

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 59

Сентябрь-октябрь

№ 7, 2018

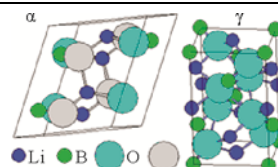
СО Д Е Р Ж А Н И Е

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Басалаев Ю.М., Болдырева Е.С., Дугинова Е.Б.

**Первопринципное исследование
электронной структуры метабората лития**

Ключевые слова: метаборат лития, LiBO_2 ,
электронное строение, химическая связь

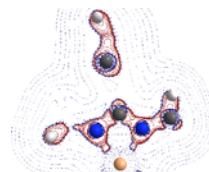


1563

Алексеев Н.В.

**Квантово-химическое исследование
связей германий-заместитель
в комплексных соединениях германия**

Ключевые слова: квантовая химия, метод AIM

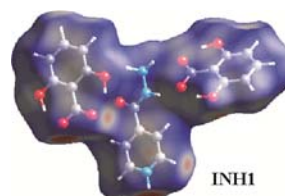


1569

Kamalakaran A.S.

**Molecular adducts of isoniazid:
Crystal structures, electronic properties,
and hirshfeld surface analysis**

Keywords: isoniazid, cocrystals, molecular salts,
X-ray diffraction studies, hirshfeld analysis

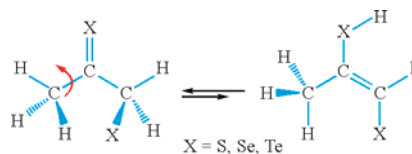


1580

Elambalassery J.G., Sreedevi S.

**Qualitative and quantitative study on internal rotation
during tautomerization of thione, selenone and tellurone**

Keywords: tautomerization, thione, enethiol, internal rotation,
selenone, tellurone

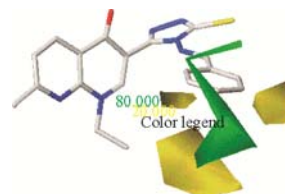


1596

Ghaleb A., Aouidate A., Sbai A., Bouachrine M.,
Lakhlifi T.

**3D QSAR modeling and molecular docking studies
on a series of triazole analogues as antibacterial agents**

Keywords: 3D QSAR, CoMFA, CoMSIA, molecular docking,
antibacterial, triazole

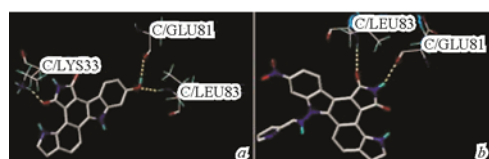


1606

Tong J., Jiang G., Li L., Li Y.

Molecular docking and 3D QSAR research of indolocarbazole series as cyclin-dependent kinase inhibitors

Keywords: Topomer CoMFA, Topomer search, molecular docking, CDKs

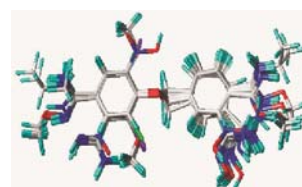


1616

Tong J., Wu Y., Bai M.

3D QSAR studies on benzyl phenyl ether diamidine derivatives with antiprotozoal activities

Keywords: benzyl phenyl ether derivatives, human African trypanosomiasis, trypanosoma brucei rhodesiense, 3D QSAR



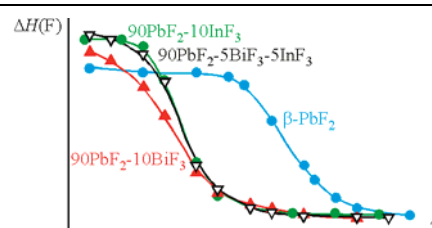
1624

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Кавун В.Я., Меркулов Е.Б., Слободюк А.Б., Полянцев М.М., Бровкина О.В.

Ионная подвижность в твердых растворах с флюоритовой структурой $Pb_{0.9}M_{0.1}F_{2.1}$ ($M = Bi, In$) и $Pb_{0.9}Bi_{0.05}In_{0.05}F_{2.1}$ по данным ЯМР

Ключевые слова: твердые растворы, ионная подвижность, РФА, спектры ЯМР ^{19}F

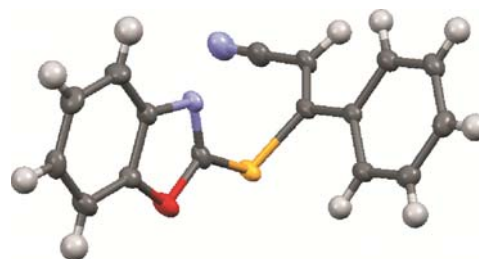


1632

Афонин А.В., Ващенко А.В., Никитина Л.П., Малькина А.Г.

Изучение молекулярной и кристаллической структуры (Z)-3-(бензоксазол-2-илтио)-3-фенил-2-пропенонитрила методом РСА и его E/Z изомеризации в растворе по данным спектроскопии ЯМР 1H

Ключевые слова: (Z)-3-(бензоксазол-2-илтио)-3-фенил-2-пропенонитрил, рентгеноструктурный анализ, спектроскопия ЯМР 1H , E/Z изомеризация

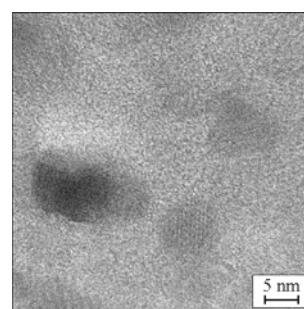


1640

Файнер Н.И., Пушкарев Р.В., Эренбург С.Б., Трубина С.В., Шестаков В.А., Меренков И.С., Tegauchi M.

Физико-химические свойства и строение пленок $SiC_xN_y:Fe$, выращенных из газовой смеси ферроцена, водорода и 1,1,3,3,5,5-гексаметилциклотрисилазана

Ключевые слова: нанокompозитные пленки, термодинамическое моделирование, метод CVD, 1,1,3,3,5,5-гексаметилциклотрисилазан, ферроцен, спектроскопия КРС, ВРПЭМ, EXAFS

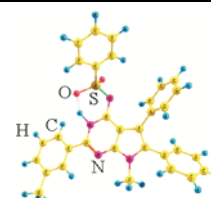


1648

Ettehadi Z., Davoodnia A., Khashi M., Ali Beyramabadi S.

Tautomerism in the sulfonamide moiety: Synthesis, experimental and theoretical characterizations

Keywords: pyrrolo[2,3-d]pyrimidine, DMAP, DFT, tautomerism, intramolecular proton transfer

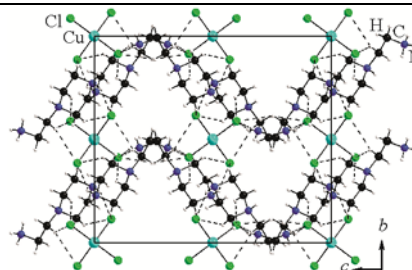


1656

Maroua El Glaoui, Maher El Glaoui, Jelsch C., Ben Nasr C.

Hirshfeld surface analysis, crystal structure and spectroscopic studies of a new Cu(II) halocuprate salt with protonated N-amino-ethyl-piperazine

Keywords: organic-inorganic hybrid material, Cu(II) complex, X-ray diffraction, coordination compound, Hirshfeld surface, infrared and ultraviolet-visible (UV-vis) spectroscopy

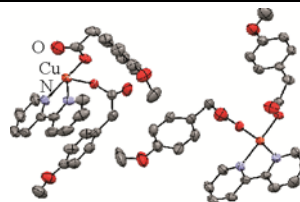


1669

Iqbal M., Ali S., Tahir M.N.

Asymmetric oxygen bridged copper(II) carboxylate: Synthesis, complete characterization and crystal structure

Keywords: bridged copper(II) complex, characterization, structural description



1678

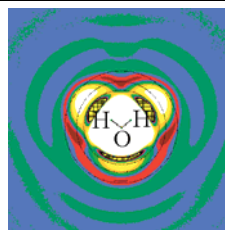
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Теплухин А.В.

Изучение закономерностей ближнего упорядочения водных молекул методом Монте-Карло.

II. Пространственные корреляции и водородные связи

Ключевые слова: вода, Монте-Карло, структура, моделирование, функции распределения



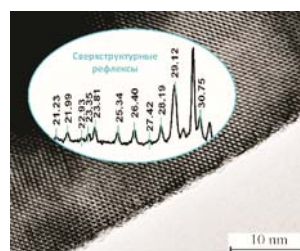
1682

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Венедиктова О.С., Булавченко О.А., Афонасенко Т.Н., Цырульников П.Г., Герасимов Е.Ю., Цыбуля С.В.

Фазовые превращения в системе Mn—Ga—O в зависимости от условий приготовления

Ключевые слова: фазовые превращения, марганецсодержащие двойные оксиды, марганец-галлиевая шпинель, порошковая рентгеновская дифракция

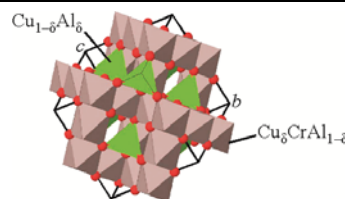


1689

Плясова Л.М., Довлитова Л.С., Сименцова И.И., Молина И.Ю., Штерцер Н.В., Минюкова Т.П.

Влияние условий синтеза на формирование структуры шпинели CuCrAlO₄

Ключевые слова: шпинель CuCrAlO₄, условия синтеза, структурные характеристики

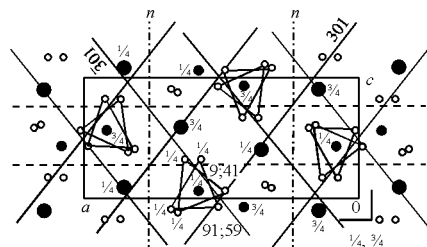


1697

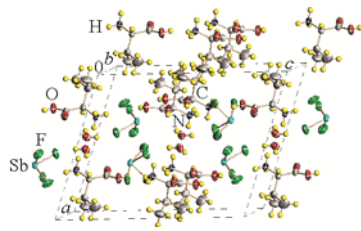
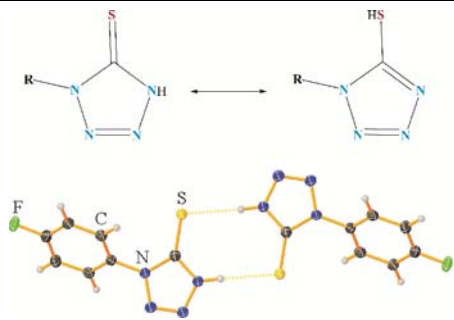
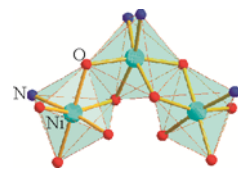
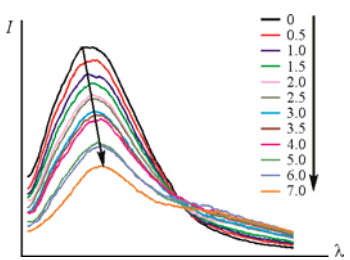
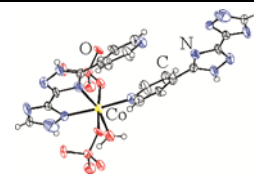
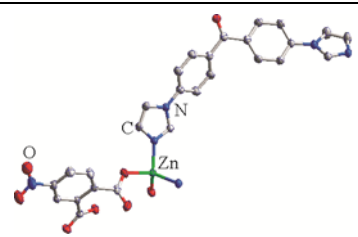
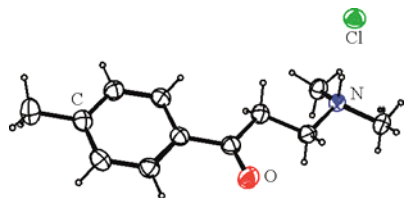
Борисов С.В., Первухина Н.В., Магарилл С.А.

Структурообразующая роль тяжелых катионов в боросиликатах Sr₃B₂SiO₈ (Sr(B,Si)O_{2.67}) и Ba₃B₆Si₂O₁₆

Ключевые слова: кристаллографический анализ, катионные подрешетки, боросиликаты, стабильность структуры, псевдосимметрия, кристаллографическая стехиометрия



1706

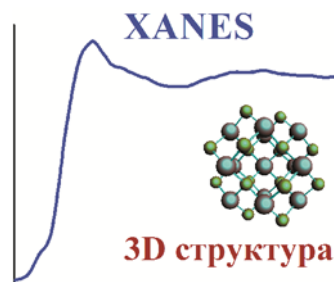
<p>Удовенко А.А., Макаренко Н.В., Ковалева Е.В., Земнухова Л.А.</p> <p>Кристаллическая структура моногидрата тетрафтороантимоната(III) <i>DL</i>-валиния</p> <p>Ключевые слова: кристаллическая структура, комплексное соединение, тетрафтороантимонат(III), <i>DL</i>-валин</p>		1712
<p>Аскеров Р.К., Магеррамов А.М., Османов В.К., Баранов Е.В., Борисова Г.Н., Дороватовский П.В., Хрусталева В.Н., Борисов А.В.</p> <p>Молекулярная и кристаллическая структура 1-(4-фторфенил)-1,4-дигидро-5-тетразол-5-тиона и его комплекса с кадмием(II)</p> <p>Ключевые слова: 1-(4-фторфенил)-1,4-дигидро-5-тетразол-5-тион, комплекс кадмия(II), кристаллическая структура, вторичные F...F взаимодействия, синхротронное излучение</p>		1717
<p>Zhang Y., Liu L.-Z., Gao L., Akogun S.-F., Dong W.-K.</p> <p>An unprecedented trinuclear nickel(II) complex assembled from an asymmetric Salamo-type ligand</p> <p>Keywords: asymmetric Salamo-type ligand, Ni(II) complex, synthesis, crystal structure, fluorescent property</p>		1723
<p>Wang T.-R., Zhou Q.-C., Ren J.-L., Zhu M.-J., Xie R.-M., Sheng G.-H.</p> <p>Fluorescence spectral study on the interaction between copper(II) complex with (E)-3-(2,3-dihydrobenzo[B][1,4]dioxin-6-yl) acrylic acid and urease</p> <p>Keywords: complex, urease binding quenching mechanism, K_{sv}, K_q</p>		1732
<p>Zhao D., Ma F.X., Zhang R.H.</p> <p>Syntheses and crystal structures of two coordination polymers based on a new N-donor aromatic ligand</p> <p>Keywords: hydrothermal, coordination polymer, X-ray diffraction, layer structure, hydrogen bond</p>		1736
<p>Yang X., Wang G.-F., Yang L.</p> <p>Synthesis and structural characterization of a zinc coordination polymer with bis(4-(1<i>H</i>-imidazol-1-yl)phenyl)methanone and 4-nitrophthalate</p> <p>Keywords: coordination polymer, ribbon, zinc complex, crystal structure, N-donor ligand</p>		1742
<p>Ayeni A.O., Watkins G.M., Hosten E.C.</p> <p>Molecular and crystal structure of a novel Mannich quaternary salt: 3-(dimethylamino)-1-<i>p</i>-tolylpropan-1-one hydrochloride</p> <p>Keywords: Mannich base, aminomethylation, acetophenones, NMR, single crystal X-ray diffraction analysis</p>		1746

ОБЗОР

Кравцова А.Н., Гуда Л.В., Положенцев О.Е.,
Панкин И.А., Солдатов А.В.

Диагностика 3D локальной атомной структуры наноструктурированных материалов на основе спектроскопии XANES

Ключевые слова: 3D локальная атомная структура, спектроскопия XANES, теория функционала плотности, синхротронное излучение, наноструктурированные материалы



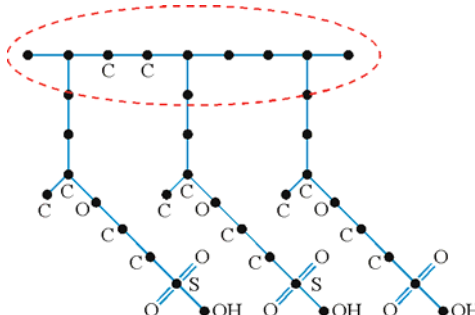
1749

СТРУКТУРА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Алексеев Н.И., Бройко А.П., Калёнов В.Е., Корляков А.В., Лагош А.В., Лифшиц А.О., Лучинин В.В., Хмельницкий И.К.

Структура электроактивного полимера, модифицированного графеном, для мембран биомиметических систем. Моделирование и эксперимент

Ключевые слова: графен, биомиметические системы, электроактивные полимеры, искусственный мускул, восстановленный оксид графена

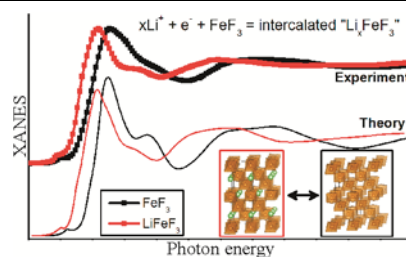


1766

Шаповалов В.В., Гуда А.А., Панкин И.А., Поль А., Солдатов А.В.

Структурные деформации в ходе циклирования конверсионного катодного нанокompозита на основе FeF₃

Ключевые слова: фториды железа, литий-ионные аккумуляторы, катодные материалы, XRD, XANES, DFT, эволюционный алгоритм

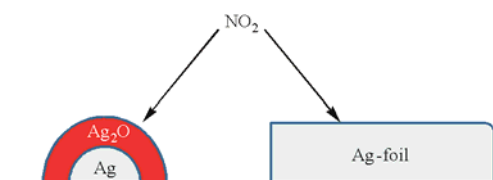


1778

Калинкин А.В., Смирнов М.Ю., Клембовский И.О., Сорокин А.М., Гладкий А.Ю., Бухтияров В.И.

Размерный эффект при окислении серебра диоксидом азота

Ключевые слова: серебро, РФЭС, CTM, NO₂, размерный эффект

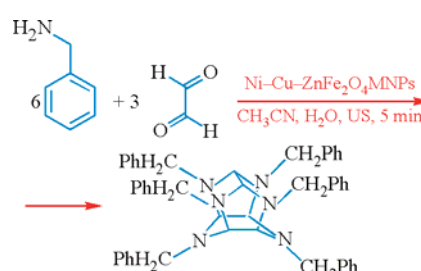


1785

Taghavi Fardood S., Ramazani A., Golfar Z., Joo S.W.

Green synthesis using tragacanth gum and characterization of Ni—Cu—Zn ferrite nanoparticles as a magnetically separable catalyst for the synthesis of hexabenzylhexaazaisowurtzitane (HBIW) under ultrasonic irradiation

Keywords: ferrite, tragacanth gum, natural gel, hexabenzylhexaazaisowurtzitane (HBIW), ultrasonic irradiation

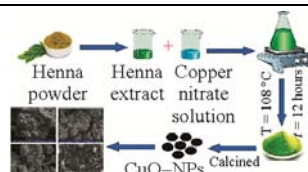


1789

Fardood S. Taghavi, Ramazani A., Asiabi P.A., Joo S.W.

A novel green synthesis of copper oxide nanoparticles using a Henna powder extract

Keywords: Henna, copper oxide nanoparticles, nanobiotechnology, green method

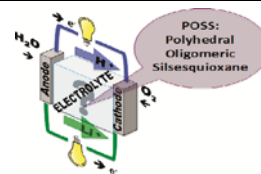


1796

Kucuk A.C.

Ion conducting behaviour of silsesquioxane-based materials used in fuel cell and rechargeable battery applications

Keywords: silsesquioxane, electrolyte, fuel cell, Li-ion battery



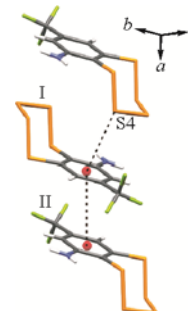
1802

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Рыбалова Т.В., Рогачев А.Д., Хоменко Т.М.,
Волчо К.П., Салахутдинов Н.Ф.

**Молекулярная и супрамолекулярная структура
8-(трифторметил)бензо[*f*][1,2,3,4,5]пентатиепин-6-
амина – представителя конденсированных
аренпентатиепинов**

Ключевые слова: 8-(трифторметил)бензо[*f*]-
[1,2,3,4,5]пентатиепин-6-амин, аренпентатиепины,
биологическая активность, рентгеноструктурный анализ,
молекулярная и супрамолекулярная структура, полиморфы



1811

**Памяти академика
Юрия Дмитриевича Цветкова**



1816

Содержание следующего номера — в конце журнала