

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 58

Сентябрь-октябрь

№ 7, 2017

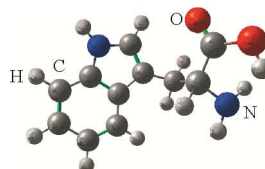
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Крауклис И.В., Тулуб А.В., Штыров А.А.

**Сравнительные характеристики молекулы
триптофана в газовой фазе и в воде**

Ключевые слова: L и D изомеры, триптофан, влияние
воды, метод DFT, цвиттер-ионные структуры

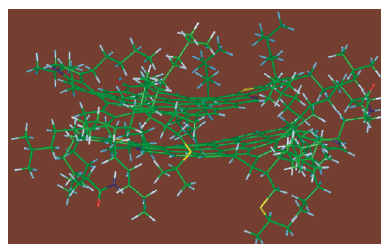


1305

Шуткова С.А., Доломатов М.Ю.

**Надмолекулярная структура нефтяных
асфальтенов «континентального» типа**

Ключевые слова: нефтяные асфальтены,
электронная структура, химическая структура,
методы квантовой химии, метод молекулярной механики,
димеры, тримеры, потенциал ионизации,
сродство к электрону, структура нефтяных асфальтенов

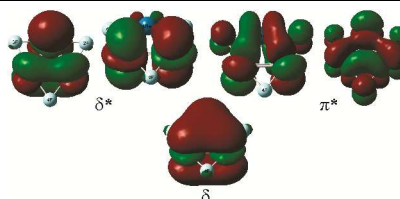


1311

Jin B., Jin Q., Jin F.-K.

**Theoretical predictions on the structure and d -AO-
based aromaticity of $\text{Re}_3\text{F}_3^{2+/0/4-}$, $\text{Re}_3\text{F}_3\text{X}^+$ ($\text{X} = \text{Li}, \text{Na},$
 K), $\text{Re}_3\text{F}_3\text{Y}^{2+}$ ($\text{Y} = \text{Be}, \text{Mg}, \text{Ca}$) clusters**

Keywords: rhenium low-fluoride cluster, aromaticity,
DFT calculations

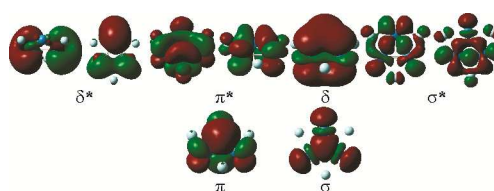


1316

Jin Q., Jin B., Jin F.K.

**Probing the electronic structure and aromaticity in
 $\text{W}_3\text{F}_3^{+/-}$, $\text{W}_3\text{F}_3\text{X}$ ($\text{X} = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$), and $\text{W}_3\text{F}_3\text{Y}^+$
($\text{Y} = \text{Be}, \text{Mg}, \text{Ca}$) clusters**

Keywords: tungsten low-fluoride cluster, δ aromaticity,
DFT calculation

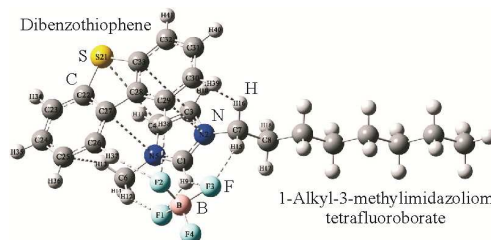


1327

Niknam M., Vatanparast M., Shekaari H.

**Theoretical study on interactions between
1-alkyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate
and dibenzothiophene: DFT, NBO, and AIM analysis**

Keywords: dibenzothiophene, desulfurization, ionic liquid,
density functional theory, interaction energy



1336

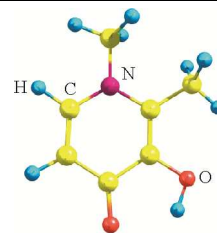
ИЗДАТЕЛЬСТВО СО РАН
НОВОСИБИРСК
2017

Valizadeh A., Ghiasi R.

1347

Theoretical approach on the molecular structure, chemical reactivity, molecular orbital analysis, spectroscopic properties (IR, UV, NMR), and NBO analysis of deferiprone

Keywords: deferiprone, frontier orbital analysis, ^1H and ^{13}C NMR calculations, NBO analysis



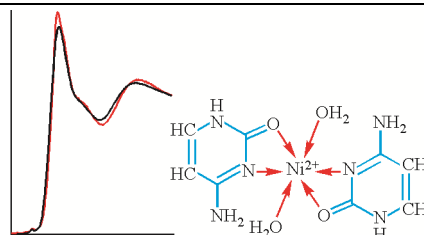
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Пугачев Д.В., Есина Н.Я., Курасова М.Н.,
Фортальнова Е.А., Венковский Н.У.,
Лазаренко В.А., Тригуб А.Л., Хрусталеv В.Н.

1358

Комплексы никеля(II) с цитозином и треонином: синтез и строение

Ключевые слова: комплексные соединения никеля, треонин, цитозин, EXAFS, XANES

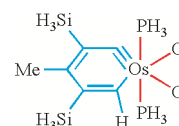


Zafarnia F., Ghiasi R., Jamehbozorgi S.

1364

Computational study of osmabenzene: the solvent effects on the structure and spectroscopic properties (IR, NMR)

Keywords: metallabenzene, osmabenzene, ^1H NMR chemical shift, solvent effect, infrared spectrum

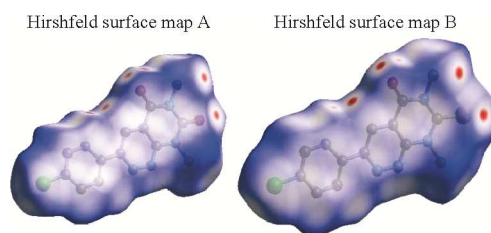


Poursattar Marjani A., Taghartapeh M.R., Soltani A.R.,
Khalafy J., Kanani Y.

1371

Molecular structures, Hirshfeld surface analysis, and spectroscopic properties of 6,8-dimethyl-3-(4-chlorophenyl)-7-oxo-7,8-dihydropyrimido-[4,5-c]pyridazin-5(6H)-one and 6,8-dimethyl-3-(4-chlorophenyl)-7-thioxo-7,8-dihydropyrimido-[4,5-c]pyridazin-5(6H)-one

Keywords: X-ray crystallography, DFT, electronic properties, hirshfeld surface analysis

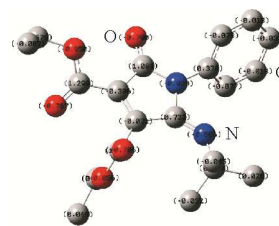


Yahyaee S., Vessally E., Hashemi M.

1379

Experimental and theoretical studies on diethyl 2-(ter-butylimino)-2,5-dihydro-5-oxo-1-phenyl-1H-pyrrole-3,4-dicarboxylate using DFT calculations

Keywords: diethyl 2-(ter-butylimino)-2,5-dihydro-5-oxo-1-phenyl-1H-pyrrole-3,4-dicarboxylate, DFT, FT-IR, GIAO, NMR chemical shifts, NICS calculation



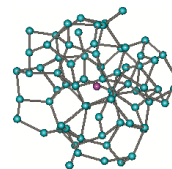
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Маленков Г.Г.

1388

Система аргон–вода при низких температурах

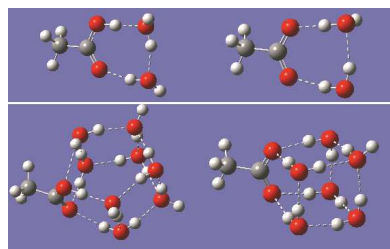
Ключевые слова: система аргон–вода, /растворы, тонкие пленки, молекулярная динамика



Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В.

Состав и строение гидратов молекул CH_3COOH и гидратов анионов CH_3CO_2^- в водных растворах

Ключевые слова: уксусная кислота, ацетат натрия, водные растворы, гидратация молекул и анионов, колебательный спектр, расчет методом ТФП, строение гидратов молекул CH_3COOH , строение гидратов анионов CH_3CO_2^-

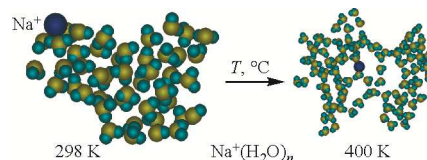


1395

Шевкунов С.В.

Структура гидратной оболочки катиона Na^+ в условиях нагрева в плоской нанопоре

Ключевые слова: ион, гидратная оболочка, координация, вытеснение, нанопора, компьютерное моделирование



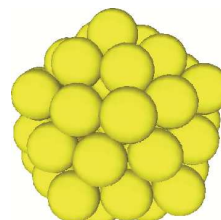
1406

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Самсонов В.М., Васильев С.А., Самсонов М.В., Бембель А.Г., Белоцерковский А.В., Рыбаков Д.И.

Нахождение магических чисел для кластеров серебра и меди методом молекулярной динамики

Ключевые слова: магические числа, металлические кластеры, молекулярная динамика, потенциал сильной связи, метод погруженного атома

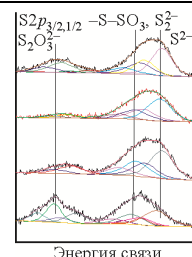


1415

Мурашева К.С., Сайкова С.В., Воробьев С.А., Романченко А.С., Михлин Ю.Л.

Характеристики наночастиц сульфидов меди, полученных в системе сульфат меди – тиосульфат натрия

Ключевые слова: наночастицы, сульфиды меди, гидрозоли, оптическая спектроскопия, РФЭС, РФА, ПЭМ, динамическое рассеяние света

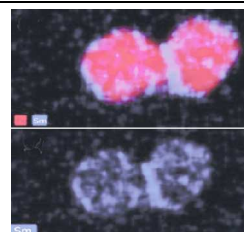


1421

Ластовина Т.А., Будник А.П., Поляков В.А., Солдатов А.В.

Магнитно-структурные свойства наночастиц маггемита, полученных с использованием различных стабилизаторов

Ключевые слова: магнитные частицы, маггемит, сурфактанты

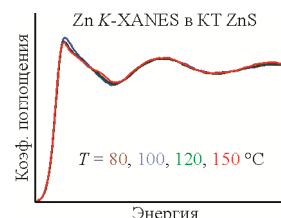


1429

Кравцова А.Н., Будник А.П., Цатурян А.А., Панкин И.А., Бугаев А.Л., Солдатов А.В.

Влияние температуры на структуру и характеристики квантовых точек на основе ZnS

Ключевые слова: квантовые точки, сульфид цинка, тиомочевина, микроволновой синтез, флуоресценция, XANES спектроскопия

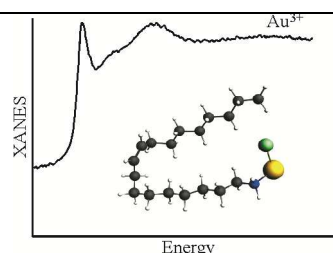


1435

Киричков М.В., Гуда А.А., Будник А.П., Ластовина Т.А., Бугаев А.Л., Шаповалов В.В., Русалев Ю.В., Чернышев А.В., Солдатов А.В.

***In situ* анализ стадий формирования наночастиц золота восстановлением олеиламином**

Ключевые слова: ПЭМ, ДРС, XANES спектроскопия, UV-vis, наночастицы золота, олеиламин



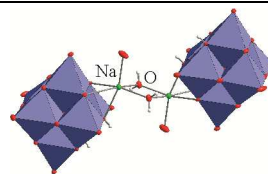
1442

Абрамов П.А., Соколов М.Н.

Кристаллическая структура

$\text{Na}_{10}[\{\text{Na}(\text{H}_2\text{O})\text{H}_2\text{Nb}_6\text{O}_{19}\}_2(\mu\text{-H}_2\text{O})_2]\cdot 46\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: гексаниобат, натрий, рентгеноструктурный анализ



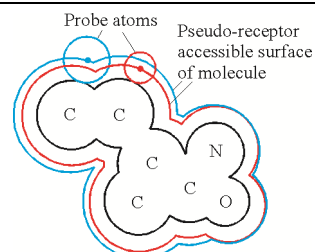
1450

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Tong J.-B., Bai M., Zhao X.

QSAR study by the RASMS method of DABO derivatives as HIV-1 reverse transcriptase non-nucleoside inhibitors

Keywords: random sampling analysis on molecular surface (RASMS), dihydroalkoxybenzoxypyrimidines (DABO) derivatives, quantitative structure activity relationship (QSAR), multiple linear regression (MLR)



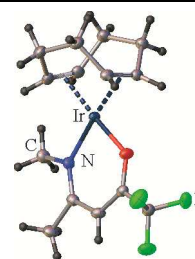
1457

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Караковская К.И., Викулова Е.С., Пирязев Д.А., Морозова Н.Б.

Строение и термические свойства (1,1,1-трифтор-4-метилиминопентаноато-2)(циклооктадиен-1,5)иридия(I)

Ключевые слова: иридий(I), β-иминокетонаты, циклооктадиен, МОСVD прекурсор, рентгеноструктурный анализ, термогравиметрия

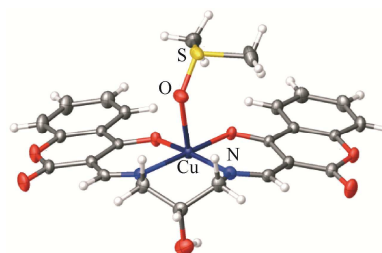


1466

Попов Л.Д., Щербаков И.Н., Власенко В.Г., Левченков С.И., Александров Г.Г.

Кристаллическая структура комплекса (N,N'-бис[хромен-2,4-дион]-3-{2'-гидроксипропилендиамин-N,N',O,O'}) (диметил-сульфоксид)меди(II)

Ключевые слова: комплекс меди(II), основание Шиффа, рентгеноструктурный анализ

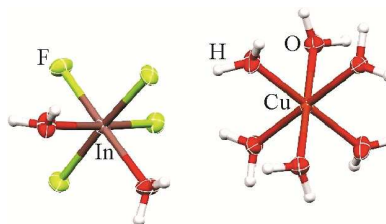


1471

Давидович Р.Л., Логвинова В.Б., Ткачев В.В., Шилов Г.В.

Кристаллическая структура фториодоиндата(III) меди(II) $\text{Cu}(\text{InF}_4)_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: синтез, индий(III), комплексный фторид, кристаллическая структура, Cu(II), октаэдр, структурный тип

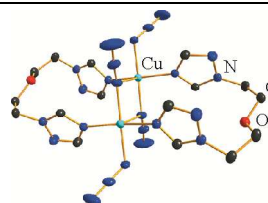


1475

Xu X.-J., Fang X., Yu H.-N., Zhou Z., Wang J.

A novel dinuclear Cu^{II} complex based on flexible bis(triazole): Synthesis, structure and physical properties

Keywords: Cu(II) complex, 1,1'-(2,2'-oxybis(ethane-2,1-diyl))bis(1H-1,2,4-triazole), dinuclear, photocatalytic activity

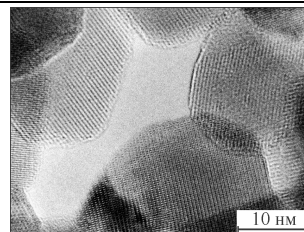


1479

Громилов С.А., Герасимов Е.Ю., Храненко С.П.,
Комаров В.Ю., Задесенец А.В.

**[ZnEn₃]CrO₄ – предшественник
цинкохромитной шпинели**

Ключевые слова: комплексная соль, цинк, хромат-анион,
этилендиамин, шпинель, кристаллохимия,
рентгеноструктурный анализ

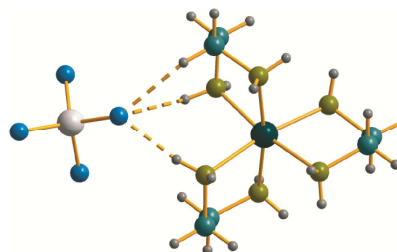


1482

Храненко С.П., Комаров В.Ю., Герасимов Е.Ю.,
Задесенец А.В., Максимовский Е.А., Громилов С.А.

**[NiEn₃]CrO₄. Структура, термические свойства,
псевдоморфизм**

Ключевые слова: комплексная соль,
этилендиаминникель, хромат-анион, термические
свойства, псевдоморфизм, рентгеноструктурный анализ,
кристаллохимия

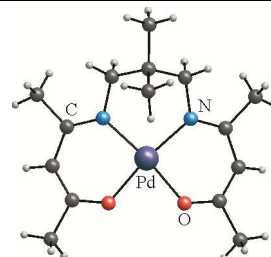


1487

Черкасов С.А., Викулова Е.С., Николаева Н.С.,
Смоленцев А.И., Морозова Н.Б.

**Кристаллическая структура и термические
свойства N,N'-(2,2-диметилпропилен)-
бис(ацетилацетониминато)палладия(II)**

Ключевые слова: палладий(II), основания Шиффа,
МОСVD прекурсор, рентгеноструктурный анализ,
термогравиметрия

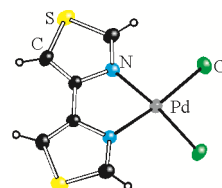


1492

Ebadi A., Shojaei S.

**Characterization, crystal structure determination,
and luminescent properties
of [Pd(4,4'-bit)Cl₂]**

Keywords: crystal structure, palladium(II) complex,
4,4'-bithiazole, luminescent properties

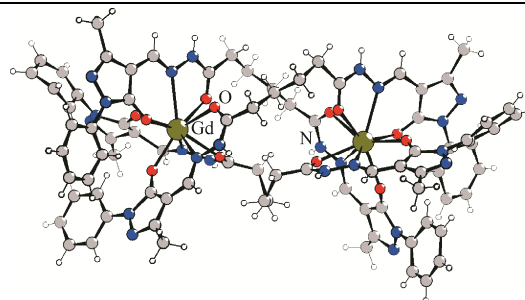


1496

Шульгин В.Ф., Конник О.В., Бекирова З.З.,
Александров Г.Г., Кискин М.А., Еременко И.Л.

**Строение координационного соединения
гадолиния с ацилдигидразоном адипиновой
кислоты и 3-метил-1-фенил-4-формилпиразол-
5-она**

Ключевые слова: 4-ацилпиразолон-5, ацилдигидразон,
гадолиний, биядерные комплексы, тройной геликат,
рентгеноструктурный анализ

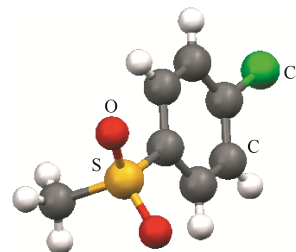


1502

Адамович С.Н., Мирскова А.Н., Зельбст Э.А.,
Фундаменский В.С.

**Кристаллическая и молекулярная структура
метил-(4-хлорфенил)сульфона**

Ключевые слова: метил-(4-хлорфенил)сульфон,
кристаллическая и молекулярная структура,
арилсульфониуксусные кислоты, протатраны,
биологически активные производные



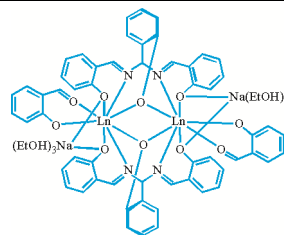
1506

Li L., Yuan F.

1510

**Unexpected C=N bond cleavage in H₃salmp:
Synthesis and structures
of [LnNa(salmp)(sal)]₂·6EtOH (Ln = Sm, Er;
H₃salmp = 2-bis(salicylideneamino)methylphenol;
sal = salicylaldehydato)**

Keywords: samarium, erbium, Schiff base, crystal structure



Содержание следующего номера — в конце журнала