

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 57

Ноябрь-декабрь

№ 8, 2016

СОДЕРЖАНИЕ

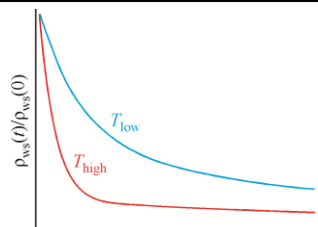
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Морозов В.А.

1585

Кинетика релаксации фотовозбужденных состояний в цепочке обменных кластеров в приближении среднего поля

Ключевые слова: обменный кластер, спин-кроссовер, светоиндуцированные ян-теллеровские переходы, кинетика структурной релаксации

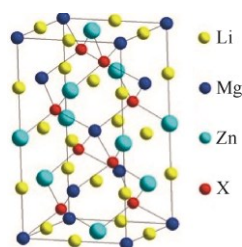


Басалаев Ю.М., Стародубцева М.В.

1591

Моделирование кристаллов полухейслеровского типа со структурой халькопирита: $\text{Li}_2\text{MgZnX}_2$ ($X = \text{N, P, As, Sb}$)

Ключевые слова: халькопирит, полухейслеровское соединение, зонная структура, электронная плотность, деформационная плотность, химическая связь

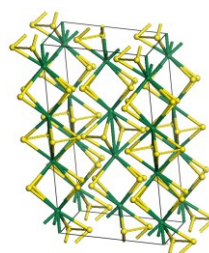


Козлова М.Н., Еняшин А.Н., Фёдоров В.Е.

1597

Квантово-химическое исследование пайерлсовского состояния квазиодномерных сульфидов ванадия и ниобия

Ключевые слова: сульфид ванадия, сульфид ниобия, хлорид ниобия, электронная структура, метод функционала электронной плотности

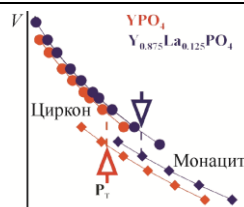


Шеин И.Р., Шалаева Е.В.

1606

Барический фазовый переход циркон–монацит в $\text{Y}_{1-x}\text{La}_x\text{PO}_4$: расчеты из первых принципов

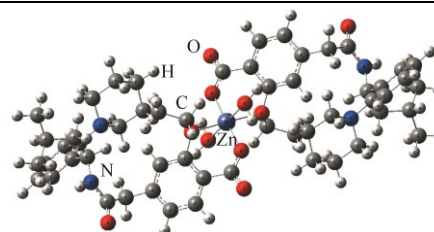
Ключевые слова: ортофосфаты LaPO_4 - YPO_4 , *ab initio* расчеты, барические превращения, фазовая стабильность



Sadaoui-Kacel S., Zaater S., Bensouilah N., Djebbar S.

Novel repaglinide complexes with manganese(II), iron(III), copper(II) and zinc(II): Spectroscopic, DFT characterization and electrochemical behavior

Keywords: metal complexes, repaglinide ligand, synthesis, DFT, electrochemical behaviour

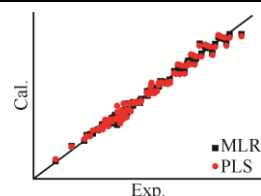


1613

Liao L.-M., Li J.-F., Lei G.-D.

Structural characterization and prediction of Kovats retention indices (RI) for alkylbenzene compounds

Keywords: alkylbenzene, retention index, structural descriptors, QSRR

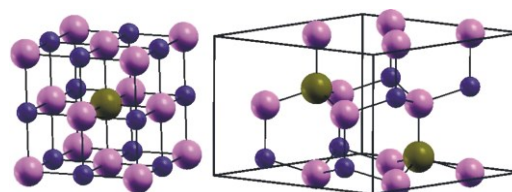


1625

Банников В.В., Кудякова В.С., Елагин А.А., Баранов М.В., Бекетов А.Р.

Электронное строение и магнитные свойства гексагональной и кубической модификаций нитрида алюминия, активированного примесями *sp*-элементов (В, С, О)

Ключевые слова: нитрид алюминия, электронная плотность, химическая связь, *ab initio* моделирование



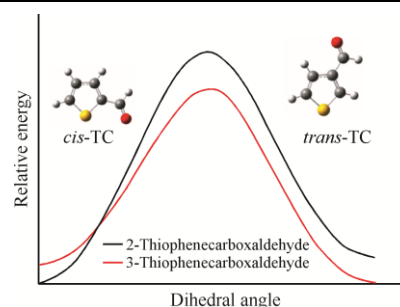
1633

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Umar Y., Tijani J., Abdalla S.

Density functional theory studies of conformational stabilities and rotational barriers of 2- and 3-thiophenecarboxaldehydes

Keywords: density functional method, rotational barrier, vibrational wavenumber, solvent effect, thiophenecarboxaldehyde, conformational preference, infrared spectra, geometry optimization, polarizable continuum model, potential energy distribution (PED)

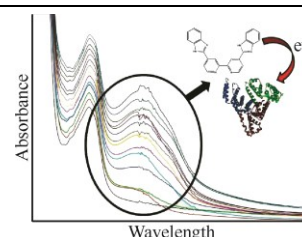


1640

Swarnalatha K., Rathnamala P., Babu A.A., Bhuvanesh N.

Structural characterization, photophysical and BSA binding interaction studies of 4,4'-bis(benzimidazolyl)-2,2'-bipyridine

Keywords: 4,4'-bis(benzimidazolyl)-2,2'-bipyridine, crystal structure, energy transfer, BSA binding



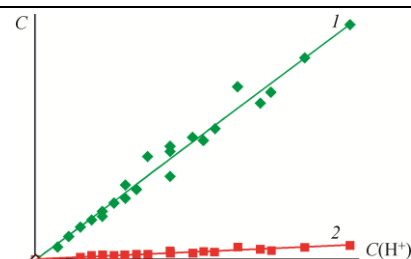
1649

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Подлипская Т.Ю., Булавченко А.И.

Структура и локализация гидратированного протона в обратных мицеллах TRITON N-42 при инъекционной солюбилизации растворов HCl

Ключевые слова: обратные мицеллы, оксиэтилированные ПАВ, солюбилизация, ИК-Фурье спектроскопия, ассоциаты гидратированного протона

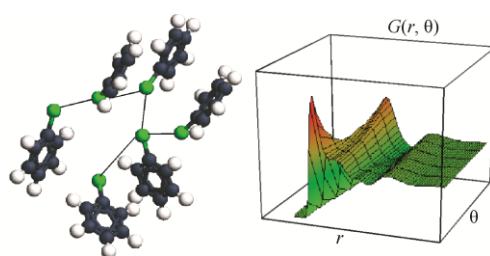


1655

Алексеев Е.С., Богдан Т.В.

Галоген-агрегация в растворах хлорбензол–*o*-дихлорбензол

Ключевые слова: растворы хлорбензол–*o*-дихлорбензол, молекулярно-динамическое моделирование, локальная структура, галоген-агрегация, функция радиально-углового распределения, функция радиального распределения, коэффициенты самодиффузии, локальные дипольные моменты

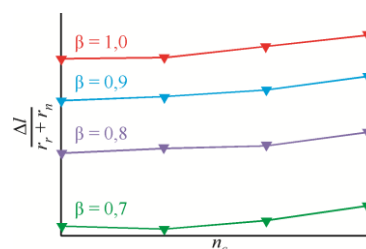


1662

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. I. Структурные характеристики

Ключевые слова: ионные сферические мицеллы, структура поверхности, двойной электрический слой, числа агрегации



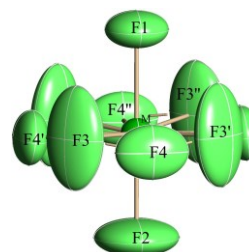
1671

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Удовенко А.А., Давидович Р.Л., Логвинова В.Б., Ткачёв В.В.

Кристаллическая структура гексафторидониобата(V) и гексафторидотантала(V) тетраметиламмония

Ключевые слова: ниобий(V), тантал(V), фтор, тетраметиламмоний, кристаллическая структура

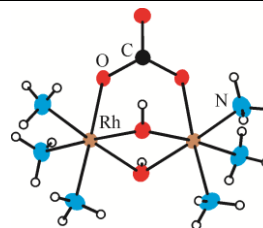


1679

Воробьёва С.Н., Байдина И.А., Корольков И.В.

Исследование кристаллической структуры димерного комплекса родия(III) [(NH₃)₆Rh₂(μ-CO₃)(μ-OH)₂](NO₃)₂·H₂O

Ключевые слова: синтез, родий, триаммины, димерные комплексы, координационные соединения, кристаллическая структура

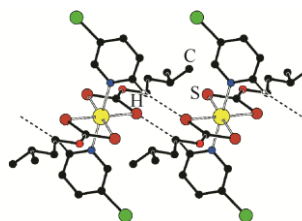


1683

Neerupama, Kour G., Sachar R., Kant R.

Characterization of the adducts of bis(O-isoamyldithiocarbonato) nickel(II) with heterocyclic amines and X-ray structure of bis(O-isoamyldithiocarbonato)-bis(3-bromopyridine)nickel(II)

Keywords: synthesis, dithiocarbonates, crystal structure, direct methods, interactions, octahedral

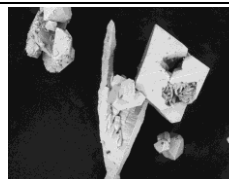


1688

Наумов Д.Ю., Храненко С.П., Куратьева Н.В., Панченко А.В., Громилов С.А.

Новые данные о строении α-транс-[Pd(NH₃)₂Cl₂]

Ключевые слова: палладий, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия, неупорядоченная структура

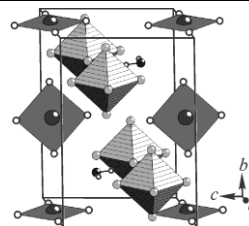


1695

Губанов А.И., Даниленко А.М., Смоленцев А.И.,
Куратьева Н.В., Венедиктов А.Б., Коренев С.В.

**Структурное исследование солей,
содержащих ионы $[Pd(NH_3)_4]^{2+}$ и $[IrF_6]^{2-}$**

Ключевые слова: синтез, координационные соединения,
двойные комплексные соли, кристаллическая структура,
палладий, иридий, фторокомплексы

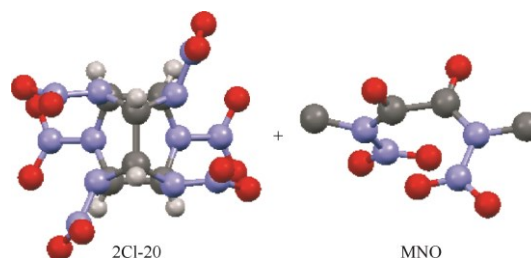


1701

Алиев З.Г., Гончаров Т.К., Алдошин С.М.,
Дашко Д.В., Росляков А.Г., Шишов Н.И.,
Милехин Ю.М.

**Структура и свойства бимолекулярного
кристалла (2CL-20 + MNO)**

Ключевые слова: CL-20, 2,4,6,8,10,12-гексанитро-
2,4,6,8,10,12-гексаазаизовюрцитан,
полициклический нитроамин, N^1-N^2 -диметил- N^1-N^2 -
динитрооксамид, рентгеноструктурный анализ,
кристаллическая и молекулярная структура,
энергетические бимолекулярные кристаллы,
термостабильность

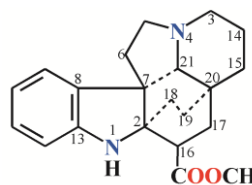


1708

Адизов Ш.М., Ташходжаев Б., Кунафиев Р.Ж.,
Мирзаева М.М., Upadhyay P.P., Юлдашев П.Х.

**Кристаллическая структура индолиновых
алкалоидов копсинилама, копсинина и его солей**

Ключевые слова: индолиновые алкалоиды, копсинилам,
копсинин, галоидные солевые формы, PCA



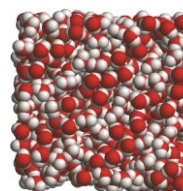
1715

ОБЗОРЫ

Теплухин А.В.

**Короткодействующие потенциальные функции
в компьютерном моделировании воды
и водных растворов**

Ключевые слова: вода, Монте-Карло, метод Эвальда,
параллельные вычисления



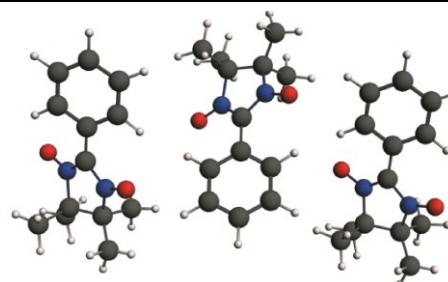
1723

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Федоренко А.Д., Мазалов Л.Н., Калинин А.В.

**Применение метода РФЭС для изучения
электронного строения диамагнитной молекулы
n-нитроанилина и нитроксильного радикала
4,4,5,5-тетраметил-2-фенил-4,5-дигидро-1*H*-
имидазол-3-оксид-1-оксида**

Ключевые слова: *n*-нитроанилин,
нитроксильный радикал, рентгеновская фотоэлектронная
спектроскопия (РФЭС), сателлитная структура, TD-DFT

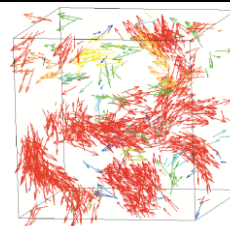


1753

Аникеенко А.В., Маленков Г.Г., Наберухин Ю.И.

**Визуализация вихреподобных коллективных
движений в компьютерной модели жидкого
аргона**

Ключевые слова: жидкости, вода, жидкий аргон,
молекулярная динамика, коллективные эффекты,
вихревые движения

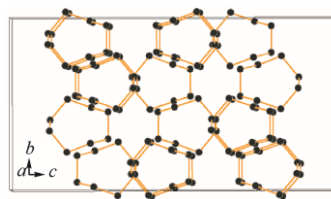


1758

Громилов С.А., Пирязев Д.А., Егоров Н.Б.,
Акимов Д.В.

**Рентгеноструктурное исследование α - ^{34}S
в интервале 100–363 К**

Ключевые слова: сера, изотоп,
рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия

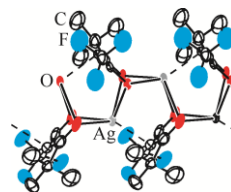


1761

Федосеев И.С., Викулова Е.С., Ильин И.Ю.,
Смоленцев А.И., Галлямов М.Р., Морозова Н.Б.

**Кристаллическая структура (1,1,1-трифторо-5,5-
диметилгексан-2,4-дионато)серебра(I)**

Ключевые слова: серебро(I), β -дикетонаты,
рентгеноструктурный анализ, термогравиметрия

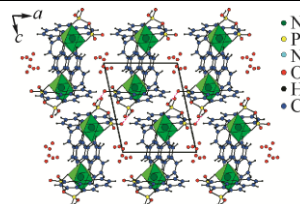


1765

Cherni S., Zid F., Driss A.

**Crystal structure of a [(dihydrogen pyrophosphato-
 $\text{K}^2\text{O}, \text{O}')$ bis(1,10-phenanthroline- N, N')nickel(II)]2.5-
hydrate $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{P}_2\text{O}_7)(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_2] \cdot 2.5\text{H}_2\text{O}$**

Keywords: nickel pyrophosphate, hydrothermal synthesis,
X-ray diffraction, $\pi \cdots \pi$ stacking interactions, hydrogen bonds



1769

Shamaei S., Heidari A., Amani V.

**Characterization, luminescent properties,
and crystal structure determination
of $[\text{Pt}(\text{Ph}_2\text{bipy})\text{Cl}_2]$**

Keywords: synthesis, crystal structure, platinum(II) complex,
4,4'-diphenyl-2,2'-bipyridine, luminescent properties

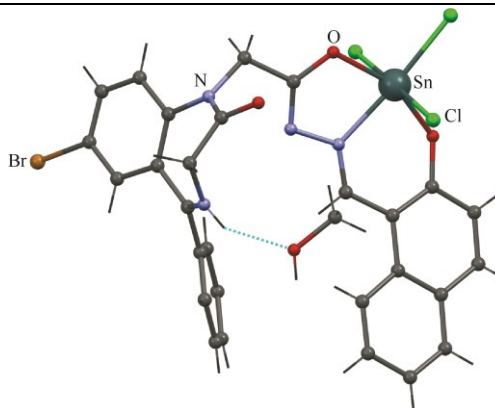


1773

Яловский Г.В., Сейфуллина И.И., Павловский В.И.,
Андронати С.А., Кравцов В.Х.

**Молекулярная структура и свойства
комплекса олова(IV) с 1-[(2-гидрокси-1-нафтил)
метил-гидразино]карбонилметил-7-бром-
5-фенил-1,2-дигидро-3H-1,4-бенздиазепин-
2-оном**

Ключевые слова: синтез, тетрахлорид олова,
1-гидразинокрбонилметил-7-бром-5-фенил-
1,2-дигидро-3H-1,4-бенздиазепин-2-он, гиазепам,
2-гидрокси-1-нафталальдегид, гидразоны,
координационные соединения, темплатный синтез,
молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ

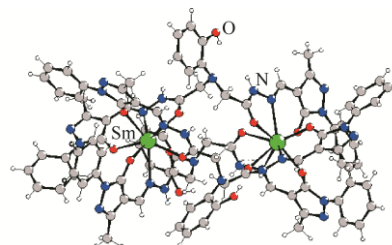


1778

Шульгин В.Ф., Бекирова З.З., Александров Г.Г.,
Ерёменко И.Л.

**Координационное соединение самария(III)
с ацилдигидразоном
N-(2-гидроксифенил)иминодиуксусной кислоты
и 5-гидрокси-3-метил-1-фенил-4-формилпиразола**

Ключевые слова: 4-формилпиразолон-5,
ацилдигидразон, самарий(III), тройной геликат,
рентгеноструктурный анализ

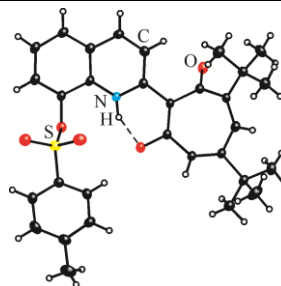


1782

Ткачёв В.В., Шилов Г.В., Алдошин С.М.

**Строение новой 8-гидроксихиолиновой
лигандной системы с 1,3-трополоновым
фрагментом**

Ключевые слова: 8-гидроксихиолин, 1,3-трополоны,
рентгеноструктурный анализ,
перспективы комплексообразования,
перспективно новая полидентатная система
с расширенными координационными возможностями

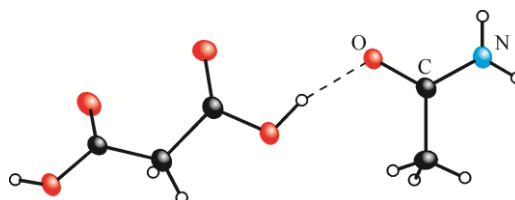


1786

Цыпленкова А.Ю., Кольцова О.В., Лобанов Н.Н.,
Ершов М.А., Пыльчикова Ю.Ю.

**Кристаллическая и молекулярная структура
двойного соединения малоновой кислоты
с ацетамидом**

Ключевые слова: малоновая кислота, ацетамид,
молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ



1789

КОНФЕРЕНЦИИ, СИМПОЗИУМЫ, НАУЧНЫЕ ШКОЛЫ

**ХIII МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«СПЕКТРОСКОПИЯ КООРДИНАЦИОННЫХ
СОЕДИНЕНИЙ»**

Туапсе, 11.09—17.09.2016



1792

**XXII ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«РЕНТГЕНОВСКИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ
СПЕКТРЫ И ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ»**

Владивосток, 20.09—23.09.2016



1794

Указатель статей. Том 56	1796
Авторский указатель. Том 56	1806

Содержание следующего номера — в конце журнала