

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 62

Июль

№ 7, 2021

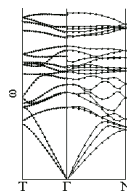
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Басалаев Ю.М., Басалаева М.Ю., Гордиенко А.Б.

Особенности электронного и колебательного строения пниктидов BeC-V_2

Ключевые слова: BeCN_2 , BeCP_2 , BeCAs_2 , BeCSb_2 , халькопирит, пниктиды, фононы, упругие свойства, твердость

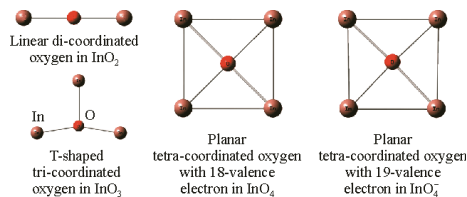


1061

Tang M., Zhou K.

Theoretical study of the structures and electronic characteristics of In_xO ($x = 2, 3$) and $\text{In}_4\text{O}^{0/-1}$

Keywords: density functional theory, global minima, planar tetra-coordinated oxygen, 18-valence electrons



1072

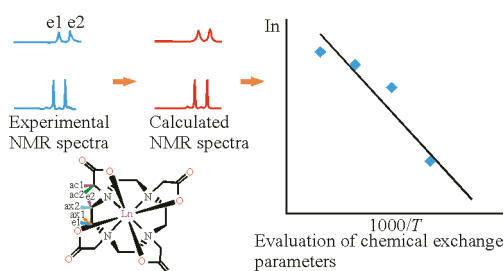
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Бабайлов С.П., Заполоцкий Е.Н.

Алгоритм анализа формы сигналов ЯМР для определения активационных параметров молекулярной динамики парамагнитных комплексов лантаноидов:

конформационная динамика в комплексах тулия с макроциклическим лигандом DOTA

Ключевые слова: динамический ЯМР, парамагнитные комплексы, химический обмен, конформационная динамика

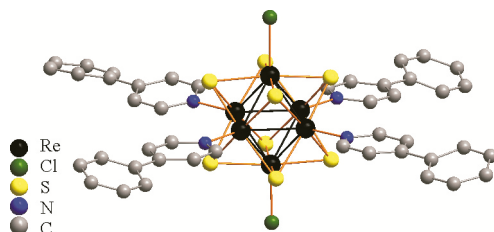


1079

Уланчиков А.А., Гайфулин Я.М., Сухих Т.С., Рядун А.А., Рыжиков М.Р., Миронов Ю.В.

Синтез, строение и физико-химические свойства молекулярных кластерных комплексов рения с терминальными лигандами – молекулами 4-фенилпиридина

Ключевые слова: кластер, рений, органические лиганды, кристаллическая структура, электронная структура



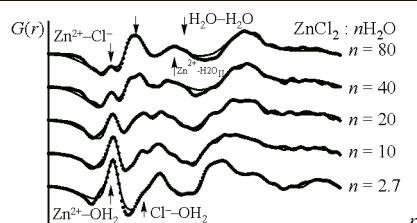
1086

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Смирнов П.Р., Гречин О.В.

Структура ближнего окружения ионов в водных растворах хлорида цинка по данным рентгеноструктурного анализа

Ключевые слова: растворы электролитов, рентгенодифракционный анализ, структура, координационное число



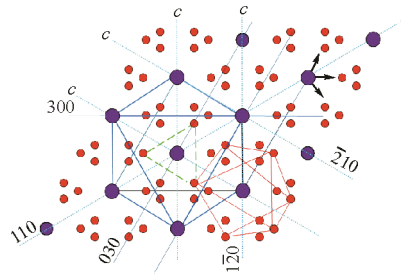
1098

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

Кристаллографический анализ трех модификаций CaCO_3 : кальцита, арагонита, фатерита

Ключевые слова: кристаллографический анализ, кальцит, арагонит, фатерит, механизмы упорядочения атомов, анионные и катионные подрешетки, симметрия–стабильность, кристаллодинамика

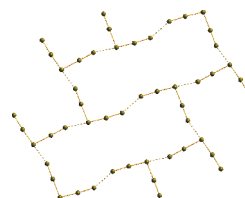


1105

Адонин С.А.

Кристаллические структуры полибромидных солей бис(пиридил)алкан-дicationов

Ключевые слова: полибромиды, полигалогениды, кристаллическая структура

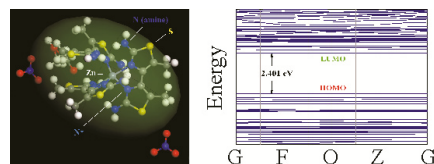


1116

Chamack M., Hosseini A., Khazaei Z.

Synthesis, crystal structure, and DFT insight of a new trigonal bipyramidal zinc(II) complex

Keywords: bithiazole, metal complex, X-ray, DFT

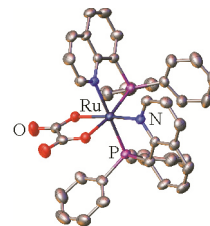


1121

Al-Wahish M.A., Awwadi F.F., Hodali H.A.

Synthesis, characterization, computational studies, and single crystal structures of $[\text{Ru}(\text{N}-\text{P})_2(\text{O}-\text{O})]$ complexes

Keywords: 8-diphenylphosphinoquinoline, ruthenium complexes, oxalate, malonate, 1,1-cyclobutandicarboxylate

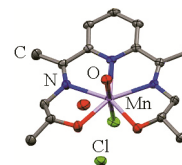


1134

Kose A., Kirpik H.

Crystal structure and photo-physical properties of a seven-coordinate $\text{Mn}(\text{II})$ complex

Keywords: $\text{Mn}(\text{II})$ complex, seven-coordinate, hydrogen bond, photophysical properties

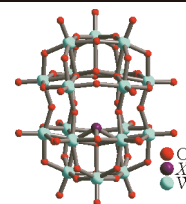


1144

Абрамов П.А.

Кристаллические структуры тетраметиламмонийных солей $[\text{XW}_{18}\text{O}_{60}]^{9-}$

Ключевые слова: полиоксовольфрамат, анион Доусона, кристаллическая структура

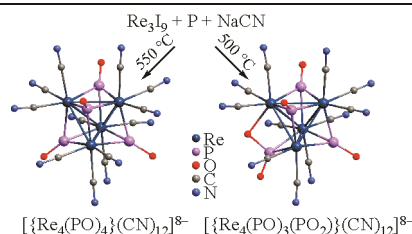


1151

Пронин А.С., Брылев К.А., Штрёбеле М.,
Майер Х.-Ю., Миронов Ю.В.

**Синтез и строение тетраэдрического
кластерного комплекса рения
с ядром $\{\text{Re}_4(\text{PO})_4\}^{4+}$**

Ключевые слова: рений, фосфор, кластерные комплексы,
кристаллическая структура

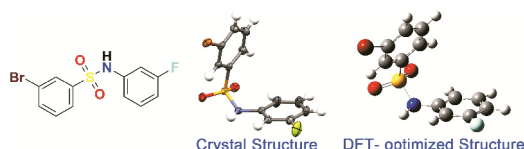


1157

Deng H., Liao W., Tan X., Liu T.

**Synthesis, characterization, crystal structure,
and DFT study
of 3-bromo-*N*-(3-fluorophenyl)benzenesulfonamide**

Keywords: benzene sulfonamide, synthesis,
X-ray diffraction, DFT



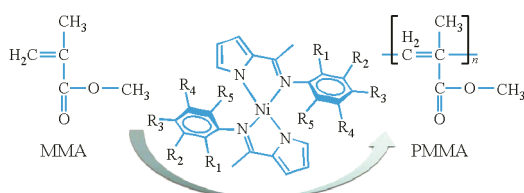
1164

СТРУКТУРА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Su B.-Y., Yan T.-Y., Wu J.-D., Han Q.-Q., Wang L.,
Ran L.-T., Pan D.-D.

**Asymmetric mono(imine)pyrrole nickel
PMMA catalysts:
Synthesis, crystal structure, and DFT calculation**

Keywords: mono(imino)pyrrole, nickel complex,
crystal structure, DFT, MMA polymerization



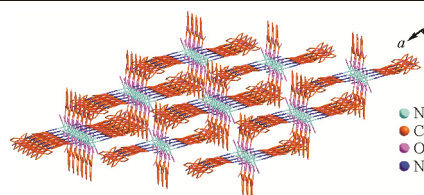
1171

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Song Y., Xu L.P., Li G.T., Wang X.Y.

**A 3D supramolecular polymer involving hydrogen
bonds based on nicker(II), 1,3-benzenedicarboxylic
acid, and nitrogen-containing ligand**

Keywords: Ni(II) complex, hydrogen bonds,
1,3-benzenedicarboxylic acid, crystal structure



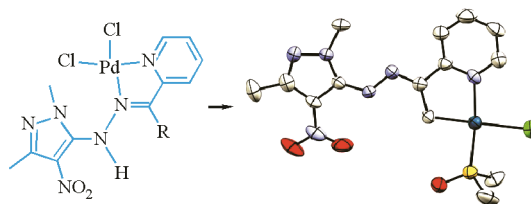
1182

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Abushamleh A.S., Abu-Safieh K.A., Khanfar M.A.,
Taher D., Tahtamouni L., Alwahsh N.J.

**Novel palladium(II) complexes
of pyrazole-containing Schiff base ligands:
Synthesis, structural characterization,
and cytotoxicity of the palladium(II) complexes
of 2-{1-[2-(1,3-dimethyl-4-nitro-1H-pyrazol-5-
yl)hydrazono]ethyl} pyridine (APHP)
and its analogue 2-{1-[2-(1,3-dimethyl-4-nitro-1H-
pyrazol-5-yl)hydrazono]methyl} pyridine (PCHP)**

Keywords: pyrazol, hydrazone, Schiff base, palladium,
solid state structure, biological activities

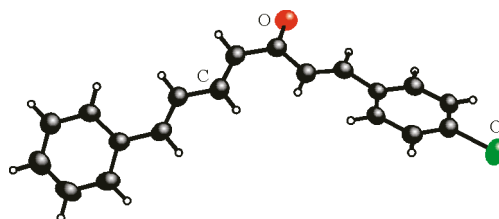


1189

Lu B., Ren S.H., Lin Y., Liu W.Q., Wan P.N., Cui H.F.

**Synthesis, crystal structure, and biological activity
of novel curcumin analogues derived from
cinnamaldehyde**

Keywords: curcumin analogues,
Claisen-Schmidt condensation, crystal structure, synthesis,
biological activity



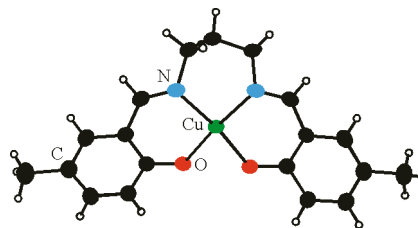
1200

Qian H.-Y.

1208

Synthesis, X-ray crystal structures, and antibacterial activity of zinc(II) and copper(II) complexes derived from *N,N'*-bis(5-methylsalicylidene)-1,3-propanediamine

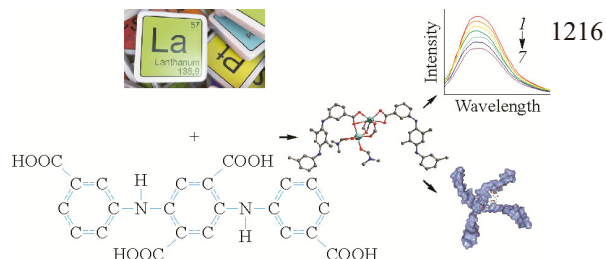
Keywords: Schiff base, zinc complex, copper complex, X-ray diffraction, antibacterial activity



Zhu M.-C., Ji X.-X., Zhou Y., Li S.-H., Bao H.-H., Xu J., Gao E.-J., Zhu X.-P.

A new La(III) complex constructed by long flexible ligand: Crystal structure, DNA binding, and molecular docking studies

Keywords: La(III) complex, fluorescence spectroscopy, molecular docking, nanosizing



Содержание следующего номера — в конце журнала