



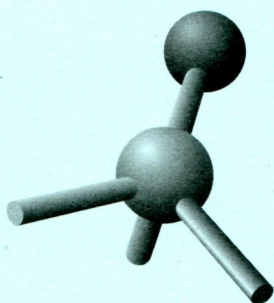
11  
Ж 92

ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

Том 54  
июль  
август  
**2013**

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



**№ 4**

НОВОСИБИРСК

ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

ТОМ 54

Июль-август

№ 4, 2013

СОДЕРЖАНИЕ

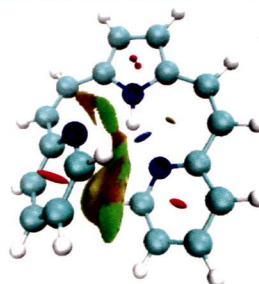
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Вашенко А.В., Афонин А.В.

605

**Особенности трехцентрового водородного связывания в ди(винилпирролил)пиридине и ди(винилпиридил)пирроле по данным *ab initio* расчета и QТАИМ анализа**

**Ключевые слова:** трехцентровая водородная связь, маятниковые колебания, *ab initio* расчёты, QТАИМ, 2,6-бис-[2-(1*H*-пиррол-2-ил)-винил]-пиридин, 2,5-бис-[2-(пиридин-2-ил)-винил]-1*H*-пиррол

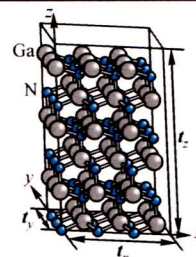


Литинский А.О., Новиков С.И., Попов Д.С.

615

**Электронно-энергетическая структура GaN при замещении атомов галлия атомами титана или цинка**

**Ключевые слова:** энергетический спектр электронов, DFT-расчеты, гексагональный нитрид галлия, структуры Ti/GaN- и Zn/GaN-, разбавленные магнитные полупроводники

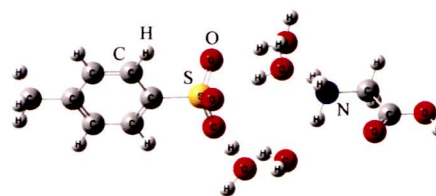


Нечаева Л.С., Бутырская Е.В., Шапошник В.А., Селеменев В.Ф.

623

**Структурный анализ сульфокатионообменника в форме глицина**

**Ключевые слова:** структурный анализ, квантово-химический расчет, молекулярно-динамическое моделирование, сульфокатионообменник, глицин

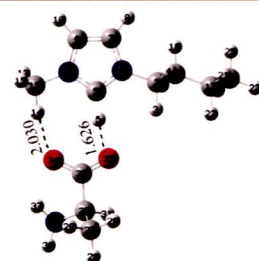


Li Z.W., Wu W.S., Du Z.Y., Hao X.Y.

631

**Structure and interaction between anion and cation in the ion pairs of 1-butyl-3-methylimidazolium cation and alanine anion [BMIM][Ala]**

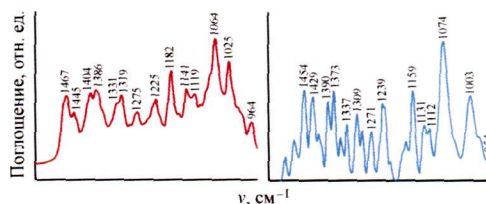
**Keywords:** amino acid ionic liquids (AAILs), density functional theory (DFT), natural bond orbital (NBO), second order interaction energy



Андрианов В.М., Королевич М.В.

**Расчет и сравнительный анализ ИК спектров (22S,23S)-24-эпибрассинолида и (22S,23S)-28-гомобрассинолида**

**Ключевые слова:** ИК спектроскопия, анализ нормальных колебаний, абсолютные ИК интенсивности, характеристические частоты, интерпретация ИК спектра, brassinosteroids, brassinolides



639

Годнева М.М., Залкинд О.А., Беляевский А.Т.

**Исследование строения фторофосфатоцирконатов (гафнатов) щелочных металлов методами ИК спектроскопии и кристалломорфологии**

**Ключевые слова:** фторофосфатоцирконаты, фторофосфатогафнаты, калий, рубидий, цезий, химические связи, слоистые кристаллы

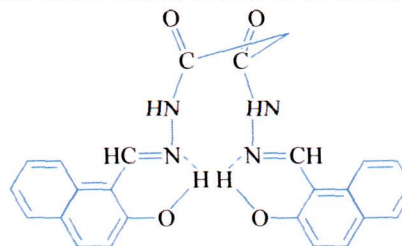


651

Kumar A., Chanu O.B., Koch A., Lal R.A.

**Heterobimetallic dioxomolybdenum(VI) complexes derived from bis(2-hydroxy-1-naphthaldehyde) malonyldihydrazone: synthesis and characterization**

**Keywords:** bis(2-hydroxy-1-naphthaldehyde) malonyldihydrazone, heterobimetallic, dioxomolybdenum, dioxouranium, magnetic moment, spectroscopic studies

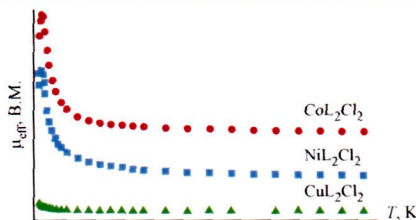


657

Лавренова Л.Г., Жилин А.С., Богомяков А.С., Шелудякова Л.А., Алексеев А.В., Василевский С.Ф.

**Магнитные свойства комплексов хлоридов 3d-металлов с 3-амино-4-этоксикарбонилпиразолом**

**Ключевые слова:** синтез, комплексы, 3d-металлы, 3-амино-4-этоксикарбонилпиразол, магнетохимия, электронная и ИК спектроскопия

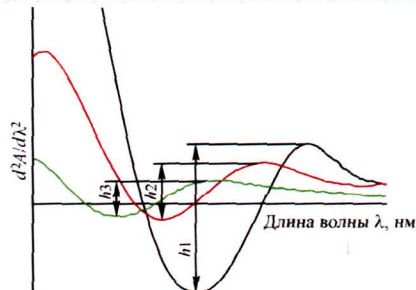


668

Биглова Ю.Н., Крайкин В.А., Михеев В.В., Торосян С.А., Колесов С.В., Мустафин А.Г., Мифтахов М.С.

**Количественное определение методом УФ спектроскопии производных метанофуллеренов с различной степенью замещения**

**Ключевые слова:** фуллерен, метанофуллерены, УФ спектроскопия, спектры поглощения, производная спектроскопия второго порядка



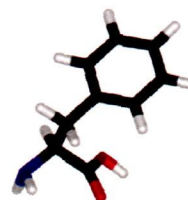
674

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Абросимов В.К., Лебедева Е.Ю.

**Хиральный эффект в параметрах Сеченова растворимости аргона в водных растворах α-валина и α-фенилаланина**

**Ключевые слова:** аргон, вода, водные растворы аминокислот, растворимость, влияние температуры, параметры Сеченова, параметры парных взаимодействий



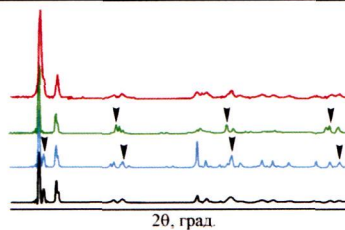
679

Шефер К.И., Черепанова С.В., Цыбуля С.В.,  
Исупов В.П., Мороз Э.М.

685

**Влияние нарушений структуры и упаковки слоев на дифракционную картину гиббсита и байерита**

**Ключевые слова:** гиббсит, байерит, гидроксиды алюминия, интеркаляция, структура, дефекты, дефекты упаковки, моделирование дифракционных картин

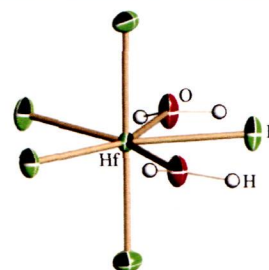


Давидович Р.Л., Пушилин М.А., Логвинова В.Б.,  
Герасименко А.В.

696

**Мономерный комплексный анион  $[\text{HfF}_5(\text{H}_2\text{O})_2]^-$  в кристаллической структуре тригидрата пентафторогафната 4-амино-1,2,4-триазолия: синтез и рентгеноструктурное исследование**

**Ключевые слова:** синтез, пентафторогафнат, 4-амино-1,2,4-триазолий, кристаллическая структура, мономерный комплексный анион

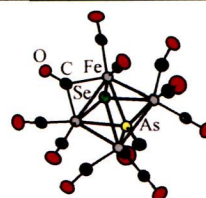


Баширов Д.А., Куратьева Н.В., Смоленцев А.И.,  
Конченко С.Н.

702

**Строение новых карбонильных кластерных комплексов с остовом  $[\text{Fe}_4(\mu_4\text{-Q})(\mu_4\text{-AsCH}_3)(\text{CO})_{11}]$**

**Ключевые слова:** карбонильный кластер, железо, синтез, кристаллическая структура

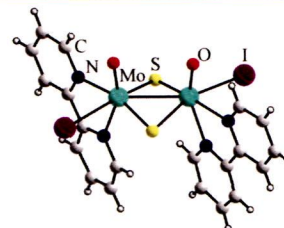


Гущин А.Л., Ларичева Ю.А., Алфёрова Н.И.,  
Вировец А.В., Соколов М.Н.

707

**Биядерные кластерные комплексы молибдена, содержащие 2,2'-бипиридил или 1,10-фенантролин: синтез и строение**

**Ключевые слова:** биядерные кластеры, молибден, полипиридилные лиганды, кристаллическая структура

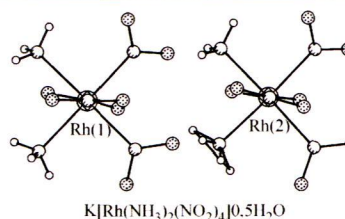


Байдина И.А., Беляев А.В., Корольков И.В.,  
Воробьева С.Н.

714

**Влияние природы внешнесферного катиона на кристаллическую структуру солей аниона  $\text{cis-}[\text{Rh}(\text{NH}_3)_2(\text{NO}_2)_4]^-$**

**Ключевые слова:** родий, *cis*-диаамминтетранитриты, соли, кристаллическая структура

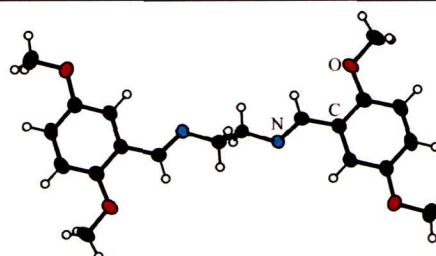


Khalaji A.D., Mighani H., Gholinejad M., Grivani G.,  
Jalali Akerdi S., Fejfarova K., Dusek M.

721

**Characterization and computational studies of zinc(II)-halide complexes with bidentate Schiff base ligand  $(2,5\text{-MeO-ba})_2\text{En}$ : crystal structure of  $(2,5\text{-MeO-ba})_2\text{En}$**

**Keywords:** zinc(II) halides, Schiff base, crystal structure, density functional theory

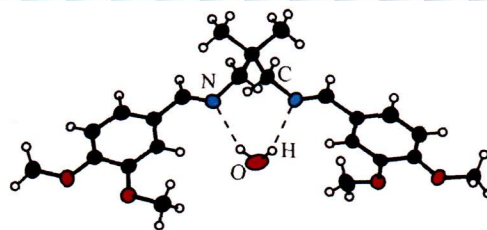


Khalaji A.D., Foroghnia A., Fejfarova K., Dusek M.

728

**Characterization of Schiff bases derived from 3,4-dimethoxybenzaldehyde: the crystal structure of N,N'-bis(3,4-dimethoxybenzylidene)-2,2-dimethylpropane-1,3-diamine hydrate**

**Keywords:** diimine, Schiff base, spectroscopy, single-crystal X-ray diffraction

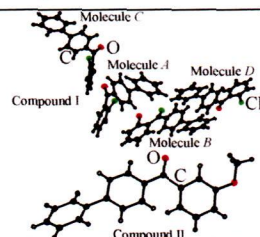


Zhang S.-J., Xiang H., Rao G.-W., Hu W.-X.

733

**Crystal structures of two 4-phenylbenzophenones**

**Keywords:** 4-phenylbenzophenone, [1,1'-biphenyl]-4-yl(2-chlorophenyl)methanone, [1,1'-biphenyl]-4-yl(3-methoxyphenyl)methanone, crystal structure, single crystal XRD, torsion angle, hydrogen bond,  $\pi$ - $\pi$  contact



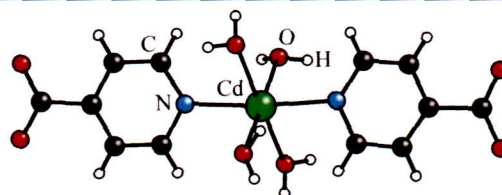
**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Payehghadr M., Morsali A.

741

**Thermolysis preparation of cadmium(II) oxide nanoparticles from a new three-dimensional cadmium(II) supramolecular compound**

**Keywords:** supramolecular, cadmium(II) oxide, nanoparticle, thermolysis



**КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ**

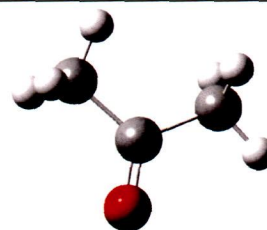
Красных Е.Л.

746

**Прогнозирование энтальпий испарения на основе модифицированных индексов Рандича.**

**Альдегиды и кетоны**

**Ключевые слова:** энтальпия испарения, топологический индекс, индекс связанности, альдегиды, кетоны

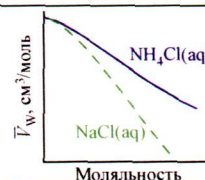


Королёв В.П.

751

**Гидратация аминокислот в водных растворах хлоридов аммония и натрия**

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

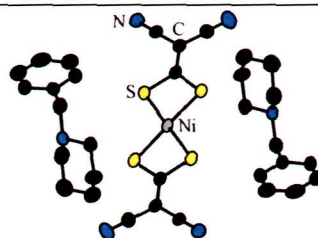


Hu Y.-L., Liang Li-bo, Liu J.-F., Chen W.-Q., Zhou J.-R., Liu X.-P., Yang L.-M., Ni C.-L.

755

**Crystal structure of bis(iso-maleonitriledithiolate)nickel(II) benzylpiperidinium**

**Keywords:** bis(iso-maleonitriledithiolate)nickel(II) anion, benzylpiperidinium, crystal structure

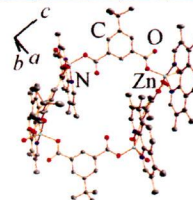


Wang J., Tao J.-Q., Xu X.-J., Tan C.-Y.

759

**Hydrothermal synthesis, crystal structure and luminescence of a novel tetranuclear zinc(II) complex**

**Keywords:** tetranuclear, 3,4,7,8-tetramethyl-1,10-phenanthroline, 5-tert-butyl isophthalic acid and fluorescent property

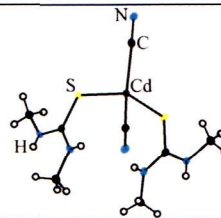


Malik M.R., Rüffer T., Lang H., Isab A.A., Ali S., Ahmad S., Stoeckli-Evans H.

763

**Structural characterization of dicyanidobis(*N,N'*-dimethylthiourea- $\kappa$ S)cadmium(II)**

**Keywords:** cadmium cyanide, *N,N'*-dimethylthiourea, crystal structure

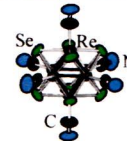


Леднёва А.Ю., Вировец А.В., Наумов Н.Г.

768

**Взаимопроникающие каркасы в структуре кластерного комплекса [(SnMe<sub>3</sub>)<sub>3</sub>Re<sub>6</sub>Se<sub>8</sub>(CN)<sub>6</sub>]**

**Ключевые слова:** рений, октаэдрический кластер, олово

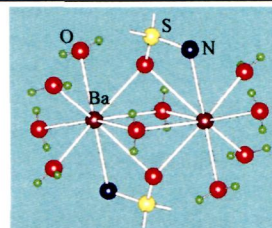


Миминошвили Э.Б., Миминошвили К.Э., Беридзе Л.А., Зазашвили С.Р.

773

**Кристаллическая структура бис[Ba(Aet)(OH)<sub>2</sub>]<sub>5</sub>]бис(Aet)·4H<sub>2</sub>O**

**Ключевые слова:** комплексные соединения, рентгеноструктурный анализ, Ba(II), Sr(II), этазол, сульфаниламиды

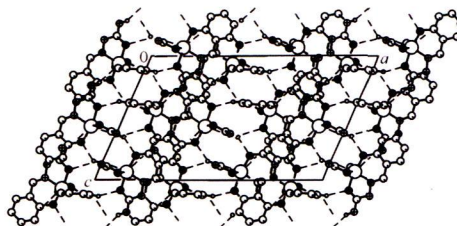


Чумаков Ю.М., Цапков В.И., Петренко П.А., Паломарес-Санчес С.А., Гуля А.П.

778

**Кристаллическая структура [2-(2-гидроксибензилиден)-гидразинкарбоксимидато(1-)] [2-(2-гидроксибензилиден)-гидразинкарбоксимидато(2-)]хром моногидрата**

**Ключевые слова:** комплексы 3d-металлов, рентгеноструктурный анализ, семикарбазон салицилового альдегида

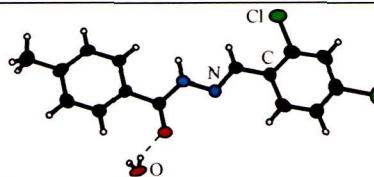


Lei Y., Chen G., Yang Q., Fu C., Pan J., Li T.

783

**Structures of two new hydrazone compounds derived from 4-methylbenzohydrazide**

**Keywords:** synthesis, crystal structure, hydrazone compound, hydrogen bonding



Содержание следующего номера — в конце журнала