

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 59

Июль-август

№ 6, 2018

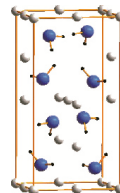
С О Д Е Р Ж А Н И Е

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Кайзер Е.Б., Кравченко Н.Г., Поплавной А.С.

**Первопринципное моделирование электронных свойств
 LiNH_2 и NaNH_2**

Ключевые слова: функционал плотности, электронная структура, электронная плотность, химическая связь, хранение водорода, амиды щелочных металлов

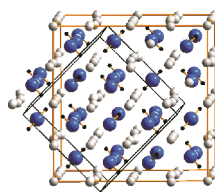


1301

Кравченко Н.Г., Жданов В.В., Кайзер Е.Б., Поплавной А.С.

**Первопринципные исследования кристаллической
структуры, электронных спектров и химической связи
в низкотемпературной фазе имида лития**

Ключевые слова: хранение водорода, имид лития, функционал плотности, электронные спектры, химическая связь

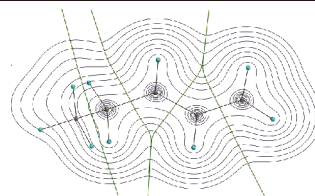


1308

Чернова Е.М., Ситников В.Н., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д.

**Исследование электронного строения
алкилаллильных радикалов**

Ключевые слова: электронная плотность, свободные радикалы, свободная валентность, спиновая плотность, радикальный центр, квантовая теория атомов в молекуле, сопряжение

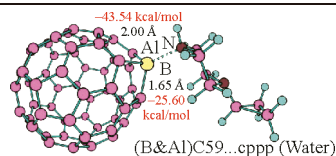


1315

Bilge M.

A DFT investigation of the interaction of B- and Al-doped C_{60} fullerenes with cyclopropylpiperazine

Keywords: doped fullerenes, cyclopropylpiperazine, DFT, NBO

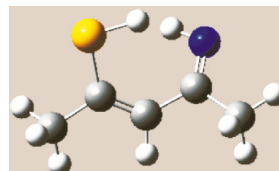


1321

Poorsargol M., Delarami H.S.

**A quantum chemical study of various intramolecular
hydrogen bonds in 4-amino-3-pentene-2-thial**

Keywords: 4-amino-3-pentene-2-thial, intramolecular hydrogen bond, resonance, AIM, NBO

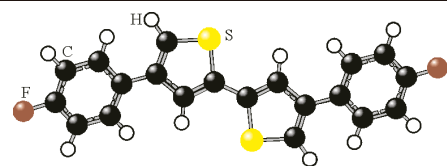


1326

Nikoofard H., Amin A.H.

DFT study of structural and electronic properties of conducting oligo(*p*-fluorophenylthiophene)

Keywords: conducting polymer, oligo(*p*-fluorophenylthiophene), density functional theory, doped state



1338

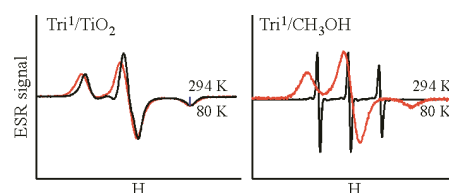
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Самойлова Р.И., Сырямина В.Н., Цветков Ю.Д.,
Дзюба С.А., Тониоло К., Формаджо Ф.

ЭПР спектроскопия адсорбированных спин-меченых пептидов:

иммобилизация трихогана на диоксиде титана

Ключевые слова: ТОАС спин-меченые пептиды, иммобилизация на TiO₂, ЭПР спектроскопия



1348

Кинжалов М.А., Новиков А.С., Хорошилова О.В.,
Бокач Н.А.

Строение 2-метилфенилцианамид в твердой фазе

Ключевые слова: арилцианамиды, нековалентные взаимодействия, анализ поверхностей Хиршфельда, топологический анализ распределения электронной плотности

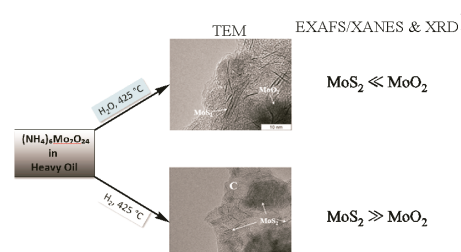


1351

Соснин Г.А., Мироненко О.О., Елецкий П.М.,
Кукушкин Р.Г., Гуляева Ю.К., Булавченко О.А.,
Герасимов Е.Ю., Сараев А.А., Каичев В.В., Храмов Е.В.,
Яковлев В.А.

Особенности структуры Мо-содержащего дисперсного катализатора в процессе обогащения тяжелой нефти в среде водяного пара и водорода

Ключевые слова: молибден, каталитический паровой крекинг, тяжелая нефть, дисперсный катализатор



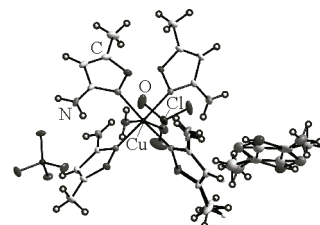
1357

Ben Nasr M., Kahlaoui M., Ferenc W., Cristovao B.,
Ben Nasr C.

Crystal structure, magnetic properties, and electrical characterization of a new coordination compound:

[CuClO₄(C₄H₆N₂O)₄H₂O]ClO₄(C₄H₆N₂O)_{0.08}

Keywords: X-ray diffraction, coordination compound, impedance spectroscopy, magnetic properties, DSC

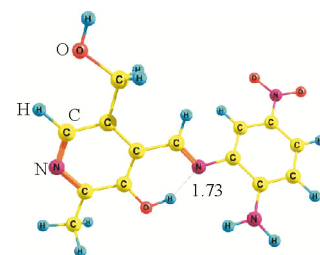


1367

Beyramabadi S. A., Khashi M., Morsali A., Gharib A.,
Chegini H.

Experimental and computational investigations of 4-((E)-(2-amino-5-nitrophenylimino)methyl)-5-(hydroxymethyl)-2-methylpyridin-3-ol Schiff base derived from vitamin B₆

Keywords: synthesis, Schiff base, DFT, intramolecular proton transfer, assignment, AIM analysis

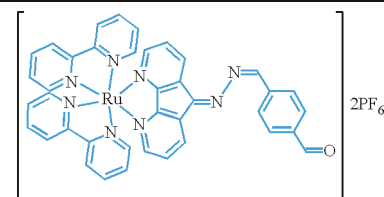


1376

Erden I., Orman Z., Kilicarslan F.A.

Effect of different π -conjugated dyes containing 4,5-diazafluorenone-9-hydrazone on the performance of dye-sensitized solar cells

Keywords: DSSC, 4,5-diazafluorenone-9-hydrazone, Schiff base, ruthenium complexes



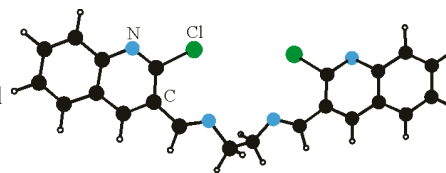
1385

Beyramabadi S. A., Javan-Khoshkholgh M., Ostad N.J., Gharib A., Ramezanzadeh M., Sadeghi M., Bazian A., Morsali A.

1392

Spectroscopic (FT-IR, NMR, UV-Vis, Fluorescence) and DFT studies (molecular structure, IR and NMR spectral assignments, NBO and Fukui function) of Schiff bases derived from 2-chloro-3-quinolinecarboxaldehyde

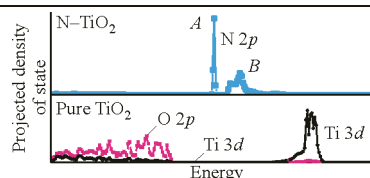
Keywords: synthesis, Schiff base, DFT, fluorescence, IR assignment, NMR, NBO



Zhang D., Wang J.

Modification of the optical and electronic properties of TiO₂ by N anion-doping for augmentation of the visible light assisted photocatalytic performance

Keywords: titania, photocatalysis, nitrogen doping, DFT simulation

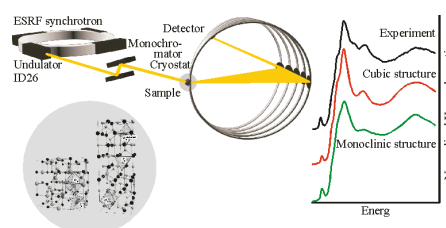


1403

Подковырина Ю.С., Кременная М.А., Солдатов М.А., Солдатов А.В.

Влияние особенностей локальной атомной и электронной структуры магнетита на тонкие эффекты в спектрах рентгеновского поглощения высокого разрешения

Ключевые слова: магнетит, локальная атомная и электронная структура, рентгеновская спектроскопия поглощения, HERFD-XANES спектроскопия



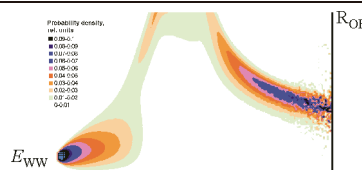
1412

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Теплухин А.В.

Термодинамически мотивированный критерий водородной связи для компьютерных моделей воды

Ключевые слова: вода, водородная связь, Монте-Карло, моделирование

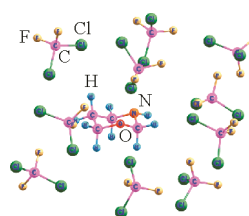


1418

Кузнецов В.В.

Моделирование пирамидальной инверсии азота в тетрагидро-1,3-оксазинах в полярной среде

Ключевые слова: конформационный анализ, тетрагидро-1,3-оксазин, компьютерное моделирование, конформер, пирамидальная инверсия азота, сольватная оболочка, растворитель

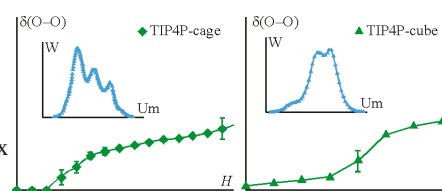


1425

Белега Е.Д., Елютин П.В., Трубников Д.Н.

О проблеме критериев фазовых превращений в кластерах молекул воды (пример гексамера и октамера)

Ключевые слова: кластеры воды, изомеризация сетки водородных связей, критерии фазовых превращений, молекулярная динамика, микроканонический ансамбль



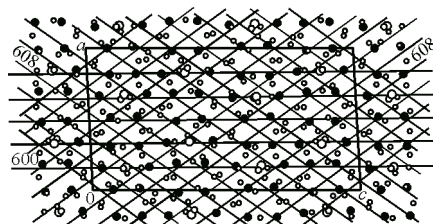
1431

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

Кристаллографический анализ строения $\text{LaBiI}_6 \cdot 13\text{H}_2\text{O}$ и $\text{NdBiI}_6 \cdot 13\text{H}_2\text{O}$. Подрешетка атомов иода – общий «скелет» структур

Ключевые слова: кристаллографический анализ, когерентная сборка, подрешетка анионов иода, упаковка комплексных ионов $[\text{Ln}(\text{H}_2\text{O})_9]^{3+}$ и $[\text{BiI}_6]^{3-}$

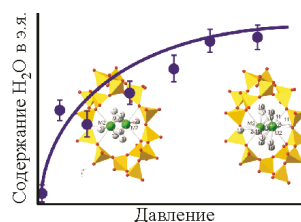


1438

Серёткин Ю.В., Бакакин В.В.

Структура К-замещенного цеолита клиноптилолита и его поведение при сжатии в проникающей и непроникающей средах

Ключевые слова: цеолиты, К-замещенный клиноптилолит, структура, высокое давление, индуцированная давлением гидратация

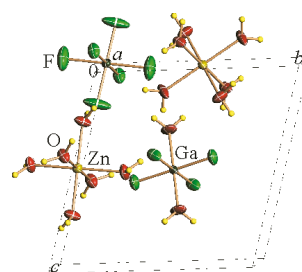


1443

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

Рентгеноструктурное исследование комплексных фторидов индия(III) и галлия(III) $\text{M}^{\text{II}}\text{AF}_5 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ($\text{M} = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}, \text{Cd}$; $\text{A} = \text{In}, \text{Ga}$)

Ключевые слова: In(III), Ga(III), Cu(II), Zn(II), комплексный фторид, кристаллическая структура, октаэдрические комплексные катионы, октаэдрические комплексные анионы

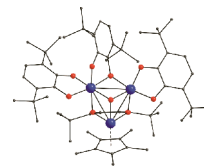


1452

Петров П.А., Сухих Т.С.

Кристаллические структуры циклопентадиенильных катехолатных комплексов хрома

Ключевые слова: хром, декаметилхромоцен, хиноны, рентгеноструктурный анализ

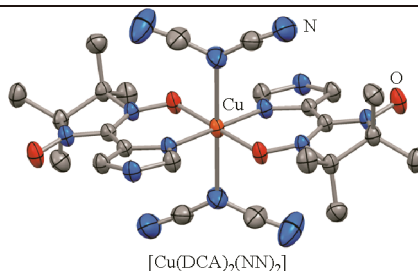


1457

Романенко Г.В., Фурсова Е.Ю., Летягин Г.А., Богомяков А.С., Петрова М.В., Морозов В.А., Овчаренко В.И.

Кристаллическая структура комплексов металлов с 2-имидазолиновыми нитроксилами и дицианамидом

Ключевые слова: никель, кобальт, медь, марганец, 2-имидазолиновые нитроксилы, дицианамид, разнолигандные комплексы

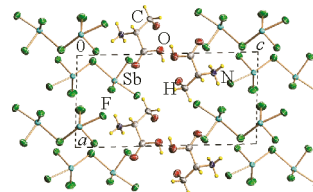


1465

Удовенко А.А., Макаренко Н.В., Ковалёва Е.В., Земнухова Л.А.

Кристаллическая структура гептафтородиантимоната(III) DL -сериния

Ключевые слова: кристаллическая структура, комплексное соединение, гептафтородиантимонат(III), DL -серин

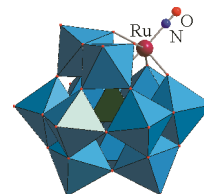


1474

Шмакова А.А., Волчек В.В., Абрамов П.А., Соколов М.Н.

Реакция $\text{K}_2[\text{Ru}(\text{NO})\text{Cl}_5]$ с $\text{K}_8[\gamma\text{-SiW}_{10}\text{O}_{36}]$ в гидротермальных условиях: синтез $[\text{SiW}_{11}\text{O}_{39}\{\text{Ru}(\text{NO})\}]^{5-}$

Ключевые слова: рутений, анион типа Кеггина, кристаллическая структура

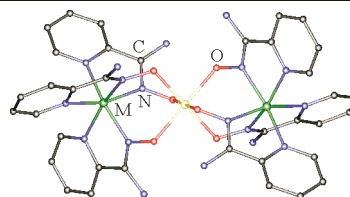


1480

Ran J.-W., Tong Y.-P.

Crystal structures, magnetic properties, and theoretical investigations of three linear cluster complexes with pyridine-2-amidoxime

Keywords: synthesis, trinuclear complex, crystal structure, magnetic property, theoretical investigations

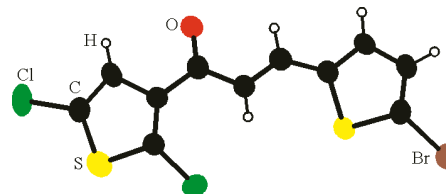


1486

Delgado G.E., Henao J.A., Quintana J.H., Al-Maqtari H.M., Jamalis J., Sirat H.M.

Structural characterization of a new chalcone compound containing a thiophene moiety: (E)-3-(5-bromothiophen-2-yl)-1-(2,5-dichlorothiophen-3-yl)-2-propen-1-one

Keywords: synthesis, chalcones, thiophene, crystal structure, hydrogen bond patterns

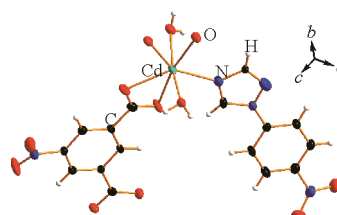


1493

Qian J., Wang J., Chen N.-N.

Crystal structure and luminescent property of a one-dimensional chain based on 1-(4-nitrophenyl)-1,2,4-triazole

Keywords: synthesis, coordination polymer, one-dimensional chain, 1-(4-nitrophenyl)-1,2,4-triazole, 5-nitro-1,3-benzenedicarboxylic acid, luminescence

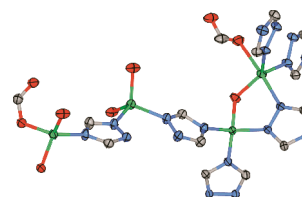


1499

Fang X.-D., Yang L.-B., Dou A.-N., Zhu A.-X., Xu Q.-Q.

Structure and photocatalytic properties of a 3D zinc(II) triazolate coordination polymer combining hydroxyl and formate anions as the auxiliary coligands

Keywords: synthesis, coordination polymer, zinc(II), 1,2,4-triazole, photocatalytic property

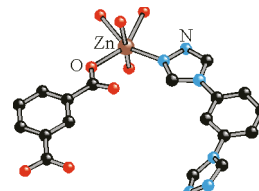


1503

Miao S.B., Xu C.Y., Ji B.M.

Crystal structures and luminescence properties of two one-dimensional zinc coordination polymers derived from a bis(triazole) ligand

Keywords: 1,3-di-(1,2,4-triazole-4-yl)benzene, coordination polymer, crystal structure, luminescence property

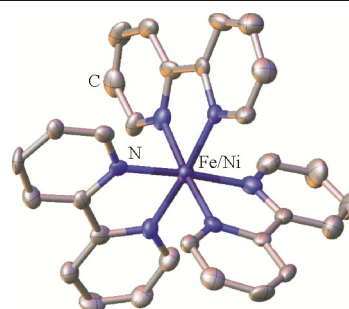


1508

Чебаненко Е.А., Марцинко Е.Э., Сейфуллина И.И., Дьяконенко В.В., Шишкина С.В.

Структурные особенности и свойства гетерометаллических комплексов германия(IV) и некоторых 3d-металлов с ксиларовой кислотой и 2,2'-бипиридином

Ключевые слова: ксиларатогерманат, 2,2'-бипиридин, комплексы железа(II) и никеля(II), координационные соединения, молекулярная и кристаллическая структура, анализ поверхностей Хиршфельда

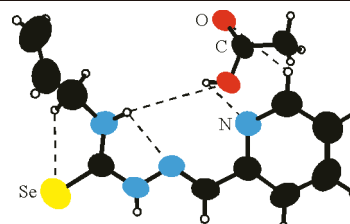


1514

Чумаков Ю.М., Петренко П.А., Граур В.О., Цапков В.И., Гуля А.П.

Кристаллическая структура уксуснокислого сольвата N-(проп-2-ен-1-ил)-2-(пирид-2-илметилиден)-гидразинкарбоселеноамида

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, гидразинкарбоселеноамид, селеносемикарбазон



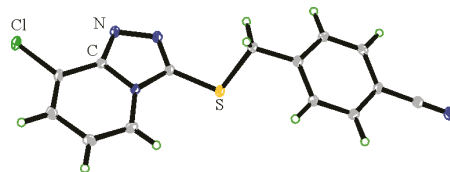
1521

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Wang Q., Zhai Z.-W., Sun Z.-H., Yang M.-Y., Han L.,
Liu X.-H., Tan C.-X., Weng J.-Q.

**Crystal structure of a novel 1,2,4-triazolo[4,3-a]pyridine
compound with antifungal activity**

Keywords: 1,2,4-triazolo[4,3-a]pyridine, synthesis, crystal structure,
antifungal activity

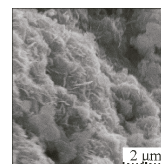


1525

Bagheri A., Masoudinia M.

**Catalytic properties of gadolinium oxide in removal
of doxycycline with anticancer activity**

Keywords: gadolinium oxide, doxycycline, hexamine,
DNA, removal

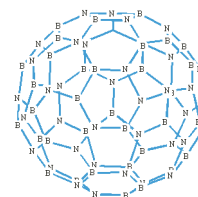


1530

Najafi M.

**Oxidation of FO and N₂ molecules on the surfaces
of metal-adopted boron nitride nanostructures
as efficient catalysts**

Keywords: catalyst, nanostructure, metal adoption, oxidation reaction,
adsorption energy



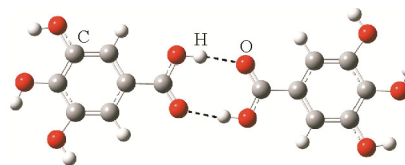
1536

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Григорян К.Р., Затикян А.Л.

***Ab initio* исследования комплексообразования галловой
кислоты в водных растворах**

Ключевые слова: галловая кислота, комплексообразование,
димеризация, *ab initio* расчеты, SCRF расчеты



1544

Содержание следующего номера — в конце журнала