

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 60

Май

№ 5, 2019

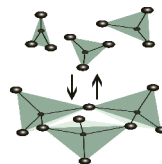
СО Д Е Р Ж А Н И Е

О Б З О Р Ы

Федоров П.П.

Морфотропия ортоборатов редкоземельных элементов RVO_3

Ключевые слова: редкоземельные элементы, бораты, полиморфизм, морфотропия

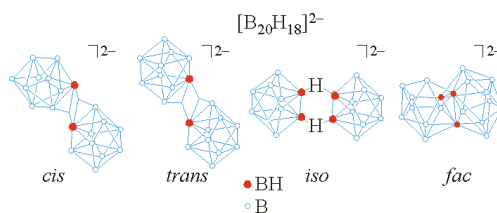


713

Авдеева В.В., Малинина Е.А., Жижин К.Ю.,
Bernhardt E., Кузнецов Н.Т.

Структурное разнообразие димерных кластеров на основе октадекагидро-эйкозаборатного аниона

Ключевые слова: кластерные анионы бора, трехмерная ароматичность, изомеризация, комплексообразование, реакции замещения



726

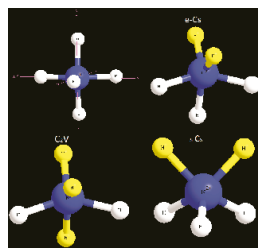
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Monajjemi M.

A comparison of NH_5^{2+} and CH_5^+ ions and deuterated variants of $NH_xD_{(5-x)}^{2+}$:

Real or artefactual rotation?

Keywords: quantum rotation, NH_5^{2+} ion, CH_5^+ ion, deuterated variants

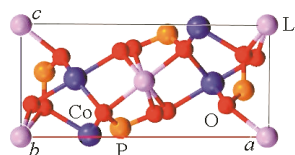


748

Dehghan F., Mohammadi-Manesh H., Loghavi M.M.

Investigation of lithium-ion diffusion in $LiCoPO_4$ cathode material by molecular dynamics simulation

Keywords: molecular dynamics simulation, lithium-ion, battery, diffusion, $LiCoPO_4$, radial distribution function

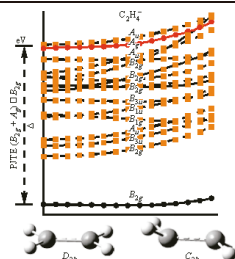


761

Mahmoudzadeh G., Ghiasi R., Pasdar H.

Computational investigation of the pseudo Jahn–Teller effect on the structure and chemical properties of perhaloethene anions

Keywords: perhaloethene anions, pseudo Jahn–Teller effect (PJTE), symmetry breaking phenomena, vibronic coupling constant, natural bond analysis (NBO)

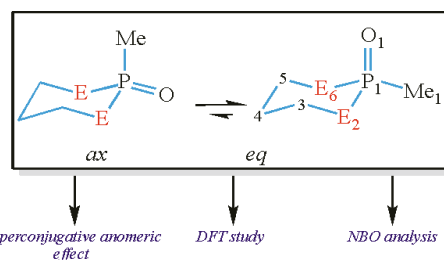


770

Nasrolahi M., Ghiasi R., Shafiee F.

Stability, electronic, and structural features of the conformers of 2-methyl-1,3,2-diheterophosphinane 2-oxide (heteroatom = O, S, Se): DFT and NBO investigations

Keywords: 2-methyl-1,3,2-diheterophosphinane 2-oxide, hyperconjugative anomeric effect, natural bond orbital analysis, DFT calculation

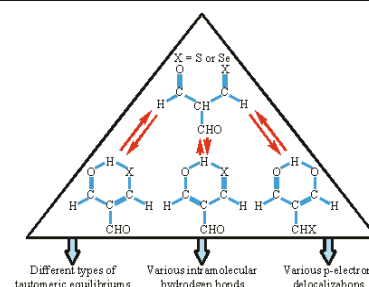


779

Rafat R., Nowroozi A.

Competition between the intramolecular hydrogen bond and the π -electron delocalization in some of the RAHB systems: A theoretical study

Keywords: intramolecular hydrogen bond, π -electron delocalization, atoms in molecules, natural bond orbital



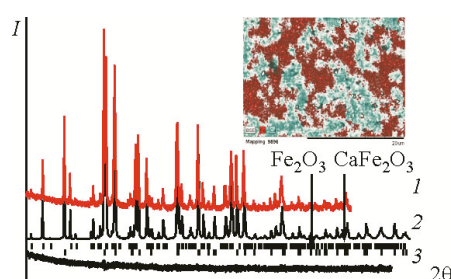
788

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Князев Ю.В., Шишкина Н.Н., Баяков О.А., Кирик Н.П., Соловьёв Л.А., Жижаев А.М., Рабчевский Е.В., Аншиц А.Г.

Особенности катионного распределения в композиционных материалах ряда CaFe_2O_4 – α - Fe_2O_3

Ключевые слова: твердофазный синтез, сканирующая электронная микроскопия, мёссбауэровская спектроскопия, катионные вакансии

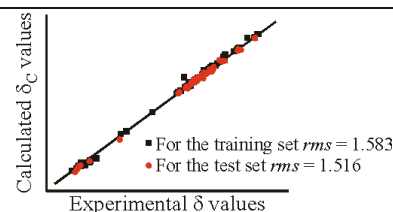


796

Yu X.L., Deng J.Y., Chen J.F., Yang H.Q.

Prediction of ^{13}C NMR chemical shifts of quinolone derivatives based on DFT calculations

Keywords: ^{13}C NMR chemical shifts, DFT, complete set of descriptors, genetic algorithm, MLR, SVM



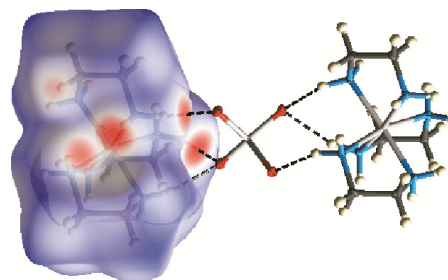
806

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Сухих А.С., Храненко С.П., Комаров В.Ю.,
Пищур Д.П., Николаев Р.Е., Бунеева П.С.,
Плюснин П.Е., Громилов С.А.

[NiEn₃]MoO₄: особенности фазового перехода и термического разложения в присутствии гидроксида лития

Ключевые слова: комплексная соль, трис-этилендиаминникель, молибдат-анион, дифференциально-сканирующая калориметрия, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия, термическое разложение

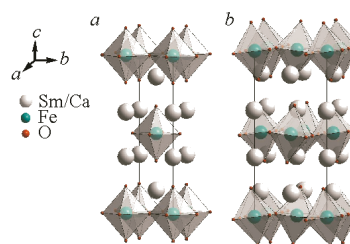


814

Галайда А.П., Волкова Н.Е., Старцева А.А.,
Гаврилова Л.Я., Черепанов В.А.

Исследование кристаллической структуры твердых растворов SmCaCo_{1-x}Fe_xO_{4-δ} и Sm_{0.9}Ca_{1.1}Fe_{1-y}Co_yO_{4-δ}

Ключевые слова: сложные оксиды, фазы Раддлсдена–Поппера, ферриты, кобальтиты, рентгенофазовый анализ, кристаллическая структура

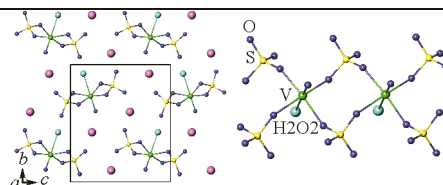


823

Тютюнник А.П., Красильников В.Н., Бакланова И.В.,
Самигуллина Р.Ф.

Кристаллическая структура (NH₄)₂VO(SO₄)₂ · H₂O

Ключевые слова: комплексные соединения ванадия(IV), оксосульфатованадаты, синтез, кристаллическая структура

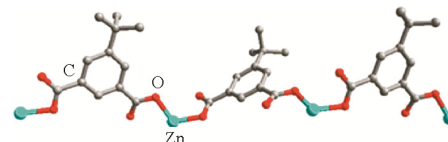


830

Zhang C., Tao J.-Q., Wang J.

Crystal structure and luminescent property of a new two-dimensional polymer based on 1,4-bis(4-(imidazole-1-yl)benzyl)piperazine

Keywords: coordination polymer, two-dimensional layer, 1,4-bis(4-(imidazole-1-yl)benzyl)piperazine, 5-*tert*-butyl isophthalic acid, luminescent property

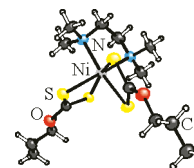


838

Qadir A.M., Dege N.

Synthesis and crystal structure of nickel(II) and zinc(II) complexes with *o*-propylxanthate and *N,N,N',N'*-tetramethylethylenediamine

Keywords: xanthate, complex, X-ray, Zn(II), synthesis

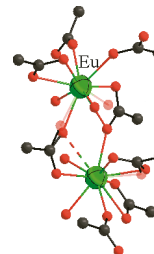


844

Демаков П.А., Сапченко С.А., Самсоненко Д.Г.,
Дыбцев Д.Н., Федин В.П.

Гадолиниевый излом в ряду трехмерных *транс*-1,4-циклогександикарбоксилатов редкоземельных элементов

Ключевые слова: лантаноиды, координационные полимеры, металл-органические каркасы, рентгеноструктурный анализ, лантаноидное сжатие

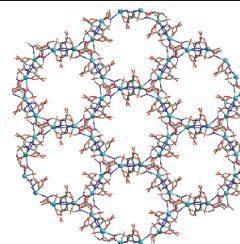


849

Барсукова М.О., Сапьяник А.А., Самсоненко Д.Г.,
Федин В.П.

Кристаллическая структура координационных полимеров на основе скандия и 2,5-пирозиндикарбоновой кислоты

Ключевые слова: скандий, координационные полимеры, гетероциклические лиганды, рентгеноструктурный анализ



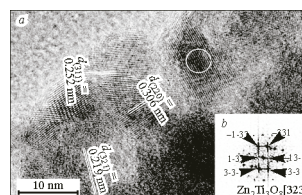
857

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Al-Hajji L.

A comparative study on the zinc metatitanate microstructure by ball milling and solvothermal approaches

Keywords: heterogeneous, mechanical, ZnO, TiO₂, nanocomposite, XRD, HR-TEM



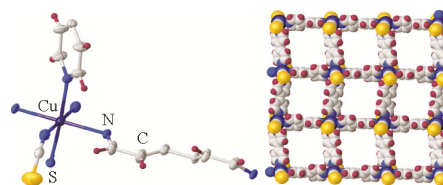
864

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Yang Y.-Y., Yang J.-H., Wang D.

Three new metal-organic coordination complexes: Crystal structures and anticancer activity in multiple myeloma

Keywords: metal-organic coordination complexes, single-crystal, human tumor cells

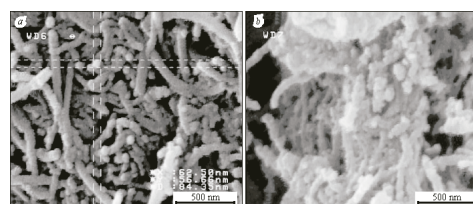


871

Abdolhi N., Aghaei M., Soltani A., Mighani H.,
Ghaemi E.A., Javan M.B., Khalaji A.D., Sharbati S.,
Shafipour M., Balakheyli H.

Synthesis and antibacterial activities of novel Hg(II) and Zn(II) complexes of bis(thiosemicarbazone) acenaphthenequinone loaded to MWCNTs

Keywords: MWCNT, bis(thiosemicarbazone), functionalization, thermal stability, antibacterial activity



878

Содержание следующего номера — в конце журнала