

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 59

Ноябрь-декабрь

№ 8, 2018

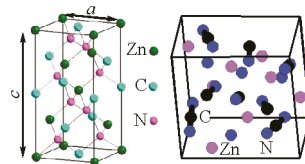
СО Д Е Р Ж А Н И Е

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Басалаев Ю.М., Емельянова А.М., Сидорова А.В.

Особенности кристаллической, электронной и колебательной структуры цианидов цинка

Ключевые слова: цианид, ZnCN_2 , $\text{Zn}(\text{CN})_2$, $\text{Zn}(\text{CN})_2$, халькопирит, химическая связь

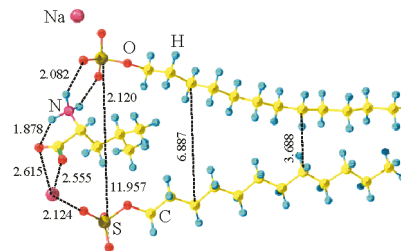


1827

Гиричева Н.И., Курбатова М.С., Тюнина Е.Ю., Баранников В.П.

Квантово-химическое моделирование взаимодействия лейцина с димером додецилсульфата натрия

Ключевые слова: аминокислота, лейцин, димер додецилсульфата натрия, комплексы, квантово-химические расчеты, метод DFT, геометрические и энергетические характеристики

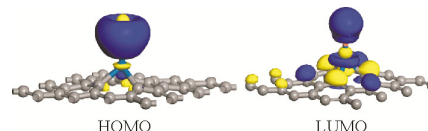


1834

Tong Y.C., Wang Q.Y., Li Z., Yu L.B.

DFT study on the CO catalytic oxidation reaction on the PtCu-embedded graphene

Keywords: CO catalytic oxidation, density functional theory, PtCu/graphene

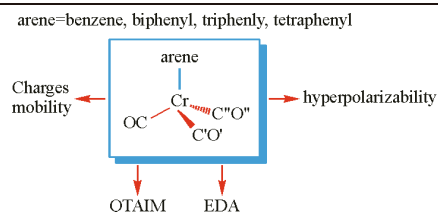


1842

Ardestani E., Ghiasi R., Tabatabai J.M.

Theoretical study of arene ligand effect on the structure and properties of $\text{Cr}(\text{CO})_3(\text{arene})$ complexes (arene=benzene, biphenyl, triphenyl, tetraphenyl)

Keywords: arene complex, substituent effect, energy decomposition analysis (EDA), hyperpolarizability



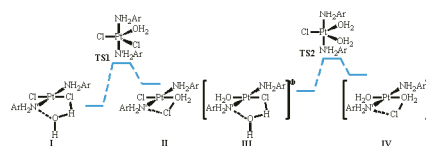
1849

Sadeghi N., Ghiasi R., Jamehbozorgi S.

A computational approach for hydrolysis of the third-generation anticancer drug:

trans-platinum(II) complex of 3-aminoflavone

Keywords: transplatin, anticancer drug, solvent effect, hydrolysis, thermodynamics and kinetics

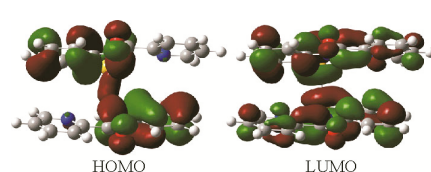


1856

Yıldırım S.Ö., Büyükmumcu Z., DoğanŞ.D., Butcher R.J.

Redetermination and density functional studies of N,N'-(disulfanediyldibenzene-2,1-diyl)dipyridine-2-carboxamide

Keywords: structural analysis, acyl azide, density functional theory, NBO analysis

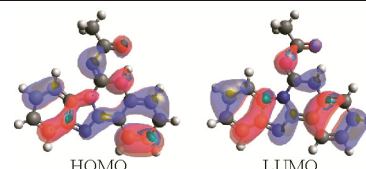


1861

Odame F., Hosten E.C.

Synthesis, characterization and computational studies of triazatetracyclo acetamide

Keywords: triazatetracyclic, acetyl chloride, frontier orbital, HOMO–LUMO

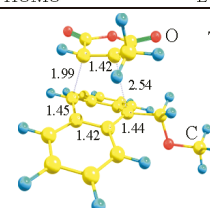


1868

Bazian A., Beyramabadi S.A., Davoodnia A., Bozorgmehr M.R., Pordel M.

A theoretical investigation on the regioselectivity of the Diels–Alder cycloaddition of 9-(methoxymethyl)-anthracene and citraconic anhydride

Keywords: DFT, Diels–Alder, cycloaddition, regioselectivity, anthracene



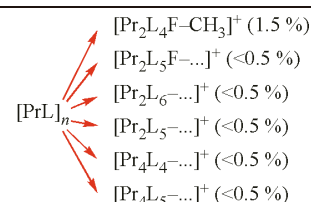
1874

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Костюк Н.Н., Дик Т.А.

Масс-спектрометрическое исследование надмолекулярного строения *трис*-пивалоилтрифторацетоната празеодима

Ключевые слова: празеодим, масс-спектр, пивалоилтрифторацетон, хелат, олигомеризация

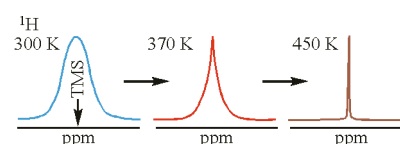


1881

Кавун В.Я., Антохина Т.Ф., Савченко Н.Н., Полянцев М.М., Бровкина О.В.

Синтез, ионная подвижность и фазовый переход в соединении $(\text{NH}_4)_6\text{LiHf}_2\text{Zr}_2\text{F}_{23}$

Ключевые слова: фторид $(\text{NH}_4)_6\text{LiHf}_2\text{Zr}_2\text{F}_{23}$, ионная подвижность, спектры ЯМР

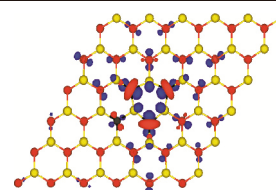


1888

Леднева А.Ю., Далматова С.А., Федоренко А.Д., Асанов И.П., Еняшин А.Н., Мазалов Л.Н., Фёдоров В.Е.

РФЭС исследование твердых растворов $\text{Mo}_{1-x}\text{Nb}_x\text{S}_2$ ($0 < x < 0.15$)

Ключевые слова: молибден, ниобий, дисульфиды, DFT, рентгенофотоэлектронные спектры

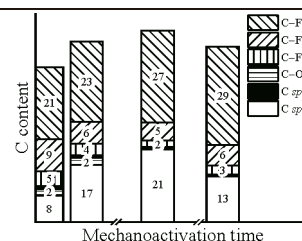


1896

Митькин В.Н., Асанов И.П., Сагидуллин А.К.

Изучение особенностей строения углерод-фторуглеродных нанокмполитов методами РФЭС и низкотемпературной адсорбции азота

Ключевые слова: сверхстехиометрический фторуглеродный материал, нанокмполиты, терморасширенный графит, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, текстура, мезопоры

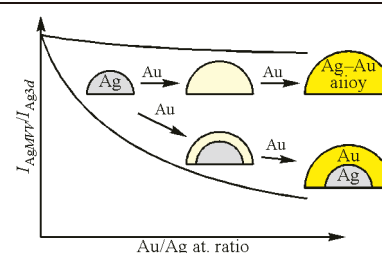


1904

Смирнов М.Ю., Калинин А.В., Бухтияров В.И.

Использование данных метода РФЭС для определения пространственного распределения металлов в биметаллических частицах, нанесенных на плоскую поверхность

Ключевые слова: серебро, золото, биметаллические частицы, структура ядро-оболочка, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия



1912

Гуда Л.В., Кравцова А.Н., Кубрин С.П., Мазурицкий М.И., Киричков М.В., Русалёв Ю.В., Шаповалов В.В., Солдатов А.В.

Особенности структуры и химического состава обыкновенного хондрита Jiddat Al Harasis 055

Ключевые слова: спектроскопия XANES, мессбауэровская спектроскопия, элементное картирование, зарядовое состояние, рентгеновская дифракция, обыкновенные хондриты, Jiddat Al Harasis 055

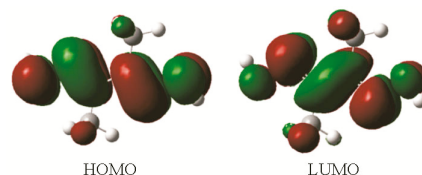


1921

Kichou N., Guechtouli N., Zaater S., Meghezzi H., Hank Z.

DFT calculations and spectroscopic studies of some Ni-dimethylglyoxime based complexes isolated by hydrothermal process

Keywords: nickel, dimethylglyoxime, hydrothermal process, metal complexes, DFT



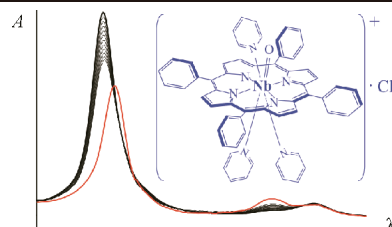
1929

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Моторина Е.В., Можжухина Е.Г., Ломова Т.Н.

Химическая структура пиридиновых комплексов оксо(5,10,15,20-тетрафенил21Н,23Н-порфинато)хлороний(V) по данным термодинамики/кинетики образования и спектроскопии

Ключевые слова: ниобий(V)порфирин, пиридин, обратимая координация, спектроскопия, химическая структура



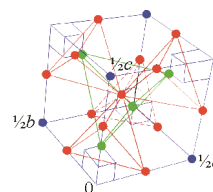
1942

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

Вариации атомных конфигураций в стабильных высокосимметричных (кубических) структурах

Ключевые слова: кристаллографический анализ, стабильность – симметрия, шпинель, (Fe,Ni)₈AgS₈, KТb₃F₁₀, (Ba,Pb)₆(Cu,Fe,Ni)₂₅S₂₇, кристаллодинамика (orderdynamics)

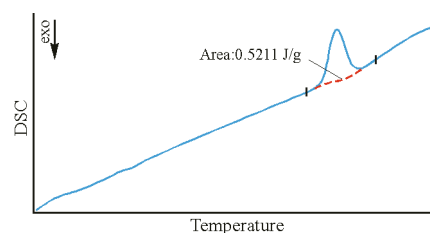


1953

Храненко С.П., Сухих А.С., Пищур Д.П., Бунеева П.С., Комаров В.Ю., Громилов С.А.

[NiEn₃]WO₄. кристаллоструктурные особенности фазового перехода при 269 К

Ключевые слова: биметаллическая комплексная соль, трис-этилендиаминникель, вольфрамат-анион, дифференциально-сканирующая калориметрия, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия

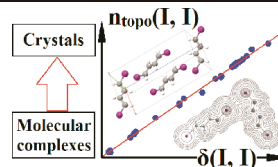


1960

Мухитдинова С.Э., Барташевич Е.В., Цирельсон В.Г.

Индексы порядков связей иода: от молекулярных комплексов к кристаллам

Ключевые слова: иод, индексы порядков связи, индексы делокализации электронов, галогенные связи

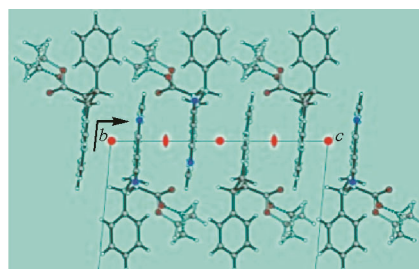


1966

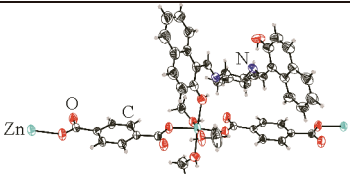
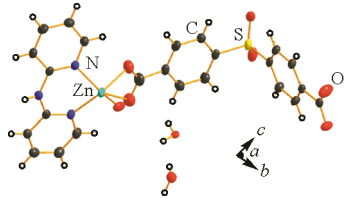
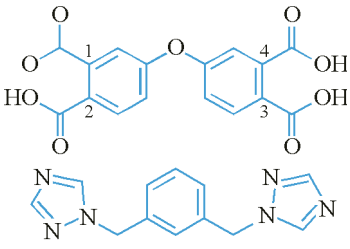
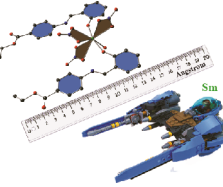
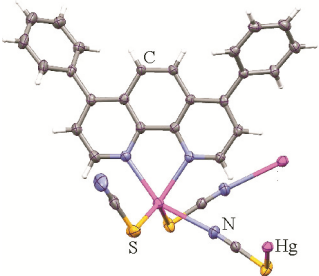
Исмиев А.И., Потехин К.А., Малеев А.В., Аскеров Р.К., Магеррамов А.М.

Синтез, молекулярная и кристаллическая структура этил 4,6(R,S)-дифенил-2-дицианометиленциклогекс-3-ен-1(R,S)-карбоксилата

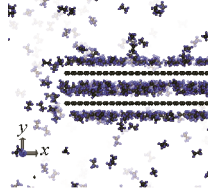
Ключевые слова: мультикомпонентная конденсация, ацетоуксусный эфир, бензальацетофенон, 1,3-дикарбонильные соединения, малонодинитрил, молекулярные агломераты, атом-атомные потенциалы



1975

Wang D.-W., Yang B., Zhao N., Shi Z.-J., Wang Y., Yang S.-L. Crystal structure of a new Zn(II) coordination polymer based on a chiral salen Schiff base Keywords: crystal structure, chiral Schiff base, Zn(II) complex, coordination polymer		1982
Yuan C., Liu S.N., Xu X.J. Crystal structure and luminescence of a novel binuclear zinc(II) complex with di-2-pyridylamine and 4,4'-sulfonyldibenzoate Keywords: Zn(II) complex, di-2-pyridylamine, 4,4'-sulfonyldibenzoic acid, crystal structure, luminescence		1986
Yuan C., Liu S.N., Xu X.J. Synthesis, crystal structure and fluorescent property of a one-dimensional coordination polymer constructed by 1,3-bis(1,2,4-triazol-1-ylmethyl)-benzene and 4,4'-oxydiphthalic acid Keywords: Cd(II) complex, 4,4'-oxydiphthalic acid, 1,3-bis(1,2,4-triazol-1-ylmethyl)benzene, crystal structure, fluorescent property		1992
Abu-Yamin A.A., AlDamen M.A., Sinnokrot M.O., Juwhari H.K., Salman M., Sarairah I., Al-hawarin J., Mubarak M.S. Synthesis, characterization, crystal structure and fluorescence of a new samarium Schiff base complex Keywords: samarium, Schiff base, fluorescence, crystal structure, Sparkle/PM7		1998
Amani V., Alizadeh R., Khosrojerdy A. Mercury(II) mixed-ligand coordination polymer constructed from 4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline and thiocyanate ligands: Crystal structure studies, spectroscopic characterization and thermal analyses Keywords: crystal structure, mercury(II) complex, 4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline, thermal gravimetric analysis, differential thermal analysis, luminescence spectroscopy		2006

**МАТЕРИАЛЫ XVIII СИМПОЗИУМА
ПО МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОМУ ВЗАИМОДЕЙСТВИЮ
И КОНФОРМАЦИЯМ МОЛЕКУЛ
Ярославль, 20-24 июня 2016 г.**

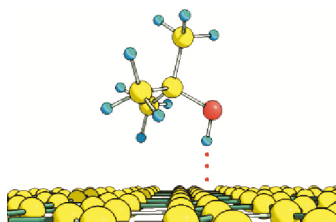
Толмачев А.М., Анучин К.М., Фоменков П.Е., Гумеров М.Р. Исследование равновесия адсорбции и плотности адсорбатов методом молекулярной динамики Ключевые слова: адсорбция, изотермы адсорбции, численный эксперимент, молекулярная динамика, щелевидные микropopы, углеродные адсорбенты		2013
Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Каплунов И.А. Сравнение стандартных функционалов расчета свойств молекул на вариационном пределе Ключевые слова: слэтеровский базис, электронная энергия, энтальпия образования, энтальпия разрыва связи, погрешности обменно-корреляционных потенциалов, вариационный предел	$\Delta E_{elec} \rightarrow 0$ method/ basis set = $\Delta \Delta_f H_{298}^0 \rightarrow 0$ B1LYP, B1PW91, B3LYP, BHandH, BHandHLYP, BLYP, BP, CAMYB3LYP, HTBS, KMLYP, LCY-BLYP, LCY-BP86, LCY-PBE, LDA, M06, M06-2X, M06-HF, M06L, mPBE, mPW, MPW1K, MPW1PW, O3LYP, OLYP, OPBE, OPBE0, PBE, PBE0, PBEsol, PW91, revPBE, revTPSS, RPBE, TPSS, TPSSH, X3LYP, HF	2021

Терентьев А.В., Варфоломеева В.В.

2028

Водородная связь $\text{OH}\cdots\pi_{\text{ГТС}}$ при адсорбции изобутанола, *трет*-бутанола и *трет*-амилового спирта на графитированной термической саже

Ключевые слова: водородные связи, константа Генри, молекулярно-статистический расчет, графитированная термическая сажа, теория функционала плотности (DFT)

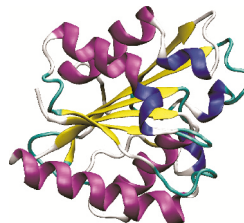


Кондратьев М.С., Кабанов А.В., Самченко А.А.,
Комаров В.М., Хечинашвили Н.Н.

2035

Параллельные вычисления в разработке термостабильных мутантов липаз

Ключевые слова: липаза, LipA, CLE, термостабильность, молекулярная динамика, биоинженерия, точечные мутации, ферменты



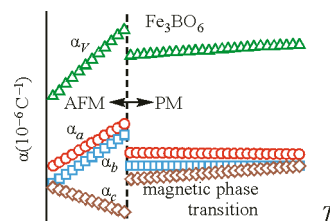
**ШКОЛА ДЛЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ
"ТЕРМОРЕНТГЕНОГРАФИЯ И РЕНТГЕНОГРАФИЯ
НАНОМАТЕРИАЛОВ-3"
Екатеринбург, 3-6 апреля 2018 г.**

Бирюков Я.П., Филатов С.К., Вагизов Ф.Г., Зинатуллин А.Л.,
Бубнова Р.С.

2041

Термическое расширение антиферромагнетиков FeVO_3 и Fe_3VO_6 вблизи температуры Нееля

Ключевые слова: бораты железа, антиферромагнетики, терморентгенография, мёсбауэровская спектроскопия, термическое расширение

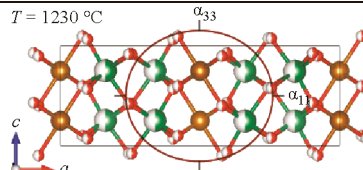


Гуляева Р.И., Петрова С.А., Чумарев В.М.

2049

Высокотемпературные исследования термического расширения FeNb_2O_6

Ключевые слова: ниобат железа, рентгеноструктурный анализ, термическое расширение, анизотропия

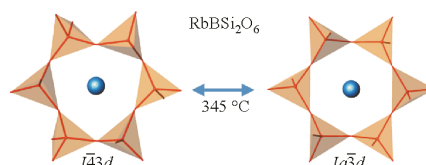


Кржижановская М.Г., Бубнова Р.С., Филатов С.К.

2055

Полиморфизм RbBSi_2O_6 и кристаллическая структура его высокотемпературной модификации по данным порошковой дифрактометрии

Ключевые слова: боросиликаты, порошковая дифрактометрия, термическое поведение, полиморфизм

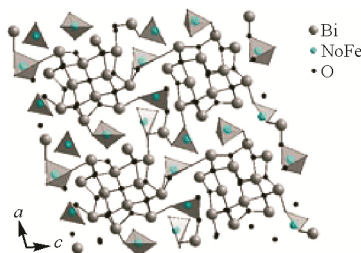


Михайловская З.А., Петрова С.А., Буянова Е.С., Абрахамс А.

2061

Высокотемпературные исследования структуры сложных оксидов на основе $\text{Bi}_{26}\text{Mo}_{10}\text{O}_{69-d}$

Ключевые слова: молибдаты висмута, оксид висмута, кислородно-ионные проводники, высокотемпературная рентгеновская дифракция, высокотемпературная нейтронная дифракция, bismuth molybdate, bismuth oxide, oxygen ion conductors, HTXRPD, HTNPD

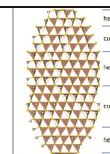


Евтушок Б.Ю., Черепанова С.В., Козлова Е.А.

2071

Структура и морфология наночастиц CdS

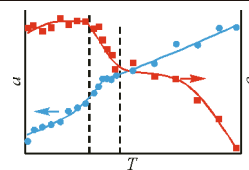
Ключевые слова: дефекты упаковки, форма частиц, моделирование, формула Дебая, DISCUS



Фёдорова О.М., Ведмидь Л.Б.

Структурные изменения феррита иттербия YbFe_2O_4 в интервале температур от -150 до $300\text{ }^\circ\text{C}$

Ключевые слова: феррит железа, рентгеноструктурный анализ, коэффициенты термического расширения

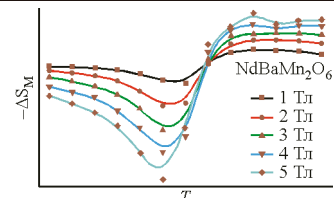


2079

Стерхов Е.В., Упоров С.А.

Трансформация магнитных переходов и кристаллической структуры $\text{NdBaMn}_2\text{O}_6$ при диамагнитном разбавлении ионами Ti^{4+} по Mn-подрешетке

Ключевые слова: двойные манганиты, упорядочение, магнитокалорический эффект, магнитные фазовые переходы



2083

Указатель статей. Том 59..... 2090

Авторский указатель. Том 59..... 2103

Содержание следующего номера — в конце журнала