

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 56

Сентябрь-октябрь

№ 5, 2015

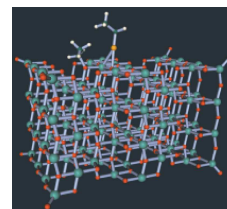
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Воронцов А.В.

**Молекулярная и диссоциативная адсорбция
молекулы диэтилсульфида на гранях (010) и (001)
наночастицы TiO_2 модификации анатаз**

Ключевые слова: полуэмпирические методы PM6 и PM7,
квантовые расчеты, замороженная поверхность, хемосорбция,
дегазация, обессеривание, фотокатализ

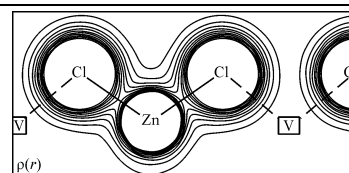


871

Басалаев Ю.М., Маринова С.А.

**Электронная структура и динамика решетки
кристалла $\alpha\text{-ZnCl}_2$**

Ключевые слова: хлорид цинка, ZnCl_2 , халькопирит,
метод подрешеток

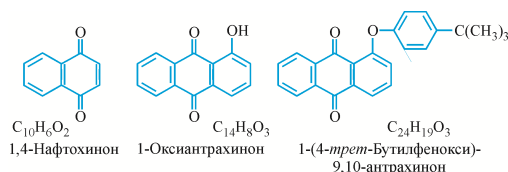


881

Доломатов М.Ю., Ковалёва Э.А.

**Новый молекулярный дескриптор модели
«структура–свойство» для оценки потенциалов
ионизации нафто- и антрахинонов**

Ключевые слова: молекулярный дескриптор,
производные хинонов, потенциалы ионизации,
интегральная сила осциллятора, топологические индексы,
QSPR

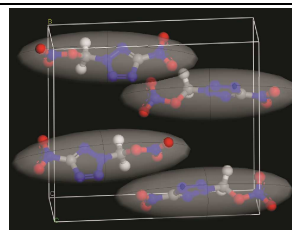


887

Gong X.-Y., Li X.-H., Zhang R.-Z.

**Theoretical investigation on nitrogen-rich energetic
compounds 5-nitro-2-nitratomethyl-1,2,3,4-tetrazole**

Keywords: density functional theory, detonation performance,
bond dissociation energy,
5-nitro-2-nitratomethyl-1,2,3,4-tetrazole,
frontier molecular orbital

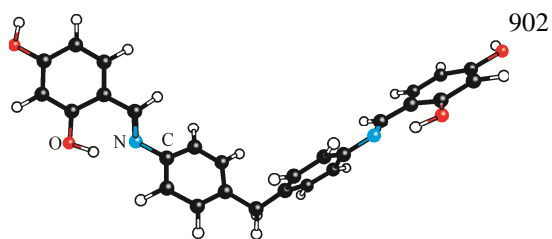


894

Eshtiagh-Hosseini H., Beyramabadi S.A., Mirzaei M., Morsali A., Naseri M.A., Chegini H., Elahi M.

Intramolecular-proton transfer, experimental and theoretical characterization of 3,3'-dihydroxy-4,4'-[4,4'-diphenylmethanebis (nitrilomethyldiene)]-bis-phenol

Keywords: Schiff base, DFT, tautomerism, assignment, proton transfer, synthesis, intramolecular hydrogen bond, AIM

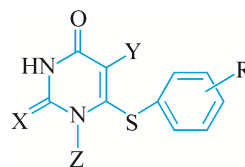


902

Tong J., Zhao X., Zhong L., Chang J.

QSAR studies of HEPT derivatives as anti-HIV drugs using RASMS method

Keywords: RASMS (random sampling analysis on molecular surface), HEPT derivatives, quantitative structure activity relationship (QSAR), multiple linear regression (MLR)



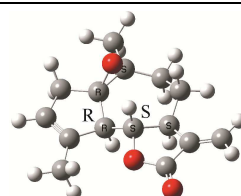
914

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Абуляисова Л.К., Адекенов С.М.

Квантово-химический анализ молекулярной структуры и колебательного спектра арглабина

Ключевые слова: арглабин, квантово-химические методы Хартри-Фока и теории функционала плотности, колебательный ИК спектр

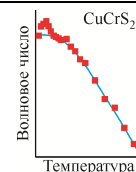


922

Селиванова А.В., Соколов В.В., Колесов Б.А.

КР-спектральное исследование кристаллов CuCrS₂ в области температур 5–300 К

Ключевые слова: КР спектроскопия, слоистые кристаллы, низкие температуры

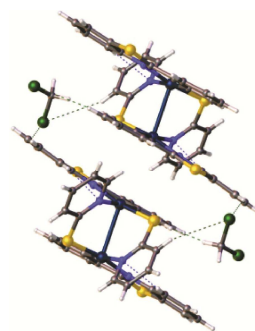


931

Катленок Е.А., Золотарев А.А., Иванов А.Ю., Смирнов С.Н., Балашев К.П.

Строение, оптические и электрохимические свойства биядерных комплексов с платинированным 2-фенилбензотиазолом и мостиковыми 2-меркапто-производными пиридина, пиримидина, бензотиазола и бензоксазола

Ключевые слова: биядерные циклометаллированные комплексы Pt(II), PCA, ЯМР ¹H, ¹⁹⁵Pt спектроскопия, электронная спектроскопия поглощения и испускания, вольтамперометрия окисления и восстановления

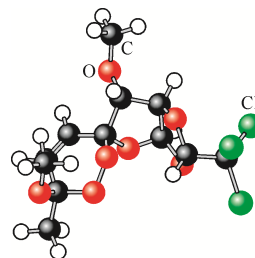


937

Karakurt T., Dinçer M., Çetin F.

Molecular structure and vibrational and chemical shift assignments of (4R)-5-eno-4,7-epidioxy-3,7-O-methyl-1,2-O-(S)-trichloroethylidene-5,6,8-trideoxy-α-D-threo-1,4-furano-4,7-diulo-octose by DFT and *ab initio* HF calculations

Keywords: X-ray structure determination, DFT, HF, GIAO, ¹H, ¹³C NMR, IR spectra, vibrational assignment

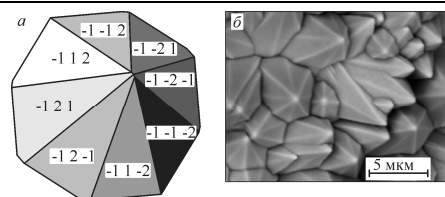


945

Лозанов В.В., Бакланова Н.И., Морозова Н.Б.

Газофазное осаждение комплексных тугоплавких покрытий на углеродном волокнистом материале

Ключевые слова: осаждение из газовой фазы, карбид гафния, иридий, покрытия, углеродный волокнистый материал



958

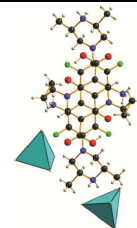
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Васильев А.Д., Головнёв Н.Н.

966

Кристаллическая структура двух ионных соединений спарфлоксацина

Ключевые слова: кристаллическая структура, катион спарфлоксациниума, тетрагалогенид-анионы цинка и кадмия, водородные связи, π - π -взаимодействие

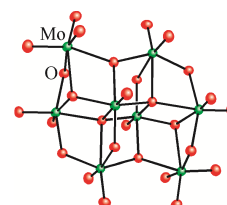


Казиев Г.З., Сауль Киньонес О., Степнова А.Ф., Хрусталёв В.Н., де Ита А., Панурина Н.А.

971

Физико-химическое исследование октамолибденодикобальтата(II) аммония состава $(\text{NH}_4)_2[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4]_2[\text{Mo}_8\text{O}_{27}]\cdot 6\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: синтез, гетерополисоединения, октамолибденодикобальтат(II), РСА, ИК спектроскопия, ТГА

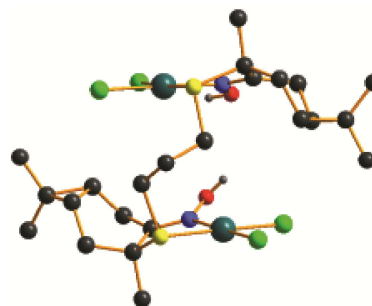


Кокина Т.Е., Глинская Л.А., Горшков Н.Б., Куратьева Н.В., Корольков И.В., Ткачёв А.В., Ларионов С.В.

978

Строение соединений $[\text{Pd}_2(\text{H}_2\text{L}^1)\text{Cl}_4]$ и $[\text{Pd}_2(\text{H}_2\text{L}^1)\text{Cl}_4] \cdot 0,5\text{CH}_2\text{Cl}_2$ с хиральным бис- α -сульфанилоскисом – производным природного монотерпеноида (+)-3-карена (H_2L^1)

Ключевые слова: комплекс, бис- α -сульфанилоскис, Pd, кристаллическая и молекулярная структура

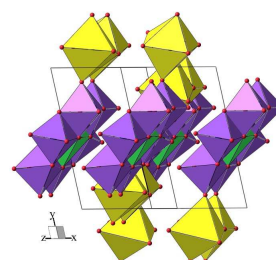


Гумерова Н.И., Мельник Н.А., Розанцев Г.М., Баумер В.Н., Радио С.В.

985

Гетерополигексамолибдоникелат(II) натрия $\text{Na}_4[\text{Ni}(\text{OH})_6\text{Mo}_6\text{O}_{18}]\cdot 16\text{H}_2\text{O}$ с анионом со структурой Андерсона: синтез и кристаллическая структура

Ключевые слова: гетерополисоединение, молибдат, структура Андерсона, рентгеноструктурный анализ, ИК спектроскопия, кристаллическая структура

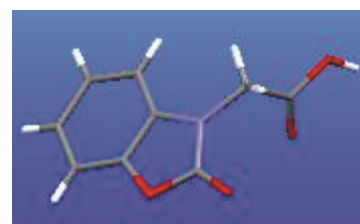


Hussain S., Khan I.U., Harrison W.T.A., Tahir M.N.

993

Crystal structures and characterization of two rare-earth-glutarate coordination networks: one-dimensional $[\text{Nd}(\text{C}_5\text{H}_6\text{O}_4)(\text{H}_2\text{O})_4]\cdot \text{Cl}$ and three-dimensional $[\text{Pr}(\text{C}_5\text{H}_6\text{O}_4)(\text{C}_5\text{H}_7\text{O}_4)(\text{H}_2\text{O})]\cdot \text{H}_2\text{O}$

Keywords: synthesis, crystal structure, coordination polymer, neodymium, praseodymium

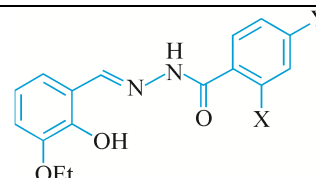


Sheng G.-H., Cheng X.-S., You Z.-L., Zhu H.-L.

1001

Two isomeric structures of oxovanadium(V) complexes with hydrazone and 8-hydroxyquinoline ligands

Keywords: hydrazone ligand, 8-hydroxyquinoline, oxovanadium complex, crystal structure, thermal property



Lin J., Henderson W., Nicholson B.K.

1006

X-ray structure of an amide-appended chloromercurated derivative of 2-phenylquinoline

Keywords: synthesis, mercury complexes, orthometallation reactions, crystal structure

