

11
Ж 92



ISSN 00136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

Том 54
май
июнь
2013

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 3

НОВОСИБИРСК

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

ТОМ 54

Май-июнь

№ 3, 2013

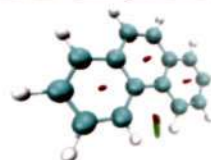
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Вашенко А.В., Бородина Т.Н.

**Н–Н взаимодействие в фенантрене:
притяжение или отталкивание?**

Ключевые слова: фенантрен, антрацен, QTAIM, EDA,
Н–Н взаимодействие

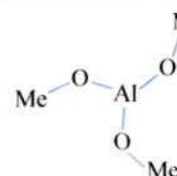


427

Алексеев Н.В.

**Квантово-химическое исследование
алкоксипроизводных трехкоординированного
алюминия**

Ключевые слова: алюмооксаны, квантовая химия,
метод NBO, метод AIM

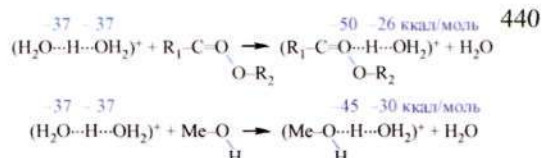


432

Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В.

**Строение дисольватов протона, образующихся при
кислотном гидролизе этилформиата и метилацетата**

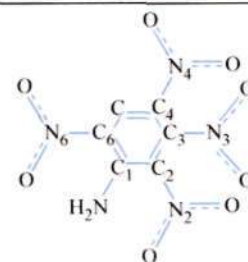
Ключевые слова: водородная связь, сродство к протону,
дисольват протона, квантово-химический расчет,
этилформиат, метилацетат, метилформиат



Li X.-H., Han D.-F., Zhang X.-Z.

**Investigation of correlation between impact sensitivities
and bond dissociation energies in benzenoid nitro
compounds**

Keywords: Density functional theory,
Bond dissociation energies (BDEs), benzenoid nitro molecules,
Impact sensitivity



447

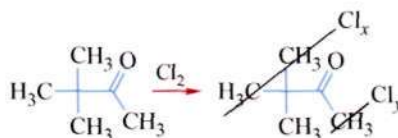
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Зенкевич И.Г., Елисеенков Е.В., Касаточкин А.Н.

453

Идентификация продуктов органических реакций при отсутствии аддитивности хроматографических индексов удерживания. Хлорпроизводные метил-*трет*-бутилкетона

Ключевые слова: метил-*трет*-бутилкетон, хлорпроизводные, хромато-массе-спектрометрическая идентификация, индексы удерживания, оценка по аддитивным схемам, отклонения от аддитивности

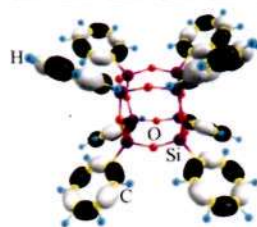


Осьмушко И.С., Вовна В.И., Яшин В.А., Короченцев В.В., Тутов М.В., Шапкин Н.П.

463

Электронное строение октавинил- и октафенилсилсесквиоксана по данным РФЭС и ТФП

Ключевые слова: полиэдрические силоксаны, РФЭС, ТФП, электронная структура

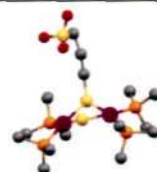


Ujam O.T., Henderson W., Nicholson B.K.

470

A zwitterionic monoalkylated derivative of $[Pt_2(\mu-S)_2(PPh_3)_4]$ from 1,3-propanesultone

Keywords: platinum complex, alkylation reaction, zwitterions, thiolate ligand, X-ray crystal structure



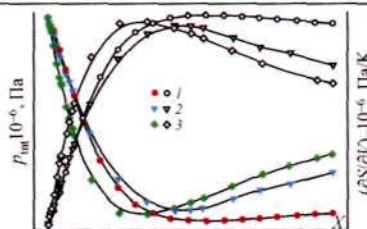
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Зайчиков А.М., Макаров С.В.

475

Термодинамические и структурные характеристики водных растворов линейных диолов

Ключевые слова: внутреннее давление, межмолекулярные взаимодействия, термодинамические и структурные характеристики водных растворов неэлектролитов, вода, линейные диолы

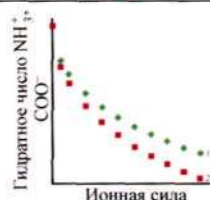


Королёв В.П.

482

Объемные свойства, структурные эффекты и гидратация аминокислот в водно-солевых системах

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



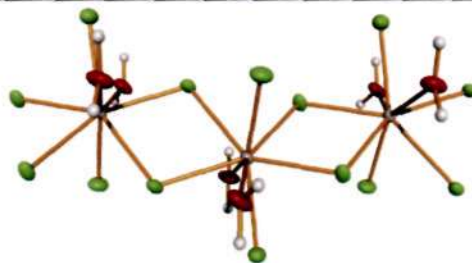
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

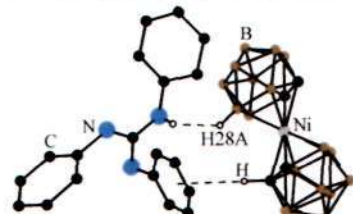
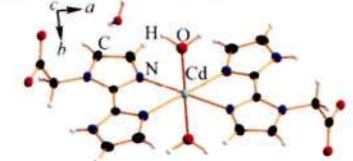
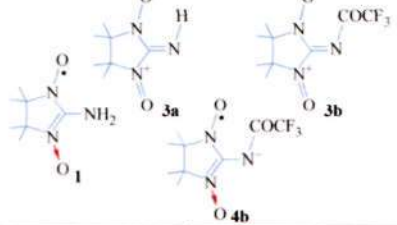
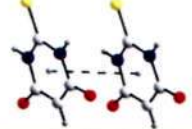
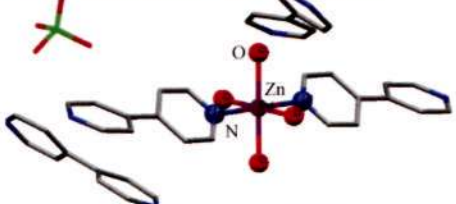
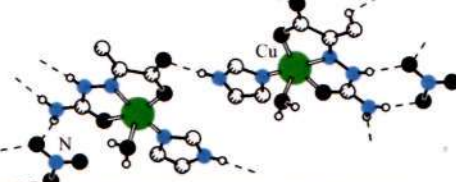
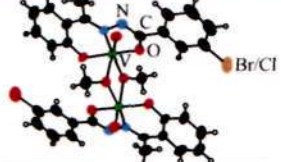
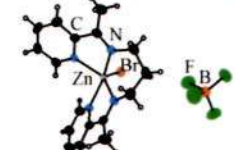
Давидович Р.Л., Пушилин М.А., Логвинова В.Б., Герасименко А.В.

488

Кристаллическая структура моноклинных модификаций тригидратов тетрафторидов циркония и гафния

Ключевые слова: синтез, тетрафториды циркония и гафния, рентгеноструктурный анализ, кристаллическая структура, водородная связь



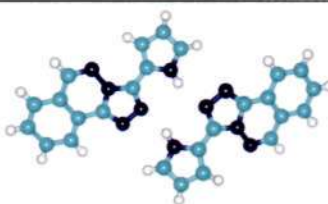
<p>Полянская Т.М., Дроздова М.К., Волков В.В. Кристаллическая структура комплекса N, N', N''-трифенилгуанидиний-бис- [η⁵-π-(3)-дикарболлид]Ni(III) Ключевые слова: низкотемпературный РСА, кристаллическая структура, трифенилгуанидиний, бис(дикарболлид)никеля, межмолекулярные взаимодействия</p>	<p>494</p> 
<p>Wang J., Tao J.-Q., Xu X.-J., Tan C.-Y. Cadmium(II) complex with (1'H-[2,2']biimidazoly-1-yl)-acetic acid: synthesis, crystal structure and luminescence Keywords: Cd(II) complex, crystal structure, hydrogen bonding, C—O...π interaction, photoluminescence</p>	<p>502</p> 
<p>Третьяков Е.В., Романенко Г.В., Толстиков С.Е., Овчаренко В.И. Молекулярная и кристаллическая структура аминозамещенного нитронилнитроксила и его производных Ключевые слова: нитроксильные радикалы, кристаллическая структура</p>	<p>506</p> 
<p>Головнев Н.Н., Молокеев М.С., Белаш М.Ю. Кристаллическая структура 2-тиобарбитурата калия Ключевые слова: кристаллическая структура, тиобарбитурат калия, водородные связи, π—π-взаимодействие</p>	<p>512</p> 
<p>Dolatyari L., Seddigi P., Ramazani A., Amiri M.G., Morsali A. A new Zn(II) complex of unusual unidentate coordination of 4,4'-bipyridine, a new precursor for preparation zinc(II) oxide nanoparticles Keywords: zinc(II), 4,4'-bipyridine, coordination polymer, fluorescence, nanoparticles</p>	<p>517</p> 
<p>Чумаков Ю.М., Цапков В.И., Жанно Е., Гуля А.П. Кристаллическая структура нитрата {акваимидазол-[2-(2-карбамоилгидразон)-пропионато]} меди(II) Ключевые слова: комплексы 3d-металлов, рентгеноструктурный анализ, семикарбазон пировиноградной кислоты, имидазол</p>	<p>523</p> 
<p>Yu J. Crystal structures of new isostructural oxovanadium(V) complexes with hydrazone ligands Keywords: oxovanadium complex, synthesis, crystal structure, hydrazone</p>	<p>528</p> 
<p>Xie H.-Q., Xiong Y., Dang Y.-L. Zinc(II) complexes with tetradentate Schiff base ligand N,N'-bis(1-pyridin-2-yl-ethylidene)propane-1,3-diamine: synthesis and crystal structures Keywords: zinc(II), Schiff base, synthesis, crystal structure</p>	<p>533</p> 

Попов Л.Д., Левченков С.И., Щербаков И.Н.,
Кискин М.А., Борисова Н.Е., Цатурян А.А., Коган В.А.

538

**Кристаллическая структура
бис-изоникотиноилгидразона 2,5-диформилпиррола**

Ключевые слова: гидразоны, рентгеноструктурный анализ,
водородная связь, теория функционала плотности



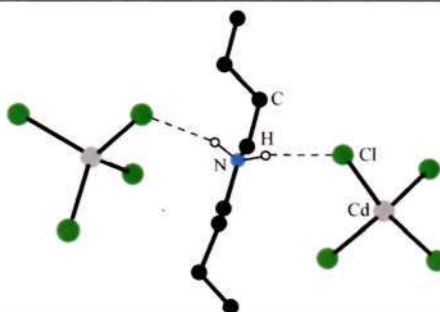
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Лосева О.В., Родина Т.А., Иванов А.В.,
Герасименко А.В., Анцуткин О.Н.

544

**Структурная организация дитиокарбаматных
гетерополиядерных комплексов золота(III)-кадмия
по данным РСА и MAS ЯМР ^{113}Cd спектроскопии**

Ключевые слова: диалкилдитиокарбаматы кадмия
со свойствами хемосорбентов, формы связывания золота
из растворов, гетерополиядерные комплексы золота(III)-
кадмия, кристаллическая и супрамолекулярная структура,
РСА, MAS ЯМР ^{113}Cd , анизотропия химического сдвига ^{113}Cd

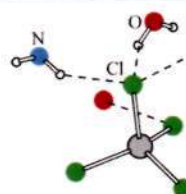


Васильев А.Д., Головнев Н.Н.

553

**Кристаллическая структура двух гидратных фаз
тетрахлоридокобальтата(II) ципрофлоксацина**

Ключевые слова: тетрахлоридокобальтат(II)
ципрофлоксацина, кристаллическая структура,
водородные связи, $\pi-\pi$ -взаимодействие

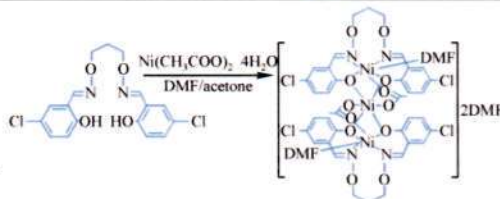


Dong W.-K., Sun Y.-X., Yao J., Wang L., Dong X.-Y.,
Gao X.-H.

559

**Structure of a new trinuclear nickel(II) complex with
a salen-type bisoxime ligand**

Keywords: salen-type bisoxime ligand, Ni(II) complex, synthesis,
crystal structure



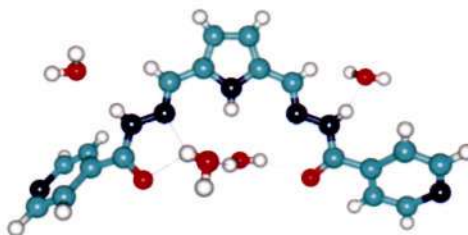
СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Попов Л.Д., Левченков С.И., Щербаков И.Н.,
Александров Г.Г., Туполова Ю.П., Луков В.В.,
Аскаленина О.И., Коган В.А.

565

**Кристаллическая структура полициклического
продукта окисления 1'-фталазинилгидразона
2-формилпиррола**

Ключевые слова: гидразоны, рентгеноструктурный анализ,
водородная связь, теория функционала плотности

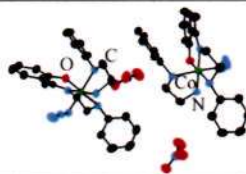


Dai C.-H., Mao F.-L.

570

**Structure of a new Schiff base cobalt(III) complex with
antibacterial activity**

Keywords: Schiff base, cobalt(III) complex, synthesis, crystal
structure, biological activity



**Аналоги димефосфона. 3. Молекулярная
и кристаллическая структура
пиридиноилгидразонов димефосфона,
обладающих противотуберкулезной активностью**

Ключевые слова: пиридиноилгидразоны димефосфона,
никотиноилгидразон димефосфона, изоникотиноилгидразон
димефосфона, строение ацилгидразонов, геометрические
изомеры, амидные конформеры, рентгеноструктурный анализ,
биологическая активность, токсичность,
противотуберкулезная активность



КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Берёзин А.С., Надолинный В.А., Басова Т.В.

581

**Исследование методом ЭПР причин влияния
магнитного поля на димеризацию
фталоцианиinatoалюминий(III) хлорида
и фталоцианинатогаллий(III) хлорида
в пленочных структурах**

Ключевые слова: фталоцианин алюминия(III),
фталоцианин галлия(III), спиновая ловушка,
магнитный момент, электронный парамагнитный резонанс

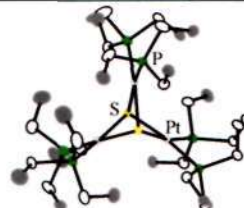


Анюшин А.В., Соколов М.Н., Вировец А.В., Федин В.П.

584

**Кристаллическая структура
[Pt₃S₂(P(CH₂OH)₃)₆](PF₆)(OH)·H₂O**

Ключевые слова: комплексы платины,
сульфидные комплексы, водорастворимые фосфины,
кристаллическая структура, водородные связи



Матвеева А.А., Решетов П.В., Кривенько А.П.

587

**Кристаллическая структура 9-(фуран-2-ил)-
4,5,6,7,8,9-гексагидро-[1,2,3,4]тетразоло-
[1,5-b]хиназолина**

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ,
кристаллическая структура, 9-(фуран-2-ил)-4,5,6,7,8,9-
гексагидро[1,2,3,4]тетразоло[5,1-b]хиназолин

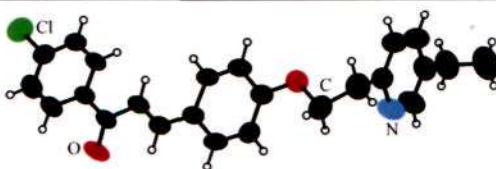


Kayalvizhi M., Vasuki G., Ramamurthi K., Navin B Patel,
Nemant R Patel

590

**Crystal Structure 1-(4-Chlorophenyl)-3-{4-[2-(5-ethyl-
pyridin-2-yl)-ethoxy]-phenyl}- propenone**

Keywords: chalcones, propenone, chlorophenyl, pyridine ring

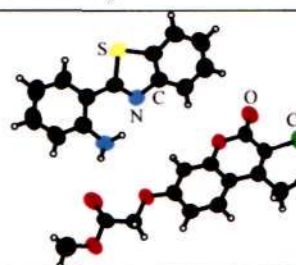


Al-Amiery A.A., Al-Temimi A.A., Kadhum A.A.H.,
Al-Majedy Y.K., Al-Bayati R.I., Mohamad A.B.

593

**Co-crystal structure of mixed molecules of methyl 2-(3-
chloro-4-methyl-2-oxo-2h-chromen-7-yloxy)acetate and
2-(2-aminophenyl)benzothiazole**

Keywords: 2-(2-aminophenyl)benzothiazole), co-crystal,
coumarins, methanol, single-crystal X-ray



Содержание следующего номера — в конце журнала