

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 60

Февраль

№ 2, 2019

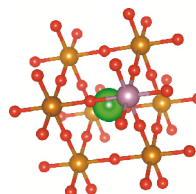
СО Д Е Р Ж А Н И Е

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Гайнутдинов И.И., Немудрый А.П., Зильберберг И.Л.

**Модификация свойств оксидов SrFeO_3 и SrCoO_3
допированием – DFT расчеты электронной структуры**

Ключевые слова: теория функционала плотности, перовскиты,
феррит стронция, кобальтит стронция, электронная структура,
заряды ионов

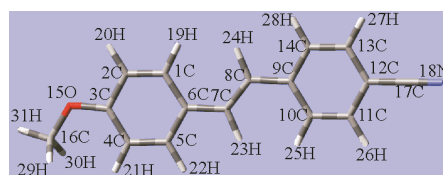


183

Абуляисова Л.К.

**Молекулярный конформационный анализ
цианопроизводного диарилэтилена
на основе теории функционала плотности**

Ключевые слова: цианопроизводное диарилэтилена, стильбен,
конформационный анализ, поверхность потенциальной энергии,
теория функционала плотности

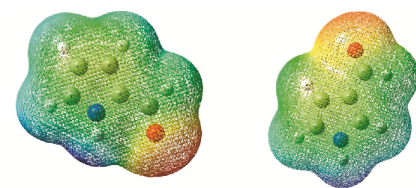


191

Umar Y., Tijani J., Abdalla S.

**Conformational stabilities, rotational barriers
and vibrational spectra of 2-pyrrolicarboxaldehyde
and 3-pyrrolicarboxaldehyde calculated
using density functional theory**

Keywords: potential energy surface, vibrational spectra,
Solvent effect, geometric parameter and frontier molecular orbital



cis-2-Pyrrolicarboxaldehyde

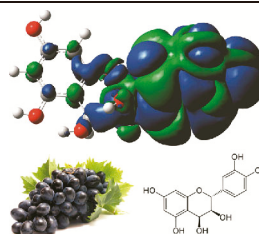
trans-3-Pyrrolicarboxaldehyde

199

Augustine C.

**Unravelling the competence of leucocyanidin
in free radical scavenging:
A theoretical approach
based on electronic structure calculations**

Keywords: leucocyanidin, electronic structure calculations,
density functional theory, antioxidants, free radical scavengers, DFT

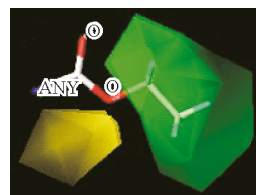


211

Tong J., Jiang G., Li L., Li Y.

Molecular virtual screening studies of herbicidal sulfonylurea analogues using molecular docking and topomer CoMFA research

Keywords: virtual screening, sulfonylurea herbicidal, molecular docking, topomer CoMFA, topomer search



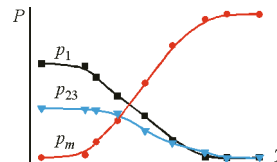
222

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Кавун В.Я., Полянцева М.М., Меркулов Е.Б., Гончарук В.К.

Ионная подвижность в твердых растворах $94\text{BiF}_3\text{--}6\text{KF}$ и $84\text{BiF}_3\text{--}6\text{KF--}10\text{NdF}_3$ с тисонитовой структурой

Ключевые слова: твердые растворы, тисониты, ионная подвижность, спектры ЯМР ^{19}F

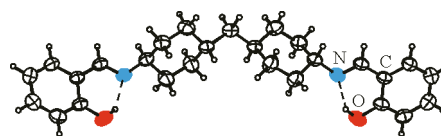


231

Said M.A.

Easy synthesis and crystal structure of a novel *ortho* hydroxyl Schiff base compound, $\text{CH}_2\text{--}\{\text{cyclo-C}_6\text{H}_{10}\}\text{--NCH-C}_6\text{H}_4\text{--OH-2}\}_2$

Keywords: green synthesis, neat one-pot reaction, UV-vis, Schiff base, crystal structure, O—H...N intramolecular hydrogen bond

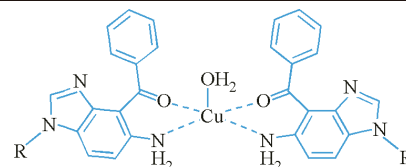


237

Rastegarnia S., Pordel M., Allameh S.

Synthesis, characterization and DFT calculations of new fluorescent Cu(II) complexes of heterocyclic ligands

Keywords: benzimidazole, fluorescent ligands, Cu(II) complex, UV-Vis and fluorescence spectroscopy, DFT

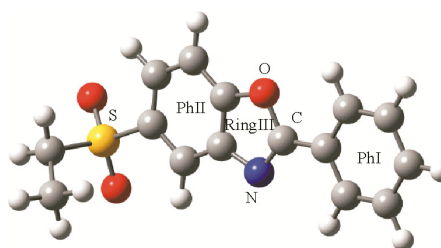


244

Zeyrek C.T., Ünver H., Temiz-Arpaci O., Boyacioglu B., Elmali A.

Spectroscopic properties and theoretical studies of 5-ethylsulphonyl-2-phenyl-benzoxazol: Relation between frontier molecular orbitals and optical properties

Keywords: benzoxazoles, spectroscopy, DFT calculations, organic light-emitting element



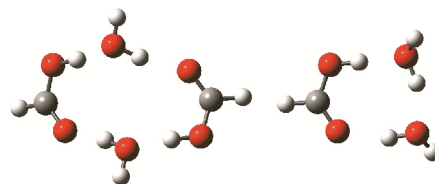
252

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Тараканова Е.Г., Волошенко Г.И., Кислина И.С., Майоров В.Д., Юхневич Г.В., Лященко А.К.

Состав и структура гидратов, образующихся в водных растворах муравьиной кислоты

Ключевые слова: водные растворы, муравьиная кислота, водородная связь, гидратация, строение гидратов, ИК спектроскопия, квантово-химический расчет



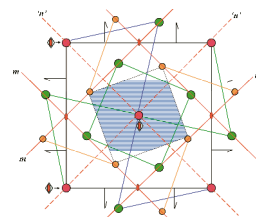
266

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

Кристаллографический анализ трансформации структуры датолита (CaBSiO_4OH) в окаямалит ($\text{Ca}_2\text{B}_2\text{SiO}_7$) при дегидратации

Ключевые слова: трансформация датолит–окаямалит, кристаллографический анализ, катионные подрешетки, локальная симметрия, факторы стабильности и симметрия

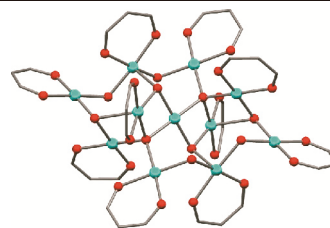


279

Романенко Г.В., Кузнецова О.В., Фурсова Е.Ю.,
Летягин Г.А., Овчаренко В.И.

**Структура многоядерных
гексафторацетилацетонатов меди(II)**

Ключевые слова: медь(II), многоядерные соединения,
гексафторацетилацетонат, гидролиз,
молекулярная и кристаллическая структура

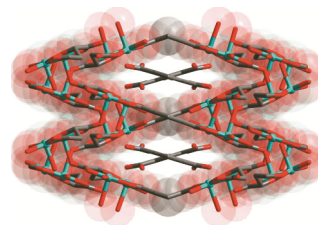


286

Завахина М.С., Самсоненко Д.Г., Федин В.П.

**Гомохиральный координационный полимер
на основе меди(II), *S*-яблочной
и бифенил-3,3',5,5'-тетракарбоновой кислот**

Ключевые слова: комплексы меди(II),
кристаллическая структура, координационные полимеры,
хиральные комплексы, яблочная кислота

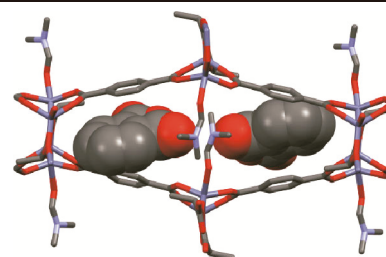


290

Завахина М.С., Хан И.С., Самсоненко Д.Г., Федин В.П.

**Соединение включения фталевого ангидрида
в пористый гомохиральный лактат терефталата цинка:
влияние гостей на геометрические характеристики
металл-органического каркаса**

Ключевые слова: кристаллическая структура,
пористые координационные полимеры,
соединение включения, цинк

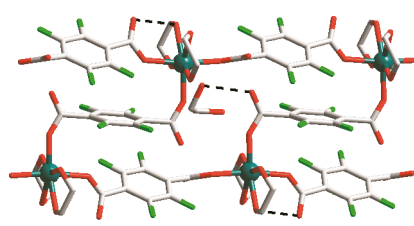


296

Чеплакова А.М., Самсоненко Д.Г., Федин В.П.

**Синтез и кристаллическая структура
металл-органического координационного полимера
[Sc₂(HOCH₂CH₂OH)₄(tFBDC)₃]·2HOCH₂CH₂OH**

Ключевые слова: комплексы скандия,
металл-органический координационный полимер,
тетрафтортерефталевая кислота, кристаллическая структура

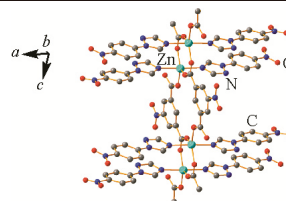


301

Qian J., Wang J., Chen N.-N., Tao J.-Q.

**A new one-dimensional chain polymer
based on [Zn₂(OCO)₂] rhomboid clusters**

Keywords: coordination polymer, ladder-like one-dimensional chain,
1-(4-nitrophenyl)-1,2,4-triazole, 5-nitro-1,3-benzenedicarboxylic acid,
luminescence

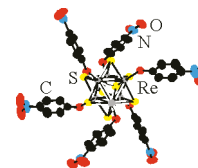


306

Nagashima S., Kawada S., Kobayashi H.

**Crystal structure of the octahedral rhenium cluster
complex (Bu₄N)₄[Re₆S₈(OC₆H₄-*p*-NO₂)₆]**

Keywords: rhenium, octahedral chalcogenide cluster,
p-nitrophenolate, crystal structure

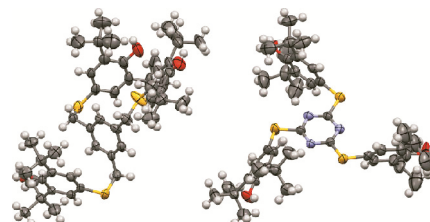


311

Литвинов И.А., Бухаров С.В., Карамов Ф.А.

**Молекулярная и кристаллическая структура
симметричных серосодержащих
пространственно затрудненных трисфенолов**

Ключевые слова: пространственно затрудненные фенолы,
геометрические изомеры, рентгеноструктурный анализ,
антиоксидантная активность

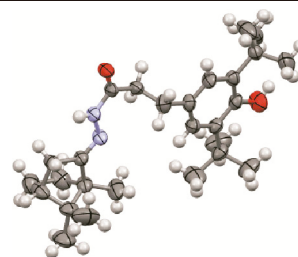


314

Литвинов И.А., Лодочникова О.А., Бухаров С.В.,
Нугуманова Г.Н., Тагашева Р.Г., Карамов Ф.А.

**Молекулярная и кристаллическая структура
индола и камфоры с пространственно
затрудненными фенольными фрагментами**

Ключевые слова: пространственно затрудненные фенолы,
геометрические изомеры, рентгеноструктурный анализ,
антиоксидантная активность



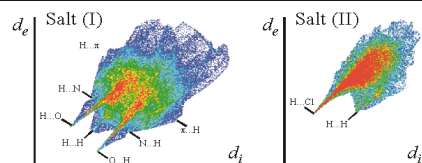
321

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Zhou C.-Y., Su F., Zhang B.-X., Han C.

**Crystal and molecular structures of two salts
based on polyamine derivatives**

Keywords: diethylenetriamine, N,N'-bis(2-aminoethyl)piperazine,
X-ray diffraction, hydrogen bond, single crystal, Hirshfeld surface



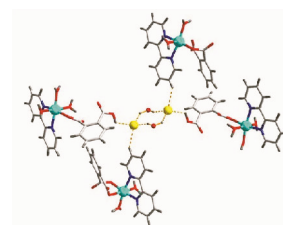
329

Gogoi A., Saha U., Dutta D., Bhattacharyya M.K.

**A supramolecular dimer of two crystallographically
independent Co(II) phthalate bipyridine complexes
in one single crystal:**

Synthesis, crystal structure, and thermal studies

Keywords: crystal structure, 2,2'-bipyridine, phthalate,
hydrogen bonds, supramolecular, 2D layered network, π - π stacking



338

Содержание следующего номера — в конце журнала