

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 59

Январь-февраль

№ 1, 2018

СОДЕРЖАНИЕ

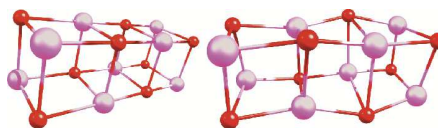
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Ермаков А.И., Хоришко Б.А.

7

Симбатность энтальпий образования, энергий активации электропроводности вюститита и кластеров его кристаллической решетки

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование, кластеры, кристаллическая решетка, вюстит, энтальпия образования, энергия активации электропроводности



Новосадов Б.К.

18

Силы в молекулах. Новые квантовые соотношения

Ключевые слова: волновое уравнение, оператор силы, теорема Гельмана – Фейнмана

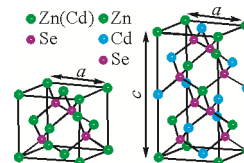
$$\hat{\mathbf{F}}_i = \sum_{a=1}^N \nabla_i \frac{-Z_a}{r_{ia}} + \sum_{j=1, j \neq i}^n \nabla_i \frac{1}{2r_{ij}}$$

Басалаев Ю.М., Сидорова А.В.

23

Электронное строение и упругие свойства кристалла ZnCdSe_2 со структурой халькопирита

Ключевые слова: халькопирит, ZnCdSe_2 , ZnZnSe_2 , CdCdSe_2 , зонная структура, деформационная плотность, химическая связь



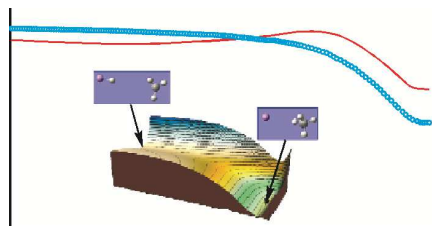
Tag El-Din Kamal M., El-Wallid S. Sedik, Talaat H.

28

Variation of the intersection point of the potential surface crossing induced by the laser phase along the reaction path in ion-molecule reactions:

Application to $\text{Li}^+ + \text{CH}_4$

Keywords: intense laser fields, dipole moment, polarizability, reaction path, unrestricted second order Møller-Plesset calculations (UMP2), ion-molecule reaction, potential energy surface crossings

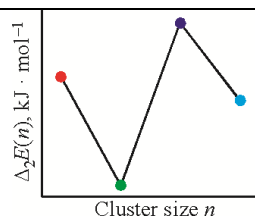


Ma D.X., Xia Q.Y.

36

A systematic search for structures and stabilities of asymmetric clusters $(\text{HFInN}_3)_n$ ($n = 1 - 6$)

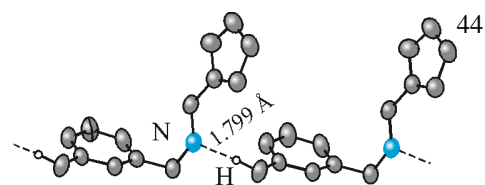
Keywords: asymmetric clusters $(\text{HFInN}_3)_n$ ($n = 1 - 6$), single source precursors, density functional theory (DFT), structures, stabilities, IR spectra



Sathiyaraj E., Thirumaran S., Ciattini S.

Crystallographic and computational studies on N-furfuryl-N-(3-hydroxybenzyl)amine and N-furfuryl-N-(4-hydroxybenzyl)amine

Keywords: crystal structures, DFT, HOMO-LUMO, vibrational spectra

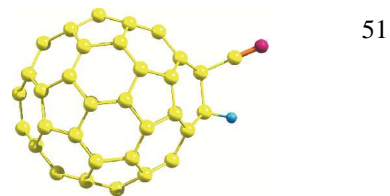


44

Макарова М.В., Семёнов С.Г., Костиков Р.Р.

Квантово-химическое исследование кислотности производных ацетилена и 1,2-дигидробакминстерфуллерепа

Ключевые слова: ацетилены, фуллерен, СН-кислота, карбанион, неподеленная электронная пара, эффект растворителя, DFT



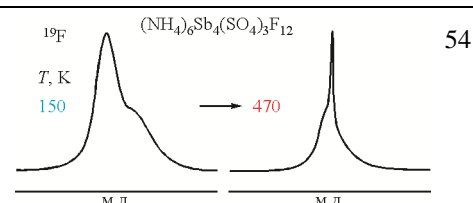
51

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Кавун В.Я., Земнухова Л.А., Полянецв М.М.

Ионная подвижность в сульфатофторидных комплексах сурьмы(III) состава $M_6Sb_4(SO_4)_3F_{12}$ ($M = Rb, Cs, NH_4$) и $(NH_4)_2Sb(SO_4)F_3$ по данным ЯМР ^{19}F и 1H

Ключевые слова: сульфатофториды сурьмы(III), спектры ЯМР ^{19}F , 1H

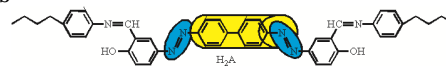


54

Al-Barody S.M.

Characterization and thermal study of Schiff-base monomers and its transition metal polychelates and their photovoltaic performance on dye sensitized solar cells

Keywords: synthesis, bis-azo dye, polychelates, coordinate polymer, poly Schiff-base, dye-sensitized solar cell (DSSC)

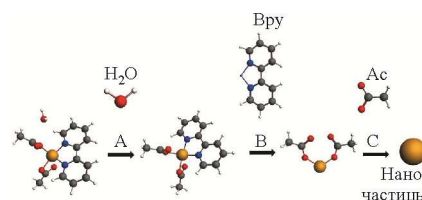


59

Кременная М.А., Будник А.П., Солдатов М.А., Ластовина Т.А., Солдатов А.В.

Рентгеноспектральное исследование атомной структуры ацетатно-бипиридинового комплекса меди(II) в процессе термического разложения

Ключевые слова: ацетатно-бипиридиновый комплекс меди(II), прекурсор наночастиц оксида меди, термогравиметрия, ИК спектроскопия, XANES, теория функционала плотности, локальная атомная и электронная структура

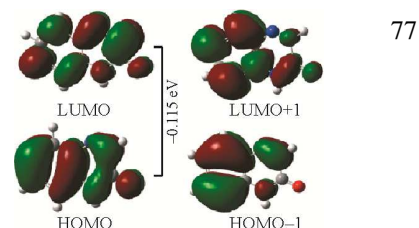


70

Makhloufi A., Ghemit R., Baitiche M., Merbah M.

Theoretical and experimental investigation on 2-hydroxyquinoxaline structure: Study of tautomerization equilibrium system and analysis of electronic properties

Keywords: 2-hydroxyquinoxaline, tautomerism, DFT, analysis spectral, electronic properties

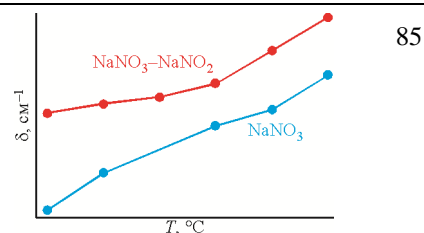


77

Алиев А.Р., Ахмедов И.Р., Какагасанов М.Г., Алиев З.А., Амиров А.М.

Молекулярная релаксация бинарных систем $LiNO_3-LiClO_4$, $NaNO_3-NaNO_2$, $K_2CO_3-K_2SO_4$

Ключевые слова: молекулярная релаксация, бинарные системы, ионные кристаллы, комбинационное рассеяние, колебательные спектры

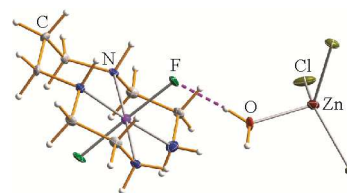


85

Moon D., Tanaka S., Akitsu T., Choi J.-H.

Crystal structure, spectroscopic and magnetic properties of *trans*-difluoro(1,4,8,11-tetraazaundecane)chromium(III) aquatrichlorozincate

Keywords: synthesis, crystal structure, 1,4,8,11-tetraazaundecane, chromium(III), Zn(II), physical properties, *trans-meso(RS)*-conformer



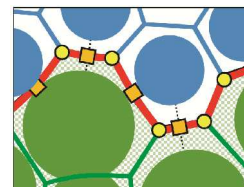
92

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Волошин В.П., Ким А.В., Шелепова Е.А.,
Медведев Н.Н.

Определение границы между липидным бислоем и водой

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, метод Вороного–Делоне, липидные мембраны, профиль атомной плоскости, профиль свободного объема

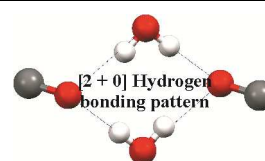


101

Siddiqui K.A.

Structural diversity of metal-organic hydrates: A crystallographic structural database study

Keywords: lattice water, metal-organic coordination complexes, hydrogen bonding, metallo-supramolecular chemistry



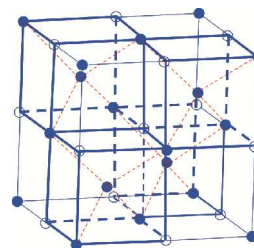
111

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Борисов С.В., Первухина Н.В., Магарилл С.А.

Кристаллографическая основа стабильности распространенных (популярных) структурных типов

Ключевые слова: кристаллографический анализ, катионные и анионные подрешетки, механико-волновая концепция кристаллического состояния, структурные типы алмаза и шпинели, структурные типы турмалина и апатита, критерии стабильности и упаковки

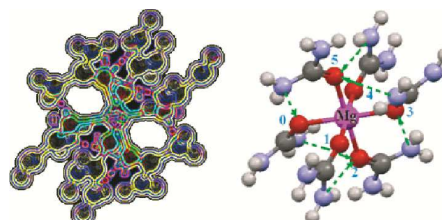


118

Ray B.G., Ray T.F., Ломтев Л.А., Никитин О.Р.

Группа нарушенной симметрии в октаэдрическом катионе $[\text{Me}(\text{urea})_6]^{2+,3+}$ с внутрикомплексными водородными связями

Ключевые слова: комплексные катионы с карбамидом, группы симметрии подстановок, таблицы Кэли, полугруппы, принцип Кюри–Неймана, группы нарушенной симметрии, таблицы и структуры групп с нарушенной симметрией, дивергентные и конвергентные оргграфы структуры

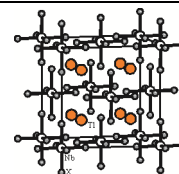


124

Соколов М.Н., Рогачев А.В., Вировец А.В.,
Богомяков А.С.

Кристаллическая структура $\text{Tl}_2[\text{NbCl}_6]$ и $\text{Tl}_2[\text{NbBr}_6]$

Ключевые слова: таллий, ниобий, кристаллическая структура, магнетизм

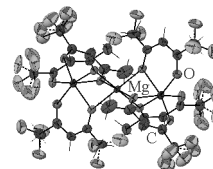


124

Куратьева Н.В., Викулова Е.С., Жерикова К.В.

Кристаллохимическое исследование двух комплексов магния с трифторацетилацетоном

Ключевые слова: магний, трифторацетилацетон, синтез, рентгеноструктурный анализ

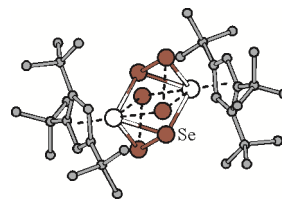


131

Афонин М.Ю., Сухих Т.С., Конченко С.Н.

Кристаллическая структура биядерных комплексов кобальта $[(\text{Cr}^{\text{III}}\text{Co})_2(\mu_2\text{-}\eta^1\text{:}\eta^2\text{-S}_2)_2]$ и $[(\text{Cr}^{\text{III}}\text{Co})_2(\mu_2\text{-}\eta^1\text{:}\eta^2\text{-Se}_2)_2]$

Ключевые слова: биядерные комплексы, кобальт, сера, селен, кристаллическая структура

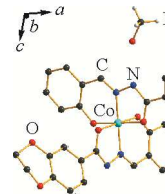


140

Sheng G.-H., Wang C.-F., Feng S., Gao X., Zhu H.-L.

Characterization and crystal structure of a novel mononuclear cobalt(II) complex with hydrazone derived from protocatechuic acid

Keywords: complex, hydrazone, protocatechuic acid, crystal structure, thermal stability

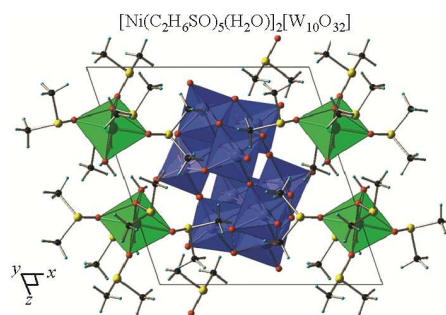


144

Пойманова Е.Ю., Медведь А.О., Радио С.В., Баумер В.Н., Арзуманян Г.М., Дорошкевич Н.В., Хомутова Е.В., Белоусова Е.Е., Розанцев Г.М., Панюшкин В.Т.

Декавольфрамат никеля $[\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_6\text{SO})_5(\text{H}_2\text{O})]_2[\text{W}_{10}\text{O}_{32}]$: синтез из водно-диметилсульфоксидного раствора, определение кристаллической структуры, ИК- и КР-спектроскопический анализ, микроморфология поверхности

Ключевые слова: кристаллическая структура, изополивольфрамат, декавольфрамат-анион, никель(II)

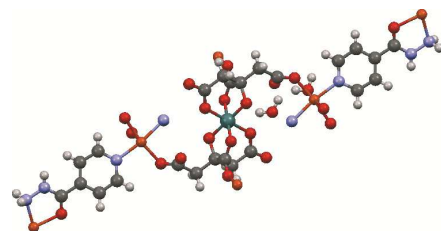


149

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

Структура координационного полимера $\{[\text{Cu}_2\text{Ge}(\mu\text{-Cit})_2(\mu\text{-INH})_2] \cdot 4\text{H}_2\text{O}\}_n$, где H_4Cit – лимонная кислота, INH – гидразид изоникотиновой кислоты

Ключевые слова: синтез, диоксид германия, лимонная кислота, гидразид изоникотиновой кислоты, ацетат меди(II), координационный полимер, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ

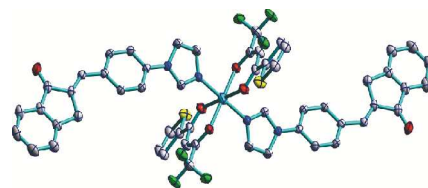


158

Wang G.-F., Zhang X., Sun S.-W., Li H., Meng L.-X., Yao C.-Z., Zhao Y.-F., Wei B.-H.

Structural characterization of two copper complexes with 2-arylidenebenzocycloalkanone ligands

Keywords: synthesis, copper complex, crystal structure, β -diketonate complexes, ketone

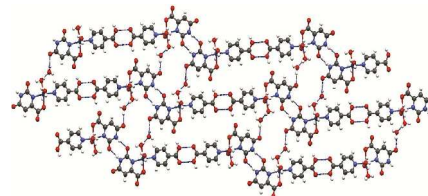


164

Siddiqui K.A., Lama P.

First orotic acid and isonicotinic acid based Zn-complex: Hydrothermal synthesis, crystal structure and thermogravimetric analysis

Keywords: crystal engineering, orotate complex, hydrogen bonding

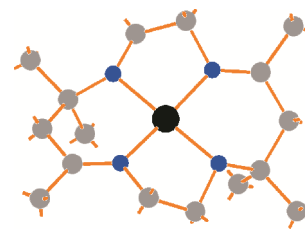


170

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

Особенности упаковки структур $[ML_2](\text{ReO}_4)_2$ ($M = \text{Cu}, \text{Ni}$; $L = 5,5,7,12,12,14$ -гексаметил-1,4,8,11-тетрааза-циклотетрадекан)

Ключевые слова: медь, никель, макроциклический лиганд, перренат-анион, кристаллохимия, упаковка структуры, рентгеноструктурный анализ

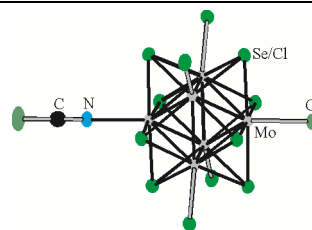


176

Михайлов М.А., Вировец А.В., Пересыпкина Е.В.,
Брылёв К.А., Соколов М.Н.

**Строение и люминесцентные свойства
кластерных комплексов с ядром $\{\text{Mo}_6(\mu_3\text{-SeCl}_7)\}^{3+}$**

Ключевые слова: синтез, кластерные комплексы молибдена,
замещение мостиковых хлоридных лигандов, сольватация,
кристаллическая структура, люминесценция

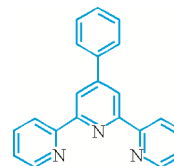


181

Huang Y., Wang Q., Ma Z.

**A neutral dinuclear silver(I)
4'-phenyl-terpyridine compound**

Keywords: silver compound, 4'-phenyl-terpyridine, thermal synthesis,
X-ray diffraction

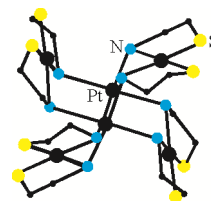


186

Азизова А.Н., Тагиев Д.Б., Османова С.Н.,
Касумов Ш.Г., Гасанов Х.И.

**Кристаллическая и молекулярная структура комплекса
платины(II) с β -меркаптоэтиламин гидрохлоридом**

Ключевые слова: платина, лиганд, координация, дентантность,
металлохелат, меркамин

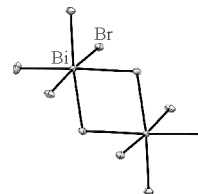


191

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

**Кристаллическая структура биядерного комплекса
висмута $[\text{H}_2\text{dabco}]_2[\text{Bi}_2\text{Br}_{10}]\cdot 4\text{H}_2\text{O}$**

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

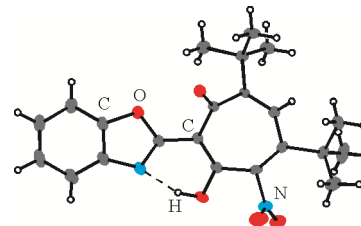


196

Ткачев В.В., Саяпин Ю.А., Тупаева И.О., Гусаков Е.А.,
Шилов Г.В., Алдошин С.М., Минкин В.И.

**Строение 2-(бензоксазол-2-ил)-5,7-ди(*трет*-бутил)-
4-нитро-1,3-трополона**

Ключевые слова: синтез, бензоксазолы, 1,3-тропоны,
внутримолекулярная водородная связь,
рентгеноструктурный анализ

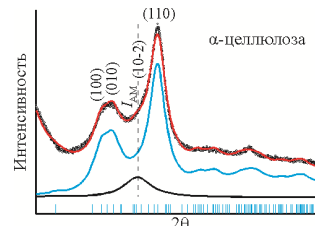


200

Подгорбунских Е.М., Бычков А.Л., Булина Н.В.,
Ломовский О.И.

**Разупорядочение кристаллической структуры
целлюлозы при механической активации**

Ключевые слова: степень кристалличности,
аморфизация целлюлозы, разупорядочение структуры,
механическая активация

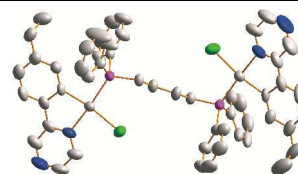


204

Li H.M., Wang Z.Q., Fu W.J., Xu C.

**Crystal structures of two luminescent mononuclear
and dinuclear cyclopalladated
2-(4-ethylphenyl)pyrazine complexes**

Keywords: palladacycle, C–H \cdots N(Cl) hydrogen bond, $\pi\cdots\pi$ interaction



212

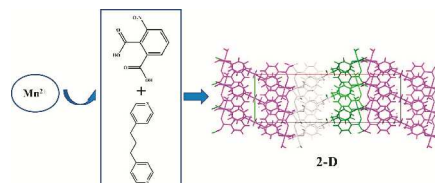
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Chooset S., Kantacha A., Nimthong A., Zeller M.,
Wongnawa S.

217

**X-ray crystal structure of a novel 2D Mn(II)
coordination polymer with 4,4'-trimethylenedipyridine
and 3-nitrophthalate as ligands**

Keywords: synthesis, manganese(II) complexes,
supramolecular chemistry, coordination polymer,
2-dimensional polymer, dicarboxylate complexes

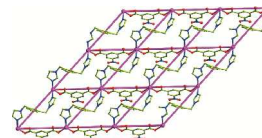


Cheng J., Wang G.-H., Wang Y.-W.

225

**Crystal structure of a 2D cadmium(II) coordination
polymer containing flexible bis(imidazole) ligand**

Keywords: bis(imidazole), cadmium complex, crystal structure

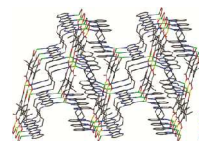


Cui J.W., Wang S.C., Wang Y.Y., Dong G.Y.

229

**Crystal structure of a 1D silver(I) coordination polymer
containing flexible bis(benzimidazole)**

Keywords: Ag(I) complex, bis(benzimidazole), crystal structure



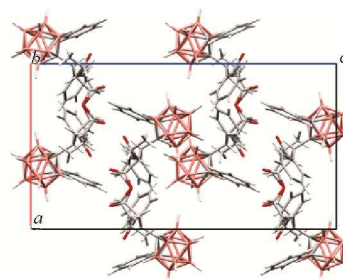
СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Сулеймен Е.М., Казанцев А.В., Van Hecke K.,
Искакова Ж.Б., Акатан К.

233

**Кристаллическая, молекулярная структура
и цитотоксическая активность диэтилового эфира
2-[(фенил-(фенил-*o*-карборанил)-метил]
малоновой кислоты**

Ключевые слова: производные *o*-карборана, производные
малоновой кислоты, рентгеноструктурный анализ,
ЯМР спектроскопия, цитотоксическая активность

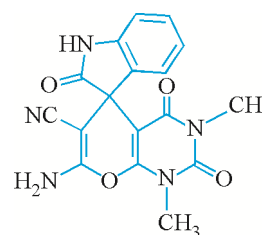


Sharma S., Brahmachari G., Kumar A., Misra N.,
Kant R., Gupta V.K.

237

**Molecular modeling, spectroscopic investigations, and
computational studies of DMSO solvated 7'-amino-1',3'-
dimethyl-2,2',4'-trioxo-1',2',3',4',4a',8a'-tetrahydrospiro-
[indoline-3,5'-pyrano[2,3-*d*]pyrimidine]-6'-carbonitrile**

Keywords: green synthesis, spiro-oxindole, X-ray diffraction,
direct methods, interactions, DFT calculations

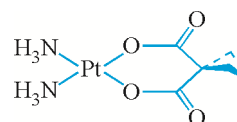


Rezazadeh M., Ghiasi R., Jamehbozorgi S.

247

**Solvent effects on the structure and spectroscopic
properties of the second-generation
anticancer drug carboplatin:
A theoretical insight**

Keywords: carboplatin, anticancer drug, frontier orbitals analysis,
solvent effect, hyperpolarizability



Содержание следующего номера — в конце журнала

© Сибирское отделение РАН, 2017
© Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН, 2017
© Новосибирский государственный
университет, 2017