

Ж92

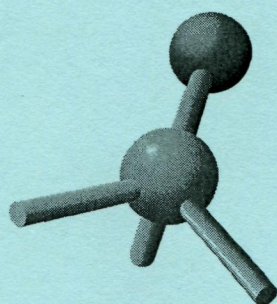


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 56
март
апрель
2015

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 2

НОВОСИБИРСК

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 56

Март-апрель

№ 2, 2015

СОДЕРЖАНИЕ

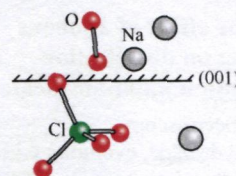
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Корабельников Д.В., Журавлёв Ю.Н.

219

**Структура и электронные свойства систем
 $\text{Na}_2\text{O}_2/\text{NaClO}_4(001)$, $\text{K}_2\text{O}/\text{KClO}_3(001)$**

Ключевые слова: оксид, пероксид, хлорат, перхлорат,
поверхность, нанослой, связь



Туровцев В.В., Чернова Е.М., Орлов Ю.Д.

225

**Изучение индуктивного и стерического
эффектов в нормальных спиртах**

Ключевые слова: квантовая теория атомов в молекуле,
спирты, индуктивный эффект, стерический эффект,
электронная плотность, аддитивность,
молекулярное моделирование, макроинкрементирование

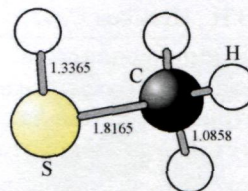


Yu A.-Y., Yang Y.-P.

232

**Theoretical studies on the spectroscopic properties
of methyl mercaptan (CH_3SH)**

Keywords: methyl mercaptan (CH_3SH), ground state,
triplet state, excitation energy, ionization energy,
the electron affinity



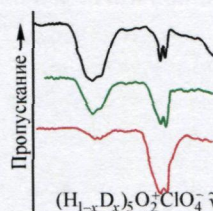
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Карелин А.И., Никитина З.К.

237

**ИК-спектроскопическое уточнение позиции H^+
и D^+ в структуре орторомбических кристаллов
 $\text{H}_5\text{O}_2^+\text{ClO}_4^-$ и $\text{D}_5\text{O}_2^+\text{ClO}_4^-$**

Ключевые слова: хлорная кислота, ИК спектроскопия,
кристаллические фазы

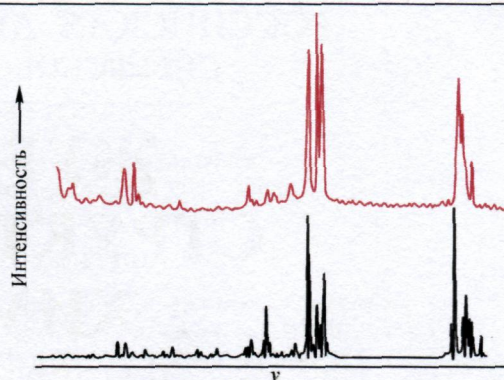


Хамалетдинова Н.М., Мещерякова И.Н.,
Пискунов А.В., Кузнецова О.В.

249

Экспериментальное и теоретическое исследование колебательных спектров комплексов олова(IV) на основе 2-гидрокси-3,6-ди-*трет*-бутил-*пара*-бензохинона

Ключевые слова: спектроскопия комбинационного рассеяния, инфракрасная спектроскопия, теория функционала плотности, олово, 2-гидрокси-3,6-ди-*трет*-бутил-*пара*-бензохинон, 2,5-дигидрокси-3,6-ди-*трет*-бутил-*пара*-бензохинон



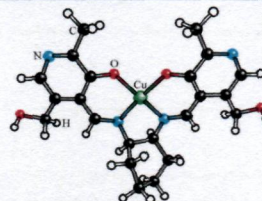
Beqramabadi S.A., Morsali A., Shams A.

259

N,N'-dipyridoxyl(1,2-diaminocyclohexane) and its Cu(II) complex:

Synthesis, experimental and theoretical studies

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

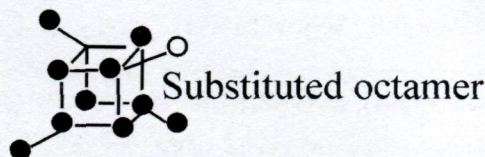


Goudarzi N.

266

²⁷Al NMR study of the effect of aqueous and methanolic media on distribution of tetraphenylammonium aluminosilicate species

Keywords: ²⁷Al NMR spectroscopy, tetraphenylammonium hydroxide, evolution with time, methanolic aluminosilicate solutions

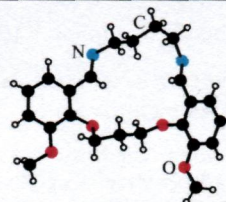


Khalaji A.D., Ghoran S.H., Rohlicek J., Dusek M.

275

Characterization and crystal structure of a 17-membered macrocyclic Schiff base compound MeO-sal-pn-bn

Keywords: macrocyclic, Schiff base, synthesis, spectroscopy, powder diffraction, orthorhombic



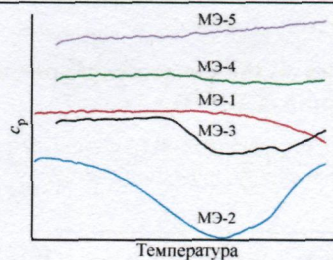
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Батов Д.В., Карцев В.Н., Штыков С.Н.

282

Теплоемкость, электропроводность и структурные изменения микроэмульсий вода – додецилсульфат натрия – триэтаноламин – 1-пентанол-1,1,2,2-тетрафтордибромэтан

Ключевые слова: микроэмульсии, электропроводность, изобарная теплоемкость, температурные и концентрационные зависимости

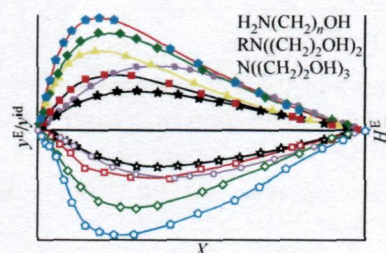


Титова А.Г., Крестьянинов М.А., Зайчиков А.М.

288

Термодинамические и структурные характеристики водных растворов самоассоциированных аминспиртов

Ключевые слова: внутреннее давление, межмолекулярные взаимодействия, термодинамические и структурные характеристики растворов, самоассоциированные аминспирты, вода, диолы

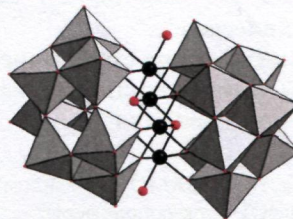


Борисов С.В., Магарилл С.А., Первухина Н.В.

297

Когерентная сборка в ряде структур с кластерами тяжелых катионов

Ключевые слова: когерентная сборка (coherence-assembly), кристаллографический анализ, кластерные группировки, катионная подрешетка, полианионы с W и Mo

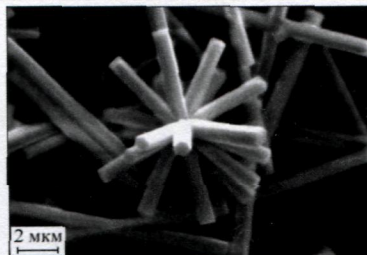


Троицкая И.Б., Гаврилова Т.А., Зубарева А.П., Троицкий Д.Ю., Громилов С.А.

304

Термические превращения состава и структуры гексагонального оксида молибдена

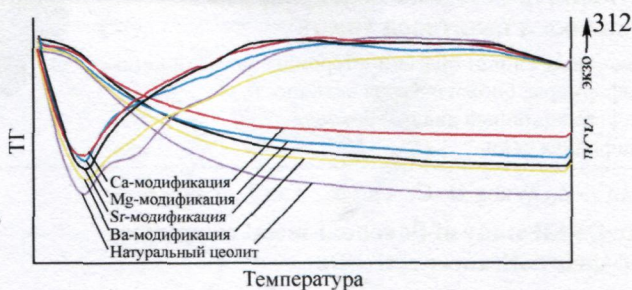
Ключевые слова: оксид молибдена, метастабильная фаза, структурная вода, гигроскопичные кристаллы, текстура кристаллов



Спиридонов Ф.М., Соколова М.Д., Охлопкова А.А., Корякина В.В., Шиц Е.Ю., Аргунова А.Г., Никифоров Л.А.

Изучение влияния ионного обмена на сорбционные свойства цеолита рода гейландита-клиноптилолита

Ключевые слова: цеолит, клиноптилолит, гейландит, ионный обмен, сорбционная емкость, удельная поверхность, рентгеноструктурный анализ, термический анализ

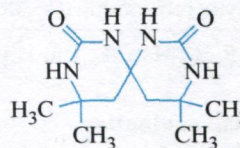


Нетреба Е.Е.

319

Исследование молекулярной и кристаллической структуры координационного металлополимера $\{[Co(C_{11}H_{20}N_4O_2)(H_2O)_3], [Co(H_2O)_6](NO_3)_4\}_n$

Ключевые слова: кобальт(II), искаженный октаэдр, спирокарбон, координационный полимер, структура, РСА

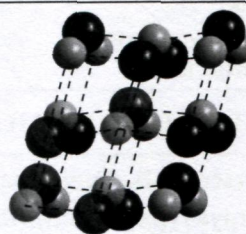


Васильченко Д.Б., Венедиктов А.Б., Байдина И.А., Корнев С.В.

325

Влияние природы аниона на структуру комплексных солей $[RhL_4Cl_2]X$ (L = Py, γ - и β -пиколины)

Ключевые слова: родий, пиридин, пиколин, рентгеноструктурный анализ

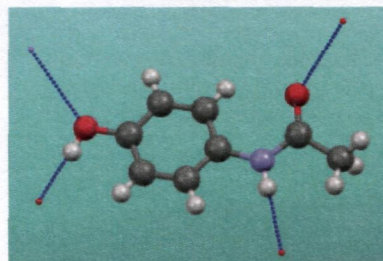


Дружбин Д.А., Дребущак Т.Н., Миньков В.С., Болдырева Е.В.

332

Кристаллическая структура двух полиморфных модификаций парацетамола при 20 К: поиск взаимосвязи «структура–свойство»

Ключевые слова: полиморфизм, парацетамол, рентгеноструктурный анализ, водородные связи, низкие температуры

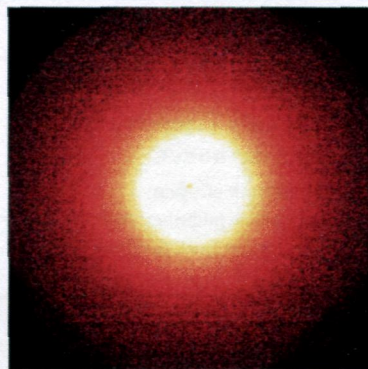


Петров В.А., Кузнецова Н.В., Аверьянова Н.В.,
Губайдуллин А.Т., Мухаметшин Т.И.

339

**Аморфно-кристаллическая
и надмолекулярная структура статистических
сополимеров 3,3-бис(азидометил)оксетана
и 3-азидометил-3-метилоксетана**

Ключевые слова: сополимеры
3,3-бис(азидометил)оксетана (БАМО) и 3-азидометил-
3-метилоксетана (АММО), блок-сополимеры,
рентгеноструктурный анализ, ИК спектроскопия,
аморфно-кристаллическая структура,
доменная структура

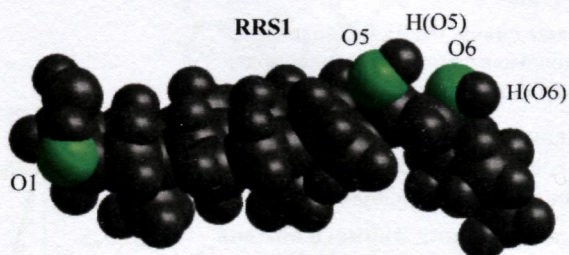


СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Андреанов В.М., Анищенко И.В.

**Оценка влияния структуры боковой цепи
брасиностероидов на их биологическую
активность методами молекулярной
механики и квантовой химии**

Ключевые слова: брасиностероиды, брасинолиды,
конформеры, биологическая активность,
конформационный анализ, боковая цепь,
водородная связь

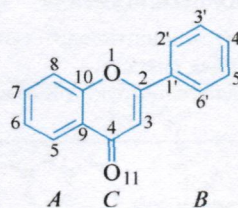


345

Qian J.-Z., Wang B.-C., Fan Y., Tan J., Yang X.

**The QSAR study of flavonoid-metal complexes
and their anticancer activities**

Keywords: flavonoid-metal complexes,
quantum chemistry descriptors, anticancer,
artificial neural network (ANN),
quantitative structure-activity relationship (QSAR)

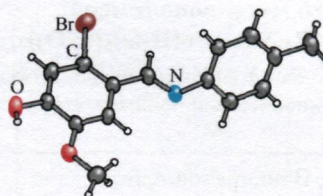


353

Zhou W., Ma J., Yuan R.-J., Han X., Liu H.-G.,
Zhu H.-L.

**Structure and biological evaluation
of (*E*)-5-bromo-2-methoxy-4-
((phenylimino)methyl)phenol derivatives
as antibacterial agents**

Keywords: vanillin derivatives, Schiff base,
crystal structure, antibacterial activity



361

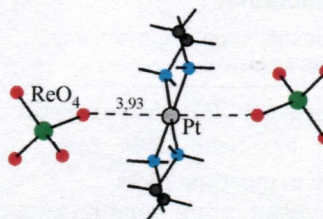
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Храненко С.П., Куратьева Н.В., Громилов С.А.

**Кристаллическая структура [Pt(En)₂](ReO₄)₂
– предшественника твердого раствора**

Pt_{0,33}Re_{0,67}

Ключевые слова: платина, рений, этилендиамин,
кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ,
рентгенофазовый анализ, твердый раствор



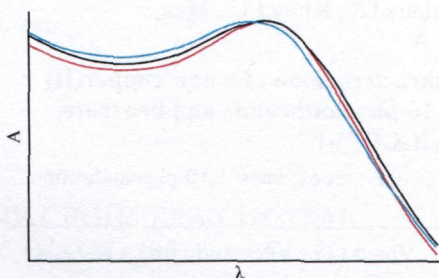
367

Поповецкий П.С., Булавченко А.И.,
Демидова М.Г., Подлипская Т.Ю.

372

Влияние полярности органического растворителя на структуру адсорбционного слоя наночастиц золота по данным фотон-корреляционной спектроскопии

Ключевые слова: наночастицы золота, обратные мицеллы, фотон-корреляционная спектроскопия, неводный электрофорез

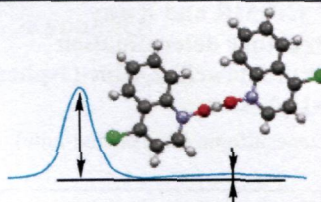


Романов В.В., Нижник Я.П., Фофанов А.Д.

381

Конформационный и структурный анализ трибромида бис(4-хлорхинолин-N-оксид)водорода

Ключевые слова: конформация, конформер, N-оксид, гибридизация, рентгеноструктурный анализ



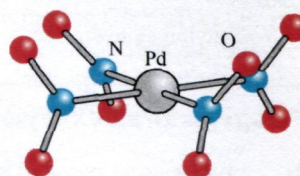
КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Задесенец А.В., Филиппова М.Ю., Байдина И.А.,
Корнев С.В.

387

Кристаллическая структура нитропалладатов серебра и бария

Ключевые слова: палладий, нитрокомплексы, серебро

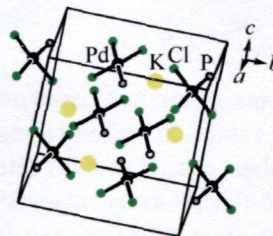


Анюшин А.В., Соколов М.Н., Вировец А.В.,
Федин В.П.

393

Кристаллическая структура $K[Pd(P(CH_2OH)_3)Cl_3]$

Ключевые слова: комплексы палладия, плоскокватратные комплексы, водорастворимые фосфины, кристаллическая структура, водородные связи

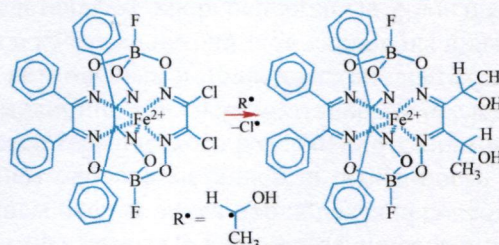


Вершинин М.А., Бурдуков А.Б., Первухина Н.В.,
Ельцов И.В.

396

Строение продукта свободно-радикального замещения атомов хлора в клатрохелате железа(II) на два этанольных фрагмента

Ключевые слова: клатрохелаты, железо(II), свободно-радикальные реакции, реакции координированных лигандов, РСА, ЯМР

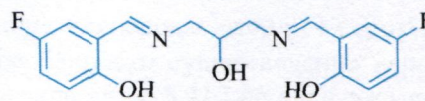


Qian S.-S., You Z.-L., Zhu H.-L.

400

Crystal structure of an end-on azido-bridged polymeric zinc(II) complex derived from N,N' -bis(5-fluoro-2-hydroxybenzylidene)-2-hydroxy-1,3-propanediamine

Keywords: Schiff base, zinc, polymeric complex, crystal structure, azide

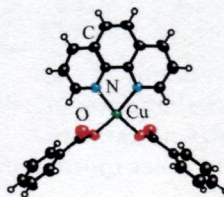


Batool S.S., Ahmad S., Khan I.U., Ejaz,
Harrison W.T.A.

405

**Structural characterization of a new copper(II)
complex of 1,10-phenanthroline and benzoate,
[Cu(phen)(C₆H₅CO₂⁻)₂]**

Keywords: copper(II) carboxylates, 1,10-phenanthroline,
benzoic acid

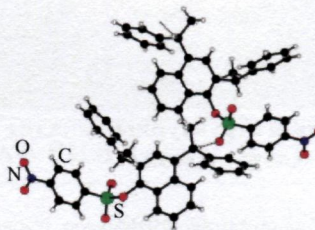


Kayalvizhi M., Vasuki G., Veerareddy A.,
Sreenivasulureddy B., Veerabhadrarao A.

410

**FT-IR, ¹H-NMR, ¹³C-NMR and X-ray
crystallographic structure determination
of 4-nitro-benzenesulfonic acid 2,4-bis-(1-phenyl-
ethyl)-naphthalen-1-yl ester**

Keywords: nitro-benzenesulfonic acid, phenyl-ethyl,
naphthalene, ester

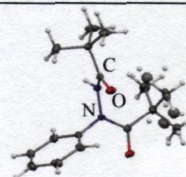


Saeed A., Arshad I., Flörke U.

414

**Crystal structure of *N'*-pivaloyl-*N*-
phenylpivalohydrazide**

Keywords: *N'*-pivaloyl-*N*-phenylpivalohydrazide,
crystal structure



Содержание следующего номера — в конце журнала