

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 54

Март-апрель

№ 2, 2013

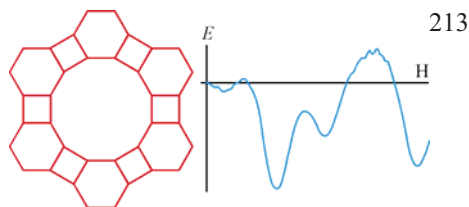
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Лузанов А.В.

**Магнетизм и бирадикалоидный характер  
 $\pi$ -ароматических и антиароматических систем  
в сильном магнитном поле**

**Ключевые слова:** диамагнетизм, парамагнетизм,  
 $\pi$ -электронная корреляция,  
число эффективно распаренных электронов, ароматичность

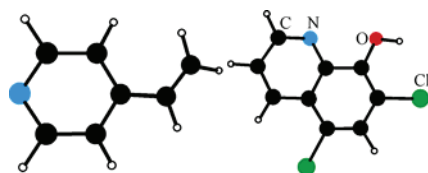


213

Hosseinnejad T., Ahmadi S.J., Karimi-Jafari M.H.

**Computational study on the structure and properties  
of ternary complexes of  $\text{Ln}^{3+}$  ( $\text{Ln} = \text{La}, \text{Ce}, \text{Nd}$  and  $\text{Sm}$ ) with  
5,7-dichloro quinoline-8-ol and 4-vinyl pyridine**

**Keywords:** ion imprinting, lanthanide complexes,  
density functional theory, polarized continuum model, conformational  
distribution



220

Liang J.X., Wang Y.B., Geng Z.Y., Wang Y.Z., Wang Y.C.

**Gas-phase reaction of isobutenyl anion with  $\text{N}_2\text{O}$   
from *ab initio* calculations**

**Keywords:** isobutenyl anion, reaction mechanism,  
second-order Møller–Plesset perturbation theory (MP2)

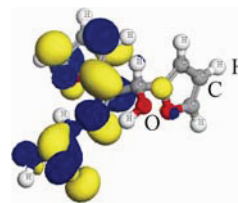


228

Musa A.Y., Ahmoda W., Al-Amiery A.A., Kadhum A.A.H.,  
Mohamad A.B.

**Quantum chemical calculation for the inhibitory effect  
of compounds**

**Keywords:** corrosion inhibition, quantum chemical parameter,  
thio, QSAR



237

Грибов Л.А., Новосадов Б.К.

**О численном решении электронно-ядерной задачи  
для молекул при использовании интегрального  
оператора электронно-ядерного взаимодействия**

**Ключевые слова:** уравнение Шредингера, гамильтониан молекулы,  
квантовая химия, численное решение

$$\hat{W}_{en}(r) = \int dQ \Psi_n^2(Q) \hat{V}_{en}(r, Q)$$

245

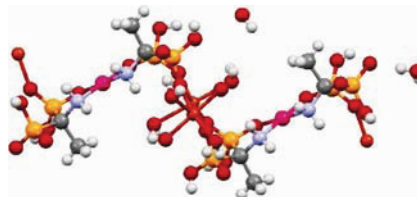
## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Козачкова А.Н., Царик Н.В., Дудко А.В., Пехньо В.И.,  
Новоторцев В.М., Ерёменко И.Л., Минин В.В.,  
Ефимов Н.Н., Уголкина Е.А.

251

**Синтез, кристаллическая структура, магнитные свойства  
гетерометаллического комплекса Pd(II)–Cu(II)  
с 1-аминоэтилиден-1,1-дифосфоновой кислотой**

**Ключевые слова:** гетерометаллический комплекс Pd(II) и Cu(II),  
аминодифосфонат, рентгеноструктурный анализ, магнитные свойства

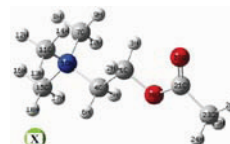


Karakaya M., Uzun F.

258

**Spectral analysis of acetylcholine halides by density functional  
theory calculations**

**Keywords:** acetylcholine halide, vibration, DFT, IR, Raman, NMR



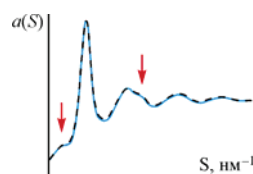
## СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Роик А.С., Аникиенко А.В., Медведев Н.Н.

269

**Политетраэдрический порядок и локальное химическое  
упорядочение в металлических расплавах**

**Ключевые слова:** металлические расплавы, рентгеноструктурный  
анализ, префикс, икосаэдрический ближний порядок,  
химический ближний порядок, политетраэдрические кластеры

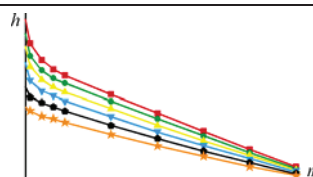


Афанасьев В.Н., Устинов А.Н.

278

**Концентрационная зависимость NaCl в широком  
интервале температуры и давления**

**Ключевые слова:** условная сжимаемость гидратных комплексов,  
условная сжимаемость свободного растворителя, гидратация



## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Кажева О.Н., Рудаков Д.А., Шилов Г.В., Дьяченко О.А.,  
Поткин В.И.

287

**Структура 6,11-дихлор-9-диметилтио-7,8-дикарба-нидо-  
ундекаборана [6,11-Cl<sub>2</sub>-9-SMe<sub>2</sub>-7,8-C<sub>2</sub>B<sub>9</sub>H<sub>9</sub>]**

**Ключевые слова:** галогенирование, дикарба-нидо-ундекаборат,  
рентгеноструктурный анализ, ядерный магнитный резонанс



Алиев С.Б., Самсоненко Д.Г., Федин В.П.

293

**Кристаллическая структура слоистых металл-  
органических координационных полимеров  
на основе трехъядерных карбоксилатных комплексов  
цинка [Zn<sub>3</sub>(DMA)<sub>2</sub>(bpdca)<sub>3</sub>]·3DMA  
и [Zn<sub>3</sub>(im)<sub>2</sub>(bdc)<sub>3</sub>]·1,5H<sub>2</sub>O**

**Ключевые слова:** цинк, кристаллическая структура,  
координационные полимеры, металл-органические каркасы,  
карбоновые кислоты

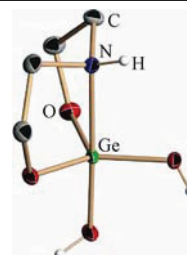


Воронков М.Г., Корлюков А.А., Хамитова Д.Р.,  
Бузин М.И., Самохин Г.С., Кочина Т.А.

299

**Кристаллическая и молекулярная структура  
1,1-квазигерматрандиола – 1,1-дигидрокси-2,8-диокси-5-  
азагермакана**

**Ключевые слова:** квазигерматрандиол,  
молекулярная и кристаллическая структура, рентгеноструктурный  
анализ, фазовый переход

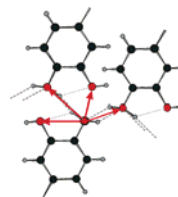


## СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Дребущак Т.Н., Болдырева Е.В., Фуке К.

**Водородные связи между катехоловыми группами в кристаллической структуре дигидрокофеиновой кислоты**

**Ключевые слова:** катехоловые соединения, водородные связи, дигидрокофеиновая кислота, рентгеноструктурный анализ

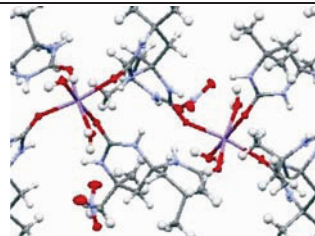


306

Нетреба Е.Е., Федоренко А.М.

**Исследование новой молекулярно-кристаллической структуры координационного полимера нитрата марганца(II) с 4,4,10,10-тетраметил-1,3,7,9-тетраазоспиро[5.5]ундекан-2,8-дионом**

**Ключевые слова:** марганец(II), спирокарбон, координационный полимер, кристаллическая структура, PCA

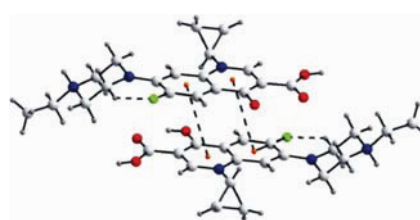


312

Головнёв Н.Н., Молокеев М.С., Головнёва И.И., Глущенко Г.А.

**Кристаллическая структура моногидрата тетрабромидодихлоридостанната(IV) энрофлоксацина**

**Ключевые слова:** кристаллическая структура, катион энрофлоксацина, анион тетрабромидодихлоридостанната(IV), водородные связи

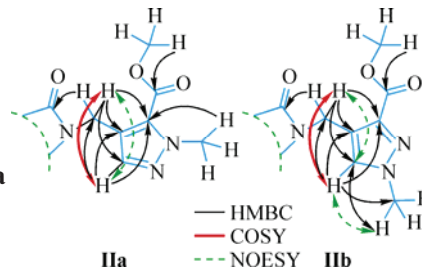


317

Сахаутдинов И.М., Батыршин И.Р., Фатыхов А.А., Юмабаева В.М., Супоницкий К.Ю., Антипин М.Ю., Юнусов М.С.

**Молекулярные структуры метил 4-[(1,3-диоксо-1,3-дигидро-2H-изоиндол-2-ил)метил]-1-метил-1H-пиразол-5-карбоксилата и метил 4-[(1,3-диоксо-1,3-дигидро-2H-изоиндол-2-ил)метил]-1-метил-1H-пиразол-3-карбоксилата**

**Ключевые слова:** метил 4-[(1,3-диоксо-1,3-дигидро-2H-изоиндол-2-ил)метил]-1-метил-1H-пиразол-5-карбоксилат, метил 4-[(1,3-диоксо-1,3-дигидро-2H-изоиндол-2-ил)метил]-1-метил-1H-пиразол-3-карбоксилат, ЯМР спектроскопия, рентгеноструктурный анализ



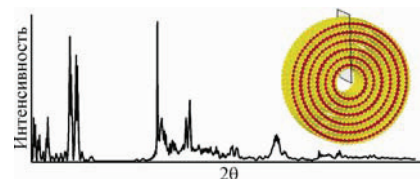
323

## СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Еняшин А.Н., Ивановский А.Л.

**О возможностях метода рентгеновской дифракции в определении политипов в наноструктурированных слоистых дисульфидах металлов**

**Ключевые слова:** слоистый дисульфид молибдена, наноструктуры, политипизм, рентгеновская дифракция, моделирование

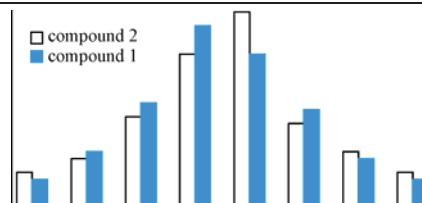


328

Hosseinfard M., Hashemi L., Amani V., Morsali A.

**Characterization of pure phase Zn(II) oxide nanoparticles via thermal decomposition of two zinc(II) complexes of the 6,6'-dimethyl-2,2'-bipyridine ligand**

**Keywords:** nano-particle, 6,6'-dimethyl-2,2'-bipy, Zn(II), surfactant



336