

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 57

Июль-август

№ 6, 2016

## СОДЕРЖАНИЕ

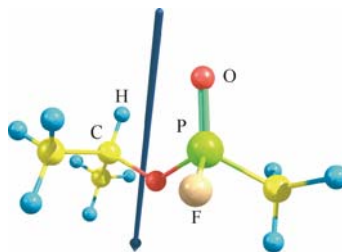
### ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Лебедев А.В.

1119

**Квантово-химический расчет строения, дипольного момента и поляризуемости О-изопропилметилфторфосфоната в газовой фазе**

**Ключевые слова:** О-изопропилметилфторфосфонат, квантово-химический расчет, геометрические параметры, конформер, дипольный момент, поляризуемость

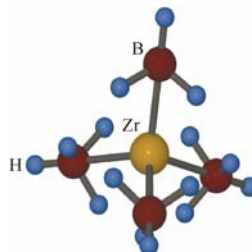


Игошкин А.М., Головнёв И.Ф., Крисюк В.В.,  
Игуменов И.К.

1130

**Структура тетрагидробората циркония  $Zr(BH_4)_4$ : молекулярно-динамическое исследование**

**Ключевые слова:** молекулярно-динамическое моделирование, тетрагидроборат циркония, кристаллическая структура молекулярных соединений, фазовые переходы

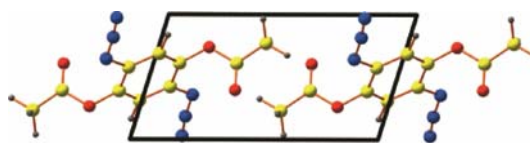


Фёдоров И.А., Журавлёв Ю.Н.

1136

**Первопринципное исследование влияния давления на структурные и электронные свойства кристаллического органического азида  $C_{10}H_8N_6O_4$**

**Ключевые слова:** органические азиды, дисперсионные силы, теория функционала плотности, уравнение состояния, давление, электронное строение

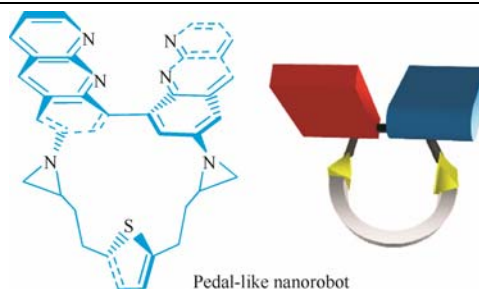


Samadizadeh M., Gorgani S.S.

1141

**Computational design of a new pedal-like nanorobot based on nitrogen inversion**

**Keywords:** nanorobot, nano pedal, nitrogen inversion, *ab initio* computation



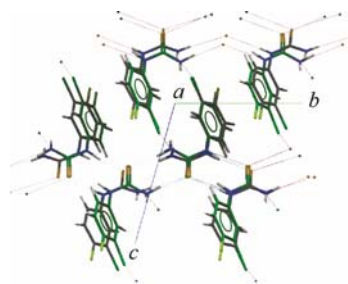
Stephen A.D., Nidhin P.V., Srinivasan P.

1147

**Ab initio prediction of plausible conformers of a flexible N-(3-chloro-4-fluorophenyl)thiourea (CFT) molecule:**

**A validation study**

**Keywords:** *ab initio* crystal structure prediction, lattice energy minimisation, polymorphism

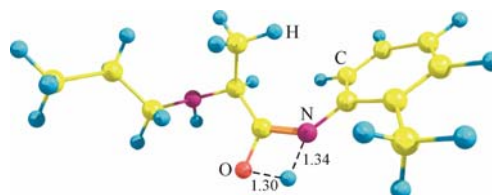


Heshmatipour F., Ali Beyramabadi S., Ali Morsali, Heravi M.M.

1157

**A DFT study on the geometry, spectroscopic properties and tautomerization of the local anaesthetic drug prilocaine**

**Keywords:** prilocaine, DFT, tautomerization, intramolecular proton transfer, PCM



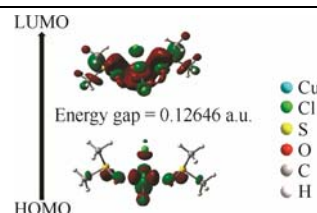
# ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Chebbi H., Chebbi M., Guesmi A., Arfaoui Y.

1164

**Crystal structure determination and DFT calculations of dichlorobis(dimethylsulfoxide-O)copper(II)**

**Keywords:** synthesis, crystal structure, DFT calculation, FT-IR, UV-visible spectroscopy

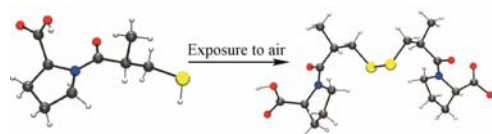


De Souza M.C., Diniz L.F., de Jesus Franco C.H., de Abreu H.A., Diniz R.

1171

**Structural study of the stability of the captopril drug regarding the formation of its captopril disulphide dimer**

**Keywords:** hypertension, ACE inhibitor, crystal structure, X-ray diffraction

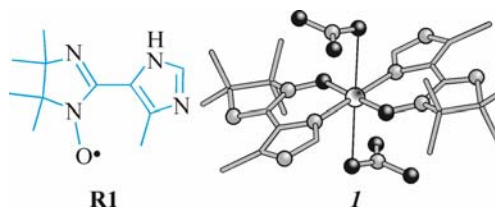


Федоренко А.Д., Мазалов Л.Н., Оглезнева И.М., Фурсова Е.Ю., Овчаренко В.И.

1181

**Рентгеновское фотоэлектронное изучение электронного строения комплексов Cu(II) с диа- и парамагнитными производными 2-имидазолина**

**Ключевые слова:** нитрокислые радикалы, комплексы меди с нитрокислыми лигандами, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия

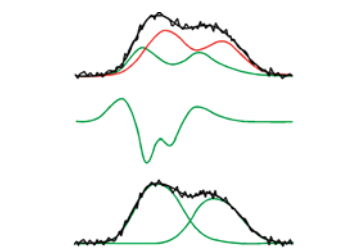


Смирнов М.Ю., Калинин А.В., Вовк Е.И., Бухтияров В.И.

1188

**Анализ состояния окисления частиц платины в нанесенных катализаторах методом двойного дифференцирования линий РФЭС**

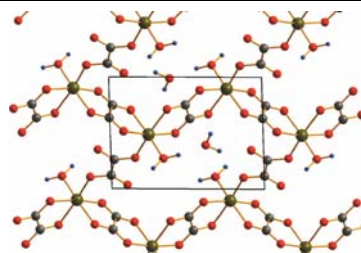
**Ключевые слова:** модельные катализаторы, платина, диоксид кремния, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, дифференцирование спектров



Тяпкин П.Ю., Петров С.А., Чернышев А.П.,  
Анчаров А.И., Шелудякова Л.А., Уваров Н.Ф.

### Особенности структуры гидратных форм оксалата железа(III)

**Ключевые слова:** оксалат железа, мессбауэровская спектроскопия, рентгеновская дифракция, синхротронное излучение, ИК спектроскопия, метастабильная аморфная фаза



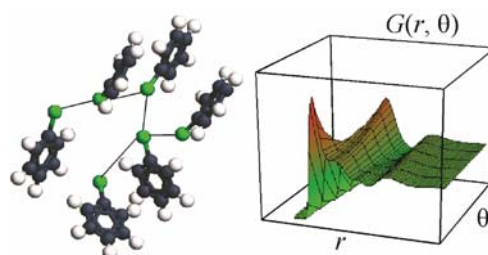
1195

## СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Алексеев Е.С., Богдан Т.В.

### Структура жидкого хлорбензола в интервале температур 293 – 363 К

**Ключевые слова:** жидкий хлорбензол, структура жидкости, молекулярно-динамическое моделирование, температурная зависимость, агрегаты, галоген-агрегация, функции радиально-углового распределения, функции радиального распределения, коэффициент самодиффузии, локальный дипольный момент, диэлектрическая проницаемость



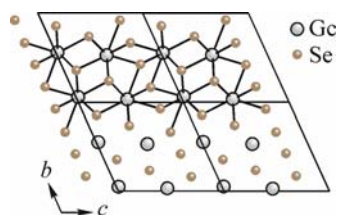
1202

## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Зеленина Л.Н., Чусова Т.П., Подберезская Н.В.,  
Корольков И.В., Пирязев Д.А.

### Новый полиселенид гадолиния $GdSe_{1.89(6)}$ в структурном типе матлокита $PbFCl$

**Ключевые слова:** полиселениды гадолиния, термодинамическое моделирование, выращивание кристаллов газотранспортными методами, рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ



1211

Ftini M.M.

### Characterization of a pure inorganic 3D network based on the $[Sr_2P_9HMo_{12}O_{71}]^{20-}$ cluster and strontium(II) linkers

**Keywords:** synthesis, polyoxometalate, inorganic compound, shaped-cage POMs, cyclic voltammetry, UV visible

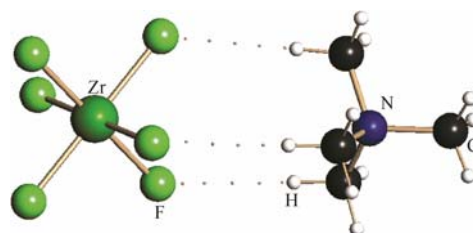


1219

Герасименко А.В., Гайворонская К.А.,  
Давидович Р.Л., Диденко Н.А.

### Высокотемпературная кубическая модификация гексафторидоцирконата тетраметиламмония $[N(CH_3)_4]_2ZrF_6$

**Ключевые слова:** кристаллическая структура, комплексный фторид, цирконий, полиморфная модификация, фазовый переход

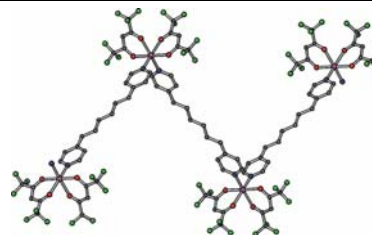


1226

Plater M.J., De Silva B.M., Foreman M.R. St J.,  
Harrison W.T.A.

### Crystal structures of two one-dimensional coordination polymers constructed from $Mn^{2+}$ ions, chelating hexafluoro-acetylacetonate anions and flexible bipyridyl bridging ligands

**Keywords:** manganese, coordination polymer, flexible ligand



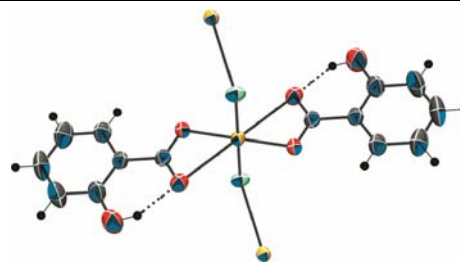
1230

Batool S.S., Gilani S.R., Tahir M.N., Siddique A., Harrison W.T.A.

1236

**Crystal structure and spectroscopic characterization of a coordination polymer of copper(II) chloride with ethylenediamine and the 2-hydroxybenzoate ion**

**Keywords:** synthesis, copper(II) carboxylate, ethylenediamine, salicylate, coordination polymer

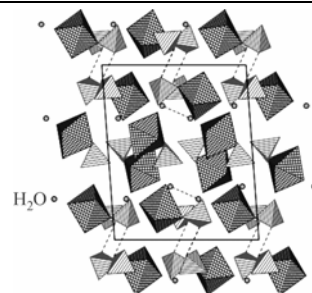


Махиня А.Н., Ильин М.А., Байдина И.А., Корольков И.В.

1242

**Кристаллическое строение *транс*-[Ru(NO)(NH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>SO<sub>4</sub>]ClO<sub>4</sub> и [Ru(NO)(NH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>SO<sub>4</sub>][Ru(NO)-(NH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>Cl(SO<sub>4</sub>)]HSO<sub>4</sub> · H<sub>2</sub>O**

**Ключевые слова:** синтез, рутений, нитрозокомплексы, амминокомплексы, сульфатоккомплексы, хлорокомплексы, синтез, рентгеноструктурный анализ, ИК спектроскопия

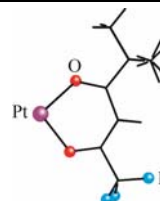


Байдина И.А., Жаркова Г.И., Пирязев Д.А.

1248

**Структура и свойства летучих изомеров бис(1,1,1-трифтор-5,5-диметилгексан-2,4-дионата) платины(II)**

**Ключевые слова:** β-дикетонаты платины(II), изомеры, структура, летучесть

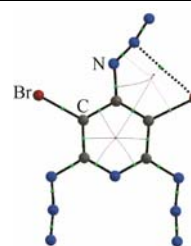


Корчагин Д.В., Алдошин С.М., Чапышев С.В.

1255

**Рентгеноструктурное исследование 2,4,6-триазидопиридина и его 3,5-дибромзамещенного производного**

**Ключевые слова:** полиазиды, РСА, молекулярная и кристаллическая структура, реакционная способность, высокоэнергетические соединения



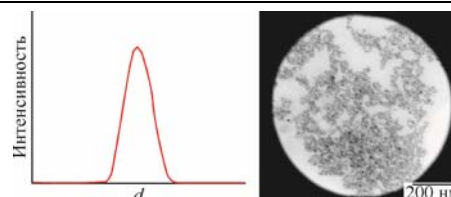
**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Баранова О.А., Хижняк С.Д., Пахомов П.М.

1264

**Влияние величины pH на синтез наночастиц серебра в водном цистеин-серебряном растворе**

**Ключевые слова:** наночастицы серебра, супрамолекула, L-цистеин, просвечивающая электронная микроскопия, динамическое светорассеяние

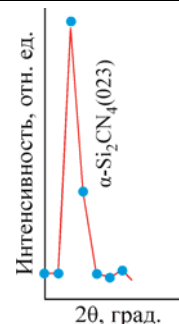


Плеханов А.Г., Файнер Н.И., Румянцев Ю.М., Юшина И.В., Рахманова М.И.

1271

**Фазовый состав и физико-химические свойства прозрачных нанокомпозитных пленок оксикарбонитрида кремния**

**Ключевые слова:** оксикарбонитрид кремния, нанокомпозитные пленки, 1,1,3,3-тетраметилдисилазан, рентгенофазовый анализ с использованием синхротронного излучения, оптические, электрофизические и люминесцентные свойства



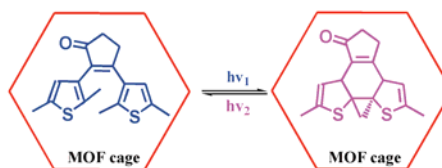


Семионова В.В., Королёв В.В., Глебов Е.М.,  
Шириян В.З., Сапченко С.А.

1279

**Фотохромные свойства поликристаллов:  
2,3-диарилциклопентенон и его аддукт  
с металл-органическим координационным  
полимером**

**Ключевые слова:** фотохромизм в твердом состоянии,  
металл-органические каркасы, 2,3-диарилциклопентеноны,  
супрамолекулярные аддукты

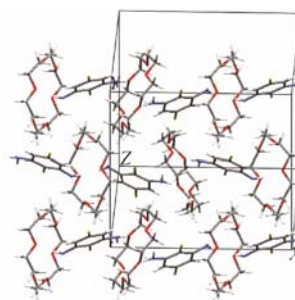


Ваганова Т.А., Гатиллов Ю.В., Родионов В.И.,  
Малыхин Е.В.

1288

**Структура молекулярных сокристаллов  
18-краун-6 и полигалогено-мета-  
фенилендиаминов**

**Ключевые слова:** молекулярные кристаллы,  
супрамолекулярная архитектура,  
рентгеноструктурный анализ,  
полифторированные соединения, ароматические диамины,  
18-краун-6 эфир, функциональные материалы

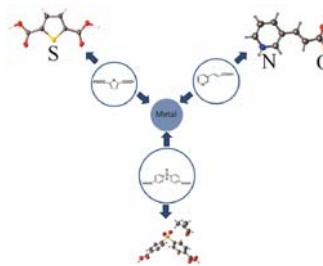


Corrêa C.C., Scaldini F.M., Machado F.C.,  
Pinheiro C.B.

1299

**Study of the supramolecular interactions  
of carboxylic acids  
used as versatile ligands  
in coordination chemistry**

**Keywords:** supramolecular arrangement, carboxylate ligands,  
X-ray diffraction



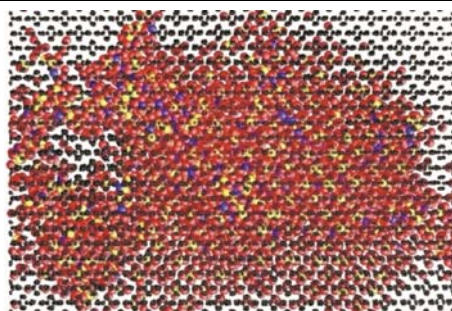
**ОБЗОРЫ**

Гречановский А.Е., [Урусов В.С.], Ерёмин Н.Н.

1306

**Изучение авторадикационных повреждений  
в минеральных матрицах  
методом молекулярной динамики**

**Ключевые слова:** атомистическое компьютерное  
моделирование, радиационная устойчивость минералов,  
твердые растворы замещения, метод полуэмпирических  
межатомных потенциалов, метод молекулярной динамики,  
компьютерное моделирование структуры и свойств  
кристалла, дефекты Френкеля



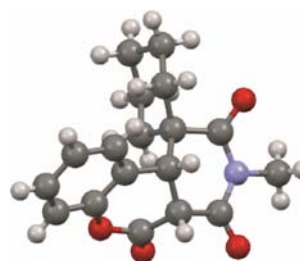
**КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ**

Кириллов Н.Ф., Никифорова Е.А., Дмитриев М.В.,  
Байбародских Д.В.

1327

**Строение 3-метил-2,3,4,4а,5,10b-гексагидро-1H-  
спиро[хромено[3,4-с]пиридин-1,1'-циклогексан]-  
2,4,5-триона**

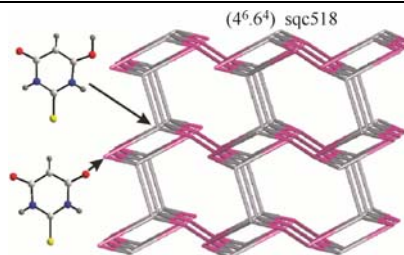
**Ключевые слова:** синтез, рентгеноструктурный анализ,  
реакция Реформатского, N-метил-2-оксо-2H-хромен-3-  
карбоксамид, метил бромциклогексанкарбоксилат,  
спирохроменопиперидиндион



Головнёв Н.Н., Молокеев М.С., Стерхова И.В.,  
Головнёва И.И.

**Структура ионных сокристаллов  
2-тиобарбитурат пиперидиния  
– 2-тиобарбитуровая кислота**

**Ключевые слова:** структура, ионные сокристаллы,  
2-тиобарбитуровая кислота, пиперидин, водородные связи,  
ИК спектроскопия

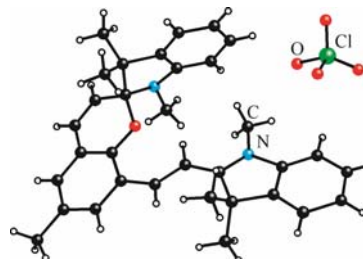


1330

Ткачёв В.В., Лукьянова М.Б., Лукьянов Б.С.,  
Пугачёв А.Д., Алдошин С.М., Минкин В.И.

**Исследование нового продукта реакции  
конденсации перхлората  
1,2,3,3-тетраметилиндолиния  
с 2,6-диформил-4-метил-фенолом**

**Ключевые слова:** спиропиран, индолиновый фрагмент,  
солевая структура, рентгеноструктурный анализ

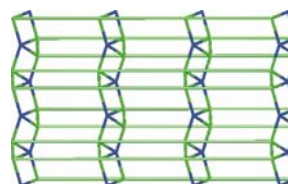


1334

Hou W.-L., Dong G.-Y., Zhang X.

**Crystal structure and catalytic properties  
of a two-dimensional copper(II) coordination  
polymer derived from rigid bis(triazole)**

**Keywords:** bis(triazole), Cu(II) complex, crystal structure,  
catalytic property



1336

**Содержание следующего номера — в конце журнала**