

**ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ**  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 58

Май-июнь

№ 4, 2017

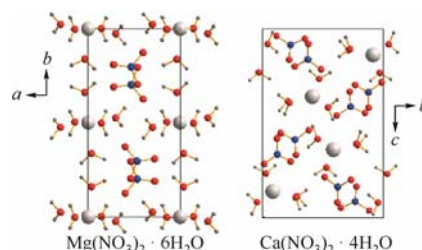
**СО Д Е Р Ж А Н И Е**

**ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ**

Журавлёв Ю.Н., Корабельников Д.В.

**Структура и электронные свойства нитратов магния и кальция и их кристаллогидратов из первых принципов**

**Ключевые слова:** гексогидрат, тетрагидрат, нитрат, магний, кальций, кристаллическая структура, упругие постоянные, химическая связь, заряд, плотность электронных состояний



675

Маджидов Т.И., Гимадиев Т.Р., Малахова Д.А.,  
Нугманов Р.И., Баскин И.И., Антипин И.С.,  
Варнек А.А.

**Соотношение «структура – реакционная способность» в реакциях Дильса–Альдера с использованием подхода конденсированных графов реакций**

**Ключевые слова:** [4+2]π-циклоприсоединение, реакция Дильса–Альдера, константа скорости реакции, конденсированный граф реакции, химические реакции, хемоинформатика

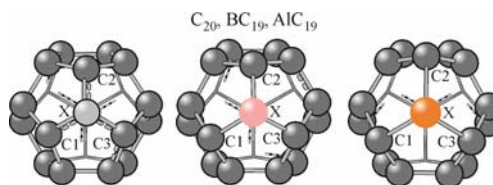


685

Molani F., Askari M.

**A DFT study on the structural and electronic properties of small toxic gases on B- and Al-doped  $\text{C}_{20}$  fullerene**

**Keywords:** heterofullerene, electronic structure, toxic gas sensing, density functional theory

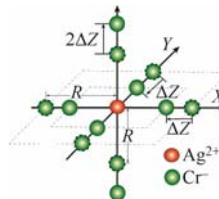


692

Zhang L.-J., Wu S.-Y., Kuang M.-Q., Hu X.-F., Li G.-L.

**Theoretical studies of the spin Hamiltonian parameters and local structures for  $\text{Ag}^{2+}$  in AgCl and KCl crystals**

**Keywords:** electron paramagnetic resonance, defect structures,  $\text{Ag}^{2+}$ , AgCl, KCl



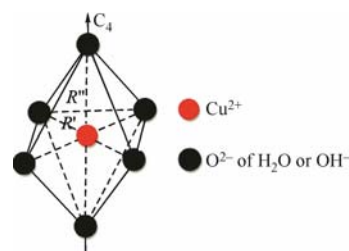
702

Yang Y., Fang Y., Liu Q., Yang L., Hu S., Hu S., Wang D., Zhang H., Luo S.

710

**Density functional theory insight into Eu(III) and Am(III) complexes with two 2,6-dicarboxypyridine diamide-type ligands**

**Keywords:** density functional theory, second-order Moller-Plesset perturbation theory, selective extraction, natural bond orbital analysis



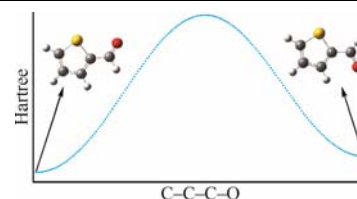
**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Güneş E., Parlak C., Şenyel M.

719

**DFT/TDDFT investigation on the electronic structures and spectral characteristics of C<sub>5</sub>H<sub>3</sub>XOS (X = H, F, Cl or Br)**

**Keywords:** thiophene-2-carbaldehyde, DFT, TDDFT, halogen effect, solvent effect

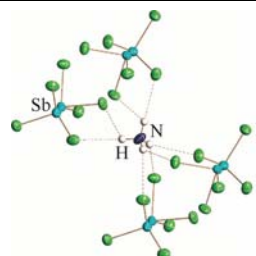


Земнухова Л.А., Удовенко А.А., Макаренко Н.В., Кузнецов С.И., Бабушкина Т.А.

729

**Кристаллическая структура и параметры ЯКР <sup>121,123</sup>Sb тридекафторотетраантимоната(III) аммония NH<sub>4</sub>Sb<sub>4</sub>F<sub>13</sub>**

**Ключевые слова:** тридекафторотетраантимонат(III) аммония, синтез, кристаллическая структура, параметры ЯКР <sup>121,123</sup>Sb

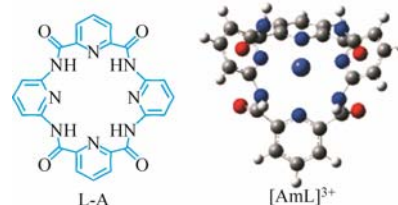


Li G.-L., Wu S.-Y., Kuang M.-Q., Hu X.-F., Xu Y.-Q.

734

**Studies on the g-factors of the copper(II)-oxygen compounds**

**Keywords:** electron paramagnetic resonance (EPR), local structures, Cu(UO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(AsO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> · 3H<sub>2</sub>O, Na<sub>2</sub>Cu(SO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> · 2H<sub>2</sub>O, Cu(PhCO<sub>2</sub>)<sub>2</sub> · 3H<sub>2</sub>O, Pb<sub>2</sub>Cu(OH)<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub>



**СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ**

Красных Е.Л., Портнова С.В.

739

**Прогнозирование изменения теплоемкости фазового перехода жидкость–пар на основе модифицированных индексов Рандича.**

**Алканы и кислородсодержащие соединения**

**Ключевые слова:** теплоемкость, топологический индекс, индекс связанности, алканы, кислородсодержащие соединения

$$Cp_{\text{gas}}^0 \text{ gas} \quad \Delta_f^g Cp_{\text{liq}}^0 (298,2) \quad Cp_{\text{liq}}^0 \text{ liquid}$$

Карцев В.Н., Штыков С.Н., Панкин К.Е.

745

**К оценке состояния собственного макроскопического силового поля жидкостей**

**Ключевые слова:** жидкости, внутреннее давление, шкала эволюции макроскопического поля

$$H_{\text{эв}} = - \left[ \frac{2A \cdot t + B}{8,859} \right]$$

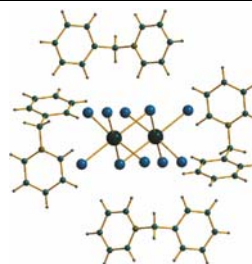
# КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Адонин С.А., Горох И.Д., Самсоненко Д.Г.,  
Корольков И.В., Соколов М.Н., Федин В.П.

751

**Кристаллические структуры биядерных  
хлоридных и бромидных комплексов Bi(III)  
с некоторыми катионами – алкилированными  
производными пиридина**

**Ключевые слова:** висмут, галогенидные комплексы,  
полиядерные комплексы, ароматические катионы

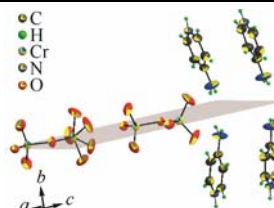


Ben Smail R., Chebbi H., Srinivasan B.R., Zid M.F.

757

**Spectroscopic characterization  
and room-temperature structure  
of bis(4-aminopyridinium) dichromate**

**Keywords:** crystal structure, infrared spectroscopy,  
bis(4-aminopyridinium) dichromate

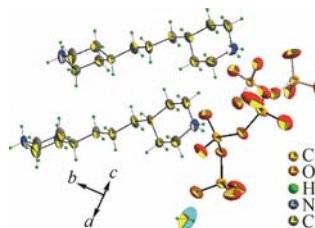


Ben Smail R., Zid M.F., Driss A.

766

**The first chromate containing both Cr<sub>2</sub>O<sub>7</sub> and Cr<sub>3</sub>O<sub>10</sub>  
groups, bis(1,3-bis(4-piperidinium)propane)  
dichromate trichromate monohydrate:  
Synthesis and crystal structure**

**Keywords:** X-ray diffraction, crystal structure,  
dichromate trichromate, 1,3-bis(4-piperidinium)propane

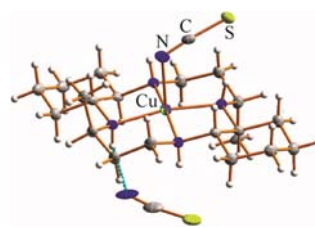


Subhan M.A., Ng S.W., Lee C.-S., Choi J.-H.

773

**Crystal structure and spectroscopic properties  
of isothiocyanato[(3,14-dimethyl-2,6,13,17-  
tetraazatricyclo(16.4.0.0<sup>7,12</sup>))docosane]copper(II)  
thiocyanate**

**Keywords:** square pyramidal geometry, copper(II),  
macrocyclic ligand, thiocyanate, *trans*-III configuration

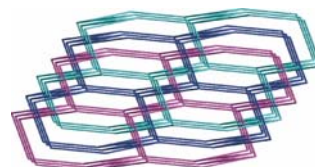


Liu X.-B., Zhao Y.-Q., Liu W.-L., Cui G.-H.

781

**Two new cadmium(II) coordination polymers  
with bis(benzimidazole) ligands**

**Keywords:** bis(benzimidazole), cadmium(II) coordination  
polymer, crystal structure, fluorescence property

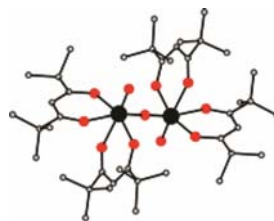


Леднева А.Ю., Артемкина С.Б., Стабников П.А.,  
Яньшол Л.В., Федоров В.Е.

789

**Строение нового хелатного комплекса  
Mo<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(DPM)<sub>4</sub>**

**Ключевые слова:** синтез, молибден,  
кристаллическая структура, термический анализ,  
масс-спектр

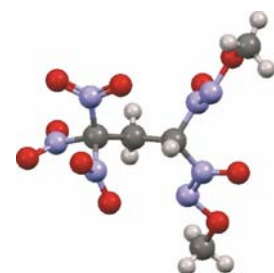


Зюзин И.Н., Алиев З.Г., Алдошин С.М.

794

**Молекулярная и кристаллическая структура  
1,1-бис(метокси-*NNO*-азокси)-  
3,3,3-тринитропропана**

**Ключевые слова:** алкокси-*NNO*-азоксисоединения,  
1,1-бис(метокси-*NNO*-азокси)-3,3,3-тринитропропан,  
(3*Z*,6*Z*)-5-(2,2,2-тринитроэтил)-2,8-диокса-3,4,6,7-  
тетраазанона-3,6-диен-4,6-диоксид,  
тринитрометильная группа, кристаллическая структура

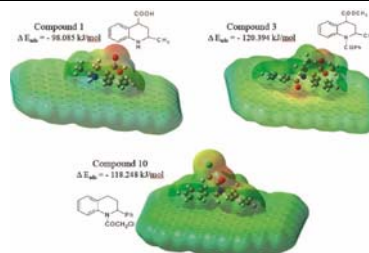


## СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Некрасова Н.А., Курбатова С.В.

### Взаимосвязь структуры и физико-химических характеристик производных 1,2,3,4-тетрагидрохинолина

**Ключевые слова:** 1,2,3,4-тетрагидрохинолин, высокоэффективная жидкостная хроматография, индексы связности (индексы Рандича), факторы удерживания

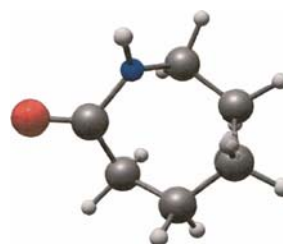


798

Ахмедов И.Д., Мельникова Н.Е., Бабаева А.З.,  
Ахмедов В.М.

### Палладийсодержащие композиционные наноматериалы на основе поликапролактама: формирование и структура

**Ключевые слова:** палладий, поликапролактam, нанокомпозит, физико-химические методы анализа, гетерогенный катализ

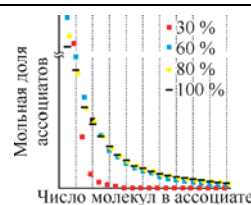


806

Толмачев А.М., Климов А.В., Анучин К.В.,  
Фирсов Д.А.

### Топология супрамолекулярных структур в растворах этанола

**Ключевые слова:** этанол, супрамолекулярные структуры, молекулярная динамика, топологический анализ



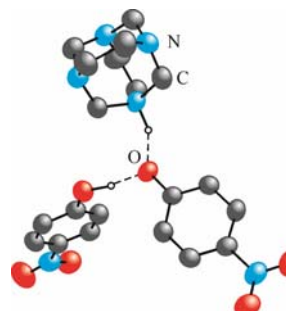
813

Rivera A., Uribe J.M., Ríos-Motta J., Bolte M.

### Effect of protonation on the structure of 1,3,6,8-tetraazatricyclo[4.4.1.1<sup>3,8</sup>]dodecane (TATD) adamantane:

**Crystal structure and DFT analysis of 3,6,8-triaza-1-azoniatricyclo[4.4.1.1<sup>3,8</sup>]dodecane 4-nitrophenolate 4-nitrophenol**

**Keywords:** 1,3,6,8-tetraazatricyclo[4.4.1.1<sup>3,8</sup>]dodecane, adamantane, crystal structure, proton transfer, hydrogen bond, amination cage, DFT calculations



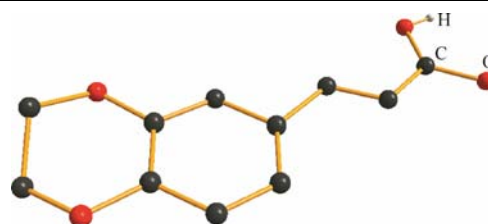
819

## СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Chen X.-F., Wang C.-F., Kong S., Li C., Zhou X.,  
Zhang C.-Y., Sheng G.-H., Zhu H.-L.

### Structure and urease inhibitory activity of copper(II) complex with (E)-3-(2,3-dihydrobenzo[B][1,4]dioxin-6-yl)acrylic acid

**Keywords:** caffeic acid, copper(II) complex, crystal structure, urease inhibitory

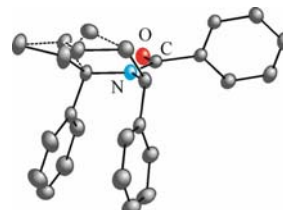


827

Sampath N.

### X-ray crystal structure and conformational flexibility study of a N-substituted 2,6-diphenylpiperidine derivative

**Keywords:** piperidine, conformation, crystallography, chair, twisted boat, dihedral angle, PMDPM, phenyl ring



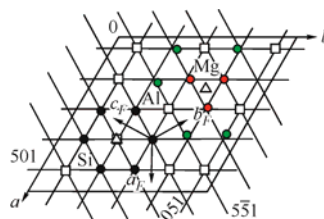
834

# КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

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

## Кубический катионный каркас в тригональных структурах турмалинов – основа стабильности структурного типа

**Ключевые слова:** кристаллографический анализ, кубический катионный каркас, структурный тип турмалина, катионная подрешетка, феномен «биений»

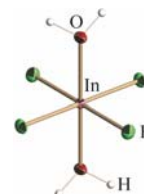


839

Давидович Р.Л., Логвинова В.Б., Ткачёв В.В., Шилов Г.В.

## Кристаллическая структура дигидратов тетрафторидоиндатов(III) рубидия и цезия

**Ключевые слова:** индий(III), комплексный фторид, октаэдр, рубидий, цезий, кристаллическая структура, водородная связь.

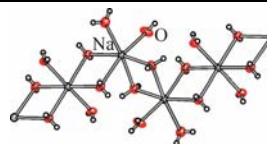


843

Абрамов П.А., Шмакова А.А., Соколов М.Н.

## Кристаллическая структура $\text{Na}_3[\text{TaO}_8] \cdot 14\text{H}_2\text{O}$

**Ключевые слова:** тантал, натрий, пероксокомплекс, кристаллическая структура

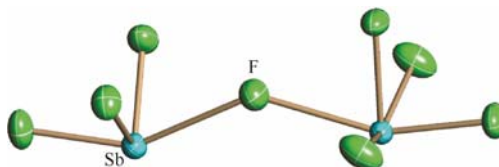


846

Удовенко А.А., Земнухова Л.А., Макаренко Н.В.

## Кристаллическая структура $\beta$ -тетрафтороантимоната(III) калия ( $\beta$ -KSbF<sub>4</sub>)

**Ключевые слова:** синтез, кристаллическая структура,  $\beta$ -тетрафтороантимонат(III) калия

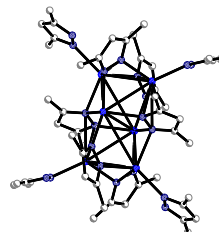


850

Виноградова К.А., Стабников П.А., Алфёрова Н.И., Наумов Д.Ю., Румянцев Ю.М.

## Шестиядерный комплекс Na(I) с 3,5-диметил-1H-пиразолом и его анионом

**Ключевые слова:** комплекс натрия(I), 3,5-диметил-1H-пиразол, 3,5-диметил-1H-пиразолят-анион, кристаллическая структура, летучесть

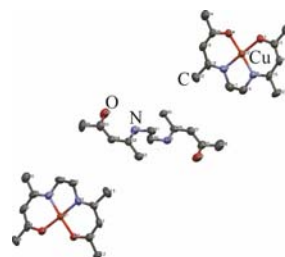


853

Магеррамов А.М., Цинцадзе М.Г., Алиева Р.А., Бахманова Ф.Н., Мамедова Ф.О., Аскеров Р.К., Алиева Ф.С., Чырагов Ф.М.

## Кристаллическая структура комплекса меди(II) с ацетилацетоном и этилендиамином, полученного путем темплатного синтеза

**Ключевые слова:** РСА, монокристалл, медь, сингония, синтез

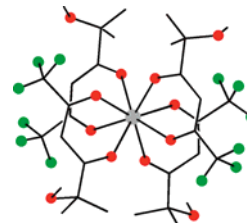


857

Крисюк В.В., Байдина И.А., Тургамбаева А.Е., Корольков И.В., Уркасым кызы С., Игуменов И.К.

## Новый летучий комплекс циркония(IV) с метоксизамещенным $\beta$ -дикетонатом

**Ключевые слова:** цирконий, дикетонаты, кристаллическая структура, летучий металлоорганический комплекс, МОСVD прекурсор



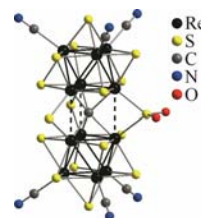
860



Лаппи Т.И., Гайфулин Я.М., Смоленцев А.И.,  
Миронов Ю.В.

**Структурная характеристика биоктаэдрического  
кластерного аниона  $[\text{Re}_{12}\text{CS}_{14}(\mu\text{-SO}_2)(\mu\text{-S})_2(\text{CN})_6]^{6-}$**

**Ключевые слова:** рений, биоктаэдрический кластерный  
комплекс, координационный полимер,  
кристаллическая структура

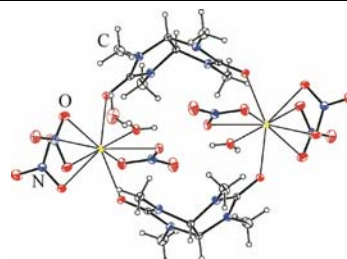


863

Нетреба Е.Е., Сомов Н.В.

**Кристаллическая структура нового биядерного  
комплекса моногидрата бис(2,4,6,8-тетраметил-  
2,4,6,8-тетраазабицикло(3.3.0)октан-3,7-дион-  
O,O')-диаква-гексакис(нитрато-O,O')-  
дигадолия(III)**

**Ключевые слова:** бициклические бисмочевины, мебикар,  
гадолий(III), структура, десятивершинник, ИК, РСА

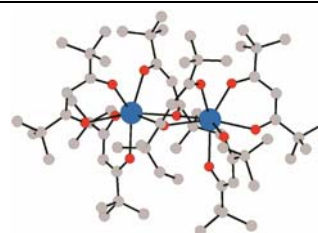


866

Лю Юйхань, Мосягина С.А., Стабников П.А.,  
Алфёрова Н.И., Корольков И.В., Первухина Н.В.,  
Морозова Н.Б.

**Структура трис-дипивалоилметаната  
лантана(III)**

**Ключевые слова:** синтез, дипивалоилметанаты Ln(III),  
кристаллическая структура, летучесть

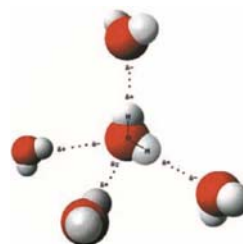


871

Муллоев Н.У., Юсупова Дж., Махсудов Б.И.

**ИК-спектроскопическое исследование  
Н-комплексов производных диоксолана  
с метанолом в растворах в  $\text{CCl}_4$**

**Ключевые слова:** гетероциклические соединения,  
протоноакцепторная способность,  
производные диоксоланов, индукционное влияние,  
стерический фактор

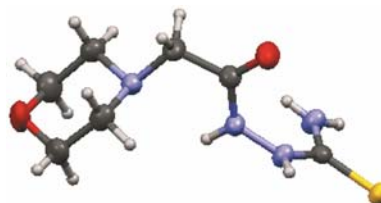


876

Турдыбеков К.М., Нуркенов О.А., Сатпаева Ж.Б.,  
Фазылов С.Д., Талипов С.А., Ибрагимов Б.Т.,  
Утегенова А.С.

**Кристаллическая структура  
2-(2-морфолиноацетил)гидразинокарботиоамида**

**Ключевые слова:** РСА, тиосемикарбазид,  
кристаллогидрат



879

**Содержание следующего номера — в конце журнала**

© Сибирское отделение РАН, 2017  
© Институт неорганической химии  
им. А.В. Николаева СО РАН, 2017