

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 54

Ноябрь-декабрь

№ 6, 2013

СОДЕРЖАНИЕ

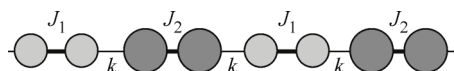
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Морозов В.А.

965

Описание спин-кроссовера в неоднородной цепочке обменных кластеров

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

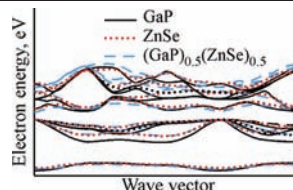


Kara Mohamed W., Mezrag F., Boucenna M., Bouarissa N.

972

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

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

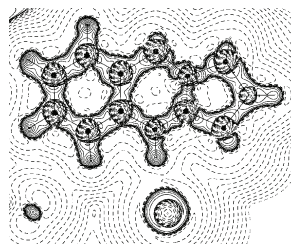


Tojiboev A., Wang R., Pan F., Englert U., Turgunov K., Okmanov R.

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

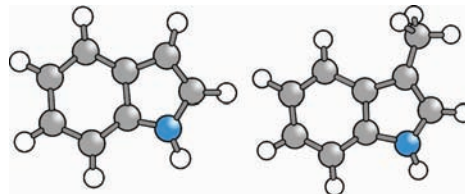


Тен Г.Н., Яковлева А.А., Баранов В.И.

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

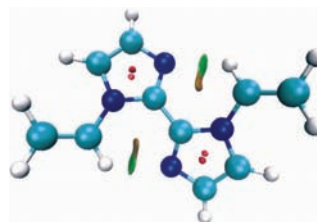


Ващенко А.В., Афонин А.В.

997

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

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



ИЗДАТЕЛЬСТВО СО РАН
НОВОСИБИРСК
2013

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

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

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

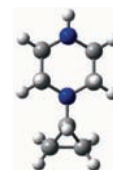


1003

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

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

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

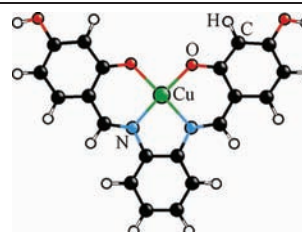


1013

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

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

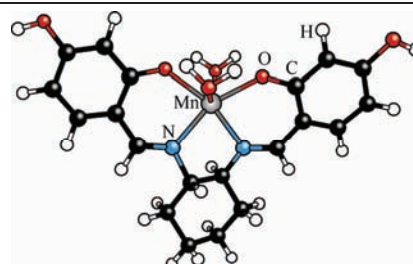


1024

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

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



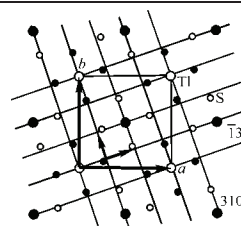
1032

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

Структурообразующая роль Tl⁺ в природных и синтетических сульфидах

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



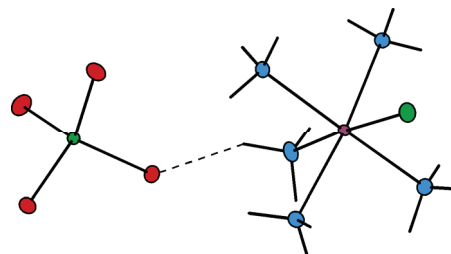
1039

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

[M(NH₃)₅Cl]WO₄ (M = Cr, Rh).

Синтез, кристаллическая структура, термические свойства

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



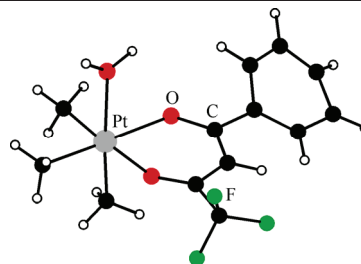
1046

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

1052

**Свойства и структура летучих фенилсодержащих
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

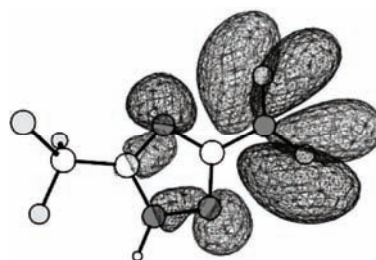


Слепухин П. А., Салмина Е.С., Потемкин В.А.,
Гришина М.А.

1060

**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

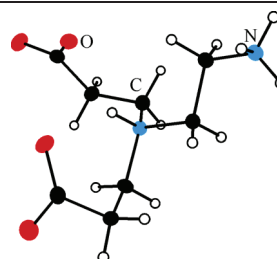


Подмарева О.Н., Старикова З.А., Цирульников Н.В.

1071

**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

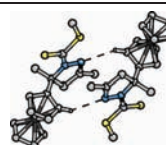


Zhu X., Xiang D.-S., Shi W.-Y.

1077

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

Keywords: pyrazoline, ferrocenyl, dithiocarboxylate, X-ray



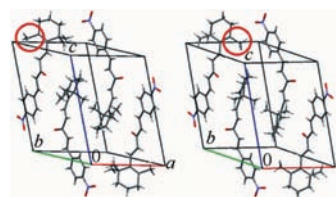
СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

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

1082

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

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



СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

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

1092

**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

