

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 58

Март-апрель

№ 3, 2017

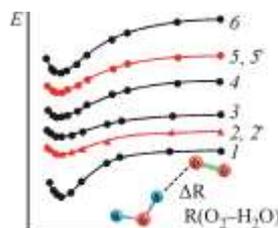
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Щепин А.С., Пешкова Т.В., Пешков С.А.

Индукция излучательных запрещенных переходов в молекуле кислорода в столкновительных комплексах O_2-H_2O

Ключевые слова: столкновительные комплексы, возбужденные состояния кислорода, поверхность потенциальной энергии (ППЭ)

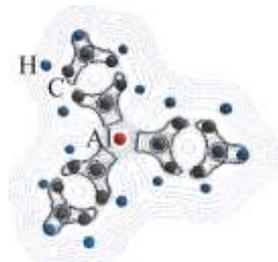


453

Алексеев Н.В.

Квантово-химическое исследование связей алюминий-углерод в соединениях трехкоординированного алюминия

Ключевые слова: квантовая химия, метод NBO, метод AIM

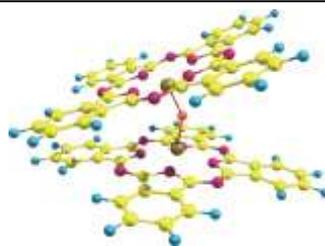


460

Семёнов С.Г., Бедрина М.Е.

Квантово-химическое исследование молекул (μ-оксо)бис[фталоцианина галлия(III)] и (μ-оксо)бис[перфторфталоцианина галлия(III)]

Ключевые слова: галлий, бис-фталоцианинаты, фторфталоцианинаты, структура, потенциал ионизации, дикацион, сродство к электрону, иодная губка, DFT, PBE0

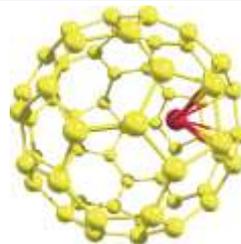


469

Семёнов С.Г., Бедрина М.Е., Макарова М.В., Титов А.В.

Квантово-химическое исследование эндокомплекса $Fe@C_{60}$

Ключевые слова: эндокомплекс $Fe@C_{60}$, основное и возбужденное состояния, структура, перегруппировка по Стоуну-Уэйлсу, DFT, PBE0



475

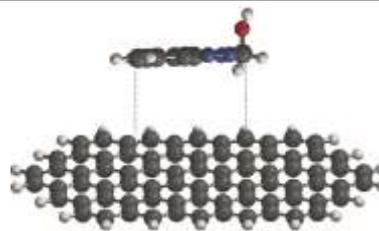
ИЗДАТЕЛЬСТВО СО РАН
НОВОСИБИРСК
2017

Джабиева С.А., Курбатова С.В., Колосова Е.А.

480

Влияние топологии молекул производных бензотриазола на их хроматографическое удерживание в условиях ОФ ВЭЖХ

Ключевые слова: бензотриазол, высокоэффективная жидкостная хроматография, индексы связанности (индексы Рэндича), факторы удерживания

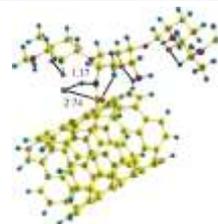


Mansoorinasab A., Morsali A., Heravi M.M., Beyramabadi S.A.

490

Quantum mechanical study of carbon nanotubes functionalized with drug gentamicin

Keywords: density functional theory, Gentamicin, quantum molecular descriptors, functionalized carbon nanotubes, reaction mechanisms



ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

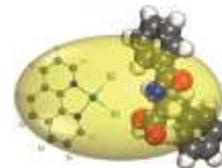
Zeidabadinejad L., Dehestani M., Pourestarabadi S.

499

On the chemical bonding features in palladium containing compounds:

A combined QTAIM/DFT topological analysis

Keywords: SAPT, QTAIM, charge transfer, the bader theory

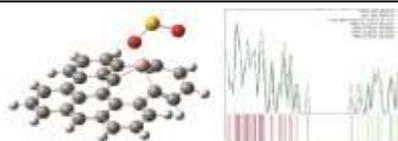


Amir Aslanzadeh S.

506

Effects of heteroatoms on the electronic, sensor, and adsorption properties of graphene

Keywords: graphene, heterodoping, sensor, adsorption

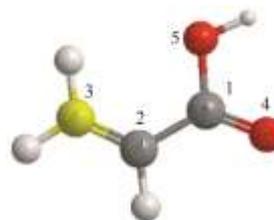


Liao L.-M., Huang X., Lei G.-D.

516

Structural characterization and chromatographic retention time simulation for some aliphatic carboxylic acids

Keywords: organic acids, structural descriptor, retention time, structure and properties, molecular vertices electronegativity interaction (MVEI)

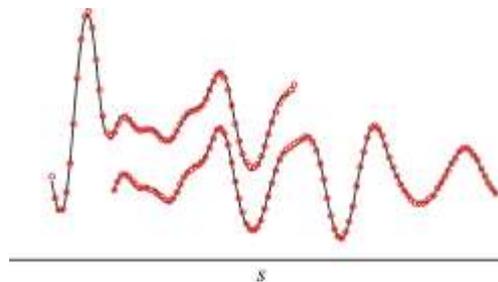


Тарасов Ю.И., Кочиков И.В., Ковтун Д.М., Поленов Е.А., Иванов А.А.

525

Внутреннее вращение и равновесная структура молекулы 2-метил-2-нитропропана на основе совместной обработки данных газовой электронографии, колебательной и микроволновой спектроскопии, а также результатов квантово-химических расчетов

Ключевые слова: 2-метил-2-нитропропан, нежесткие молекулы, внутреннее вращение, газовая электронография, квантово-химические расчеты, равновесная структура, ангармоничность, микроволновая и колебательная спектроскопия



Панюшкин В.Т., Щербаков И.Н., Волынкин В.А., Болотин С.Н., Буков Н.Н., Швыдко Т.В., Джабраилова Л.Х., Шамсутдинова М.Х.

535

О строении координационных соединений меди(II) с L-гистидином

Ключевые слова: L-гистидин, ЭПР, DFT



КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Каблов Е.Н., Кузьмина Н.А., Ерёмин Н.Н.,
Светлов И.Л., Нейман А.В.

547

Атомные модели структуры силицидов ниобия в in-situ композитах Nb—Si

Ключевые слова: ниобий-кремниевые естественные композиционные материалы, жаропрочные сплавы, микроструктура, рентгеноструктурный анализ, внедрение стабилизирующих атомов

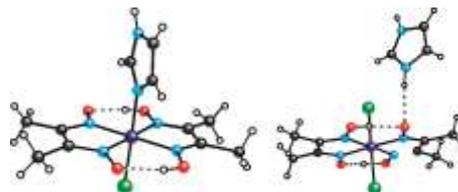


Витиу А.А., Коропчану Э.Б., Боурош П.Н.

554

Кристаллическая структура α-диметилглиоксиматов Со(III) с имидазолом

Ключевые слова: синтез, реакция замещения, структурный блок, диоксиматы Со(III), рентгеноструктурный анализ



Сейфуллина И.И., Марцинко Е.Э., Чебаненко Е.А.,
Пирожок О.В., Дьяконенко В.В., Шишкина С.В.

560

Структура бис(цитрато)германатов с катионами различного типа: (Hphen)₂[Ge(HCit)₂ · 3H₂O], [CuCl(phen)₂]₂[Ge(HCit)₂ · 6H₂O], где H₄Cit – лимонная кислота, phen – 1,10-фенантролин

Ключевые слова: синтез, диоксид германия, лимонная кислота, 1,10-фенантролин, медь(II) хлорид, координационные соединения, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ

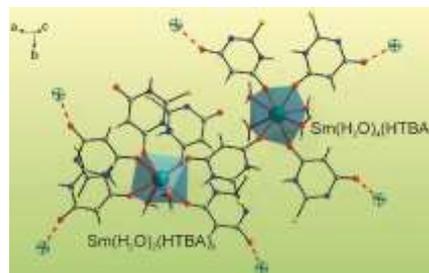


Головнёв Н.Н., Молокеев М.С., Стерхова И.В.,
Верещагин С.Н., Головнёва И.И.

567

Кристаллическая структура и свойства полимерного гексааква-гексакис(2-тиобарбитурато)-дисамария(III)

Ключевые слова: структура, синтез, комплекс, 2-тиобарбитуровая кислота, самарий(III), термическое разложение, ИК-спектр

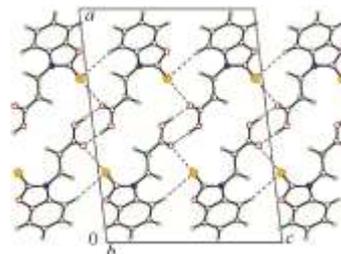


Ашуров Ж.М., Ташходжаев Б., Изотова Л.Ю.,
Олимова М.И., Ибрагимов Б.Т.

572

Кристаллическая и молекулярная структура β-(N-бензоксазолин-2-тион) пропионовой кислоты и ее солей

Ключевые слова: бензоксазолы, β-(N-бензоксазолин-2-тион)пропионовая кислота, моноэтаноламмонийная соль, этилендиаммонийная соль, PCA

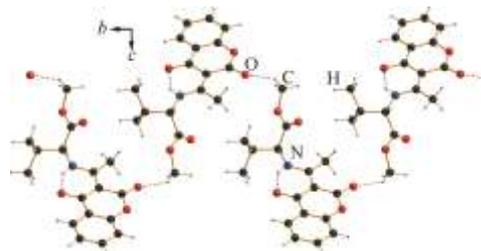


Stojković D.Lj., Jevtić V.V., Vuković N., Vukić M.,
Potočňák I., Zelen I.R., Zarić M.M., Mišić M.M.,
Baskić D., Kaluđerović G.N., Trifunović S.R.

578

Crystal and molecular structure of a new palladium(II) complex with a coumarin-valine derivate

Keywords: coumarine-derived ligand, palladium(II) complex, crystal structure

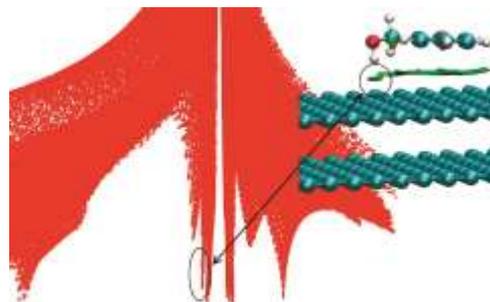


ОБЗОРЫ

Варфоломеева В.В., Терентьев А.В.

Слабые водородные связи при адсорбции нежестких молекул на графитированной термической саже

Ключевые слова: слабые водородные связи, нежесткие молекулы, термодинамические характеристики адсорбции, молекулярно-статистический расчет, графитированная термическая сажа, индекс нековалентных взаимодействий (NCI), теория функционала плотности (DFT)



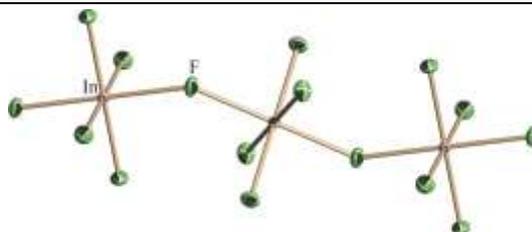
586

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

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

Кристаллическая структура нового фторидоиндата(III) аммония $(\text{NH}_4)_2[\text{InF}_5]$

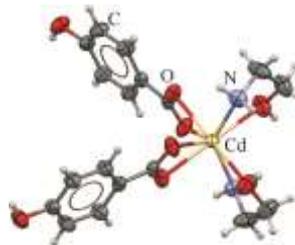
Ключевые слова: синтез, индий(III), комплексный фторид, аммоний, октаэдр, полимерная цепь, кристаллическая структура



614

Молекулярная и кристаллическая структура смешанно-лигандного комплекса кадмия с *n*-гидроксибензойной кислотой и моноэтаноламином

Ключевые слова: *n*-гидроксибензойная кислота, моноэтаноламин, комплекс кадмия, PCA, молекулярная структура

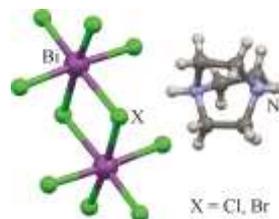


617

Коваленко Е.А., Кочелаков Д.В., Самсоненко Д.Г., Федин В.П.

Кристаллическая структура биядерных комплексов висмута $[\text{H}_2\text{dabco}]_2[\text{Bi}_2\text{Cl}_{10}] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $(\text{H}_3\text{O})_2[\text{H}_2\text{dabco}]_4[\text{Bi}_2\text{Br}_{10}][\text{BiBr}_6]_2 \cdot 4.5\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: синтез, висмут, dabco, рентгеноструктурный анализ, кристаллическая структура

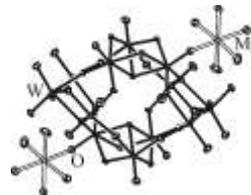


619

Анюшин А.В., Смоленцев А.И., Соколов М.Н.

Кристаллическая структура новой магнийсодержащей соли $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_4[(\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})_5)_2(\text{H}_6\text{W}_{12}\text{O}_{42})]\text{Br}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: полиоксометаллаты, паравольфрамат Б, магний, кристаллическая структура



625

Чудин О.С., Верпекин В.В., Васильев А.Д., Рубайло А.И.

Структура трехъядерного μ_3 -винилиденового кластера $\text{SrMnFePt}(\mu_3\text{-C=CHPh})(\text{PPh}_3)(\text{CO})_6$

Ключевые слова: марганец, железо, платина, винилиденовые комплексы, гетерометаллические кластеры, рентгеноструктурный анализ

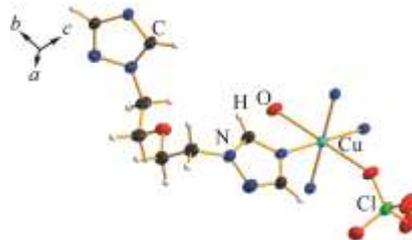


628

Juan X.X., Zhou Z., Li L., Tao J.-Q.

Crystal structure and physical properties of a one-dimensional coordination polymer based on 2,2'-bis(1H-1,2,4-triazolyl)ether

Keywords: Cu(II) complex, 2,2'-bis(1H-1,2,4-triazolyl)ether, one-dimensional chain; magnetic property, photocatalytic degradation activity



631

Pan L., Zhang B., Su Y., Ma Z.

The crystal structure of a N₅O₃ cryptand

Keywords: cryptand, crystal structure, condensation, rare earth, tren

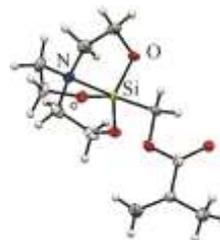


635

Болгова Ю.И., Бородина Т.Н., Трофимова О.М., Смирнов В.И.

Кристаллическая структура 2,8,9-триокса-5-аза-1-силабицикло[3.3.3]ундек-1-илметил-2-метилакрилата

Ключевые слова: (1-силатранилметил)метакрилат, кристаллическая структура, рентгеноструктурный анализ



638

Ткачёв В.В., Ткачёва Н.С., Казаченко В.П.

Строение соли 3,5-диметил-1-адамантанамина-2,4,6-триизопробилбензосульфоната в кристалле

Ключевые слова: сульфаниламиды, рентгеноструктурный анализ



641

Корчагин Д.В., Алдошин С.М., Черняк А.В., Чапышев С.В.

Молекулярная и кристаллическая структура 2,4,6-триазидопиримидина и его хлорзамещенного производного

Ключевые слова: азиды, пиримидины, PCA, молекулярная и кристаллическая структура, ЯМР ¹⁵N, энергоёмкие соединения

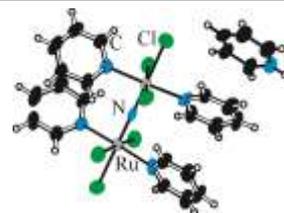


644

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

Crystal structure of a dinuclear nitrido-bridged ruthenium complex with pyridine ligands

Keywords: synthesis, dinuclear, ruthenium complex, nitrido-bridged, pyridine, crystal structure

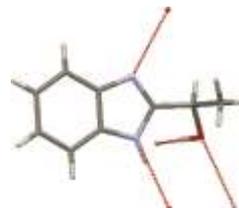


650

Махмудов У.С., Ташходжаев Б., Талипов С.А., Олимова М.И., Мухамедов Н.С., Элмурадов Б.Ж.

Полиморфы производных бензимидазола

Ключевые слова: бензимидазолы, полиморфные модификации, 2-этилбензимидазол, 2-(1-гидроксиэтил)-бензимидазол, рентгеноструктурный анализ (PCA)

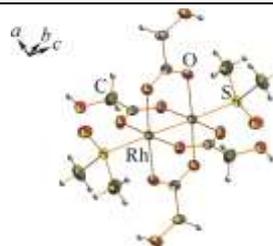


652

Ye Q.-S., Xie M.-J., Yu J., Chang Q.-W., Jiang J.,
Yan C.-X., Li J., Liu W.-P.

**Crystal structures
of tetrakis(hydroxyacetato)bis(dimethyl
sulfoxide)dirhodium(II)**

Keywords: synthesis, rhodium, hydroxyacetate, adduct,
dimethyl sulfoxide, crystal structure



656

Ujam O.T., Ogbonna O.C., Oliver A., Ume J.I.,
Janusson E., Chime C.C.

Crystal Structure of 4-hydroxy-6-methyl-3-[(1E)-1-(2-phenylhydrazinylidene)ethyl]-2H-pyran-2-one

Keywords: single X-ray crystal structure, Schiff base,
ESI-Mass spectrometry



661

Содержание следующего номера — в конце журнала