

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 60

Март

№ 3, 2019

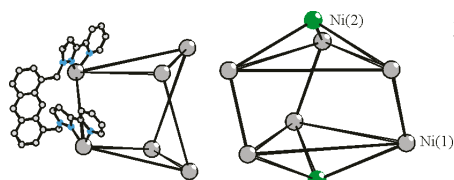
СОДЕРЖАНИЕ

ОБЗОРЫ

Гусев А.Н., Шульгин В.Ф., Кискин М.А.

**Самоорганизация полиядерных комплексов
на основе спейсированных пиридилазолов**

Ключевые слова: полиядерные комплексы, пиразолы,
триазолы, спейсер, РСА, самоорганизация,
кристаллическая структура



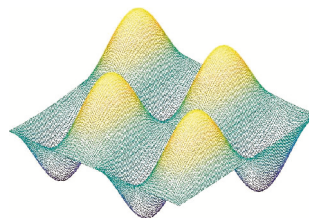
353

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Грибов Л.А.

**Решение задачи об электронно-колебательно-
вращательных уровнях энергии многоатомной
молекулы произвольного строения
в обобщенных координатах**

Ключевые слова: квантовая теория молекул,
обобщенные координаты, уровни энергии

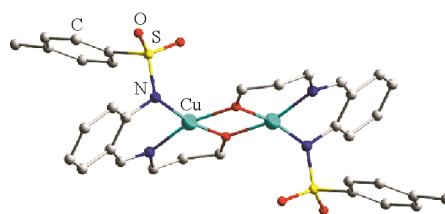


375

Бурлов А.С., Старикова А.А., Власенко В.Г.,
Кошкин Ю.В.

**Теоретическое моделирование строения
N-[2-[(гидроксиалкилимино)метил]фенил]-4-
метилбензолсульфамидов и их моно-
и биядерных комплексов меди(II)**

Ключевые слова: азометины, металлохелаты,
магнитные свойства, квантово-химические расчеты

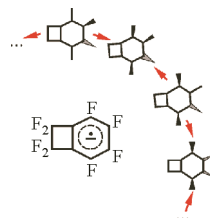


384

Береговая И.В., Щеголева Л.Н., Боровков В.И., Карпов В.М.

**Анион-радикал перфторбензоциклобутена –
структурно нежесткая частица**

Ключевые слова: перфторбензоциклоалкены,
метод времяразрешенного магнитного эффекта, анион-радикалы,
поверхность потенциальной энергии, псевдовращение,
константы сверхтонкого взаимодействия

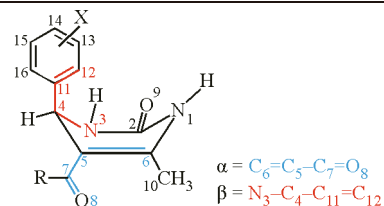


392

Memarian H.R., Amini S.

Computational studies on the rotamers of 4-aryl-2-oxo-1,2,3,4-tetrahydropyrimidines and 4-aryl-2-oxo-1,2-dihydropyrimidines

Keywords: conformational analysis, dihydropyrimidines, tetrahydropyrimidines, steric effect, bond rotation, solvent effect

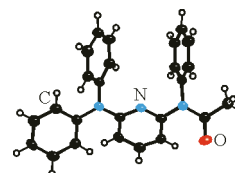


396

Okuda T., Umezono S., Okuno T.

Crystal structure and DFT study of *N*-(6-(diphenylamino)pyridin-2-yl)-*N*-phenylacetamide

Keywords: crystal structure, theoretical calculation, acetamide, pyridine, hydrogen bond



412

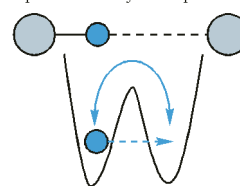
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Галкина Ю.А., Вершинин М.А., Колесов Б.А.

Спектры КР молекулярных кристаллов с сильными водородными связями N—H...N в интервале температур 5 – 300 К

Ключевые слова: спектры КР, сильные водородные связи, квантово-химический расчет, протонный таутомеризм

Прыжки или туннелирование?

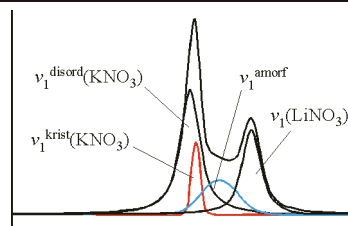


415

Гафуров М.М., Рабаданов К.Ш., Амиров А.М., Атаев М.Б., Кубатаев З.Ю., Какагасанов М.Г.

Колебательные спектры и структура системы $(1-x)\text{Li}_{0.42}\text{K}_{0.58}\text{NO}_3 - x\text{Al}_2\text{O}_3$

Ключевые слова: композит, бинарная система, нитрат лития, нитрат калия, комбинационное рассеяние, инфракрасное поглощение, рентгенофазовый анализ

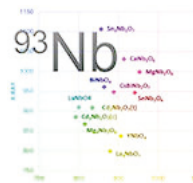


422

Saouli I., Landron S., Peric B., Boutarfaia A., Kouvatas C., Le Pollès L., Cuny J., Gautier R.

Computing ^{93}Nb NMR parameters of solid-state niobates. The geometry matters

Keywords: NMR, DFT, niobates, chemical shift, quadrupolar interaction



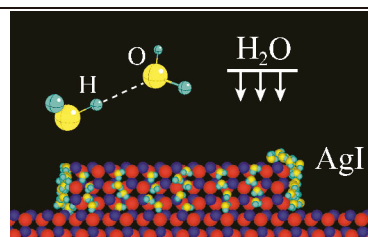
430

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Шевкунов С.В.

Структура зародыша водного конденсата в поле поверхностных кристаллических дефектов на базовой грани $\beta\text{-AgI}$

Ключевые слова: вода, кристаллическая поверхность, структура контактного слоя, водородные связи, компьютерное моделирование

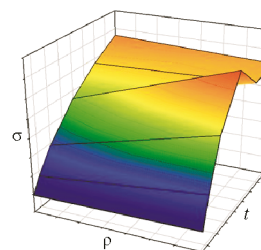


437

Одинаев С., Акдонов Д.М., Идибегзода Х.И.

Исследование частотной дисперсии коэффициента удельной электропроводности водных растворов электролитов

Ключевые слова: коэффициенты трения, времена релаксации, потенциальная энергия межчастичного взаимодействия, радиальная функция распределения, модуль электроупругости, коэффициент удельной электропроводности

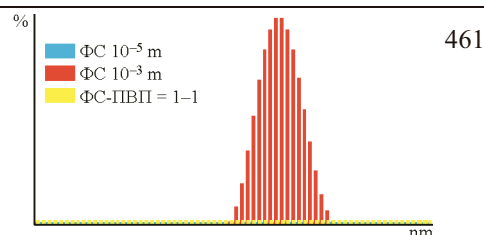


452

Батов Д.В., Кустов А.В., Кручин С.О., Макаров В.В., Березин Д.Б.

Агрегация катионных производных хлорина e_6 в воде и водных растворах поливинилпирролидона

Ключевые слова: катионные производные хлорина e_6 , фотосенсибилизаторы, водные растворы, поливинилпирролидон, динамическое рассеяние света, агрегация, диаметр частиц

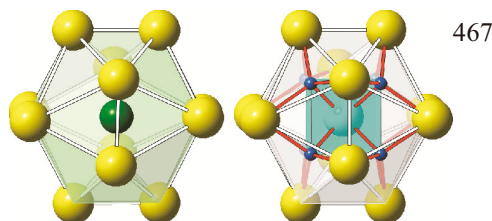


КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Бакакин В.В.

Интригующая структурно-функциональная аналогия крупных катионов и анионоцентрированных кластеров ($X^{2-}M_n^{+}$) на примере двойных халькогенидов K, Rb, Cs, $Tl^{(I)}$ и $Ag^{(I)}$, $Cu^{(I)}$

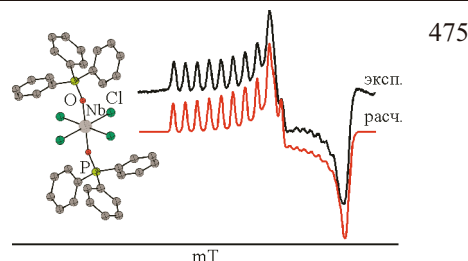
Ключевые слова: халькогениды, кристаллическая структура, кристаллохимический анализ, анионоцентрированные кластеры



Полтарак П.А., Комаров В.Ю., Козлова С.Г., Надолинный В.А., Полтарак А.А., Артемкина С.Б., Федоров В.Е.

Новые молекулярные комплексы ниобия (IV) $NbX_4(OPPh_3)_2$ ($X = Cl, Br$): синтез, кристаллическая и электронная структура

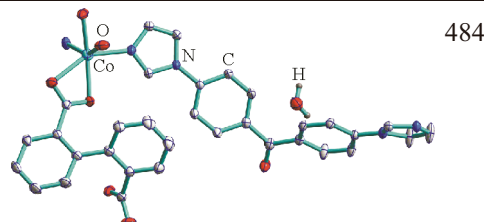
Ключевые слова: ниобий, синтез, кристаллическая структура, ЭПР спектроскопия, хлорид, бромид, трифенилфосфин оксид



Sun S.-W., Wang G.-F.

Synthesis and characterization of a cobalt coordination polymer with bis(4-(1*H*-imidazol-1-yl)phenyl)methanone and 1,1'-biphenyl-2,2'-dicarboxylate

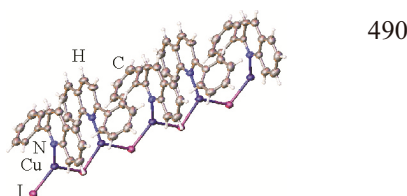
Keywords: N-donor ligand, cobalt complex, crystal structure, coordination polymer, thermal stability



Aguirrechu-Comerón A., Hernández-Molina R., González-Platas J.

Structure of one dimensional copper(I) polymer with iodine bridges

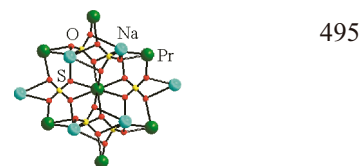
Keywords: copper(I), polymeric structures, iodine bridging structures, structural versatility



Paul A.K., Kanagaraj R.

Synthesis, characterizations and crystal structure analysis of a new mixed metal sulfate, $PrNa(SO_4)_2(H_2O)$

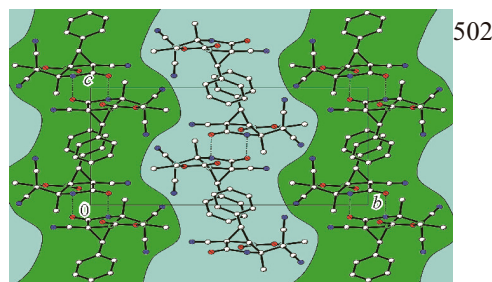
Keywords: mixed metal, praseodymium sulfate, single crystal, FT-IR, TGA



Исмиев А.И., Потехин К.А., Малеев А.В., Аскеров Р.К., Магеррамов А.М.

Синтез, молекулярная и кристаллическая структура этил 5-циано-2-(дицианометил)-2-метил-4-оксо-6-фенил-3-азабицикло[3.1.0]гексан-1-карбоксилата

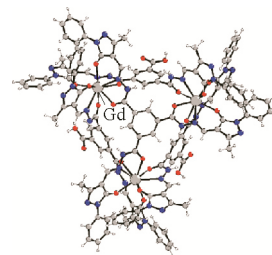
Ключевые слова: мультикомпонентная каскадная конденсация, малондинитрил, 3-азабицикло[3.1.0]гексан, атом-атомные потенциалы, молекулярные агломераты, молекулярные слои, водородная связь



Шульгин В.Ф., Балуда Ю.И., Гусев А.Н.,
Паниковровский Т.Л., Кискин М.А., Ерёменко И.Л.

**Координационные соединения лантанидов
с гидразонами 3-метил-1-фенил-4-формилпиразол-5-она
и 1,3,5-бензолтрикарбоновой кислоты**

Ключевые слова: 1,3,5-бензолтрикарбоновая кислота,
3-метил-1-фенил-4-формилпиразол-5-он, гидразон, гадолиний,
диспрозий, PCA



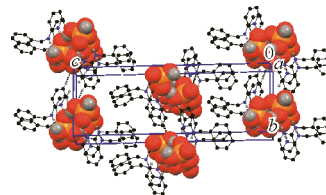
511

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Jagan R., Sivakumar K.

**Dihydrogenphosphate anionic template assisted
hydrogen bonded networks in 2-benzylaminopyridinium
and 4-ethoxyanilinium dihydrogenphosphate salts**

Keywords: crystal structure, supramolecular network,
dihydrogenphosphate, Cambridge Structural Database, SHELX



517

Содержание следующего номера — в конце журнала