

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 60

Апрель

№ 4, 2019

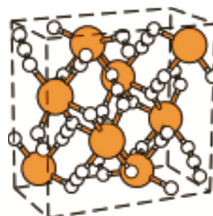
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Филиппов Д.И., Гордиенко А.Б.

Электронная структура и диэлектрические свойства азидов $\text{Ca}(\text{N}_3)_2$ и $\text{Sr}(\text{N}_3)_2$

Ключевые слова: азиды двухвалентных металлов, азид кальция, азид стронция, диэлектрические свойства, тензор диэлектрической проницаемости, эффективные заряды Борна

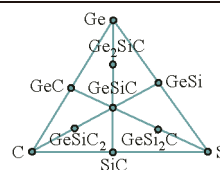


535

Басалаев Ю.М., Ускова И.К.

Моделирование кристаллической структуры и изучение электронного строения соединений $\text{Ge}_n\text{Si}_m\text{C}_n$

Ключевые слова: GeSiC_2 , халькопирит, GeSi_2C , квазихалькопирит, Ge_2SiC , антихалькопирит

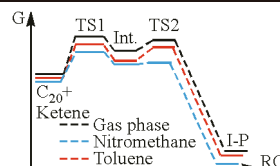


544

Soleymani M.

Theoretical study of the possibility of functionalization of C_{20} fullerene with simplest ketene CH_2CO

Keywords: C_{20} fullerene, ketene, polar transition state, functionalization, GEDT, synchronicity

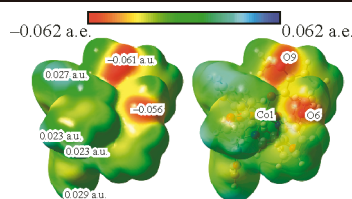


550

Zeyrek C.T., Hayvali Z., Ünver H., Elmali A.

Crystal structure, DFT and molecular docking studies of tris[N-(2-furylmethyl)-3-methoxy salicylidenaminato]cobalt(III)

Keywords: crystal structure, cobalt(III) complex, density functional theory, molecular docking, DNA

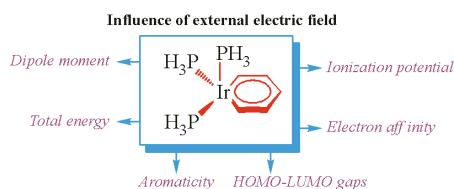


561

Ghobadi H., Ghiasi R., Jamehbozorgi S.

Effect of the external electric field on the electronic structure and aromaticity of iridabenzene: A DFT study

Keywords: iridabenzene complex, electric field effect, nucleus independent chemical shift (NICS)



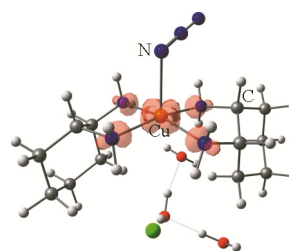
572

Nawaz S., Zierkiewicz W., Michalczyk M., Ghaffar A., Jabeen F., Ahmad S.

581

DFT analysis of copper(II) complexes of *cis*-1,2-diaminocyclohexane (Dach), [Cu(Dach)₂(N₃)]Cl·3H₂O and [Cu(Dach)₂-Ag(CN)₂-Cu(Dach)₂][Ag(CN)₂]₃

Keywords: copper(II), *cis*-1,2-diaminocyclohexane, azide, dicyanidoargentate(I), DFT calculations

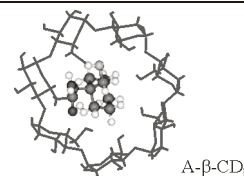


Yang L., Li D., Guo B., Wei D.

589

Theoretical study on inclusion interaction of β -cyclodextrin with gabapentin and its stability

Keywords: density functional theory, gabapentin, β -cyclodextrin, inclusion complex, energy barrier, stabilization



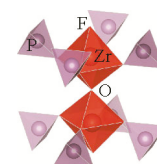
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Слободюк А.Б., Годнева М.М.

600

Строение гидратированных фторофосфатоцирконатов натрия по данным ЯМР

Ключевые слова: фториды, фосфаты, цирконаты, ЯМР, кристаллическое строение, ионная подвижность



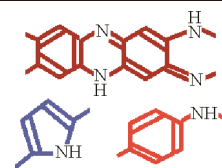
ОБЗОРЫ

Межуев Я.О., Коршак Ю.В., Штильман М.И., Похил С.Э.

609

Строение и структура азотсодержащих электропроводящих и электроактивных полимеров

Ключевые слова: полианилин, полипиррол, электропроводящие полимеры, полифенилендиамин, спектроскопия



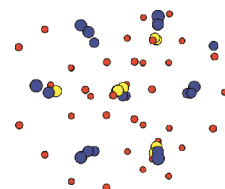
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

629

Кристаллографический анализ генезиса симметрии структур кислых сульфатов M₃H(SO₄)₂ (M=K, NH₄)

Ключевые слова: структуры M₃H(SO₄)₂, кристаллографический анализ, симметрия «темплата» SO₄, симметрия–стабильность, катионные подрешетки

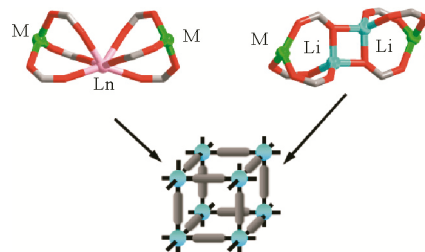


Сапьяник А.А., Смирнов К.Д., Барсукова М.О., Самсоненко Д.Г., Федин В.П.

636

Кристаллическая структура соединений, полученных в реакциях гетерометаллических пивалатных комплексов с дикарбоновыми кислотами

Ключевые слова: литий, цинк, кадмий, координационные полимеры, гетероциклические лиганды, полиядерные комплексы, рентгеноструктурный анализ

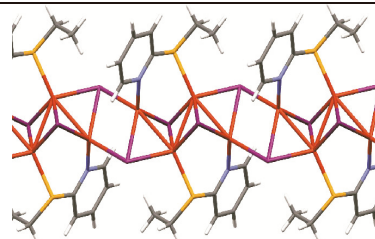


Artem'ev A.V., Rakhmanova M.I., Samsonenko D.G.

644

CuI-based coordination polymer assembled from a 2-pyridyl sulfide ligand: Synthesis and luminescent properties

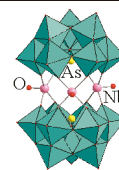
Keywords: copper(I), coordination polymers, pyridine ligands, thioethers, luminescence, crystal structure



Шмакова А.А., Абрамов П.А., Соколов М.Н.

Синтез, устойчивость и кристаллическая структура комплекса $(\text{NMe}_2\text{H}_2)_9[(\text{AsW}_9\text{O}_{33})_2(\text{NbO})_3(\text{H}_2\text{O})]\cdot 44\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: ниобий, мышьяк, полиоксометаллат, кристаллическая структура

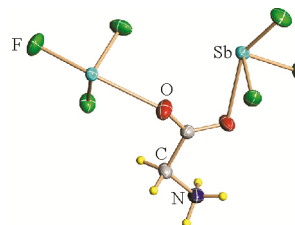


649

Войт Е.И., Удовенко А.А., Ковалева Е.В., Макаренко Н.В., Беленева И.А., Земнухова Л.А.

Структура и свойства молекулярного комплекса фторида сурьмы(III) с γ -глицином

Ключевые слова: кристаллическая структура, комплексное соединение, фторид сурьмы(III), глицин, колебательная спектроскопия, антимикробная активность

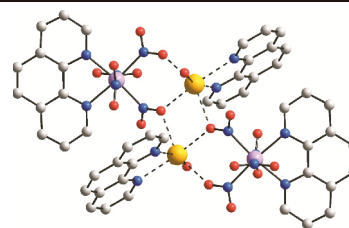


656

Топчийн П.А., Васильченко Д.Б., Ткачев С.В., Байдина И.А., Корольков И.В., Шевень Д.Г., Корнев С.В.

Смешанно-лигандные нитрокомплексы иридия(III) с фенантролином

Ключевые слова: иридий, нитрокомплексы, аквакомплексы, фенантролин, рентгеноструктурный анализ, ЯМР, масс-спектрометрия

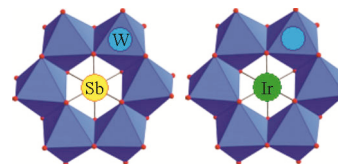


666

Мухачева А.А., Абрамов П.А., Соколов М.Н.

Взаимодействие $\text{Na}_9[\text{SbW}_9\text{O}_{33}]$ с гидроксокомплексами иридия(IV)

Ключевые слова: иридий, анион типа Андерсона, кристаллическая структура

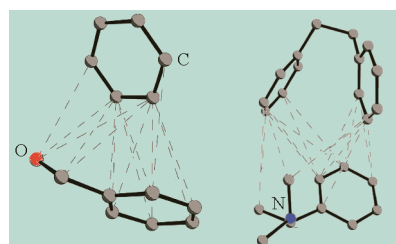


673

Демьянович В.М., Шишкина И.Н., Потехин К.А., Малеев А.В., Геворгян А.А.

Молекулярная и кристаллическая структура (1S,2R)-1-{2-[(1S)-1-(диметиламино)этил]фенил}-1,2-дифенилэтан-1,2-диола

Ключевые слова: аминоспирты, кетоаминоспирты, восстановление, стереоселективность, конфигурация, атом-атомные потенциалы, молекулярные агломераты в кристаллах

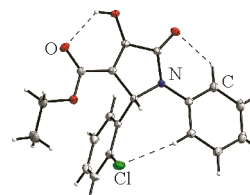


680

Ramazani A., Ahankar H., Ślepokura K., Lis T., Joo S.W.

Single crystal X-ray structure analysis of two polymorphs of ethyl 2-(2-chlorophenyl)-4-hydroxy-5-oxo-1-phenyl-2,5-dihydro-1H-pyrrole-3-carboxylate

Keywords: single crystal, X-ray analysis, pyrrolidinone derivative, polymorphs



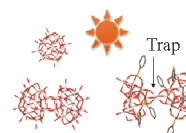
688

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Zhang L., Xu L., Li J.

First principles study on structurally resolved titanium dioxide nanoparticles functionalized by organic ligands

Keywords: solar cell, polyoxotitanate, charge trap



697

Содержание следующего номера — в конце журнала