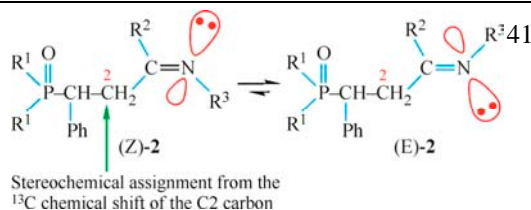


34

Wahbi A., Slimani H., Touil S.

Multinuclear NMR structural study of novel γ -iminophosphonate and phosphine oxide derivatives

Keywords: ^{13}C NMR, ^{31}P NMR, ^1H NMR, γ -iminophosphonates, phosphine oxides, *E/Z* isomerism

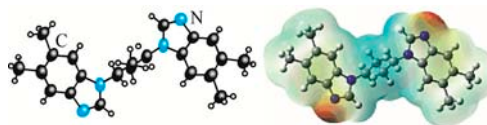


49

Li G.-Y., Hu J.-S., Liu Y.-F., Cui G.-H.

Crystal structure, spectroscopy, and theoretical calculations of two bis(benzimidazolyl)butane derivatives

Keywords: coordination polymer, benzimidazole, crystal structure, DFT, NBO

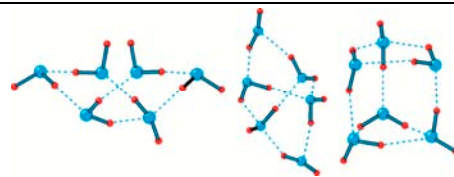


СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Белега Е.Д., Трубников Д.Н., Черёмухин Е.А.

Плавление гексамера воды

Ключевые слова: кластеры молекул воды, плавление гексамера воды, индекс Линдемана, фазовые переходы в кластерах, изомеры кластеров воды

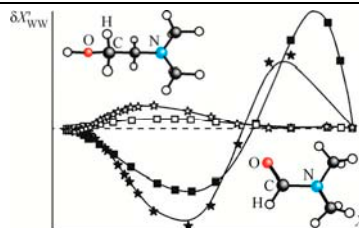


59

Титова А.Г., Крестьянинов М.А., Зайчиков А.М.

Термодинамические и структурные характеристики водных растворов аминспиртов

Ключевые слова: внутреннее давление, межмолекулярные взаимодействия, термодинамические и структурные характеристики водных растворов аминспиртов, вода, апротонные амиды



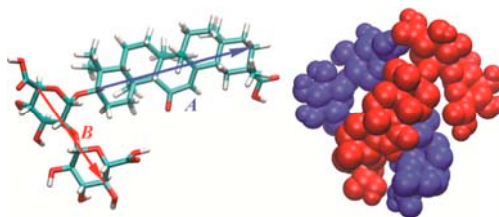
65

Зеликман М.В., Ким А.В., Медведев Н.Н.,
Селютина О.Ю., Поляков Н.Э.

Структура димеров глицирризиновой кислоты в воде и их комплексов с холестерином.

Молекулярно-динамическое моделирование

Ключевые слова: молекулярно-динамическое моделирование, водные растворы, глицирризиновая кислота, холестерин, структура ассоциатов, механизм гость-хозяин



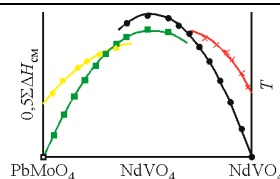
73

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Журавлёв В.Д., Резницких О.Г., Бамбуров В.Г.

О взаимной растворимости в системах MMoO_4 – LnVO_4 , где $\text{M} = \text{Ca}, \text{Cd}, \text{Sr}, \text{Ba}, \text{Pb}, \text{Ln} = \text{Y}, \text{Sc}, \text{Ce-Lu}$

Ключевые слова: гетеровалентные замещения, твердые растворы, энтальпия смешения, циркон, шеелит

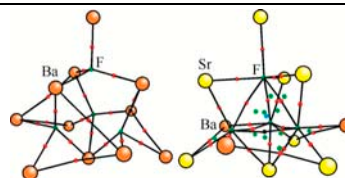


83

Ращенко С.В., Бакакин В.В., Козлова С.Г., Беккер Т.Б.,
Фёдоров П.П.

Особенности анионного изоморфизма во фторидортоборатах

Ключевые слова: анионный изоморфизм, ортобораты, фтор

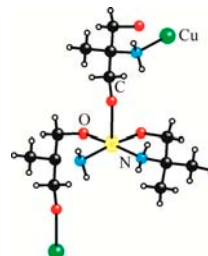


91

Abbas G., Hassan A., Irfan A., Mir M., Mariya-al-Rashida,
Wu G.

A new pentacoordinate polymeric copper(II) complex with 2-amino-2-methyl-1,3-propandiol: Structural investigations using XRD and DFT

Keywords: copper complex, frontier molecular orbitals,
absorption spectrum, density functional theory,
time dependent density functional theory

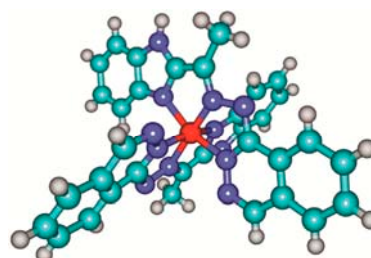


99

Попов Л.Д., Левченков С.И., Щербаков И.Н.,
Александров Г.Г., [Старикова З.А.], Луков В.В.,
Коган В.А.

Молекулярная и кристаллическая структура комплексов железа(III) и никеля(II) с 1'-фталазинилгидразонами гетероциклических карбонильных соединений

Ключевые слова: гидразоны, координационные соединения,
рентгеноструктурный анализ

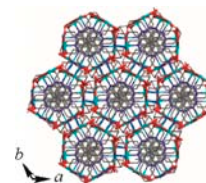


109

Завахина М.С., Самсоненко Д.Г., Федин В.П.

Кристаллическая структура координационного полимера $[\text{Cu}_2(\text{S-mal})_2(\text{bpy})_2(\text{H}_2\text{O})] \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: медь, координационные полимеры,
металл-органические каркасы, хиральные комплексы, яблоч-
ная кислота

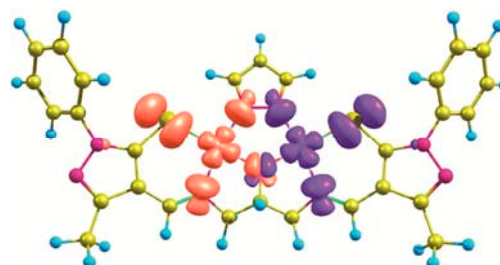


115

Левченков С.И., Щербаков И.Н., Попов Л.Д.,
Ураев А.И., Супоницкий К.Ю., Зубенко А.А.,
Ионов А.М., Коган В.А.

Влияние природы немостиковых донорных атомов на структуру и магнитные свойства биядерных комплексов меди(II) с гетероциклическими азометиновыми лигандами

Ключевые слова: азометины, комплексные соединения,
рентгеноструктурный анализ, магнетохимия,
обменное взаимодействие, теория функционала плотности

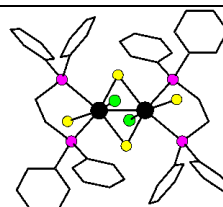


120

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

Структура нового биядерного комплекса вольфрама $[\text{W}_2\text{S}_4\text{Cl}_2(\text{dppe})_2] \cdot 2\text{CH}_3\text{CN}$

Ключевые слова: вольфрам, сера, биядерный комплекс,
синтез, кристаллическая структура, КР спектр

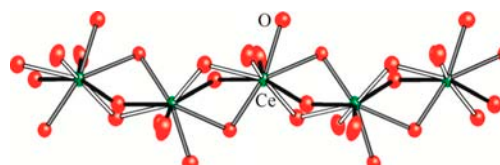


128

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

Crystal structures and characterization of two one-dimensional coordination polymers containing Ln^{3+} ions and anthranilate $(\text{C}_7\text{H}_6\text{NO}_2)^-$ anions

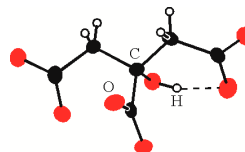
Keywords: cerium, praseodymium, anthranilate anion,
synthesis, crystal structure, one dimensional coordination polymer



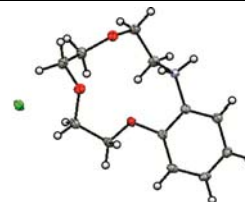
133

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Миминошвили Э.Б., Беридзе Л.А.

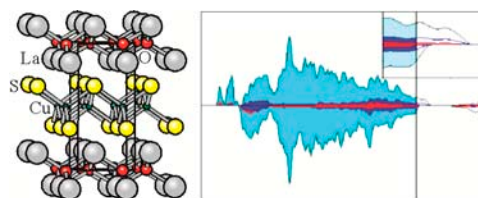
Стереохимия цитрат-аниона в соединениях, содержащих ионы гуанидиния и цитрата**Ключевые слова:** комплексные соединения, структурный анализ, переходные металлы, гуанидин, цитрат

141

Глушко В.Н., Садовская Н.Ю., Блохина Л.И.,
Ананьев И.В.**Кристаллическая и молекулярная структура бензоаза-12-краун-4 гидрохлорида****Ключевые слова:** рентгеноструктурный анализ, краун-эфиры, бензоаза-12-краун-4

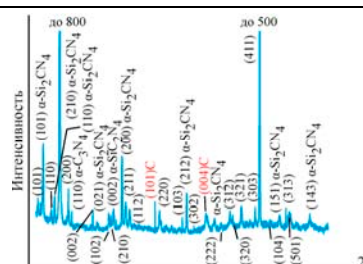
149

ОБЗОРЫ

Банников В.В., Ивановский А.Л.**Новые магнитные материалы на основе полупроводниковых 1111 фаз: теория и эксперимент****Ключевые слова:** немагнитные полупроводниковые 1111 фазы, примеси замещения, новые магнитные материалы, *ab initio* расчеты, синтез

155

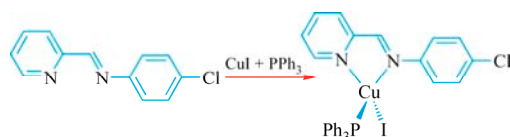
Файнер Н.И., Косяков В.И.

Фазовый состав тонких пленок карбонитрида кремния, полученных плазмохимическим разложением кремнийорганических соединений**Ключевые слова:** карбонитрид кремния, тонкие пленки, гексаметилдисилазан, плазмохимическое осаждение, РФА с использованием СИ, кристаллические фазы семейства $\alpha\text{-Si}_3\text{-}_n\text{C}_n\text{N}_4$ 

171

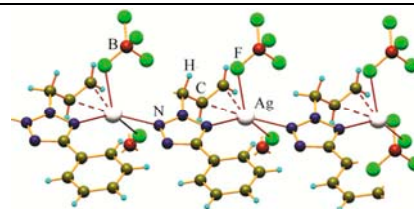
КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Khalaji A.D., Jafari K., Fejfarova K., Dusek M.

Crystal structure of new copper(I) complex Cu(py-Clan)(PPh₃)I**Keywords:** copper(I) complex, Schiff base, synthesis, crystal structure, tetrahedral

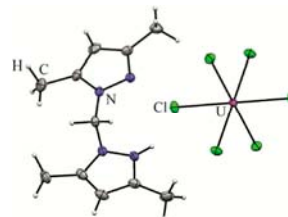
183

Слывка Ю.И.

Кристаллическая структура π -комплекса AgBF_4 с 2-аллил-5-фенил-2H-тетразолом состава $[\text{Ag}(\text{C}_{10}\text{H}_{10}\text{N}_4)(\text{BF}_4)]$ **Ключевые слова:** серебро(I), π -комплекс, тетразол, кристаллическая структура

187

Carretas J.M., Cui J., Cruz A., Santos I.C., Marçalo J.

Crystal structure of bis[1-[(3,5-dimethyl-1H-pyrazol-1-yl)methyl]-3,5-dimethyl-1H-pyrazol-2-ium] hexachloridouranate(IV): $[\text{H}_2\text{C}(3,5\text{-Me}_2\text{pz})(3,5\text{-Me}_2\text{pzH})]_2[\text{UCl}_6]$ **Keywords:** uranium, bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)methane, pyrazolium, crystal structure, short contacts

189