

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 60

Июнь

№ 6, 2019

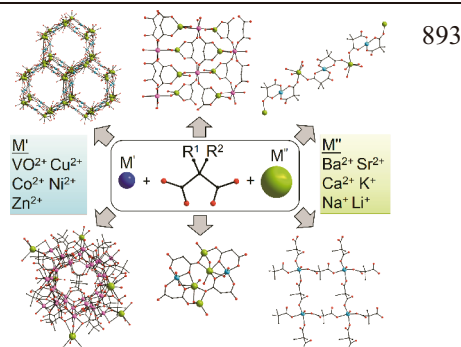
## СОДЕРЖАНИЕ

### ОБЗОРЫ

Бажина Е.С., Гоголева Н.В., Зорина-Тихонова Е.Н.,  
Кискин М.А., Сидоров А.А., Еременко И.Л.

**Гомо- и гетероядерные архитектуры полиядерных комплексов, содержащие анионы замещенных малоновых кислот: синтетические подходы и анализ молекулярного и кристаллического строения**

**Ключевые слова:** оксованадий(IV), медь(II), кобальт(II), никель(II), цинк(II), литий, барий, натрий, калий, малоновая кислота, гидроксомалонатные комплексы, гетерометаллические комплексы, координационные полимеры, кристаллическая структура

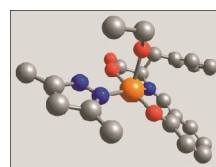


### ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Massoud R.A., Makhyoun M.A.

**Theoretical study of the interaction of ethanol with the (3, 5-dimethylpyrazole-N<sup>2</sup>) (N-salicylidene-phenyl-alaninato-O,N,O')copper(II) complex**

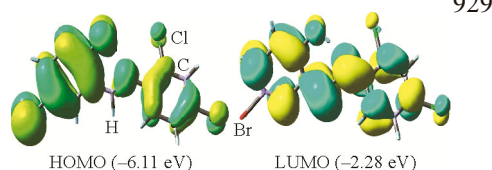
**Keywords:** DFT methods, energy scan curve, ethanol adduct



Soltani A., Mashkour R., Khalaji A.D., Raz S.G., Ghoran S.H.,  
Dusek M., Fejfarova K., Kanani Y.

**Synthesis, characterization, crystal structure, and DFT study of 4-bromo-2-(4,6-dichloro-phenylimino)-phenol**

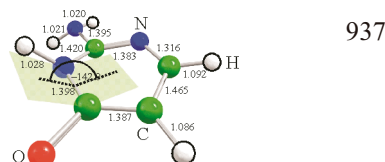
**Keywords:** Schiff base, single crystal, DFT calculation, electronic structure, NMR



Dimitrov B.H., Bakalska R.I., Delchev V.B.

**Phototautomerism of isocytosine in a water medium: Theoretical and experimental study**

**Keywords:** conical intersections, isocytosine, phototautomerism, TDDFT calculations

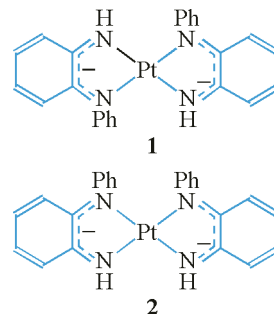


## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Иванова Т.М., Сидоров А.А., Мазалов Л.Н., Федоренко А.Д.,  
Кискин М.А., Савилов С.В., Лукин В.В., Новоторцев В.М.,  
Еременко И.Л., Калинин А.В., Федосеева Ю.В.,  
Окотруб А.В.

**Рентгеноспектральное изучение электронного строения  
нейннцентных моно- и биядерных комплексов платины  
с N-фенил-о-бензосемихинондиимин**

**Ключевые слова:** редокс-активные лиганды, РФЭС,  
анион-радикал N-фенил-о-бензосемихинондиимин,  
комплексы платины(II), электронное строение, DFT, NEXAFS

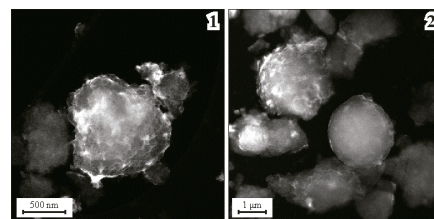


948

Свиницкий Д.А., Славинская Е.М., Стожков О.А.,  
Романенко А.В., Стадниченко А.И., Кибис Л.С.,  
Деревянникова Е.А., Евтушкова А.А., Боронин А.И.

**Состояние платины и структурные особенности  
катализаторов Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в реакции окисления NH<sub>3</sub>**

**Ключевые слова:** окисление остаточного аммиака, Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>,  
нанесенные катализаторы, оксид алюминия,  
наночастицы платины, скрининг катализаторов, РФА,  
ПЭМ, РФЭС

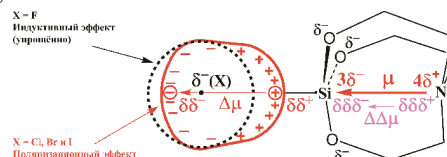


959

Тандура С.Н., Беяева В.В., Барышок В.П., Гостевский Б.А.,  
Смирнов В.И.

**Структурные проявления поляризационного эффекта  
в 1-галогенсилатранах по механизму  
диполь-индуцированный диполь**

**Ключевые слова:** 1-галогенсилатраны, поляризационный эффект,  
индуктивный эффект, индуцированный диполь



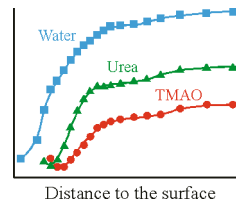
973

## СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Волошин В.П., Медведев Н.Н.

**Подвижность молекул воды, мочевины  
и триметиламиноксида вблизи глобулярного белка**

**Ключевые слова:** молекулярно-динамическое моделирование,  
водные растворы, триметиламиноксид, мочевина, гидратная  
оболочка, косольвенты



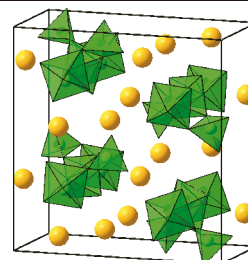
983

## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Солодовников С.Ф., Золотова Е.С., Солодовникова З.А.,  
Корольков И.В., Юдин В.Н., Уваров Н.Ф., Плюснин П.Е.,  
Саранчина Е.М.

**Строение и свойства твердых растворов  
α-Cs<sub>2</sub>Mo<sub>2-x</sub>W<sub>x</sub>O<sub>7</sub>**

**Ключевые слова:** цезий, димолибдат, молибден, вольфрам, синтез,  
замещение, кристаллизация, структура, термические свойства,  
ионная проводимость

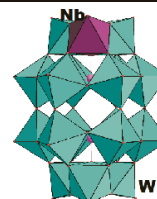


993

Шмакова А.А., Гушин А.Л., Абрамов П.А.,  
Соколов М.Н.

**Синтез и электрохимические свойства  
((CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>)<sub>7</sub>[P<sub>2</sub>W<sub>17</sub>NbO<sub>62</sub>]**

**Ключевые слова:** ниобий, анион Доусона, ЯМР,  
циклические вольтамперограммы

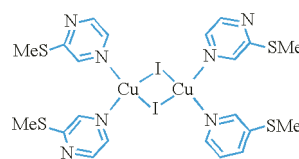


1002

Artem'ev A.V., Beresin A.S., Bagryanskaya I.Y.

**Synthesis, structure and emission properties of  $[\text{Cu}_2(\mu_2\text{-I})_2\text{L}_4]$  complex based on 2-(methylthio)pyrazine**

**Keywords:** copper(I), pyrazines, sulfide ligands, photoluminescence, crystal structure

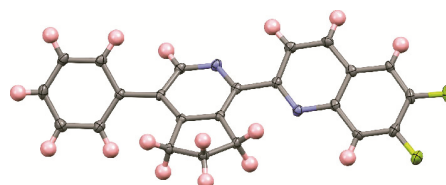


1008

Копчук Д.С., Слепухин П.А., Носова Э.В., Хасанов А.Ф., Зырянов Г.В., Русинов В.Л., Чупахин О.Н.

**Рентгеноструктурные исследования в ряду замещенных (фторированных) 2-(2-пиридил)хинолинов**

**Ключевые слова:** 2-(2-пиридил)хинолины, 1,2,4-триазины, реакция Боджера, фторорганические соединения, PCA

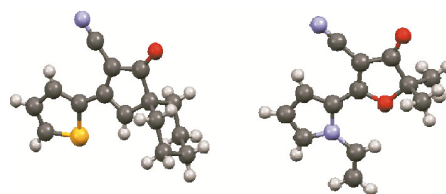


1013

Афонин А.В., Ващенко А.В., Волостных О.Г., Степанов А.В., Малькина А.Г.

**Молекулярная и кристаллическая структура 4-циано-3(2H)-фуранонов и структурные эффекты в спектрах ЯМР  $^1\text{H}$**

**Ключевые слова:** 4-циано-3(2H)-фураноны, рентгеноструктурный анализ, спектры ЯМР  $^1\text{H}$



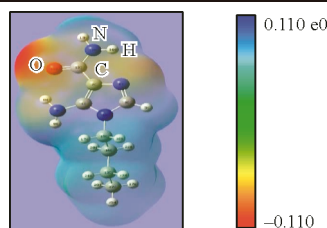
1020

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Das A.

**Experimental and theoretical studies on molecular structures, nanostructural features and photophysical properties of 5-amino-1-alkylimidazole-4-carboxamide compounds**

**Keywords:** 1-alkylAICA, DFT calculations, TDDFT study, nanostructural property, photophysical study



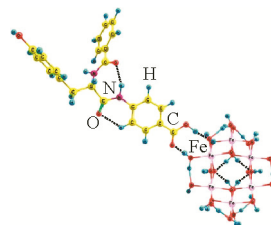
1031

Tanhaei R., Ali Beyramabadi S., Behmadi H.

**Geometry, tautomerism and non-covalent interaction of the bentiromide with a carbon nanotube and  $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$  nanoparticles:**

**A quantum mechanical study**

**Keywords:** bentiromide, drug, DFT, tautomerization,  $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$  nanoparticle, carbon nanotube



1049

**Содержание следующего номера — в конце журнала**