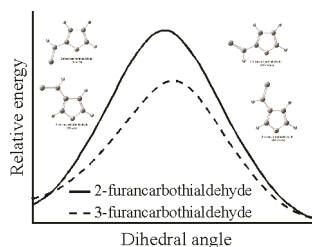


СОДЕРЖАНИЕ

Ahmed S., Abdalla S., Ishaq A., Umar Y.

DFT study of the structure, conformational profile and vibrational analysis of 2-furancarbothialdehyde and 3-furancarbothialdehyde

Keywords: density functional method, rotational barrier, vibrational wavenumber, solvent effect, furancarbothialdehyde



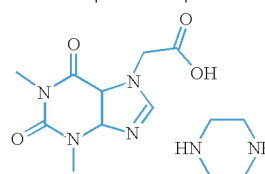
1591

Acree W.E. Jr.

Commentary on “Structure breaking/making property of acefylline piperazine in aqueous, aqueous methanol, and aqueous ethylene glycol systems”

Keywords: volumetric properties, acefylline piperazine, apparent molar volumes, density

$$\Phi_v = \frac{M}{\rho^0} - \frac{1000(\rho - \rho^0)}{C\rho^0}$$

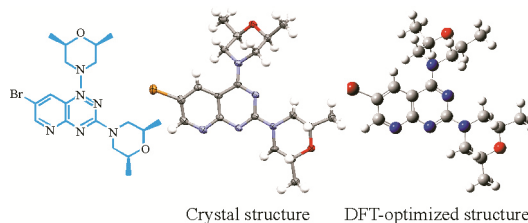


1604

Chen Y.-M., Chen D.-M., Wu Q.-M., Ye W.-J., Zhao C.-S., Liao W.-K., Zhou Z.-X.

Synthesis, crystal structure and DFT study of a novel (2*s*,2'*s*,6*r*,6'*r*)-4,4'-(6-bromopyrido[2,3-*d*]pyrimidine-2,4-diyl)bis(2,6-dimethylmorpholine)

Keywords: pyrido[2,3-*d*]pyrimidine, synthesis, crystal diffraction, DFT

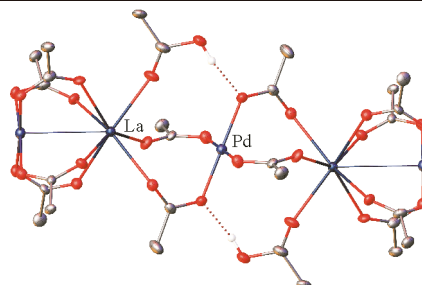


1606

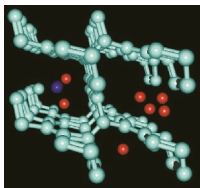
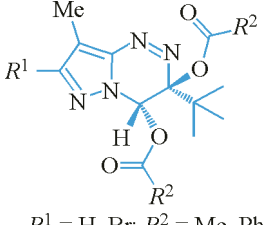
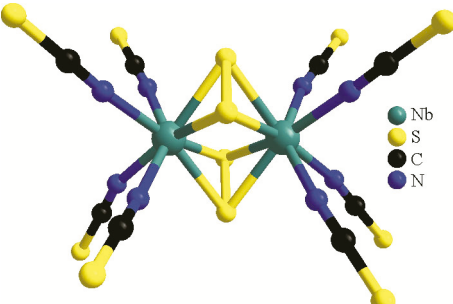
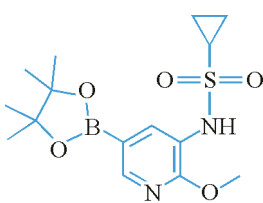
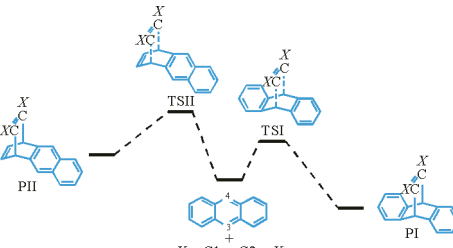
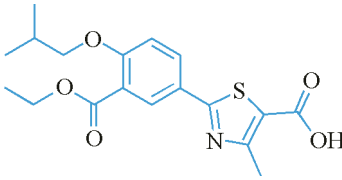
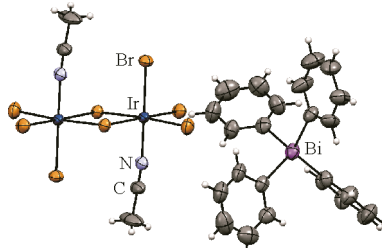
Якушев И.А., Дюжева М.А., Черкашина Н.В., Корнев А.Б., Смирнова Н.С., Варгафтик М.Н.

Синтез и кристаллическая структура пятиядерного гетерометаллического ацетатного комплекса Pd(II) с La(III)

Ключевые слова: палладий, лантан, редкоземельные элементы, гетерометаллические комплексы, полиядерные соединения, рентгеноструктурный анализ



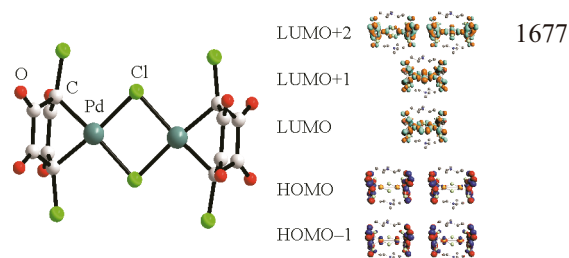
1616

<p>Куандыков Р.Р.</p> <p>Структура и свойства новой аллотропной формы углерода на основе бензола Ладенбурга</p> <p>Ключевые слова: призмат, бензол Ладенбурга, термическая устойчивость, модуль Юнга, абсорбция, диффузия</p>	 <p>1621</p>
<p>Миронович Л.М., Иванов С.М., Колтун Д.С.</p> <p>Кристаллическая структура 3-<i>трет</i>-бутилпиразоло[5,1-<i>c</i>][1,2,4]триазин-3,4-диил дикарбоксилатов</p> <p>Ключевые слова: 1,2,4-триазины, пиразоло[5,1-<i>c</i>][1,2,4]триазины, хиральность, рентгеноструктурный анализ</p>	 <p>$R^1 = \text{H, Br; } R^2 = \text{Me, Ph}$</p> <p>1627</p>
<p>Федоренко А.Д., Фоменко Я.С., Гонгола М.И., Первухина Н.В., Калинин А.В., Николенко А.Д., Гушин А.Л.</p> <p>Кристаллическая структура и рентгеноспектральное исследование биядерного тиоцианатного кластерного комплекса ниобия(IV)</p> <p>Ключевые слова: сульфидные кластеры, ниобий, роданид, PCA, РФЭС, РЭС, XANES, электронная структура</p>	 <p>1636</p>
<p>Chen J.-J., Huang P.-Y., Yang Z.-S., Cai X.-Z., Shi Y., Hu W.-Y., Zhang X.-H., Chai H.-F., Huang Z.-Y.</p> <p>Synthesis, characterization, crystal structure and DFT study of N-(2-methoxy-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl) pyridin-3-yl) cyclopropanesulfonamide</p> <p>Keywords: borate, synthesis, DFT, X-ray diffraction</p>	 <p>1648</p>
<p>Ahraminejad M., Ghiasi R., Mohtat B., Ahmadi R.</p> <p>Substituent effect in the [2 + 4] Diels–Alder cycloaddition reactions of anthracene with C_2X_2 ($\text{X} = \text{H, F, Cl, Me}$): A computational investigation</p> <p>Keywords: anthracene, Diels–Alder reaction, energy decomposition analysis (EDA), synchronicity value, Wiberg bond index</p>	 <p>1656</p>
<p>Xu J., Li Y., Zhao X., Yang H., Wang L.</p> <p>Treatment activity and nursing values of a new heterocycles compound combined with aspirin on traumatic arthritis</p> <p>Keywords: heterocycles, crystallography, aspirin, traumatic arthritis</p>	 <p>1667</p>
<p>Сенчурин В.С., Шарутин В.В., Шарутина О.К.</p> <p>Исследование кристаллической структуры комплекса иридия с тетрафенилвисмутониевым катионом $[\text{Ph}_4\text{Bi}]_2 [(\mu_2\text{-Br})\text{Br}_3\text{Ir}(\text{CH}_3\text{CN})_2]$</p> <p>Ключевые слова: бис[(μ_2-бromo)-(трибromoацетонитрил)иридат](III) тетрафенилвисмутония, синтез, кристаллическая структура</p>	 <p>1673</p>

Ромашев Н.Ф., Бакаев И.В., Комлягина В.И.,
 Фоменко Я.С., Ларичева Ю.А., Петров П.А.,
 Гущин А.Л.

Синтез и строение биядерного хлоранилатного комплекса Pd(II)

Ключевые слова: палладий, хлоранилат,
 комплекс, кристаллическая структура,
 циклическая вольтамперометрия, DFT-расчеты

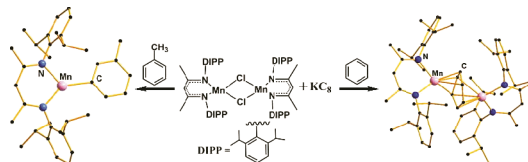


1677

Афонин М.Ю., Седельникова А.Ю., Конохова А.Ю.,
 Сухих Т.С., Конченко С.Н.

Строение и состав продуктов восстановления [(наспас)MnCl]₂ (наспас = HC(C(Me)N (2.6*i*-Pr₂C₆H₃))₂) в толуоле и бензоле интеркалированным калием графитом

Ключевые слова: π-ареновый лиганд,
 σ-арильный лиганд, марганец,
 кристаллическая структура, рентгенофазовый анализ

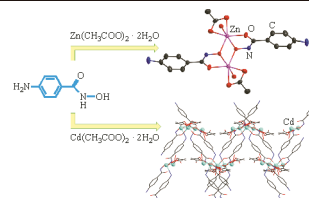


1684

Hou J.Q., Chen Y.M.

Synthesis, crystal structures and luminescent properties of Zn(II)/Cd(II) complexes assembled by 4-aminophenylhydroxamic acid

Keywords: transition metal complexes,
 luminescent property, hydroxamic acids, 3D framework

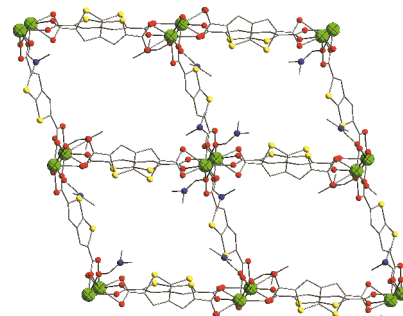


1692

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

Металл-органические координационные полимеры лантаноидов(III) с тиенотиофендикарбоксилатными лигандами

Ключевые слова: металл-органические
 координационные полимеры,
 рентгеноструктурный анализ, лантаноиды, карбоксилаты,
 серосодержащие гетероциклы, тиофен

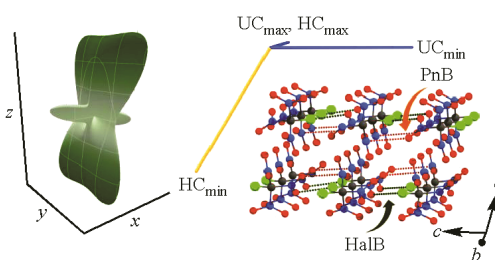


1702

Барташевич Е.В., Собалев С.А., Матвейчук Ю.В.,
 Цирельсон В.Г.

Моделирование сжимаемости изоструктурных галогенсодержащих кристаллов на макро- и микроуровнях

Ключевые слова: модуль Юнга,
 гидростатическое сжатие кристаллов,
 квантовое электронное давление,
 индикатор концентрации квантового давления,
 галогенные связи, пниктогенные связи

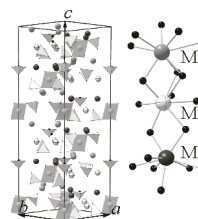


1710

Никифоров И.В., Дейнеко Д.В., Дускаев И.Ф.,
 Лазоряк Б.И.

Зеленые люминофоры в семействе фосфатов со структурой витлокит

Ключевые слова: фосфаты,
 люминесцентная спектроскопия, витлокит,
 зеленые люминофоры, перенос энергии

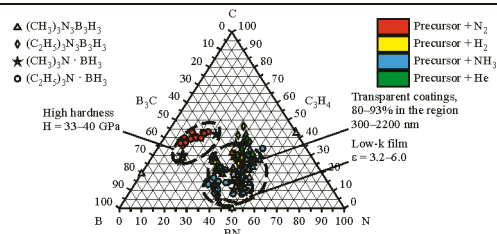


1725

Суляева В.С., Кеслер В.Г., Косинова М.Л.

**Диэлектрические слои BC_xN_y :
синтез разложением паров борорганических
соединений, состав и химическое строение**

Ключевые слова: карбонитрид бора, LPCVD, PECVD,
рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия,
Оже-спектроскопия, диэлектрическая постоянная

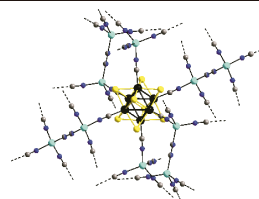


1736

Ермолаев А.В., Смоленцев А.И., Миронов Ю.В.

**Кристаллическая структура
(enH)(enH2)[{Cu2(μ-CN)}Re6S8(CN)6]**

Ключевые слова: гидротермальный синтез,
рений, халькогены, октаэдрический кластерный комплекс,
медь, этилендиамин, кристаллическая структура



1754

Содержание следующего номера — в конце журнала