

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 58

Январь-февраль

№ 1, 2017

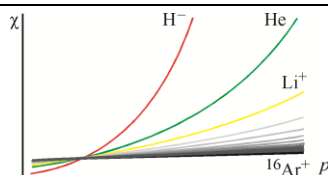
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Тапилин В.М.

Новый метод решения многочастичного уравнения Шредингера

Ключевые слова: многочастичное уравнение Шредингера, корреляция, Не-подобные ионы



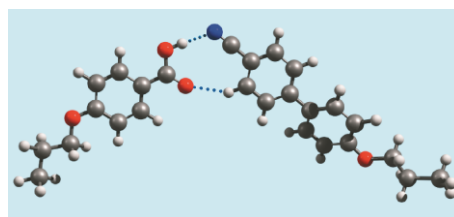
7

Гиричева Н.И., Фёдоров М.С., Шпилева К.Е.,
Сырбу С.А., Дицина О.Ю.

15

Характеристики водородной связи и строение Н-комплексов *n*-*n*-пропилоксибензойной кислоты и *n*-*n*-пропилокси-*n*'-цианобифенила

Ключевые слова: жидкие кристаллы, *n*-*n*-пропилоксибензойная кислота, *n*-*n*-пропилокси-*n*'-цианобифенил, квантово-химические расчеты, NBO-анализ, конформеры, амплитуды колебаний, Н-комплексы, водородная связь

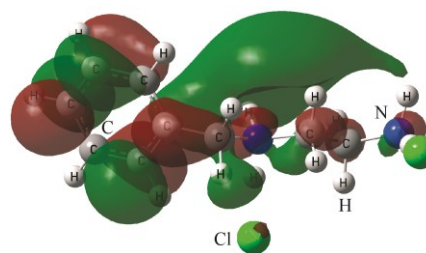


Трунаева Е.С., Хохлова О.Н., Хохлов В.Ю.

23

Квантово-химическое моделирование низкоосновного анионообменника АН-221 (HCl) при гидратации и необменном поглощении фенилаланина

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование, гидратация, фенилаланин, низкоосновный анионообменник, необменное поглощение

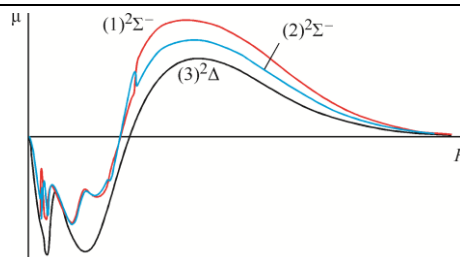


Kontar S., Korek M.

29

Electronic structure with a dipole moment calculation of the low-lying electronic states of the KHe molecule

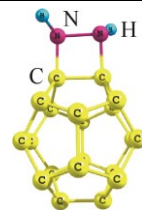
Keywords: *ab initio* calculation, KHe molecule, potential energy curves, spectroscopic constants, dipole moment



Alavi H., Ghiasi R.

A theoretical study of solvent effect on the interaction of C_{20} and N_2H_2

Keywords: C_{20} cage, $C_{20} \dots N_2H_2$ molecules, Frontier orbitals, solvent effect, hyperpolarizability



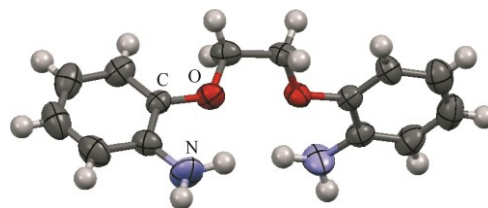
36

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Корякова О.В., Исенев М.Л., Филатова Е.С.,
Фёдорова О.В.

ИК-спектроскопическое и рентгеноструктурное исследование 1,2-бис(2-аминофенокси)-этана, 1,5-бис(2-аминофенокси)-3-оксапентана и 1,8-бис(2-аминофенокси)-3,6-диоксаоктана

Ключевые слова: 1,2-бис(2-аминофенокси)-этан, 1,5-бис(2-аминофенокси)-3-оксапентан, 1,8-бис(2-аминофенокси)-3,6-диоксаоктан, ИК спектроскопия, PCA

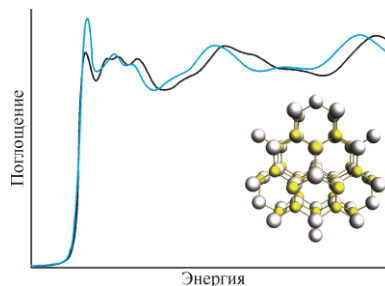


43

Кравцова А.Н., Будник А.П., Панкин И.А.,
Ластовина Т.А., Бугаев А.Л., Попов Л.Д.,
Солдатов М.А., Бутова В.В., Солдатов А.В.

Локальная атомная и электронная структура квантовых точек на основе ZnS , допированных Mn и Co

Ключевые слова: квантовые точки, сульфид цинка, твердый раствор, атомная и электронная структура, компьютерное моделирование, XANES спектроскопия



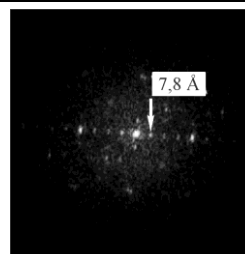
50

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Анчарова У.В., Черепанова С.В., Петров С.А.

Способы адаптации высокой концентрации кислородных вакансий в нестехиометрических ферритах стронция

Ключевые слова: гетерогенные твердые растворы на основе ферритов стронция, локальная структура, упорядочение вакансий, синхротронное излучение, рентгеновская дифракция



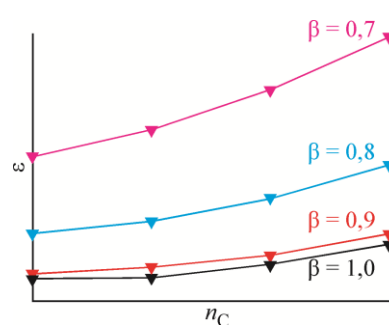
58

Кузнецов В.С., Усольцева Н.В., Блинов А.П.,
Жарникова Н.В., Смирнова А.И., Баделин В.Г.

Структурные, электростатические и термодинамические свойства поверхности сферических мицелл в растворах гомологов n -алкилсульфатов натрия.

II. Электростатические и термодинамические характеристики

Ключевые слова: ионные сферические мицеллы, электростатическая энергия, двойной электрический слой, межфазное натяжение

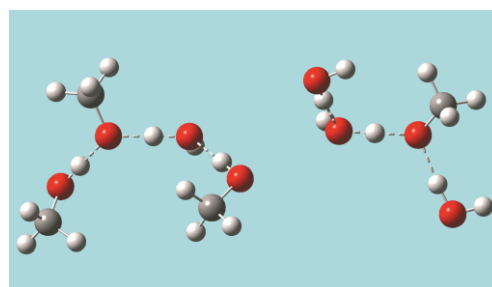


67

Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В., Кислина И.С.,
Майоров В.Д.

Конкуренция между молекулами H_2O и CH_3OH при образовании простейших устойчивых дисольватов протона и их сольватации в водно-метанольных растворах KOH и CH_3OK

Ключевые слова: водно-метанольные растворы, водородная связь, сольватация, дисольваты протона, строение Н-связанных комплексов, KOH , CH_3OK , ИК спектры, квантово-химический расчет



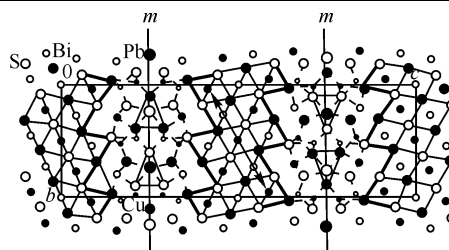
74

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Борисов С.В., Первухина Н.В., Куратьева Н.В.,
Магарилл С.А., Кучумов Б.М.

Кристаллическая структура природного Ag-Cu-Pb-Bi -сульфида

Ключевые слова: Ag-Cu-Pb-Bi -сульфид, структура, кристаллографический анализ, микродвойникование, катийные и анионные подрешетки

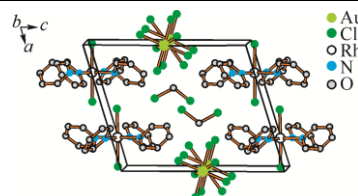


83

Васильченко Д.Б., Семитут Е.Ю., Быкова Е.А.,
Корнев С.В.

Кристаллические структуры комплексных солей $[\text{RhL}_4\text{Cl}_2][\text{AuCl}_4]$ ($\text{L}=\text{Py}$, γ - и β -пиколины)

Ключевые слова: синтез, родий, пиридин, пиколлин, золото, рентгеноструктурный анализ

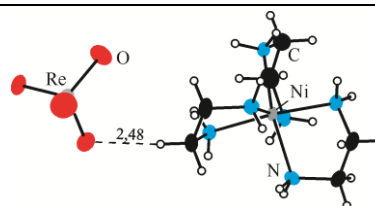


89

Храненко С.П., Быкова Е.А., Задесенец А.В.,
Громилов С.А.

Кристаллические структуры $[\text{M}(\text{En})_3](\text{ReO}_4)_2$ ($\text{M}=\text{Ni}$, Zn)

Ключевые слова: никель, цинк, рений, этилендиамин, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ

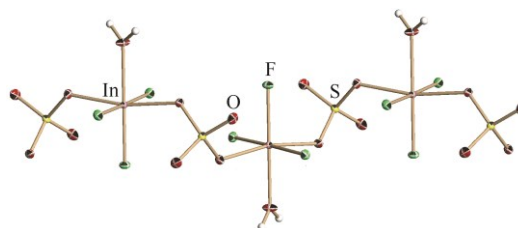


96

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

Кристаллическая структура сульфатофторидных комплексных соединений индия(III) $\text{M}_2[\text{InF}_3(\text{SO}_4)\text{H}_2\text{O}]$ ($\text{M}=\text{K}$, NH_4)

Ключевые слова: индий(III), смешанные лиганды, комплекс, сульфатофторидное соединение, полимерная цепь, кристаллическая структура

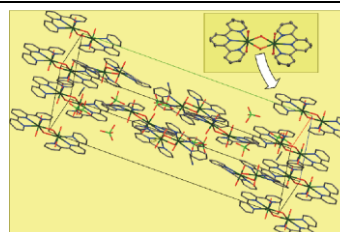


103

Lyczko K., Steczek L.

Crystal structure of a hydroxo-bridged dimeric uranyl complex with a 2,2':6',2''-terpyridine ligand

Keywords: uranyl complex, terpyridine, hydroxide bridge, crystal structure



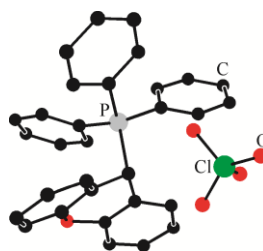
108

Утенышев А.Н., Ткачёв В.В., Ткачёва Н.С.,
Бумбер А.А.

113

Кристаллическая и молекулярная структура производных перхлората (4Н-хромен-4-ил) и (9Н-ксантен-9-ил) трифенилфосфония

Ключевые слова: рентгеноструктурное исследование, производные перхлората (9Н-ксантен-9-ил) и (4Н-хромен-4-ил) трифенилфосфония, полиморфы

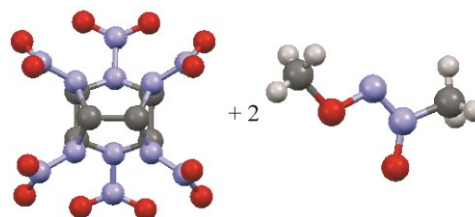


Зюзин И.Н., Алиев З.Г., Гончаров Т.К.,
Игнатъева Е.Л., Алдошин С.М.

119

Структура бимолекулярного кристалла 2,4,6,8,10,12-гексанитро-2,4,6,8,10,12-гексаазаизовюрцитана и метокси-*NNO*-азоксиметана

Ключевые слова: алкокси-*NNO*-азоксисоединения, метокси-*NNO*-азоксиметан, *Z*-2-метокси-1-метилдiazен 1-оксид, 2,4,6,8,10,12-гексанитро-2,4,6,8,10,12-гексаазатетрацикло[5.5.0.0^{3,11}.0^{5,9}]додекан, 2,4,6,8,10,12-гексанитро-2,4,6,8,10,12-гексаазаизовюрцитан, CL-20, бимолекулярные кристаллы, кристаллическая структура



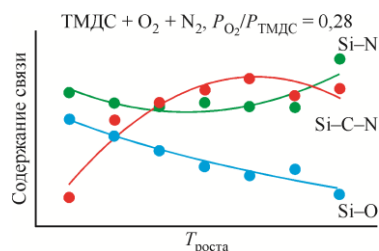
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Файнер Н.И., Плеханов А.Г., Голубенко А.Н.,
Румянцев Ю.М., Максимовский Е.А., Шаяпов В.Р.

125

Структура и элементный состав прозрачных нанокомпозитных пленок оксикарбонитрида кремния

Ключевые слова: оксикарбонитрид кремния, нанокомпозитные пленки, 1,1,3,3-тетраметилдисилазан, плазмохимическое осаждение

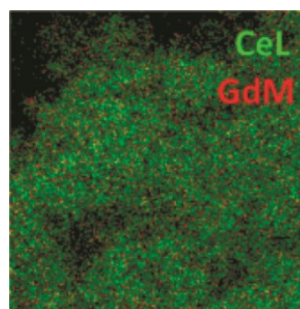


Керженцев М.А., Матус Е.В., Исмагилов И.З.,
Ушаков В.А., Стонкус О.А., Ларина Т.В.,
Козлова Г.С., Bharali P., Исмагилов З.Р.

133

Структурные и морфологические свойства носителей Ce_{1-x}M_xO_y (M = Gd, La, Mg) для катализаторов автотермической конверсии этанола

Ключевые слова: диоксид церия, допирующие добавки, рентгенофазовый анализ, электронная микроскопия, электронная спектроскопия диффузного отражения, наноматериалы



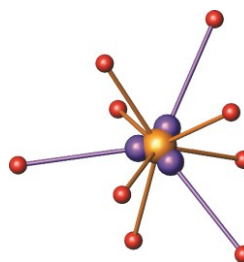
ОБЗОРЫ

Филатов С.К., Шаблинский А.П., Волков С.Н.,
Бубнова Р.С.

142

Формы упорядочения твердых растворов при понижении температуры

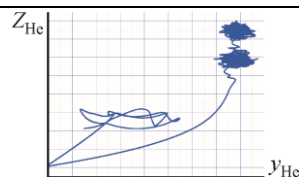
Ключевые слова: кристаллохимия, твердый раствор, порядок–беспорядок, расщепление позиций, сверхструктуры, модулированные структуры, тепловое движение атомов, ротационно-кристаллические состояния



Маленков Г.Г.

Гелий, неон и вода

Ключевые слова: гелий и неон в воде, водных пленках, пленках льда II, молекулярная динамика



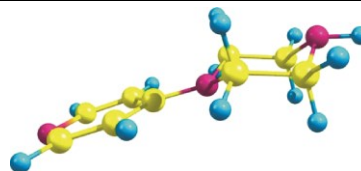
166

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Parlak C.

Solvent effects on NH stretching of 1-(4-pyridyl)piperazine

Keywords: 1-(4-pyridyl)piperazine, DFT, NH stretching, solvent effect

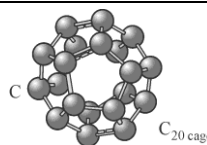


174

Nikmaram F.R., Khoddamzadeh A.

Chemical shielding of doped nitrogen on C₂₀ cage and bowl fullerenes

Keywords: C₂₀ (cage), C₂₀ (bowl), nitrogen doping, NMR

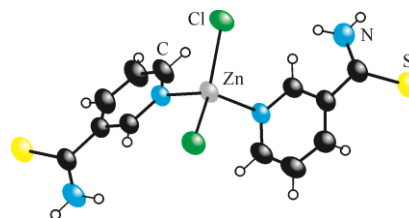


180

Akhtar M., Malik M.R., Tahir M.N., Nadeem S., Altaf M., Sohail M., Ali S., Ahmad S.

Zinc halide complexes of thionicotinamide; crystal structure of dichlorido bis(thionicotinamide-κN)zinc(II)

Keywords: zinc(II), thionicotinamide, NMR spectroscopy, crystal structure



185

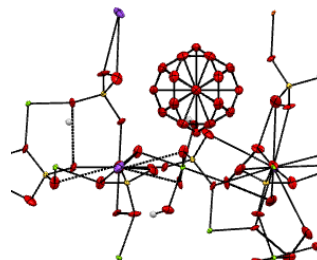
Сабиров В.Х.

Кристаллическая структура синтетического вольтаита

$[K_{0,90}(NH_4)_{0,10}]_2(Fe_{3,190}^{2+}Fe_{1,124}^{3+}Mg_{1,686})$

$(Fe_{0,938}^{3+}Mg_{0,062})_2(Al_{0,98}Fe_{0,02}^{3+})(SO_4)_{12} \cdot 18,9H_2O$

Ключевые слова: вольтаит, каркасная структура, изовалентное и гетеровалентное замещения, октаэдрическая координация

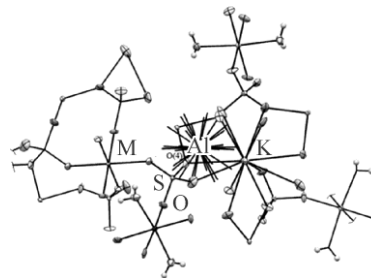


190

Lu W., Yang S.-L., Xu L., CHi X.-W., Xu Y.-Y., Sun H.-J.

Crystal structure, electrochemical and magnetic properties of a new binuclear copper(II) complex with benzoic acid as a ligand

Keywords: synthesis, copper(II) complex, crystal structure, electrochemical and magnetic properties

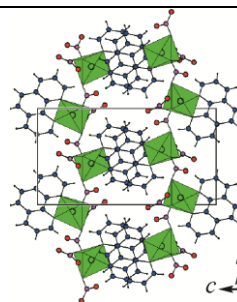


195

Cherni S.N., Driss A.

Structural characterization of a new metallopolymer complex of 1, 10-phenanthroline and nitrate $[Cu(C_{12}H_8N_2)(NO_3)_2]_n$

Keywords: mixed-ligand copper(II) complex, X-ray diffraction, $\pi \cdots \pi$ stacking interactions, five-coordination of Cu(II), zigzag polymeric chain complex

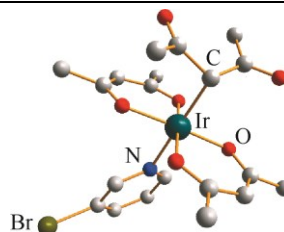


200

Chang Q.-W., Cui H., Yan C.-X., Jiang J., Ye Q.-S.,
Yu J., Chen J.-L., Liu W.-P.

**Crystal structure of iridium(III) acetylacetonate
complexes bearing axial bromide-substituted
pyridine**

Keywords: iridium, acetylacetonate, 3-bromopyridine,
4-bromopyridine, crystal structure

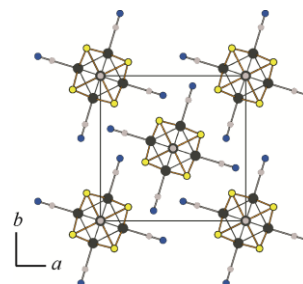


205

Гайфулин Я.М., Смоленцев А.И., Миронов Ю.В.,
Наумов Н.Г.

**Кристаллическая структура
гетерометаллических кластерных соединений
 $K_{5,3}Rb_{0,7}[Re_3Mo_3S_8(CN)_5]$
и $K_{4,4}Cs_{1,6}[Re_3Mo_3S_8(CN)_5]$**

Ключевые слова: рений, молибден,
гетерометаллический кластерный комплекс, полимер,
кристаллическая структура

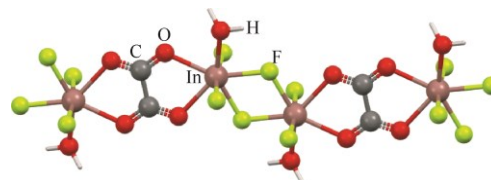


208

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

**Смешаннолигандные оксалатофторидные
комплексные соединения индия(III)
 $M_2[InF_3(C_2O_4)H_2O]$ (M-K, Rb):
синтез и кристаллическая структура**

Ключевые слова: индий(III), смешанные лиганды,
оксалатофторидное комплексное соединение, синтез,
полимерная цепь, кристаллическая структура

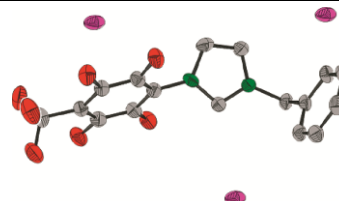


213

Saunders G.C., Thomas H.P.

**Crystal structure and theoretical calculations
of 1-(4-trifluoromethyl-2,3,5,6-tetrafluorophenyl)-3-
benzylimidazolium bromide**

Keywords: imidazolium, anion- π interaction,
X-ray structure



217

Содержание следующего номера — в конце журнала