

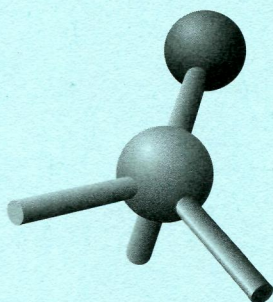
11
*92

ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

Том 54
ноябрь
декабрь
2013

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 6

НОВОСИБИРСК

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 54

Ноябрь-декабрь

№ 6, 2013

СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Морозов В.А.

965

Описание спин-кроссовера в неоднородной цепочке обменных кластеров

Ключевые слова: молекулярные магнетики, обменный кластер, спин-кроссовер, эффективный магнитный момент

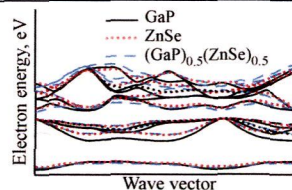


Kara Mohamed W., Mezrag F., Boucenna M., Bouarissa N.

972

Electronic structure and related properties for quasi-binary (GaP)_{1-x}(ZnSe)_x crystals

Keywords: electronic structure, optical properties, quasi-crystals, pseudopotentials

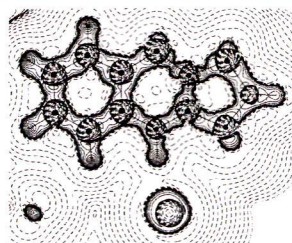


Tojiboev A., Wang R., Pan F., Englert U., Turgunov K., Okmanov R.

980

Insight into chemical bonding and electrostatic potential: a charge density study on a quinazoline derivative

Keywords: quinazoline, electronic structure, high-resolution X-ray diffraction, charge density, topological analysis, dipole moment

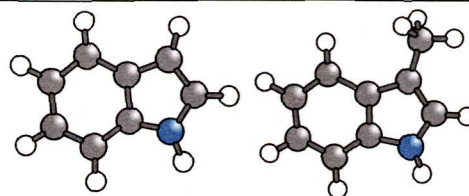


Тен Г.Н., Яковлева А.А., Баранов В.И.

986

Теоретическое исследование гидрофобности и гидрофильности индола, скатола и этанола

Ключевые слова: индол, скатол, этанол, комплексы с водой, гидрофобность, геометрические параметры водородного мостика, частоты валентных колебаний

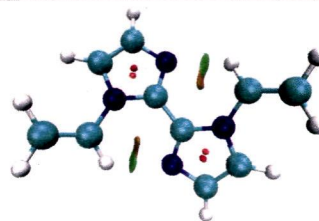


Вашенко А.В., Афонин А.В.

997

Внутримолекулярная водородная связь С–Н...N в 1,1'-дивинил-2,2'-биимидазолиле по данным *ab initio* расчетов и QTAИМ анализа

Ключевые слова: внутримолекулярные водородные связи С–Н...N, расчет *ab initio*, QTAИМ, RDG анализ



Охлопкова Л.Б., Матус Е.В., Исмагилов И.З.,
Керженцев М.А., Просвирин И.П., Исмагилов З.Р.

1003

Синтез мезопористых биметаллических Pt-Sn каталитических покрытий из полиядерных предшественников для процессов тонкого органического синтеза

Ключевые слова: капиллярные микрореакторы, наноструктурированные катализаторы, мезопористый оксид титана, золь-гель синтез, биметаллические кластеры металлов, гидрирование цитрала

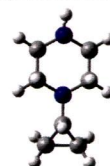


Keşan G., Alver Ö., Bilge M., Parlak C.

1013

DFT, FT-Raman and FT-IR investigations of 1-cyclopropylpiperazine

Keywords: 1-cyclopropylpiperazine, vibrational spectra, PED, DFT, B3LYP

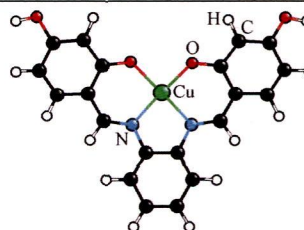


Beyramabadi S.A., Eshtiagh-Hosseini H.,
Housaindokht M.R., Shirzadi S., Morsali A., Naseri M.A.

1024

Experimental and theoretical characterization of N,N'-bis(2,4-dihydroxybenzylidene)-1,2-diaminobenzene Schiff base and its Cu(II) complex

Keywords: Schiff base, copper, IR assignment, NMR, DFT, resorcinol

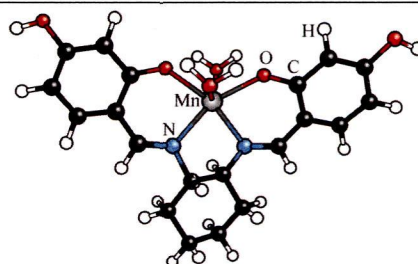


Eshtiagh-Hosseini H., Beyramabadi S.A., Mirzaei M.,
Morsali A., Salimi A.R., Naseri M.A.

1032

3,3'-Dihydroxy-4,4'-[1,2-cyclohexanediyl-bis(nitrilomethylidene)]-bis-phenol Schiff base and its Mn(II) complex: synthesis, experimental and theoretical characterization

Keywords: Schiff base, salen, Mn, DFT, IR assignment, NMR, cyclohexanediyl



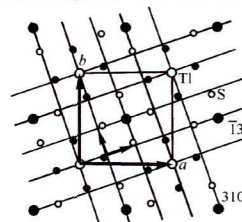
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

1039

Структурообразующая роль Tl⁺ в природных и синтетических сульфидах

Ключевые слова: сульфиды таллия, кристаллографический анализ, катионные и анионные подрешетки, таллий в анионной подрешетке

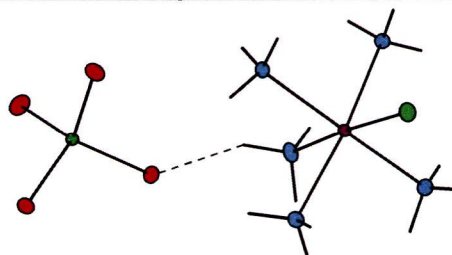


Громилов С.А., Храненко С.П., Плюснин П.Е.,
Ванина П.Ю., Куратьева Н.В.

1046

[M(NH₃)₅Cl]WO₄ (M = Cr, Rh). Синтез, кристаллическая структура, термические свойства

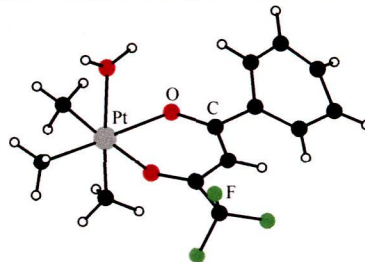
Ключевые слова: вольфрам, родий, хром, комплексная соль, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ, термические свойства



Жаркова Г.И., Байдина И.А., Смоленцев А.И.,
Игуменов И.К.

**Свойства и структура летучих фенолсодержащих
β-дикетонатов триметилплатины(IV):
(CH₃)₃Pt(btfa)H₂O, (CH₃)₃Pt(bac)Py и исходного
комплекса [(CH₃)₃PtI]₄**

Ключевые слова: β-дикетонаты триметилплатины(IV),
синтез, структура, летучесть, термические свойства

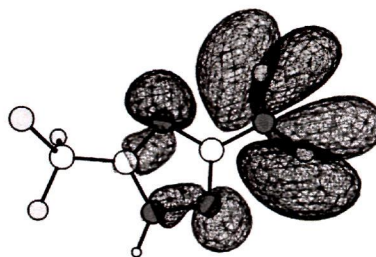


1052

Слепухин П. А., Салмина Е.С., Потемкин В.А.,
Гришина М.А.

**Кристаллическое и электронное строение
гетеромолекулярных комплексов 3,6-бис-
(3,5-диметилпиразол-1-ил)-1,2,4,5-тетразина
с азолами**

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ,
молекулярные кристаллы, водородная связь,
3,6-бис(3,5-диметилпиразол-1-ил)-1,2,4,5-тетразин,
квантово-топологический анализ

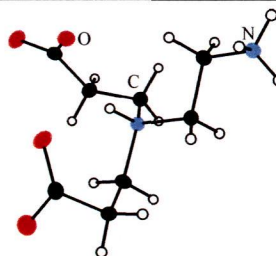


1060

Подмарева О.Н., Старикова З.А., Цирульникова Н.В.

**Кристаллическая и молекулярная структура
«асимметричной» этилендиамин-N,N-ди-3-
пропионовой кислоты моногидрата**

Ключевые слова: N,N-этилен-бис-β-аланин,
этилендиамин-N,N-ди-3-пропионовая кислота, ЭДДП,
комплексон, асимметричная структура,
рентгеноструктурный анализ

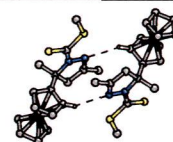


1071

Zhu X., Xiang D.-S., Shi W.-Y.

**Crystal structures of methyl and benzyl 5-ferrocenyl-3,5-
dimethyl-2-pyrazoline-1-dithiocarboxylate**

Keywords: pyrazoline, ferrocenyl, dithiocarboxylate, X-ray



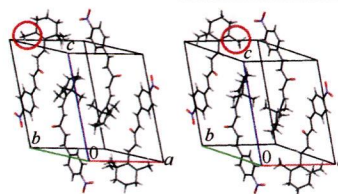
1077

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Fernandes W.B., Malaspina L.A., Martins F.T., Lião L.M.,
Camargo A.J., Lariucci C., Noda-Perez C., Napolitano H.B.

**Conformational variability in a new terpenoid-like
bischalcone: structure and theoretical studies**

Keywords: terpenoid-like bischalcone, X-ray diffraction,
disorder modeling



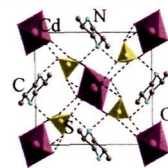
1082

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Llassi R., Rekik W., Naïli H., Mhiri T., Bataille T.

**Crystal architecture and thermal decomposition
of two new organically templated cadmium sulfates**

Keywords: hybrid material, slow evaporation, X-ray diffraction,
crystal structure, thermal decomposition, supramolecular



1092

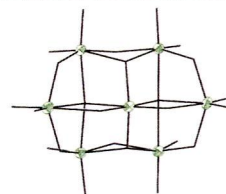
КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Куратьева Н.В., Терёшкин И.О., Храненко С.П.,
Громилов С.А.

1103

Кристаллическая структура $[\text{CoEn}_3]_2(\text{W}_7\text{O}_{24}) \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: вольфрам, кобальт, комплексная соль, карбиды, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ, термические свойства

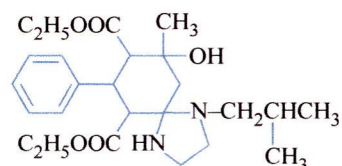


Магеррамов А.М., Исмиев А.И., Кадырова Н.А.,
Гаджиева К.Э., Аскеров Р.К., Потехин К.А.

1107

Кристаллическая структура диэтил-1-изобутил-9-гидрокси-9-метил-7-фенил-1,4-дiazаспиро[4,5]декан-6,8-дикарбоксилата $\text{C}_{25}\text{H}_{38}\text{N}_2\text{O}_5$

Ключевые слова: оксоциклогександикарбоксилаты, N-изобутилэтилендиамин, diaзаспироциклы

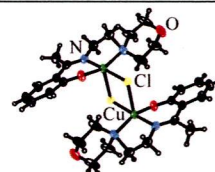


Qian S.-S., Li H.-H., You Z.-L., Zhu H.-L.

1110

Construction of chlorido-bridged dinuclear copper(II) complexes with similar tridentate Schiff bases

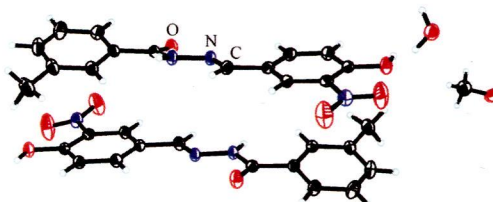
Keywords: Schiff base, copper complex, dinuclear complex, crystal structure



Ma J.-J.

Characterization and crystal structures of solvated N' -(4-hydroxy-3-nitrobenzylidene)-3-methylbenzohydrazide and N' -(4-dimethylamino-benzylidene)-3-methylbenzohydrazide

Keywords: benzohydrazone, Schiff base, hydrogen bonding, $\pi \cdots \pi$ interaction

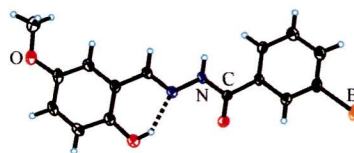


1115

Zong Q.-S., Wu J.-Y.

Crystal structures of aroylhydrazones derived from 5-methoxysalicylaldehyde

Keywords: aroylhydrazone, Schiff base, synthesis, X-ray structure, hydrogen bonding



1121

Указатель статей. Том 54..... 1127

Авторский указатель. Том 54..... 1136

Содержание следующего номера — в конце журнала