

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор Лев Николаевич Мазалов
Зам. гл. редактора Георгий Михайлович Жидомиров
Отв. секретарь Владимир Алексеевич Варнек

ЧЛЕНЫ РЕДКОЛЛЕГИИ

Н.М. Бажин, Е.В. Болдырева, В.И. Бухтияров, Ю.В. Гатилов, Л.А. Грибов,
А.Л. Ивановский, В.Б. Кобычев, С.Г. Козлова, С.В. Коренев, Г.Г. Маленков,
В.Н. Пиоттух-Пелецкий, Н.В. Подберезская, М.Н. Соколов, А.В. Солдатов, Д.В. Солдатов,
С.Ф. Солодовников, Б.П. Толочко, С.В. Цыбуля

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

академик РАН В.В. Болдырев, д. ф.-м. н. С.В. Борисов, академик РАН В.М. Бузник,
академик РАН Ф.А. Кузнецов, академик РАН Ю.Н. Молин, д. х. н. Ю.И. Наберухин,
академик РАН Р.З. Сагдеев, академик РАН Ю.Д. Цветков, чл.-корр. РАН В.П. Федин

УЧРЕДИТЕЛИ ЖУРНАЛА

Сибирское отделение РАН,
Учреждение Российской академии наук
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Адрес редакции: 630090 Новосибирск, пр. Акад. Лаврентьева, 3. ИНХ СО РАН.
Телефон (383)-330-63-66
E-mail: JSC@niic.nsc.ru

Электронная страница Журнала структурной химии
<http://jsc.niic.nsc.ru/>
или ссылка на него на странице Издательства СО РАН
<http://www.sibran.ru>

Журнал переводится на английский язык и издается
издательством Springer в США под названием
Journal of Structural Chemistry

www.springerlink.com

Ответственные за номер: *Г.М. Жидомиров, Н.М. Бажин, Ю.И. Наберухин, Г.Г. Маленков,*
С.Ф. Солодовников, В.Н. Пиоттух-Пелецкий, М.Н. Соколов

Зав. редакцией *Елена Львовна Таскаева*
Выпускающие редакторы *Е.Л. Таскаева, И.А. Скоробогатова*
Художественный редактор *С.М. Маслакова*
Компьютерная верстка: *С.М. Маслакова, И.Г. Трефилова, Л.В. Кукарина*

Сдано в набор 08.12.2014. Подписано к печати 07.03.2015. Бум. оф. №1 80 г/м²
Формат 60 × 84 1/8. Офсетная печать. Усл. печ. л. 21,94.
Уч.-изд. л. 19,4. Тираж 250 экз. Заказ № 74. Цена свободная

Журнал зарегистрирован в Министерстве печати и информации РФ за № 0110103 от 27.01.93.
Оригинал-макет подготовлен в редакционно-издательском отделе ИНХ СО РАН
Издательство СО РАН
630090 Новосибирск, Морской пр., 2
Отпечатано на полиграфическом участке ИНХ СО РАН
630090 Новосибирск, пр. Акад. Лаврентьева, 3

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 56

Март-апрель

№ 2, 2015

СОДЕРЖАНИЕ

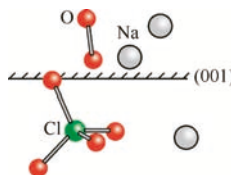
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

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

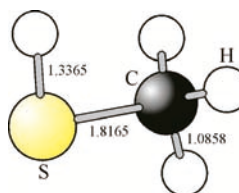


Yu A.-Y., Yang Y.-P.

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



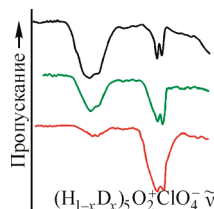
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

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

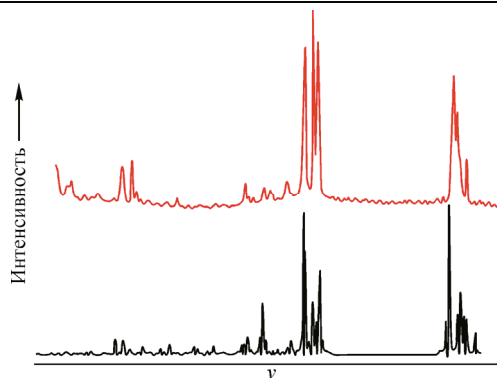


Хамалетдинова Н.М., Мещерякова И.Н.,
Пискунов А.В., Кузнецова О.В.

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



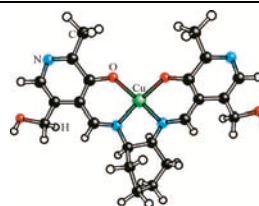
Beyramabadi S.A., Morsali A., Shams A.

259

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

Synthesis, experimental and theoretical studies

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

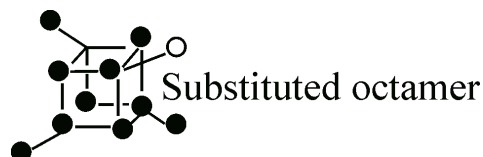


Goudarzi N.

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

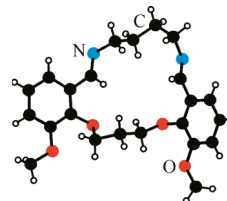


Khalaji A.D., Ghoran S.H., Rohlicek J., Dusek M.

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



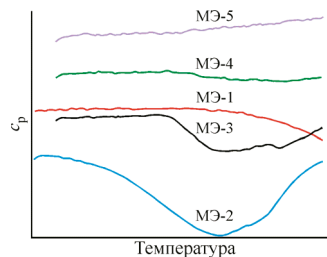
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

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

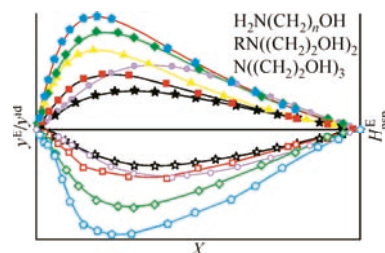


Титова А.Г., Крестьянинов М.А., Зайчиков А.М.

288

Термодинамические и структурные характеристики водных растворов самоассоциированных аминспиртов

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



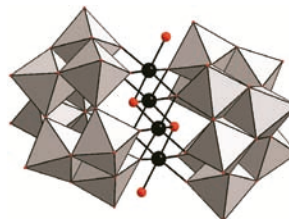
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

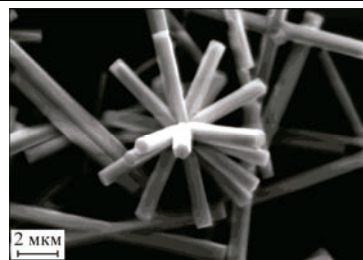


Троицкая И.Б., Гаврилова Т.А., Зубарева А.П., Троицкий Д.Ю., Громилов С.А.

304

Термические превращения состава и структуры гексагонального оксида молибдена

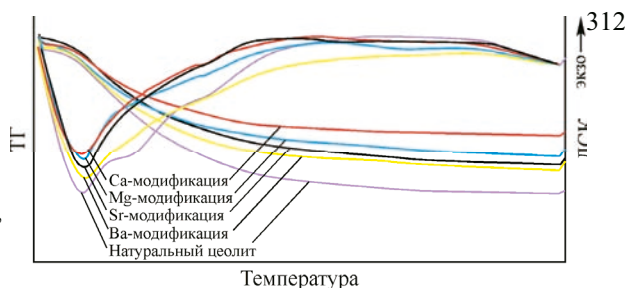
Ключевые слова: оксид молибдена, метастабильная фаза, структурная вода, гигроскопичные кристаллы, текстура кристаллов



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



Нетребя 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, PCA

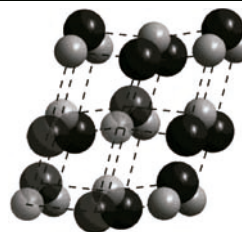


Васильченко Д.Б., Венедиктов А.Б., Байдина И.А., Корнев С.В.

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

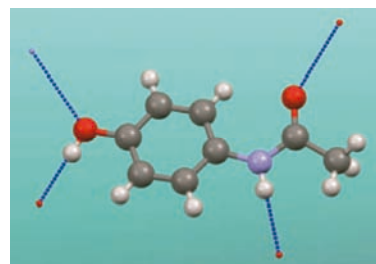


Дружбин Д.А., Дребущак Т.Н., Миньков В.С., Болдырева Е.В.

332

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

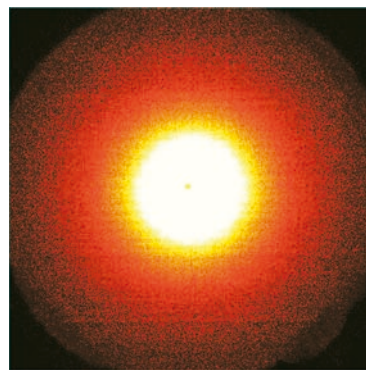
Ключевые слова: полиморфизм, парацетамол, рентгеноструктурный анализ, водородные связи, низкие температуры



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

**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



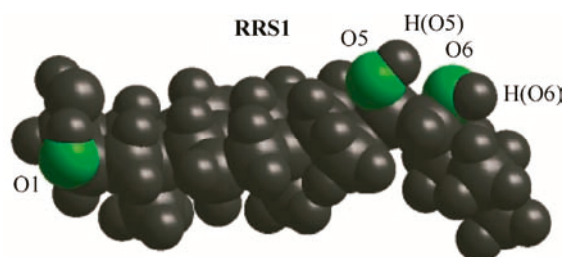
339

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Андрианов 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

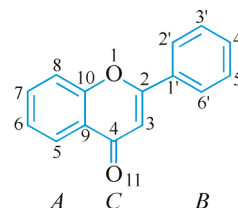


345

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)

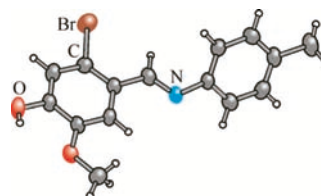


353

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



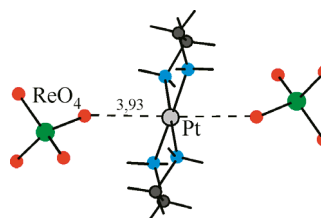
361

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