

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 57

Январь-февраль

№ 1, 2016

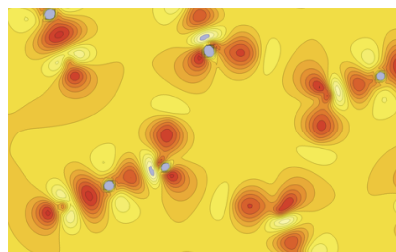
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Фёдоров И.А., Журавлёв Ю.Н., Киселёва Е.А.

Первопринципное исследование влияния давления на структурные и электронные свойства кристаллического азида водорода

Ключевые слова: органические азиды, дисперсионные силы, теория функционала плотности, уравнение состояния, давление, электронное строение, химическая связь, скорость детонации

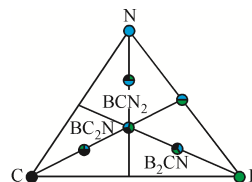


7

Басалаев Ю.М.

Влияние подрешеток на формирование зонной структуры кристаллов с решеткой халькопирита: B_2CN , BC_2N , BCN_2

Ключевые слова: халькопирит, антихалькопирит, подрешетка, B_2CN , BC_2N , BCN_2

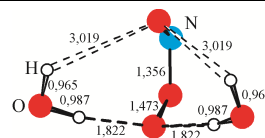


15

Симон К.В., Тулуб А.В.

Пероксинитрит в составе гемма

Ключевые слова: структура гемма, неэмпирические расчеты, O_2/NO химия

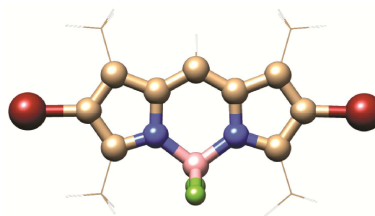


21

Гусева Г.Б., Антина Е.В., Ксенофонов А.А.,
Нуранеева Е.Н.

Квантово-химическое исследование молекулярного строения комплексов цинка(II) и бора(III) с моноiod- и дибромзамещенными дипирринами

Ключевые слова: дипирринаты, комплексы, молекулярная структура, геометрические характеристики, теория функционала электронной плотности



32

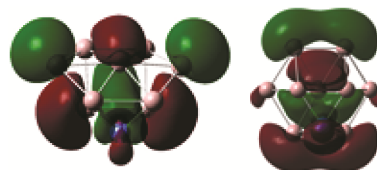
Zhang L., Zhang C.-Y., Song X.-H., Wang B.-Q.,
Zhang J.

40

**Geometries, stabilities, electronic,
and magnetic properties of small aluminum cluster
anions doped with cobalt:**

A density functional theory study

Keywords: aluminum-cobalt cluster, geometric structure,
relative stability, electronic property, density functional theory

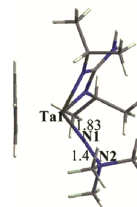


Lu N., Wang H.

53

**A theoretical investigation on the N–N
bond cleavage in Ta(IV) hydrazidium and Ta(V)
hydrazido complexes**

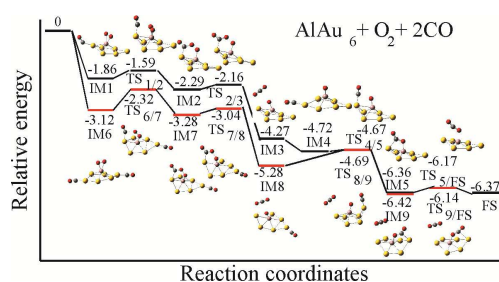
Keywords: N–N bond cleavage, H atom abstraction,
dimerization, protonation, density functional calculation



Li A., Guo L., An X., Liu N.,
Cao Z., Li W., Zheng X., Shi Y.,
Guo J., Xi Y.

**The catalytic mechanism
of CO oxidation
in AlAu_6 clusters
by density functional theory**

Keywords: CO oxidation, AlAu_6 cluster,
catalytic mechanism



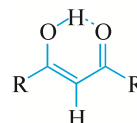
59

Azizi-Toupkanloo H., Tayyari S.F.

70

**Density functional efficiency in the calculations
of vibrational frequencies and molecular structure
of β -diketones**

Keywords: density functional theory, vibrational frequencies,
geometrical parameters, regression parameters



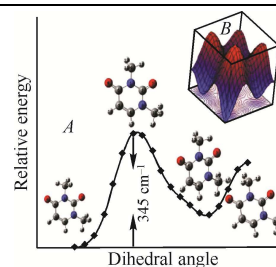
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Soliman U.A.

80

**Vibrational analysis, conformational stability,
force constants, internal rotation barriers,
MP2 = full and DFT calculations
of 1,3-dimethyluracil tautomers**

Keywords: 1,3-dimethyluracil,
normal coordinate analysis, vibrational frequencies,
ab initio calculation, barriers to internal rotation

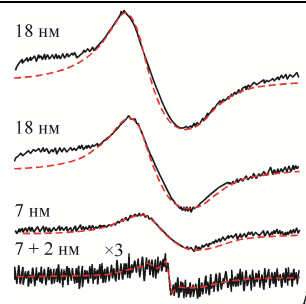


Нестеров Н.С., Сименцова И.И., Юданов В.Ф.,
Мартыанов О.Н.

94

**Сравнительное исследование процесса
восстановления Со-содержащих катализаторов
процесса Фишера–Тропша в среде водорода
и сверхкритического изопропанола методом ФМР**

Ключевые слова: сверхкритические флюиды, ФМР,
гетерогенные катализаторы процесса Фишера–Тропша,
восстановление, *in situ*

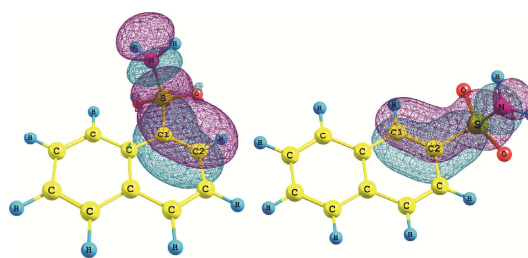


Гиричева Н.И., Гиричев Г.В., Петров В.М.

101

Структурная обусловленность фрагментации молекул нафталинсульфонилгалогенидов и нафталинсульфонамидов при ионизации электронами

Ключевые слова: масс-спектр, молекулярная структура, производные нафталинсульфонокислоты, нафталинсульфонилхлориды, нафталинсульфонилфторид, нафталинсульфонамиды, пути фрагментации



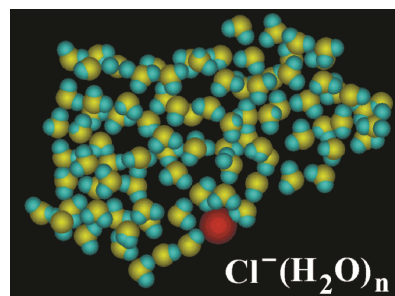
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Шевкунов С.В.

108

Явление вытеснения атомарного иона из гидратной оболочки в условиях плоской нанопоры

Ключевые слова: гидратация ионов, структура гидратной оболочки, наноструктуры, супрамолекулярные структуры, термодинамическая устойчивость молекулярной структуры, компьютерное моделирование на молекулярном уровне, метод Монте-Карло

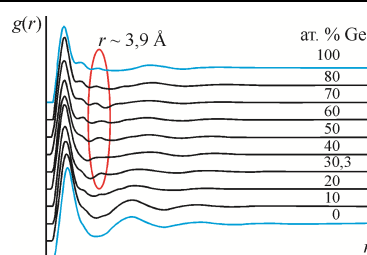


Яковенко О.М., Казимиров В.П., Роик А.С., Головатая Н.В., Ялтанский С.П., Сокольский В.Э.

117

Рентгенографическое исследование расплавов Al—Ge в широком температурно-концентрационном интервале

Ключевые слова: расплав Al—Ge, микрогетерогенная структура, рентгеновская дифракция, ближний порядок

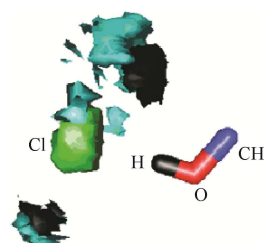


Атамась Н.А.

126

Локальная структура растворов ионная жидкость – одноатомный спирт

Ключевые слова: ионные жидкости, одноатомные спирты, энергия межмолекулярного взаимодействия, молекулярная динамика, локальная структура, радиальные функции распределения, водородные связи, дипольный момент

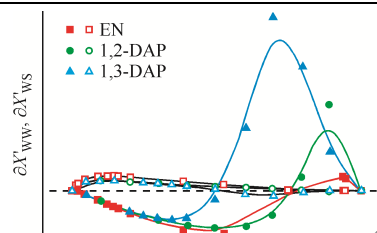


Титова А.Г., Крестьянинов М.А., Зайчиков А.М.

133

Термодинамические и структурные характеристики водных растворов диаминов

Ключевые слова: внутреннее давление, межмолекулярные взаимодействия, термодинамические и структурные характеристики водных растворов диаминов, вода, апротонные амиды

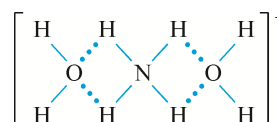


Королёв В.П.

140

Гидратные числа и объемные свойства ионов NH₄⁺, Cl⁻ и NO₃⁻ в растворе при 298,15 К. Зависимость от концентрации

Ключевые слова: кажущиеся и парциальные объемы, гидратные числа ионов, хлорид аммония, нитрат аммония

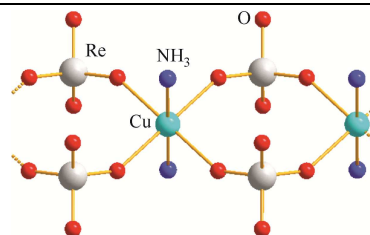


КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Громилов С.А., Тютюнник А.П., Пирязев Д.А.,
Плюснин П.Е., Корнев С.В.

Рентгенографическое исследование превращения [Cu(NH₃)₄](ReO₄)₂ в [Cu(NH₃)₂(μ-ReO₄)₂]_n

Ключевые слова: медь, перренат, термолиз,
рентгенофазовый анализ, рентгеноструктурный анализ,
кристаллохимия

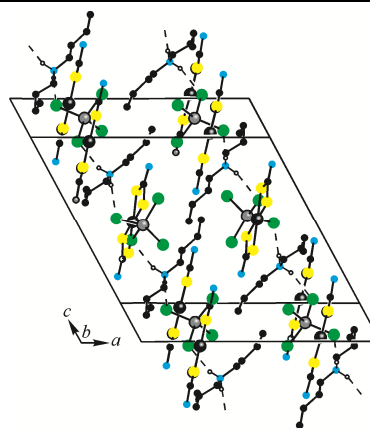


145

Родина Т.А., Лосева О.В., Смоленцев А.И.,
Иванов А.В.

Получение, структурная организация и термическое поведение ионно-полимерного комплекса золота(III)–цинка–дибутиламмония состава ([NH₂(C₄H₉)₂][Au{S₂CN(C₄H₉)₂]₂][ZnCl₄])_n

Ключевые слова: диалкилдитиокарбаматы цинка
со свойствами хемосорбентов,
формы связывания золота из растворов,
гетероядерные комплексы золота(III)–цинка,
кристаллическая и молекулярная структура, РСА,
синхронный термический анализ,
электронная растровая микроскопия
и рентгеноспектральный микроанализ

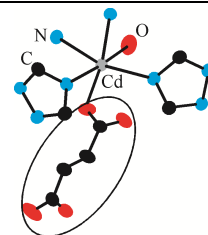


151

Lin C.-J., Zhou L.-X., Niu Q.-J., Zheng Y.-Q.,
Zhu H.-L., Zhang B.-B.

Three metal-organic polymers assembled from Cd(II)–fluconazole: syntheses, crystal structures, and characterization

Keywords: Cd(II) complexes, fluconazole, crystal structures,
topology

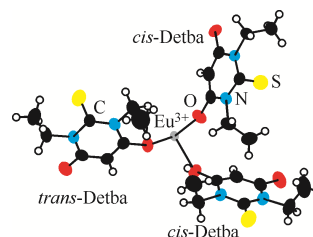


160

Головнёв Н.Н., Молокеев М.С., Верещагин С.Н.

Кристаллическая структура и некоторые свойства катена-{трис(1,3-диэтил-2-тиобарбитурата) европия(III)}

Ключевые слова: кристаллическая структура, комплекс,
европий(III), 1,3-диэтил-2-тиобарбитуровая кислота,
термография, ИК спектроскопия, фотолюминесценция



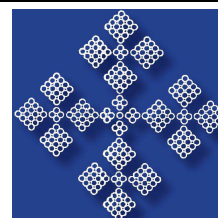
171

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Микитаев А.К., Козлов Г.В.

Физические основы катализа реакции сшивания эпоксиполимеров с углеродными нанотрубками

Ключевые слова: эпоксиполимер,
углеродные нанотрубки, сшивание, микрогель,
фрактальная размерность

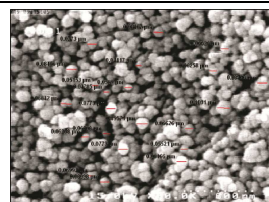


179

Khanfekr A., Tamizifar M., Naghizadeh R.

Effects of donor concentration on structure of Nb-doped nano-sized BaTiO₃ powders prepared by microwave-hydrothermal synthesis methods

Keywords: barium titanate, perovskites, niobium doping,
chemical synthesis, microwave sintering, microstructure



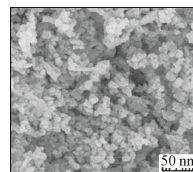
185

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Bagheri ghomi A.

ZnO and MgO nanoparticles: synthesis and comparative study on their properties

Keywords: nanoparticle, ZnO, MgO, photocatalyst, bond gap

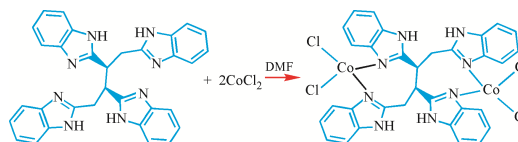


192

Huang Q.-W., Wang S.-X., Liu S.-G., Su W.-Y.,
Li G.-B., He Y.-M.

Crystal structure and antitumor activities of dinuclear cobalt(II) complex based on *meso*-1, 2, 3, 4-tetra(1H-benzo[d]imidazol-2-yl)butane

Keywords: benzimidazole, cobalt complex, crystal structure, antitumor activities



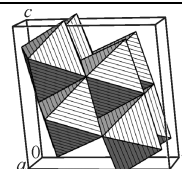
198

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Яровой С.С., Смоленцев А.И., Ермолаев А.В.,
Миронов Ю.В.

Кристаллическая структура W₁₄

Ключевые слова: иод, вольфрам, кристаллическая структура

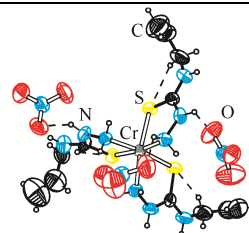


203

Чумаков Ю.М., Петренко П.А., Граур В.О.,
Цапков В.И., Гуля А.П.

Кристаллическая структура нитрата трис(4-аллилтиосемикарбазид)хрома(III) гидрата

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, координационные соединения хрома, 4-аллилтиосемикарбазид

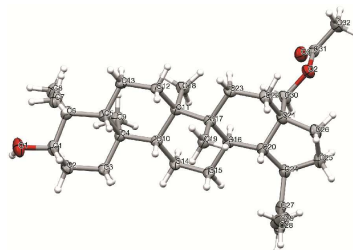


206

Сулеймен Е.М., К. Van Hecke

Кристаллическая структура и абсолютная конфигурация 28-*O*-ацетилбетулина

Ключевые слова: тритерпеноид, бетулин, 28-*O*-ацетилбетулин, ЯМР спектроскопия, рентгеноструктурный анализ

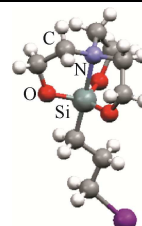


210

Стерхова И.В., Смирнов В.И., Кузнецова Г.А.,
Зельбст Э.А.

Кристаллическая и молекулярная структура 1-(иодметил)- и 1-(иодпропил)силатранов

Ключевые слова: 1-(иодметил)силатран, 1-(иодпропил)силатран, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ



213

Содержание следующего номера — в конце журнала

**VII Международная конференция
"ВЫСОКОСПИНОВЫЕ МОЛЕКУЛЫ И МОЛЕКУЛЯРНЫЕ МАГНЕТИКИ"**

**X Российско-японский семинар
"СОЕДИНЕНИЯ С ОТКРЫТОЙ ОБОЛОЧКОЙ
И МОЛЕКУЛЯРНЫЕ СПИНОВЫЕ УСТРОЙСТВА"**

**I Школа-конференция молодых ученых
"ДИЗАЙН МАГНИТНО-АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ"**

**19 - 23 сентября 2016 года
Новосибирск**

**<http://tomo.nsc.ru>
molmag2016@tomo.nsc.ru**

Научная программа конференции посвящена актуальным вопросам дизайна магнитно-активных соединений и высокоспиновых молекул.

Основные разделы научной программы:

- Моно-, би- и полирадикалы;
- Многоспиновые молекулы;
- Металлоорганические парамагнетики и гетероспиновые комплексы;
- Магнетоструктурные корреляции;
- Молекулярные магнетики;
- Методы исследования магнитноактивных соединений;
- Магнетизм кластеров и наночастиц.

Место проведения:

Дом Ученых Академгородка, малый зал.

Официальные языки:

английский и русский

Ключевые даты:

Начало регистрации – 1 февраля 2016 г.

Окончание регистрации – 1 мая 2016 г.

Окончание приема тезисов – 1 июня 2016 г.

Организаторы:

Институт "Международный томографический центр" СО РАН

Российский научный фонд

Российский фонд фундаментальных исследований

Федеральное агентство научных организаций

Сибирское отделение РАН

Контакты:

Д.ф.-м.н. Матвей Владимирович Федин

МТЦ СО РАН, Ул. Институтская, д. 3А, Новосибирск, 630090 Россия

Телефон: +7-383-330-1276; факс: +7-383-333-1399; E-mail: molmag2016@tomo.nsc.ru