

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 64

Ноябрь

№ 11, 2023

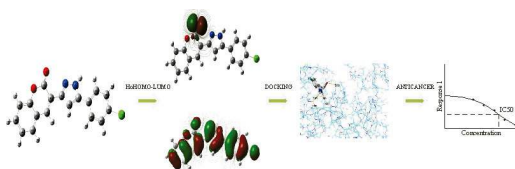
СОДЕРЖАНИЕ

JebaLenet J., Jenisha J., Brindha J., Abbs Fen Reji T.F.

115488

Synthesis, spectral characterization, DFT and docking studies of 5-(4-chlorophenyl)-3-(coumarin-3-yl)-1H-pyrazole and 5-(4-chlorophenyl)-3-(coumarin-3-yl)isoxazole

Keywords: B3LYP, DFT, FTIR, Gaussian, HOMO, LUMO, Mulliken charges

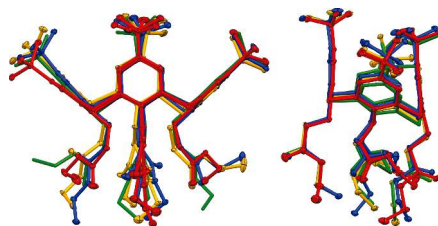


Габдулхаев М.Н., Зиганшин М.А.,
Губайдуллин А.Т., Горбачук В.В.

117706

Воспроизводимое приготовление полиморфов производного триакаликс[4]арена насыщением твердого «хозяина» парами растворителей

Ключевые слова: полиморфизм, каликсарен, бинарная и тройная системы

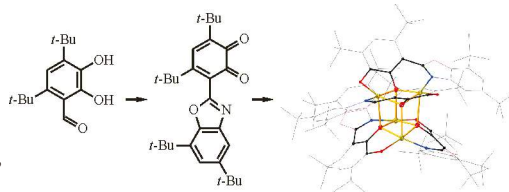


Жеребцов М.А., Арсеньев М.В., Баранов Е.В.,
Чесноков С.А.

117710

Синтез и строение кубанового комплекса меди на основе о-хинона с бензоксазольным заместителем

Ключевые слова: о-хинон, медь, полиядерный комплекс, кубан, окислительное присоединение, рентгеноструктурный анализ

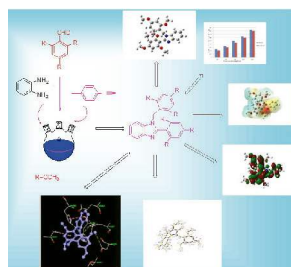


Athimoolam T., Devaraj Stephen L., Gunasekaran B.,
Krishnamurthi J.

117716

Synthesis, characterization, molecular docking, and in vitro antidiabetic activity studies of new and highly selective methoxy-substituted benzimidazole

Keywords: benzimidazole, protein inhibition, biological activity, antidiabetic activity, Molecular docking, FMO analysis

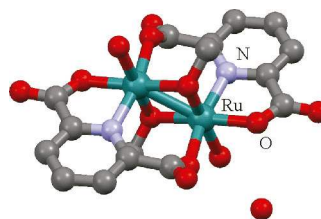


Jerome P., Swaminathan S., Bhuvanesh N.S.P.,
Oh T.H., Karvembu R.

117721

Synthesis of a novel dinuclear ruthenium (III) ONO pincer complex containing an $M-M$ bond: an XRD study

Keywords: Ru(III)–O–Ru(III), ONO-pincer complex, 2,6-pyridinedicarboxylic acid, crystal structure, Ru–Ru bond

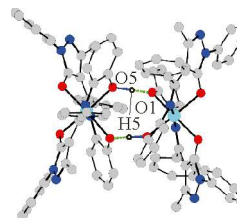


Гусев А.Н., Балуда Ю.И., Шульгин В.Ф.,
Крюкова М.А., Кискин М.А.

117791

Комплексы никеля(II) и кобальта(III) с основанием Шиффа на основе 4-бензоил-3-метил-1-фенилпиразол-5-она

Ключевые слова: никель(II), кобальт(III), основание Шиффа, PCA, водородная связь, магнетохимия

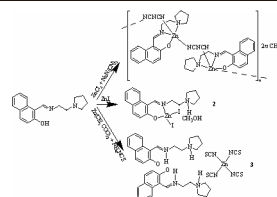


Jiang J., Liang P., Deng Y., Zhao H., You Z.

117920

Synthesis, crystal structures and urease inhibition of zinc(II) complexes derived from 1-(((2-(pyrrolidin-1-yl)ethyl)imino)methyl)naphthalen-2-ol

Keywords: Schiff base, zinc complex, crystal structure, urease inhibition

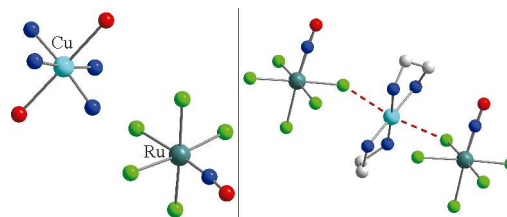


Бородин А.О., Филатов Е.Ю., Куратьева Н.В.,
Плюснин П.Е., Коренев С.В., Костин Г.А.

118092

Двойные комплексные соли аминов меди(II) с анионом $[RuNOCl_5]^{2-}$: синтез, структура, свойства

Ключевые слова: нитрозокомплексы рутения, двойные комплексные соли, термический анализ, метастабильные наносплавы



Özdemir N., Kaloğlu M., Özdemir İ.

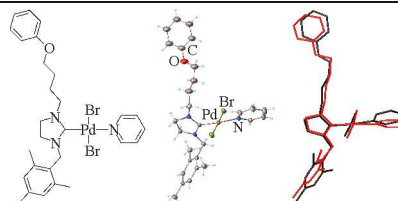
118188

An imidazolidin-2-ylidene-based

Pd-PEPPSI complex:

An experimental and theoretical approach

Keywords: *N*-heterocyclic carbene, palladium, PEPPSI, X-ray diffraction, DFT

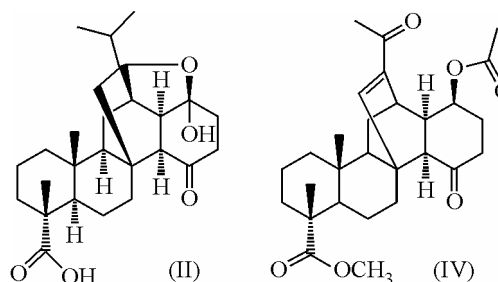


Третьякова Е.В., Рыбалова Т.В., Половяненко Д.Н.

118295

Синтез и молекулярная структура 1 α -гидрокси-13-изопропил-7,10 α -диметил-4-оксооктадекагидро-4b,12-метанохризено[1,12-bc]фуран-7-карбоновой кислоты и метил 1 α -ацетокси-13-ацетил-7,10 α -диметил-4-оксогексадекагидро-1H-4b,12-этенохризен-7-карбоксилата

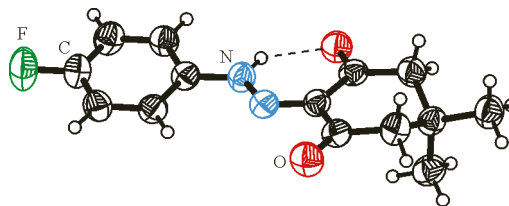
Ключевые слова: озонлиз, синтез, 1 α -гидрокси-13-изопропил-7,10 α -диметил-4-оксооктадекагидро-4b,12-метанохризено[1,12-bc]фуран-7-карбоновая кислота, метил 1 β -ацетокси-13-ацетил-7,10 α -диметил-4-оксогексадекагидро-1H-4b,12-этенохризен-7-карбоксилат, рентгеноструктурный анализ, водородная связь



Kurbanova M., Ashfaq M., Sadigova A.,
Maharramov A., Tahir M.N.

Synthesis, crystal structure, Hirshfeld surface analysis and computational study of hydrazone derivative of 5,5-dimethylcyclohexane-1,3-dione

Keywords: 5,5-dimethylcyclohexane-1,3-dione, XRD, crystal packing, intermolecular interactions, Hirshfeld surface analysis, computational study

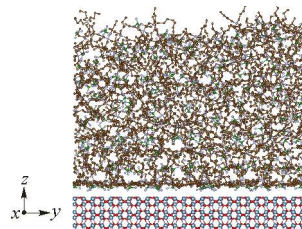


118423

Гайнутдинов И.И., Уваров Н.Ф., Дун М.

Моделирование методом молекулярной динамики особенностей структуры и подвижности ионов органических солей $[N(C_nH_{2n+1})_4]BF_4$ ($n = 1, 2$)

Ключевые слова: молекулярная динамика, композиты, ионные соли, структура, подвижность атомов, оксиды

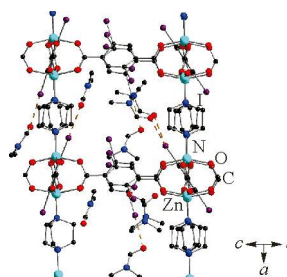


118463

Загузин А.С., Бондаренко М.А., Сухих Т.С.,
Федин В.П., Адонин С.А.

Кристаллические структуры двух металл-органических координационных полимеров на основе Zn(II) и 2,5-дииндотерефталата

Ключевые слова: цинк, металл-органические координационные полимеры, карбоксилаты, кристаллическая структура, галогенная связь

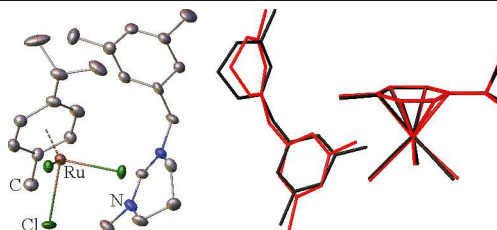


118589

Özdemir N., Karaca E.Ö., Gürbüz N., Özdemir İ.

Experimental and theoretical characterization of 3-(3,5-dimethylbenzyl)-1-methyl-3,4,5,6-tetrahydropyrimidinium trichlorido(η^6 -*p*-cymene)ruthenate(II)

Keywords: X-ray diffraction analysis, Hirshfeld surface analysis, spectroscopy, DFT calculation

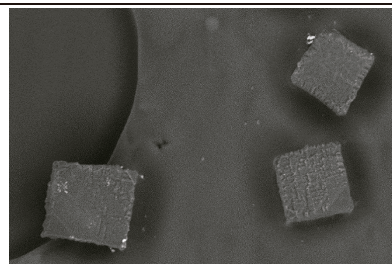


118592

Громилов С.А., Елисеев А.П.

Новые данные о строении монокристаллов алмаза с высокой концентрацией азотных центров

Ключевые слова: алмаз, рентгенография монокристаллов, уточнение параметров элементарной ячейки, азотные центры в алмазе, ИК спектроскопия

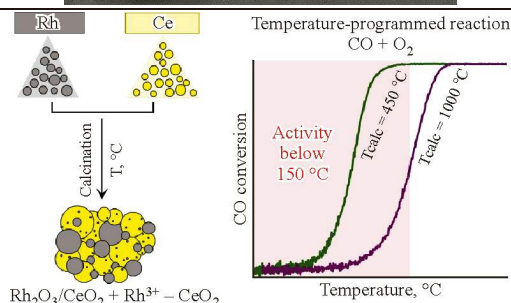


118595

Кибис Л.С., Кротова А.И., Федорова Е.А.,
Кардаш Т.Ю., Столкус О.А., Светличный В.А.,
Славинская Е.М., Боронин А.И.

Использование метода импульсной лазерной абляции в жидкости для создания модельных катализаторов Rh–CeO₂

Ключевые слова: импульсная лазерная абляция, оксид церия, оксид родия, наночастицы, низкотемпературное окисление CO

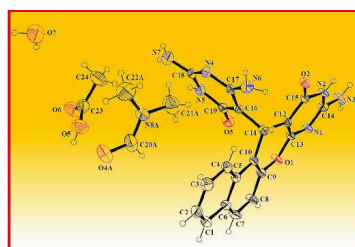


118600

Tahir M.N., Shad H.A., Haroon M., Ashfaq M., Mancini R.J.

**A pyranopyrimidine derivative:
Synthesis, characterization, Hirshfeld surface
analysis and computational investigation**

Keywords: pyranopyrimidine, crystal structure,
supramolecular assembly, Hirshfeld surface analysis,
quantum chemical calculations

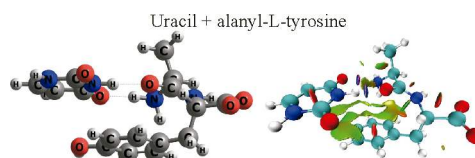


118603

Курбатова М.С., Баранников В.П.

**Комплексы ионизированных дипептидов
глицил-L-глутаминовой кислоты
и аланил-L-тирозина с нуклеиновыми
основаниями пиримидинового ряда**

Ключевые слова: пептиды, эндорфин 30-31,
нуклеиновые основания, урацил, цитозин,
молекулярные комплексы, квантово-химические расчеты,
структура, энергии комплексообразования,
энергии межмолекулярных взаимодействий,
энергии водородных связей, критические точки

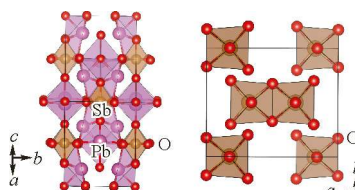


118607

Буш А.А., Сташ А.И., Иванов С.А.

**Кристаллическая структура и диэлектрические
свойства монокристаллов $Pb_6Sb_2O_{11}$**

Ключевые слова: фаза $Pb_6Sb_2O_{11}$, монокристаллы,
рентгеноструктурный анализ, кристаллическая структура,
диэлектрические свойства



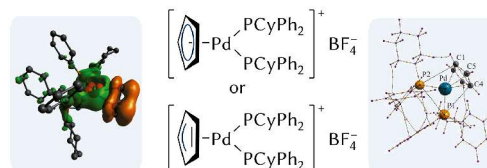
118689

Суслов Д.С., Быков М.В., Пахомова М.В.,
Орлов Т.С., Абрамов З.Д., Сучкова А.В.,
Павлова А.А., Абрамов П.А.

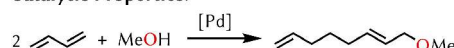
**Синтез, структура и каталитические свойства
в теломеризации бутадиена
с метанолом тетрафторобората
бис(дифенилциклогексилфосфин)
(η^5 -циклопентадиенил) палладия(II)**

Ключевые слова: палладий(II),
дифенилциклогексилфосфин, циклопентадиенил,
теломеризация бутадиена

Structural Studies:



Catalytic Properties:

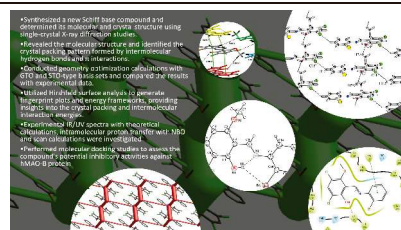


118772

Yıldırım M.H., Yıldırım A.Ö., Kaya P., Kaştaş Ç.A.

**Investigating the structural and in-silico bioactive
properties of a newly synthesized Schiff base
compound through experimental and computational
approaches**

Keywords: Schiff bases, single crystal, STO, Hirshfeld,
molecular docking



119416

Содержание следующего номера — в конце журнала