

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 55

Январь-февраль

№ 1, 2014

СО Д Е Р Ж А Н И Е

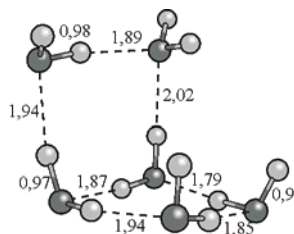
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Захаров И.И.

Структура кластеров воды $(\text{H}_2\text{O})_6^-$ и аммиака $(\text{NH}_3)_{13}^-$ с избыточным электроном.

Квантово-химические исследования

Ключевые слова: квантово-химические DFT и MP2 расчеты, молекулярные кластеры воды и аммиака, модель сольватированного электрона

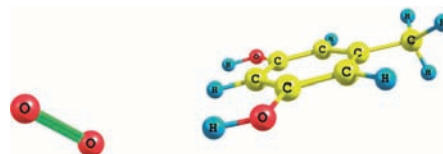


7

Кобзев Г.И., Казаева А.Н., Футтеркнехт З.

Влияние 5-метилрезорцина на спиновую конверсию в молекулярном кислороде

Ключевые слова: 5-метилрезорцин, возбужденные состояния кислорода, поверхность потенциальной энергии (ППЭ), спиновая конверсия

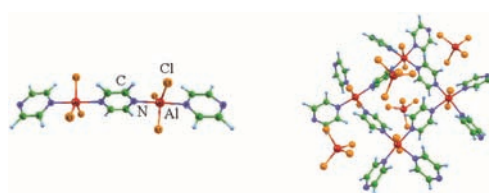


14

Давыдова Е.И., Тимошкин А.Ю., Френкинг Г.

Структура и устойчивость молекулярных и ионных комплексов AlCl_3 с пиразином и 4,4'-бипиридилем

Ключевые слова: квантово-химические расчеты, молекулярные комплексы, ионные комплексы, хлорид алюминия, пиразин, 4,4'-бипиридил, структура, устойчивость

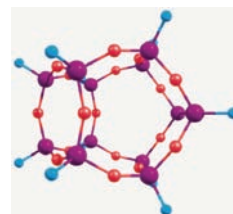


20

Семёнов С.Г., Бердина М.Е.

Квантово-химическое исследование структуры додекасилсесквиоксана $\text{H}_{12}\text{Si}_{12}\text{O}_{18}$

Ключевые слова: додекасилсесквиоксан, эндокомплекс, симметрия, структура, ионизация, B3LYP, PBE0, MP2(full), cc-pVTZ



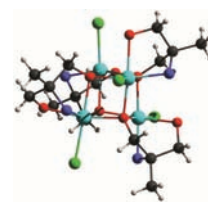
29

Abbas G., Mariya-al-Rashida, Irfan A., Ali Rana U., Shakir I.

36

DFT studies on tetranuclear cubane complex **[Ni₄(ampd)₄(Cl₄)]·MeCN**

Keywords: Ni(II) cubane, 2-amino-2-methyl-2,3-propandiol, single crystal X-ray crystallography, density functional theory, time-dependent density functional theory

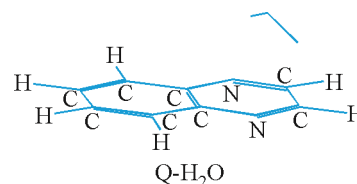


El Assyry A., Benali B., Boucetta A., Lakhrissi B.

43

Application of the AMYR calculating method **on quinoxaline, 3-chloroquinoxaline** **and 3-methylquinoxaline in interaction** **with *n* water molecules (*n* varies from 1 to 6)**

Keywords: quinoxaline, 3-chloroquinoxaline, 3-methylquinoxaline, AMYR, interaction energies, conformations

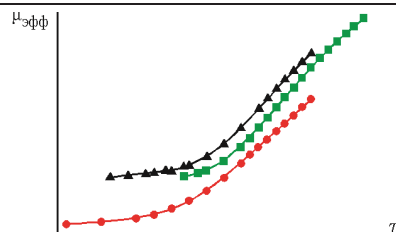


ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Шакирова О.Г., Далецкий В.А., Лавренова Л.Г., Варнек В.А., Рудаков Д.А., Поткин В.И.

Спин-кроссовер в комплексах карборанов железа(II) **с *трис*(пиразол-1-ил)метаном**

Ключевые слова: синтез, комплексы железа(II), карбораны, *трис*(пиразол-1-ил)метан, магнетохимия, электронная, ИК и мессбауэровская спектроскопия

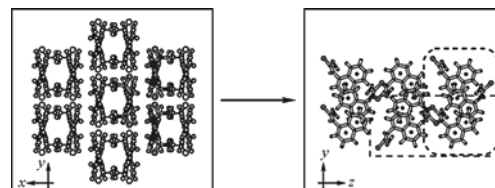


50

AlDamen M.A., Sinnokrot M.

Crystallographic and theoretical studies **of 1-(1-naphthyl)-2-thiourea** **with intermolecular N—H...S heteroatom interaction** **and N—H...π interaction**

Keywords: 1-(1-naphthyl)-2-thiourea, S...H—N hydrogen bond, interaction energy, *ab initio*, RIMP2, B3LYP



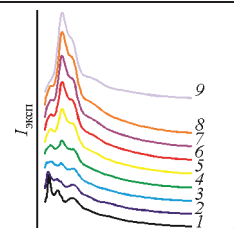
58

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Гречин О.В., Смирнов П.Р., Тростин В.Н.

Рентгенодифракционное исследование водных **растворов трихлорида лутеция**

Ключевые слова: водные растворы лантанидов, структура, рентгенодифракционный анализ, малоугловые максимумы интенсивности рассеяния, функции радиального распределения

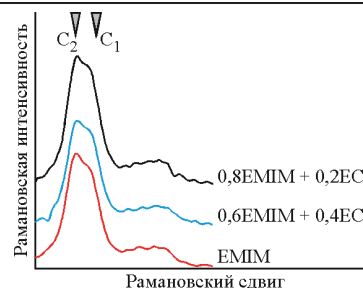


66

Гафуров М.М., Кириллов С.А., Рабаданов К.Ш., Атаев М.Б., Третьяков Д.О.

Спектроскопическое исследование процессов **сольватации и ассоциации в растворах соли лития** **в ионных и апротонных растворителях**

Ключевые слова: спектры комбинационного рассеяния, ионная жидкость, этилметилимидазолиний бис(трифторметансульфонил)имид, литий бис(трифторметилсульфонил)имид, сольватация

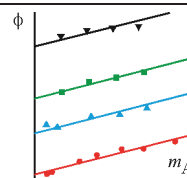


72

Королёв В.П., Серебрякова А.Л.

Гидратация аминокислот в водных растворах сульфатов магния и натрия

Ключевые слова: парциальный объем, аминокислоты, водно-солевые системы, вклады групп, гидратные числа



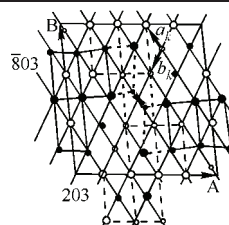
77

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

Кристаллографический анализ природных сульфидов тяжелых металлов: рукселита, фельберталита, марруччиита

Ключевые слова: кристаллографический анализ, структуры сульфидов, катионные и анионные подрешетки, рукселит, фельберталит, марруччиит

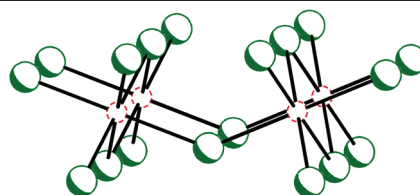


81

Тютюнник А.П., Дьячкова Т.В., Зайнулин Ю.Г., Громилов С.А.

Структура моноклинной модификации Re_3B

Ключевые слова: рений, бориды, высокое давление, высокая температура, рентгенофазовый анализ, кристаллохимия

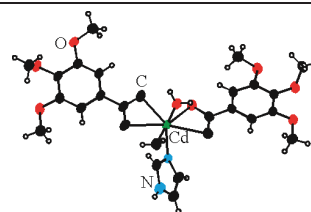


88

Chen H., Zhang L., Hu B., Wu X.-L., Wang T., Huang G., Wang Y.-Q., Liu C.-Z.

Crystal structure and luminescence of two cadmium 3,4,5- trimethoxybenzoate complexes

Keywords: 3,4,5- trimethoxybenzoate, crystal structure, cadmium, spectral analysis, luminescence

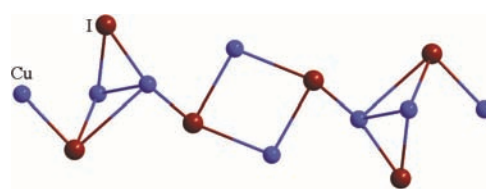


94

Li X., Zhao H., Zeng Q.

Structure and photoluminescent property of a three-dimensional pillared-layer La(III)-Cu(I) heterometallic coordination polymer

Keywords: heterometallic coordination polymer, crystal structure, pillared-layer, photoluminescent property



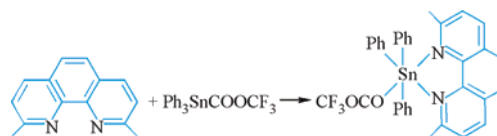
101

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Yousefi M., Safari M., Torbati M.B., Amanzadeh A.

***In vitro* anti-proliferative activity of novel hexacoordinated triphenyltin(IV) trifluoroacetate containing a bidentate N-donor ligand**

Keywords: organotin(IV) complex, 2,9-dimethyl-1,10-phenanthroline, spectroscopic study, anticancer drug, cell line

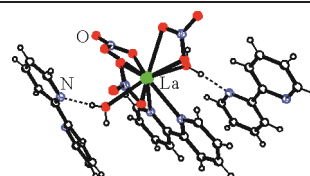


106

Александреску Л., Боурош П., Опря О., Житару И.

Кристаллическая структура $[\text{La}(\text{NO}_3)_3(\text{H}_2\text{O})_2(\text{BiPy})] \cdot 1,5(\text{BiPy})$

Ключевые слова: комплексное соединение La(III) , синтез, строение, кристаллическая структура



112