

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 57

Июнь-июль

№ 5, 2016

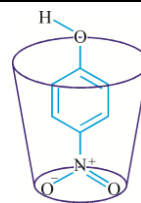
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Киселёв С.С., Борисов Ю.А.

Комплексы α -, β - и γ - циклодекстринов с нитрофенолами. Теоретическое исследование строения и энергетики

Ключевые слова: циклодекстрины, нитрофенолы, комплексы внедрения, DFT

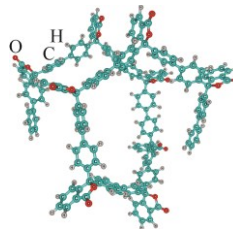


897

Мацевич О.В., Янборисов В.М., Самигуллина З.С.

Квантово-химическое моделирование гомополиконденсации псевдохлорангидридов ароматических *o*-кетокислот

Ключевые слова: поликонденсация, учет растворителя, активный центр, переходное состояние, энтальпия реакции, полиариленталиды

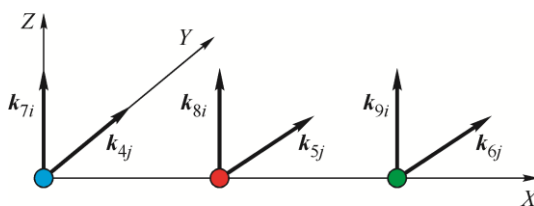


903

Ивашкевич О.А., Матулис В.Э., Нагорный Ю.Е., Репченков В.И.

Гармоническое силовое поле системы связанных атомов

Ключевые слова: квадратичное силовое поле, условия равновесия, структура матрицы силовых постоянных

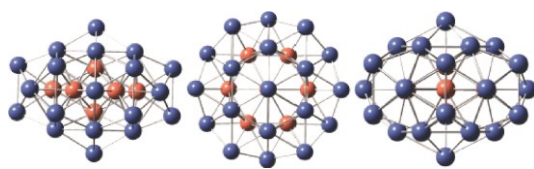


910

Song W., Wang B., Guo K., Zhang W.

Structures and magnetic properties of Ni_n ($n = 36 - 40$) clusters from first-principles calculations

Keywords: nickel clusters, first-principle, magnetic properties

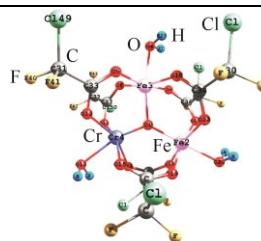


916

Morsali A., Beyramabadi S.A., Chegini H., Bozorgi N., Moghadam-Elahabad A.

Experimental and theoretical characterization of Fe_2Cr trinuclear-oxo-centered complex with a CF_2ClCOO^- bridge

Keywords: synthesis, oxo-centered, trinuclear, carboxylate, CF_2ClCOO^- , DFT, AIM



923

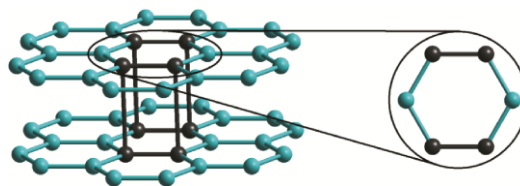
ИЗДАТЕЛЬСТВО СО РАН
НОВОСИБИРСК
2016

Беленков Е.А., Грешняков В.А.

932

Структура и некоторые физико-химические свойства углеродной и кремниевой фаз с алмазоподобной решеткой LA3

Ключевые слова: моделирование, алмаз, кремний, алмазоподобные фазы, атомная структура, электронные свойства, фазовый переход



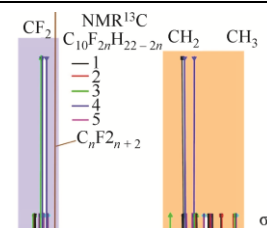
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Игнатъева Л.Н., Бузник В.М.

940

Квантово-химическое ЯМР исследование разветвленных и неразветвленных фторполимеров

Ключевые слова: квантово-химические расчеты, низкомолекулярные фторполимеры, спектры ЯМР ^{19}F и ^{13}C фторуглеродных молекул

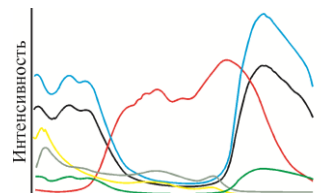


Полищук С.А., Игнатъева Л.Н., Марченко Ю.В., Бузник В.М.

950

Висмутсодержащие фторидные стекла

Ключевые слова: фториды индия, циркония, висмута, бария, фторидные, фторцирконатные стекла, ИК, КР, ЯМР ^{19}F , фотолюминесценция

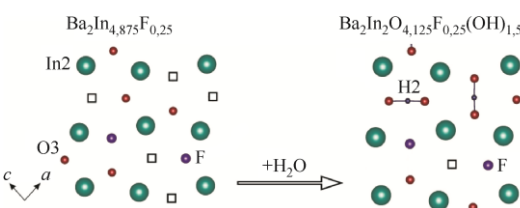


Анимича И.Е., Тарасова Н.А., Денисова Т.А., Бакланова Я.В.

959

Состояние протонов в гидратированных фторзамещенных браунмиллеритах $\text{Ba}_2\text{In}_2\text{O}_{5-0.5y}\text{F}_y \cdot n\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: браунмиллерит, анионное допирование, MAS ЯМР ^1H , колебательная спектроскопия, протонная подвижность

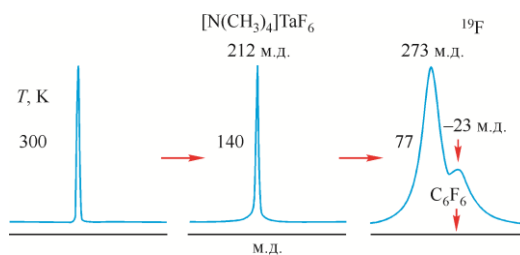


Кавун В.Я., Слободюк А.Б., Диденко Н.А., Давидович Р.Л.

966

Особенности ионной подвижности и фазовые переходы в гексафторокомплексных соединениях тантала(V), ниобия(V) и титана(IV) с катионом тетраметиламмония

Ключевые слова: гексафторокомплексы, ниобий(V), тантал(V), титан(IV), тетраметиламмоний, ионная подвижность, фазовые переходы, спектры ЯМР ^{19}F , ^1H , ДСК

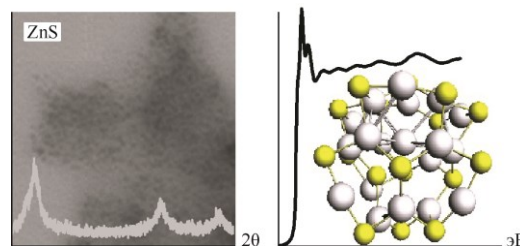


Кравцова А.Н., Панкин И.А., Будник А.П., Бутова В.В., Ластовина Т.А., Солдатов А.В.

975

Синтез и моделирование структуры квантовых точек на основе ZnS

Ключевые слова: квантовые точки, сульфид цинка, микроволновый синтез, поверхностно-активные вещества, атомная и электронная структура, компьютерное моделирование, XANES спектроскопия

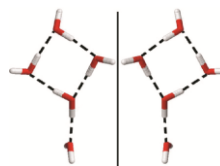


СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Хахалин А.В., Градобоева О.Н.

Метод определения и классификации хиральности водных сред

Ключевые слова: хиральность, водные кластеры, численный метод, матрицы

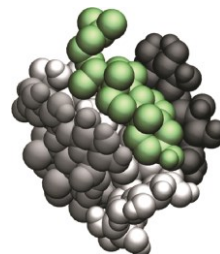


983

Зеликман М.В., Ким А.В., Медведев Н.Н.

Структура малых ассоциатов глицирризиновой кислоты с холестерином в водном растворе. Молекулярно-динамическое моделирование

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

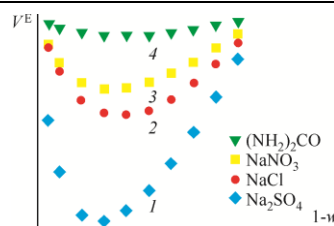


990

Королёв В.П.

Объемные свойства и гидратные числа компонентов систем вода—соль, вода—мочевина и вода—мочевина—соль

Ключевые слова: кажущиеся и парциальные объемы, гидратные числа, водные растворы, мочевины, соли натрия



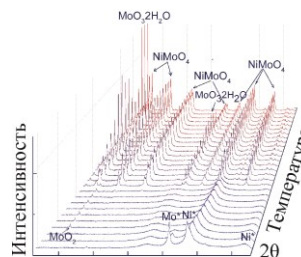
997

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Булавченко О.А., Смирнов А.А. Хромова С.А.,
Винокуров З.С., Ищенко А.В., Яковлев В.А.,
Цыбуля С.В.

Рентгенографическое исследование в условиях *in situ* процесса восстановления водородом $\text{NiMoO}_4\text{-SiO}_2$

Ключевые слова: смешанные оксиды, *in situ* рентгенография, восстановление

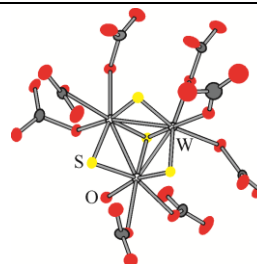


1005

Ларичева Ю.А., Гущин А.Л., Абрамов П.А.,
Соколов М.Н.

Строение и термические свойства сульфидного кластера вольфрама, координированного тиомочевинной

Ключевые слова: трехъядерный сульфидный кластер, вольфрам, тиомочевина, кристаллическая структура, квантово-химические расчеты

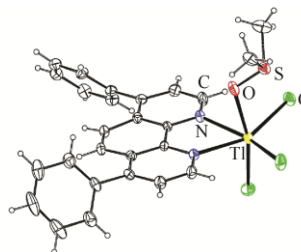


1012

Ghadermazi M.

Characterization, luminescent properties, crystal structure determination, and thermal properties of $[\text{Ti}(\text{Ph}_2\text{phen})\text{Cl}_3(\text{DMSO})]$

Keywords: synthesis, Ti(III), 4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline, crystal structure, thermal gravimetric, differential thermal analysis, luminescent properties



1020

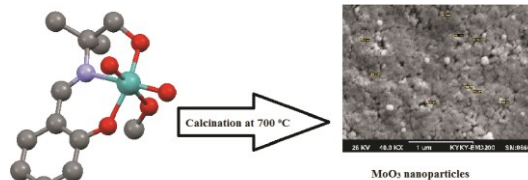
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Saeednia S., Iranmanesh P., Hatefi Ardakani M.,
Ebadinejad N.

1026

Sonochemical and solvothermal synthesis of methanol {2-[(2-hydroxy-1,1-dimethylethylimino)-methyl]phenolato} dioxidomolybdenum(VI) complex and its decomposition to MoO₃ nanoparticles

Keywords: nanosized MoO₃, Mo(VI) tridentate Schiff base complex, solvothermal, sonochemical, thermal analysis



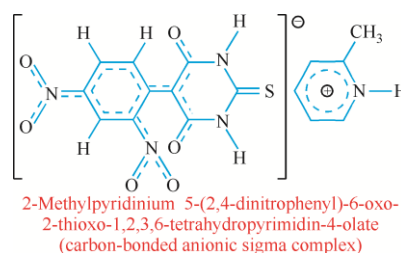
СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Mangaiyarkarasi G., Sridevi G., Poornima Devi P.,
Kalaivani D.

1035

2-Methylpyridinium 5-(2,4-dinitrophenyl)-6-oxo-2-thioxo-1,2,3,6-tetrahydropyrimidin-4-olate: Synthesis, crystal structure, and biological evaluation

Keywords: carbon-bonded anionic sigma complex, 2-thiobarbituric acid, 1-chloro-2,4-dinitrobenzene, single crystal X-ray diffraction studies, anticonvulsant activity, maximal electroshock method

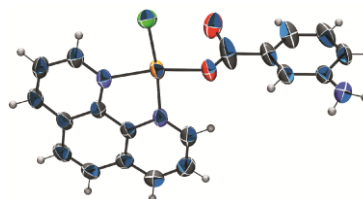


Batool S.S., Gilani S.R., Tahir M.N., Harrison W.T.A.

1041

Structural characterization of a mixed-ligand complex of copper(II) with 1,10-phenanthroline and the *m*-aminobenzoate ion

Keywords: synthesis, copper(II), 1,10-phenanthroline, *m*-aminobenzoate ion, coordination polymer



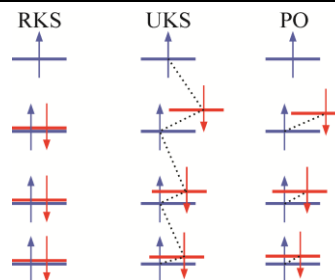
ОБЗОРЫ

Рузанкин С.Ф., Шубин А.А., Ковальский В.Ю.,
Зильберберг И.Л.

1047

Анализ спин-поляризованных решений в базисе парных орбиталей

Ключевые слова: теория функционала плотности, решения с нарушенной спиновой симметрией, базис парных орбиталей, спиновая плотность, гидроксид железа, диссоциация C—H связи, Fe(IV)=O, Fe(III)—O•, диссоциация группы V=O



КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Liu X., Li L., Qian Z., Wang X.

1066

Theoretical investigation of the spectroscopic constants of aluminum carbide in the ground state

AIC

Keywords: spectroscopic constants, potential energy curves, extrapolation, AIC

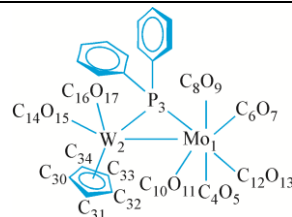
Wang J., Shi X., Cao W.

1070

Geometries and properties of the heterobimetallic phosphido-bridged complex:

$\text{CpW}(\text{CO})_2(\mu\text{-PPh}_2)\text{Mo}(\text{CO})_5$

Keywords: DFT, metal-metal bond, semi-bridging carbonyl, AIM, NBO

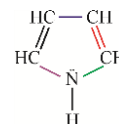


Муллоев Н.У., Файзиева М., Исломов З.З., Юсупова Дж.

1075

Протоноакцепторные способности гетероциклических соединений по полосам валентных колебаний групп N—H ассоциированных молекул

Ключевые слова: гетероциклические соединения, производные пиррола, амфотерные свойства, протоноакцепторная способность, гетероатом, самоассоциация, индукционное влияние

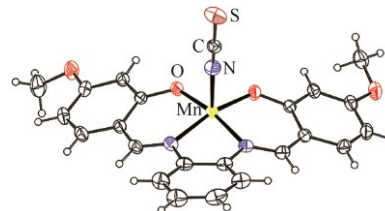


Ghaemi A., Keyvani B., Rayati S., Zarei S., Notash B.

1078

Crystal structure of a new manganese(III) complex with tetradentate Schiff base N, N'-O-phenylenebis-(4-methoxysalicylideneimine)

Keywords: synthesis, tetradentate Schiff base ligand, Mn(III), crystal structure, N,N'-O-phenylenebis-(4-methoxysalicylideneimine), X-ray diffraction analysis

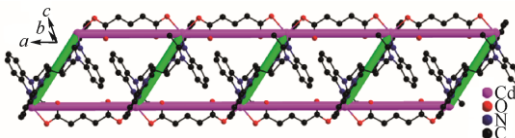


Zhang X., Liu Y.G., Cui G.H.

1082

Crystal structures and luminescence properties of a one-dimensional cadmium coordination polymer derived from flexible bis(imidazole) ligand

Keywords: Cd(II) complex, crystal structure, luminescence property

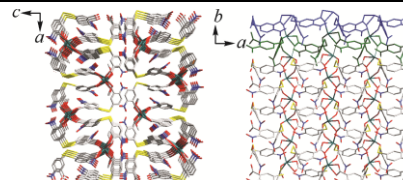


Yuan X.-M., Sun D., Li D.-P., Xu H.-J.

1087

A new Cd(II) coordination polymer constructed by a flexible carboxylate ligand

Keywords : Cd(II) complex, coordination polymer, disulfide ligand

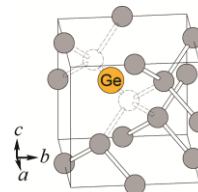


Надолинный В.А., Комаровских А.Ю., Пальянов Ю.Н., Куприянов И.Н., Борздов Ю.М., Рахманова М.И., Юрьева О.П., Вебер С.Л.

1092

Исследование методом ЭПР германий-вакансионного дефекта в алмазе

Ключевые слова: алмаз, электронный парамагнитный резонанс, люминесценция, дефект, германий

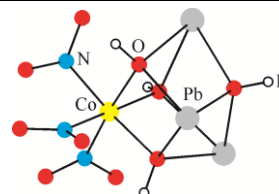


Храненко С.П., Куратьева Н.В., Громилов С.А.

1095

Семейство кристаллических структур с участием катионов $[\text{Pb}_3(\text{OH})_4\text{Co}(\text{NO}_2)_3]^{2+}$

Ключевые слова: свинец, кобальт, комплекс, рентгеноструктурный анализ, рентгенофазовый анализ, кристаллохимия

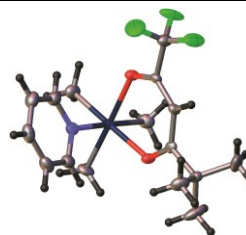


Доровских С.И., Пирязев Д.А., Байдина И.А.,
Жаркова Г.И., Морозова Н.Б.

1100

**Строение и термические свойства
триметилпивалоилтрифторацетонат
пиридинплатины(IV)**

Ключевые слова: платина(IV), β-дикетон,
рентгеноструктурный анализ, термогравиметрия

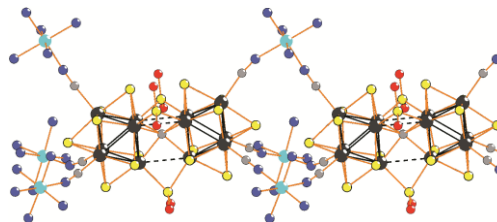


Гайфулин Я.М., Смоленцев А.И., Миронов Ю.В.

1104

**Строение координационного полимера на основе
биооктаэдрического кластерного аниона
[Re₁₂CS₁₄(SO₂)₃(CN)₆]⁶⁻ и амминокомплексов Ni²⁺**

Ключевые слова: синтез, рений, биооктаэдрический
кластерный комплекс, координационный полимер,
кристаллическая структура

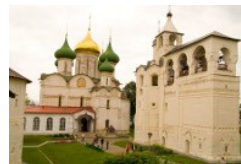


КОНФЕРЕНЦИИ, СИМПОЗИУМЫ, НАУЧНЫЕ ШКОЛЫ

**VIII Национальная кристаллохимическая
конференция**

Суздаль, 29.05-03.06.2016

1107



Содержание следующего номера — в конце журнала