

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 61

Сентябрь

№ 9, 2020

СОДЕРЖАНИЕ

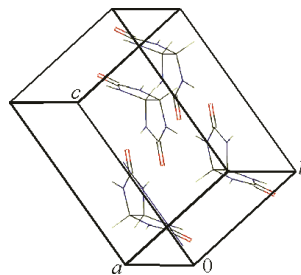
ОБЗОРЫ

Паньшина С.Ю., Пономаренко О.В., Бакибаев А.А.,  
Мальков В.С.

1389

**Анализ рентгеноструктурных характеристик  
гликолурила и его производных**

**Ключевые слова:** рентгеноструктурный анализ,  
гликолурил, водородные связи, алкилгликолурилы,  
ацетилгликолурилы, фенилгликолурилы,  
металлокомплексы, длины связей,  
диэдральные углы



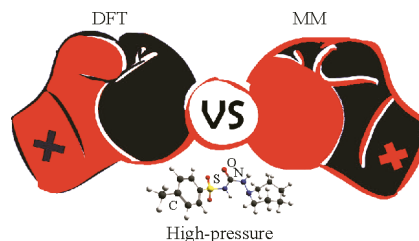
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Fedorov A. Yu., Rychkov D. A.

1433

**Comparison of different computational approaches  
for unveiling the high-pressure behavior  
of organic crystals at a molecular level.  
Case study of tolazamide polymorphs**

**Keywords:** molecular crystals, high-pressure, H-bonds,  
intermolecular interactions, structure-forming interactions,  
polymorphs, tolazamide

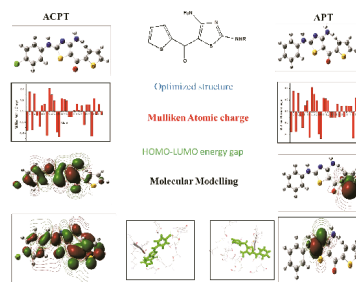


Shahana M. F., Yardily A.

1443

**Synthesis, spectral characterization,  
DFT and docking studies  
of (4-amino-2-(phenylamino)thiazol-5-yl)-  
(thiophene-2-yl)methanone and (4-amino-2-  
(4-chlorophenyl)amino)thiazol-5-yl)(thiophene-  
2-yl)methanone**

**Keywords:** ketothiophene derivatives, computational studies,  
Mulliken charges, stability, Molecular docking

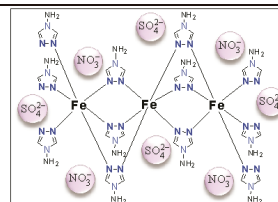


# ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Виноградова К.А., Андреева А.Ю., Пищур Д.П.,  
Бушуев М.Б.

**Спиновый переход в гетероанионных комплексах  
в системе  $\text{Fe}^{2+}$  – 4-амино-1,2,4-триазол –  $\text{NO}_3^-$  –  $\text{SO}_4^{2-}$**

**Ключевые слова:** спиновый переход, кооперативность,  
гистерезис, железо(II), триазол, гетероанионные комплексы

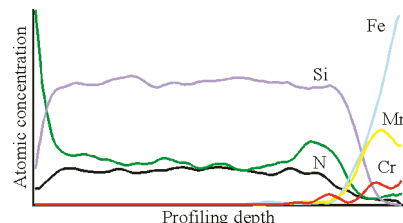


1456

Демин В.Н., Смирнова Т.П., Борисов В.О., Грачев Г.Н.,  
Смирнов А.Л., Хомяков М.Н.

**Осаждение твердых покрытий карбонитрида кремния  
из паров гексаметилдисилазана (HMDS)  
и смеси (HMDS + бензол) в лазерной плазме**

**Ключевые слова:** лазерная плазма мощного оптического разряда,  
карбонитрид кремния, твердые покрытия

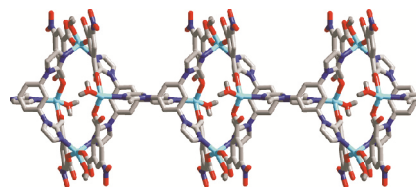


1466

Zhang X.-Y., Xu M.-L., Wu J.-P., Wang J.

**Crystal structure, and physical properties  
of a new one-dimensional polymer based  
on 1,3,5-tris(2-methylimidazol-1-yl)benzene  
and 5-nitro-1,3-benzenedicarboxylic acid**

**Keywords:** 1,3,5-tris(2-methylimidazol-1-yl)benzene,  
5-nitro-1,3-benzenedicarboxylic acid, luminescent property,  
photocatalytic property, magnetic property



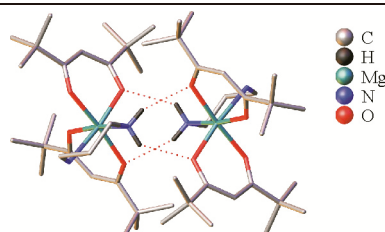
1474

## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Викулова Е.С., Рихтер Э.А., Пирязев Д.А., Жерикова К.В.,  
Морозова Н.Б.

**Строение разнолигандных дипивалоилметанатных  
комплексов магния с пропилендиамином  
и его производным**

**Ключевые слова:** магний, разнолигандные комплексы,  
диамины, дипивалоилметанат, рентгеноструктурный анализ

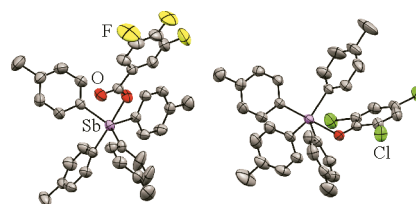


1481

Шарутин В.В., Шарутин О.К., Ефремов А.Н.

**Исследование кристаллических структур  
2,4,6-трихлорфеноксида и 3,4,5-трифторбензоата  
тетра(*n*-толил)сурьмы**

**Ключевые слова:** 2,4,6-трихлорфеноксид тетра(*n*-толил)сурьмы,  
3,4,5-трифторбензоат тетра(*n*-толил)сурьмы, синтез,  
кристаллическая и молекулярная структуры

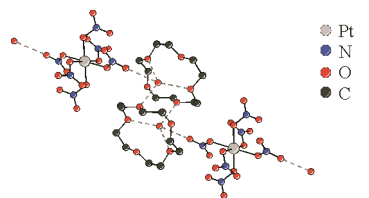


1490

Топчийн П.А., Васильченко Д.Б., Байдина И.А.,  
Корольков И.В.

**Аддукты нитратокомплексов платины(IV)  
с 15-краун-5 эфиром**

**Ключевые слова:** платина, нитратокомплексы,  
краун-эфиры, рентгеноструктурный анализ

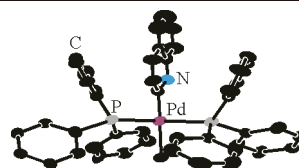


1498

Lin Y.-S., Lee G.-H., Yih K.-H., Wang H.-F., Huang K.-F.

**Crystal structures of quinolinyl palladium(II) complexes:  
[Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>{κ<sup>1</sup>-C<sub>9</sub>H<sub>6</sub>NB}(Cl)] and [Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Cl]<sub>2</sub>{μ,κ<sup>2</sup>-C<sub>9</sub>H<sub>6</sub>N}**

**Keywords:** 2-chloroquinoline, palladium, dipalladium,  
X-ray diffraction



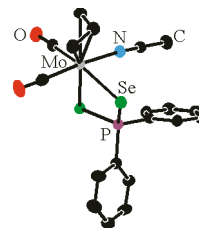
1508

Lin Y.-S., Lee G.-H., Yih K.-H., Wang H.-F., Huang K.-F.

**Crystal structures of the first diselenophosphinate molybdenum(II) allyl complexes:**

**[Mo(CH<sub>3</sub>CN)(κ<sup>3</sup>-C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>)(CO)<sub>2</sub>(κ<sup>2</sup>-Se<sub>2</sub>PPh<sub>2</sub>)] and [Mo(κ<sup>3</sup>-C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>)(CO)<sub>2</sub>(κ<sup>2</sup>-Phen)(κ<sup>1</sup>-Se<sub>2</sub>PPh<sub>2</sub>)]**

**Keywords:** molybdenum, diselenophosphinate ligand, allyl, carbonyl, X-ray diffraction



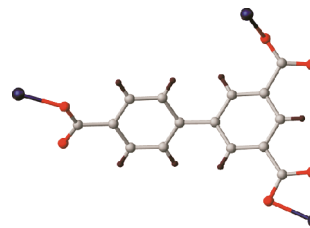
1515

## СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Xiao Q.-S., Ren G.-Z., Li J.-J., Yin H., Yu H., Liu G.

**Mixed-ligand coordination polymers: Structural diversity and protective effect of on cardiac arrest induced by anesthesia via inducing *Sirt1* pathway**

**Keywords:** Co(II)-framework, coordination geometry, cardiac arrest, myocardial

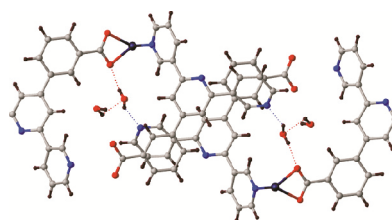


1522

Qiu J., Wang X.-X., Gong X., Zhang W.-X.

**Two Cu(II)-based coordination polymers: Structural diversity and treatment activity against neonatal sepsis by enhancing the antibacterial response of the immune system**

**Keywords:** coordination polymer, Cu(II)-complex, X-ray, neonatal sepsis

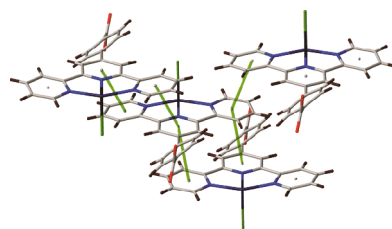


1530

Shi L., Feng J., Zhang J., Wang Q.

**Two Co(II)-based coordination polymers: Structural insights and stimulation activity on osteoblasts differentiation by increasing the Wnt/β-catenin signaling pathway activation**

**Keywords:** coordination polymer, Co(II)-complex, osteoblast differentiation, Wnt/β-catenin

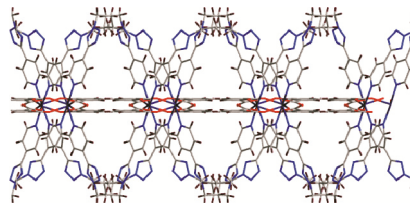


1537

He Z.-X., Zhang Z.-H., Dong Y.-F., Liu H.-G., Sun S.-D., Wang S.-Z.

**Two Co(II) and Zn(II) coordination polymers: Structural characterization and anticancer activity against nasopharyngeal carcinoma**

**Keywords:** coordination polymer, X-ray, nasopharyngeal cancer



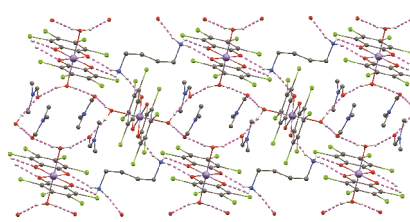
1544

## СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Mahata G., Panja A.

**Synthesis, crystal structure and supramolecular interactions in a bis(tetrachlorocatecholate) chelated manganese(III) complex**

**Keywords:** manganese(III) complex, redox active ligand, crystal structure, hydrogen and halogen bonding, C-H...π and π...π interactions, cyclic voltammetry



1551

Содержание следующего номера — в конце журнала