

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 57

Март-апрель

№ 3, 2016

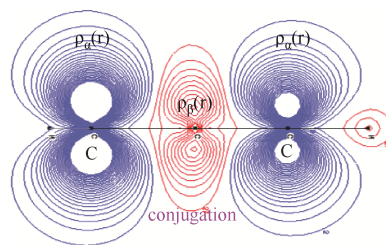
## СОДЕРЖАНИЕ

### ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

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

#### Изучение электронного строения и свойств пропаргильного радикала

**Ключевые слова:** квантовая теория атомов в молекуле,  
электронная плотность, сопряжение,  
пропаргил, энтальпия образования,  
энтальпия разрыва связи

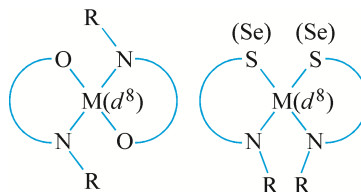


453

Харабаев Н.Н., Стариков А.Г., Минкин В.И.

#### Квантово-химическое моделирование *транс*- и *цис*-изомеров бис-хелатных азометиновых комплексов Ni(II), Pd(II), Pt(II) с координационным узлом $MN_2Y_2$ ( $Y = O, S, Se$ )

**Ключевые слова:** квантовая химия,  
молекулярная структура, хелатные комплексы металлов,  
ароматические азометины

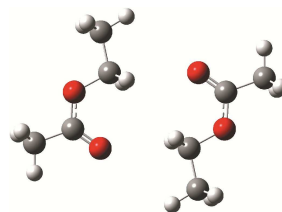


461

Красных Е.Л., Портнова С.В.

#### Прогнозирование энтальпий испарения на основе модифицированных индексов Рандича. Сложные эфиры

**Ключевые слова:** энтальпия испарения,  
топологический индекс, индекс связанности,  
сложные эфиры, прогнозирование

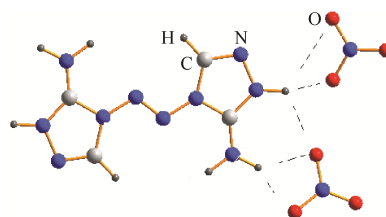


466

Корабельников Д.В., Журавлёв Ю.Н.

#### Структура и электронные свойства нитрата и перхлората 3,3'-диамино-4,4'-азо-1,2,4-триазола

**Ключевые слова:** нитрат, перхлорат, комплексный  
катион, кристаллическая структура, химическая связь,  
электронные состояния

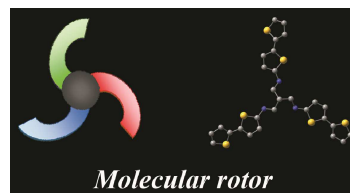


475

Gorgani S.S., Samadizadeh M.

**Design of a new rotary molecular machine based on nitrogen inversion:  
DFT investigation**

**Keywords:** rotary molecular machines, configuration changes, nitrogen inversion, aziridine, *ab initio* calculations



484

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Рядун А.А., Трифонов В.А., Надолинный В.А.,  
Павлюк А.А., Рахманова М.И.

**Структура и свойства кристаллов  
 $\text{Li}_2 - 2x\text{Mg}_2 + x(\text{MoO}_4)_3$  активированных  
ионами меди**

**Ключевые слова:** ЭПР ионов переходных металлов, люминесценция, сцинтилляторы, кристаллы двойного молибдата

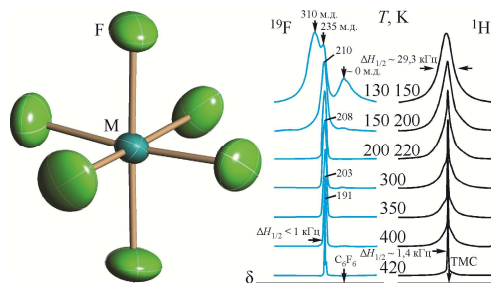


488

Давидович Р.Л., Удовенко А.А., Кавун В.Я.,  
Логвинова В.Б., Ткачёв В.В.

**Кристаллическая структура и ЯМР исследование  
гексафторидониобата(V)  
и гексафторидотанталата(V)  
4-амино-1,2,4-триазолия**

**Ключевые слова:** ниобий(V), тантал(V), фтор, 4-амино-1,2,4-триазол, кристаллическая структура, ЯМР, спектры

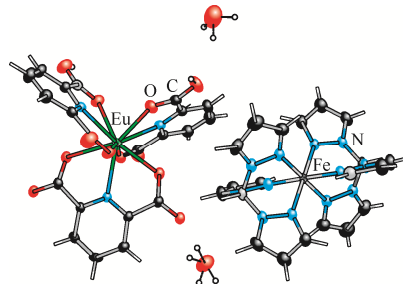


492

Шакирова О.Г., Лавренова Л.Г., Коротаев Е.В.,  
Куратьева Н.В., Колоколов Ф.А., Бурдуков А.Б.

**Структура и спин-кроссовер в соединении  
железа(II) с *трис*(пиразол-1-ил)метаном  
и комплексным анионом  $[\text{Eu}(\text{dipic})_2(\text{Hdipic})]^{2-}$**

**Ключевые слова:** координационное соединение, железо(II), *трис*(пиразол-1-ил)метан, комплексный анион  $[\text{Eu}(\text{dipic})_2(\text{Hdipic})]^{2-}$ , спин-кроссовер, термохромизм

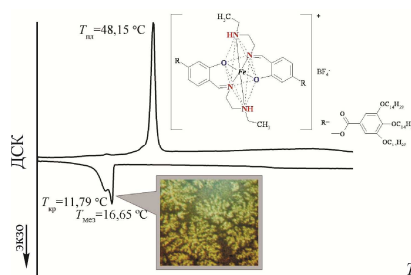


499

Червонова У.В., Груздев М.С., Колкер А.М.,  
Акопова О.Б.

**Структура и фазовые переходы азометиновых  
билигандных комплексов железа(III)  
на основе 3,4,5-три(тетрадецилокси)бензоилокси-  
4-салицилиден-N'-этил-N-этилендиамина**

**Ключевые слова:** комплексы железа(III), основание Шиффа, строение, масс-спектрометрия, мезоморфизм

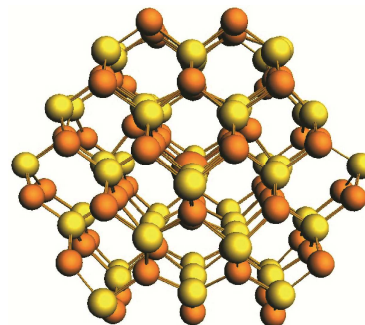


506

Кравцова А.Н., Сучкова С.А., Файн М.Б.,  
Солдатов А.В.

***In silico* исследование атомной и электронной  
структуры квантовых точек семейства CdTe,  
допированных атомами редкоземельных  
элементов**

**Ключевые слова:** квантовые точки, теллурид кадмия, допирование, редкоземельные элементы, атомная и электронная структура, компьютерное моделирование, XANES спектроскопия



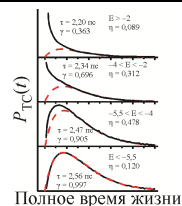
520

## СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Волошин В.П., Наберухин Ю.И.

### “Правильные” и “неправильные” водородные связи в жидкой воде

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, структура воды, сетка водородных связей, время жизни водородных связей



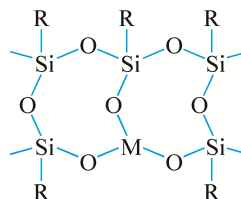
527

## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Гардионов С.В., Шапкин Н.П., Баланов М.И.,  
Васильева В.В., Разов В.И., Трухин В.О.

### Исследование полиметаллоорганосилоксанов методами рентгеновской дифрактометрии и позитронной аннигиляционной спектроскопии

**Ключевые слова:** полиметаллоорганосилоксаны, рентгеновская дифрактометрия, позитронная аннигиляционная спектроскопия, области когерентного рассеяния, методика Миллера-Бойера

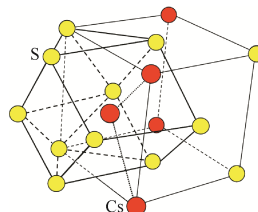


537

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

### Структурообразующая роль крупных катионов в сульфидах с Cs<sup>+</sup> и Tl<sup>+</sup>

**Ключевые слова:** кристаллографический анализ, крупные катионы Cs<sup>+</sup>, Tl<sup>+</sup> в сульфидах, F-подрешетки, структурный тип PbS, "двумерные" упорядочения позиций атомов

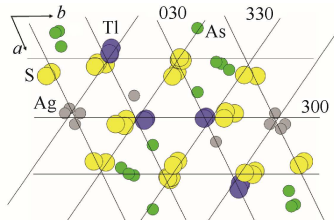


542

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

### Кристаллографический анализ структур ряда Tl- и Ag- содержащих сульфидов. Корреляция состав–симметрия

**Ключевые слова:** кристаллографический анализ, катионные и анионные подрешетки, сульфиды с Tl<sup>+</sup> и Ag<sup>+</sup>, стехиометрия катион/анион



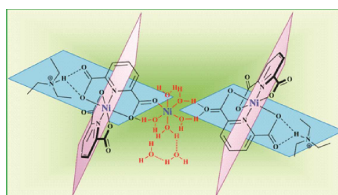
549

Jerome P., Bhuvanesh N.S.P., Karvembu R.

### Synthesis and crystal structure of a trinuclear nickel(II) ONO pincer complex

[Ni(Pydc)<sub>2</sub>]<sub>2</sub>[Ni(H<sub>2</sub>O)<sub>5</sub>]·2H<sub>2</sub>O·2(C<sub>6</sub>H<sub>15</sub>N)

**Keywords:** trinuclear, Ni(II) pincer complex, 2,6-pyridinedicarboxylic acid, crystal structure

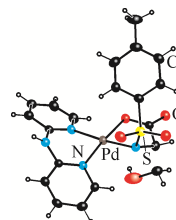


558

Mehdipour E., Bahrami H., Shamaei S., Amani V.

### Crystal structure of palladium(II) complex with 2,2'-dipyridylamine and 4-toluenesulfonyl-L-serine

**Keywords:** crystal structure, palladium (II) complex, 4-toluenesulfonyl-L-serine, 2,2'-dipyridylamine, thermal gravimetric, differential thermal analyses, luminescent properties

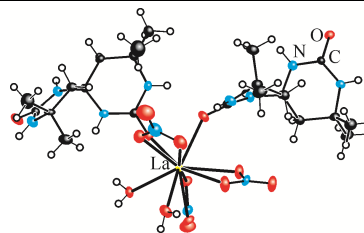


564

Нетребба Е.Е.

**Кристаллическая структура нового комплекса *bis*(4,4,10,10-тетрамethyl-1,3,7,9-тетраазоспиро-[5.5]ундекан-2,8-дион-О)-диаква-трис-(нитрато-О,О')-лантана**

**Ключевые слова:** лантан, спирокарбон, моноядерный, билигандный, комплекс, структура, ИК, РСА, РФА

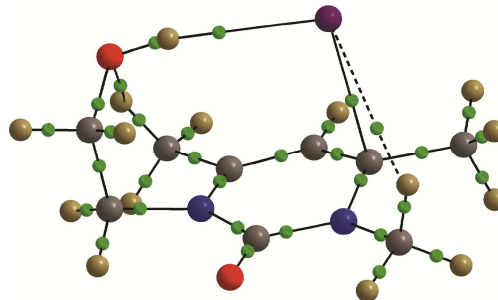


572

Литвинов И.А., Воронина Ю.К., Галяметдинова И.В., Шашин М.С., Семенов В.Э., Резник В.С.

**Молекулярная и кристаллическая структура 1-(2-гидроксиэтил)-1,2-дигидро-3,4,6-триметил-2-оксопиримидинийиодида – продукта N-алкилирования ксимедона**

**Ключевые слова:** ксимедон, молекулярная структура, кристаллическая структура, нековалентные взаимодействия, Г...л взаимодействия, электронная структура, топологический анализ



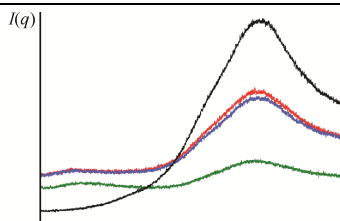
579

## СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Миргород Ю.А.

**Малоугловое рентгеновское рассеяние системы триацетат гадолиния – ундекан – вода**

**Ключевые слова:** малоугловое рентгеновское рассеяние, триацетат гадолиния, ундекан, вода, гидротропы, ламеллярные мицеллы, критический параметр упаковки, кооперативный эффект



587

## ОБЗОР

Федотов М.А.

**Применение ядерного магнитного резонанса для исследования строения комплексов платиновых металлов в водных растворах**

**Ключевые слова:**  $^{99,101}\text{Ru}$ ,  $^{103}\text{Rh}$ ,  $^{105}\text{Pd}$ ,  $^{187}\text{Os}$ ,  $^{195}\text{Pt}$  ЯМР, комплексы платиновых металлов, водные растворы, координатный сдвиг, неорганические лиганды, аминокислотные лиганды, радиоактивные отходы

99, 101 <b>Ru</b> 3/2, 5/2	103 <b>Rh</b> 1/2	105 <b>Pd</b> 5/2
187 <b>Os</b> 1/2	<b>Ir</b>	195 <b>Pt</b> 1/2

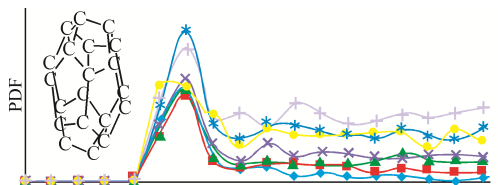
593

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Nikmaram F.R.

**A comparative study of the radial distribution of hydrogen on  $\text{C}_{20}$ ,  $\text{C}_{19}\text{Si}$  and  $\text{C}_{19}\text{B}$  cage fullerenes: A Monte Carlo simulation**

**Keywords:** boron, silicon,  $\text{C}_{20}$  fullerene,  $\text{H}_2$  radial distribution, Monte Carlo

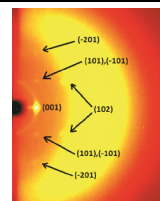


644

Сухих А.С., Басова Т.В., Громилов С.А.

**Разработка методики рентгенографического исследования тонких слоев на примере фталоцианина кобальта**

**Ключевые слова:** фталоцианин кобальта, рентгенографическое исследование тонких пленок

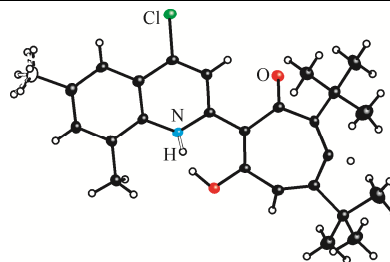


648

Ткачёв В.В., Саяпин Ю.А., Шилов Г.В.,  
Комиссаров В.Н., Алдошин С.М., Минкин В.И.

**Молекулярная структура 5,7-ди(*трет*-бутил)-  
2-(6,8-диметил-4-хлорхинолин-2-ил)-3-  
гидрокситропона с двумя таутомерными  
формами**

**Ключевые слова:** 1,3-трополоны, внутримолекулярная  
водородная связь, рентгеноструктурный анализ

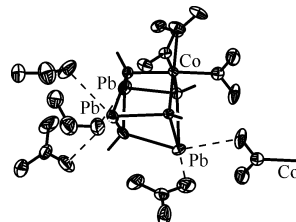


652

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

**Кристаллическая структура  
[Pb<sub>3</sub>(OH)<sub>4</sub>Co(NO<sub>2</sub>)<sub>3</sub>](NO<sub>3</sub>)(NO<sub>2</sub>) · 2H<sub>2</sub>O**

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

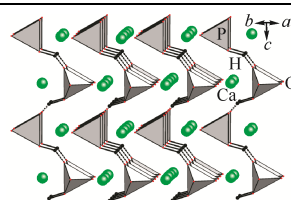


655

Ouerfelli N., Zid M.F.

**New polymorph of CaHPO<sub>4</sub> (monetite): synthesis  
and crystal structure**

**Keywords:** calcium hydrogenphosphate, polymorphs,  
synthesis, single crystal x-ray diffraction, monetite,  
crystal structure

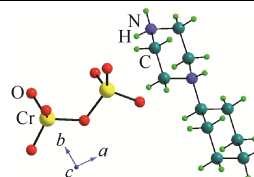


658

Chebbi H., Ben Smail R., Zid M.F.

**Crystal structure of 1-cyclohexylpiperazine-1,4-dium  
dichromate (VI)**

**Keywords:** organic dichromate, synthesis,  
single crystal X-ray diffraction, crystal structure



662

**Содержание следующего номера — в конце журнала**