

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 62

Март

№ 3, 2021

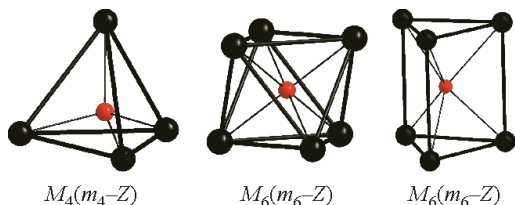
СОДЕРЖАНИЕ

ОБЗОРЫ

Гайфулин Я.М., Миронов Ю.В., Наумов Н.Г.

Высоковалентные кластерные соединения переходных металлов, содержащие внедренные гетероатомы: особенности геометрии, электронного строения и физико-химических свойств

Ключевые слова: кластер, переходный металл, кристаллическая структура, электронная структура



355

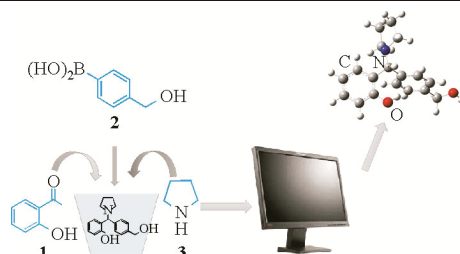
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Ulaş Y.

Theoretical and experimental investigation of 2-((4-(hydroxymethyl)phenyl)(pyrrolidin-1-yl)-methyl)phenol:

Synthesis, spectroscopic (FTIR, UV, NMR) properties and NLO analysis

Keywords: alkylaminophenol, NLO, quantum chemical calculation, DFT



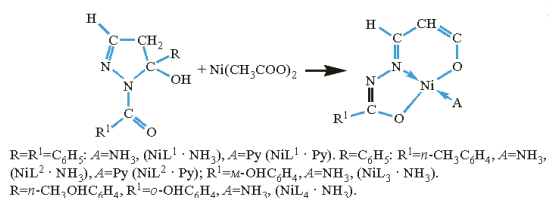
382

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Турсунов М.А., Умаров Б.Б., Авезов К.Г.

Синтез и кристаллическая структура комплексов никеля(II) с производными бензоилуксусных альдегидов

Ключевые слова: бензоилуксусный альдегид, гидразид бензойной кислоты, пяти- и шестичленная псевдоароматическая система металлоциклов, рентгеноструктурный анализ



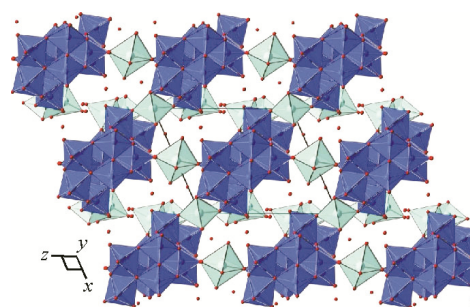
394

Дуванова Э.С., Марийчук А.Ю., Баумер В.Н.,
Розанцев Г.М., Радио С.В.

404

**Кристаллическая структура
двойного паравольфрамата Б
натрия-меди(II) $\text{Na}_2\text{Cu}_4[\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2] \cdot 22\text{H}_2\text{O}$
и смешанного паравольфрамата Б–гидроксида
меди(II) $\text{Cu}_5[\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2] \cdot 2\text{Cu}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$**

Ключевые слова: анион паравольфрамата Б,
изополивольфрамат, медь(II),
кристаллическая структура,
ИК спектроскопия, рентгеноструктурный анализ

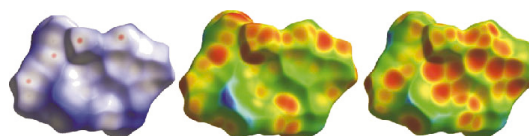


Feng T., Wang J.-F., Li L.-L., Zhang Y., Dong X.-Y.

415

**Insight into fluorescence properties, DFT
and Hirshfeld analyses of a newly synthesized
and structurally novel trinuclear copper(II)
Salamo-based complex involving phenoxo-O
bridged coordination**

Keywords: Salamo-type ligand, complex,
Hirshfeld surface analysis, DFT computation,
crystal structure

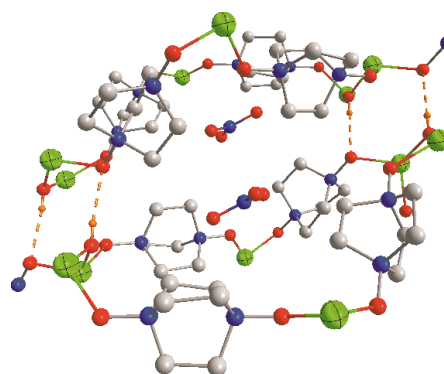


Демаков П.А., Юдина Ю.А., Самсоненко Д.Г.,
Дыбцев Д.Н., Федин В.П.

429

**Кристаллическая структура
координационных полимеров цинка
на основе N,N'-диоксида
1,4-дизабицикло[2.2.2]октана:
влияние гидрофобности
карбоксилатных лигандов**

Ключевые слова: металл-органические
координационные полимеры,
рентгеноструктурный анализ, комплексы цинка,
карбоксилаты, алифатические лиганды, N-оксиды,
водородная связь, гидрофобные взаимодействия

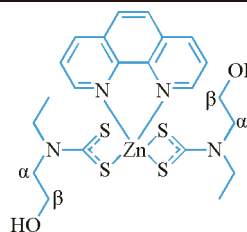


Onwudiwe D.C., Adeyemi J.O., Papane R.T.,
Bobinihi F.F., Hosten E.

439

**Spectroscopic and structural characterization
of Zn(II) bis(*N*-ethyl-*N*-ethanol dithiocarbamate)
and its adducts with N-donor ligands**

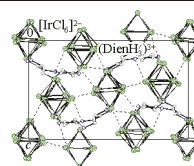
Keyword: dithiocarbamate, heteroleptic, Zn(II) complex,
structure, adducts



Макотченко Е.В., Байдина И.А., Корольков И.В.
**Строение комплексов гексахлороиридата(IV)
с диэтилентриаммином**

449

Ключевые слова: иридий, комплексы,
диэтилентриамин, рентгеноструктурный анализ

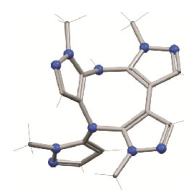


Романенко Г.В., Толстикова С.Е., Овчаренко В.И.

459

**Строение 1,4-дигидро-1,4-дiazоцина
с тремя аннелированными
пиразольными циклами**

Ключевые слова: 1,4-дiazоцин, N-метилпиразол,
молекулярная и кристаллическая структура

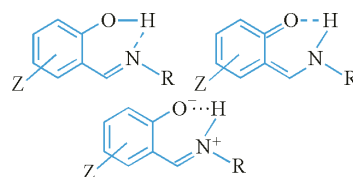


Сергиенко В.С., Абраменко В.Л., Чураков А.В.,
Суражская М.Д.

464

**Бензоидно-хиноидная таутомерия
салицилидениминов:
кристаллические структуры 5-бром- (HL¹)
и 3-нитро-салицилиден-(2-морфолин)-
этилимина (HL²)**

Ключевые слова: синтез, ИК спектроскопия,
рентгеноструктурный анализ,
бензоидная и хиноидная таутомерная форма

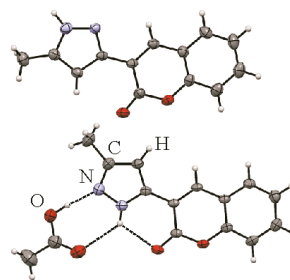


Кострицкий А.Ю., Дмитриев М.В., Гринёв В.С.,
Федотова О.В.

471

**Кристаллическая структура
и особенности упаковки
3-(5-метил-1*H*-пиразол-3-ил)-2*H*-хромен-2-она
и 3-(3-метил-1*H*-пиразол-3-ил)-2*H*-хромен-2-она**

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ,
кристаллическая структура, пиразолилхроменон,
таутомерия, квантово-химическое моделирование



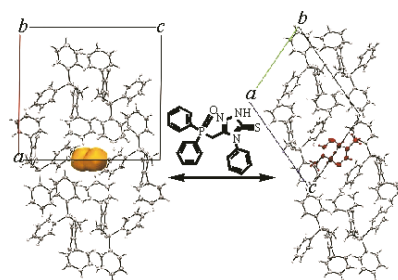
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Самигуллина А.И., Крутов И.А., Гаврилова Е.Л.,
Исламов Д.Р., Усачев К.С., Губайдуллин А.Т.

481

**Супрамолекулярная структура
фосфорилированного
N-фенил-1,2,4-триазол-3-тиона
и его кристаллосольвата**

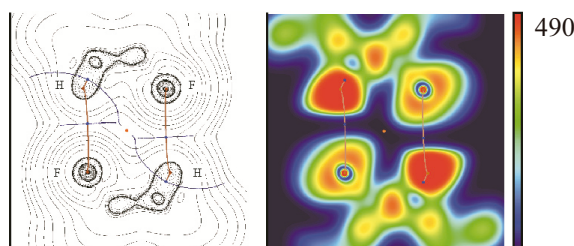
Ключевые слова: 1,2,4-триазол-3-тион,
кристаллосольват, супрамолекулярный мотив,
межмолекулярное взаимодействие



Tskhovrebov A.G., Novikov A.S., Khrustalev V.N.

**Identification of supramolecular dimers
in the crystal structure of (Z)-1-(((5-fluoropyridin-
2-yl)amino)methylene)naphthalen-2(1*H*)-one
via C(sp²)-H...F hydrogen bonding:
Combined experimental and theoretical study**

Keywords: azomethines, imines, hydrogen bonding,
weak interactions, DFT



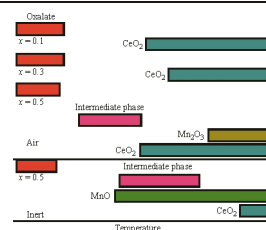
СТРУКТУРА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Булавченко О.А., Винокуров З.С., Николаева О.А.,
Афонасенко Т.Н., Цыбуля С.В.

497

**Исследование совместного термического
разложения оксалатов марганца и церия
на воздухе и в инертной среде**

Ключевые слова: оксид церия, флюорит, РФА,
оксид марганца, оксалат, термический анализ, in situ



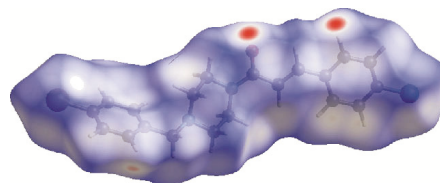
СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Chen L.-Y., Yang C.-Z., Xu Y., Qi C.-Y., Zhong Y., Wu B.

511

Synthesis, crystal structure and biological evaluation of (*E*)-1-(4-(4-bromobenzyl)piperazin-1-yl)-3-(4-chlorophenyl)prop-2-en-1-one

Keywords: cinnamide, piperazine, crystal structure, bioassay

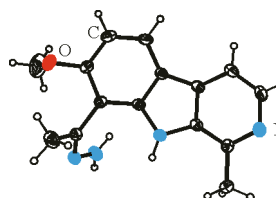


Аманжан А., Жанымханова П.Ж., Багрянская И.Ю., Шульц Э.Э., Турмухамбетов А.Ж., Адекенов С.М.

521

Строение и стереохимия гидразонпроизводного гармина

Ключевые слова: алкалоиды, гармин, гидразонпроизводное 8-ацетилгармина, рентгеноструктурный анализ



Содержание следующего номера — в конце журнала

© Сибирское отделение РАН, 2021
© Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 2021
© Новосибирский государственный университет, 2021