

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

ТОМ 60

Декабрь

№ 12, 2019

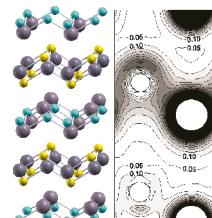
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Банников В.В., Шеин И.Р.

Структурные, электронные свойства и особенности химической связи в слоистых 1111-оксиарсенидах LaRhAsO и LaIrAsO: *ab initio* моделирование

Ключевые слова: 1111-фазы, оксиарсениды, легирование, зонная структура, поверхность Ферми, химическая связь

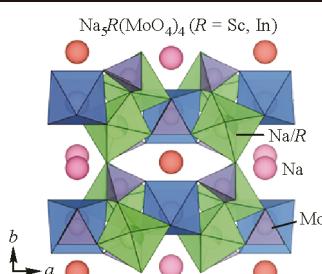


1939

Суэтин Д.В., Бакланова Я.В., Медведева Н.И.,
Савина А.А., Хайкина Е.Г., Плетнева Е.Д.,
Денисова Т.А.

Кристаллическая и электронная структура двойных молибдатов скандия и индия со структурой аллюодита

Ключевые слова: двойной молибдат, индий, скандий, твердофазный синтез, кристаллическая структура, метод Ритвельда, электронная структура, *ab initio* расчеты

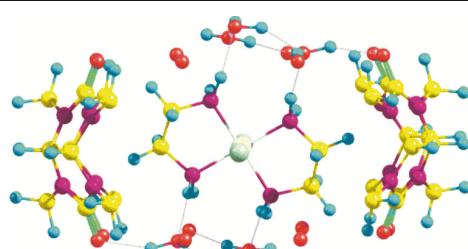


1949

Гришаева Т.Н., Маслий А.Н., Кузнецов А.М.

Структурные особенности соединения включения на основе комплекса *транс*-[Co(en)₂Cl₂]⁺ и кукурубит[8]урила: исследование методом функционала плотности

Ключевые слова: теория функционала плотности, функционал PBE, соединение включения, супрамолекулярные соединения, кукурубит[8]урил, кобальт(III)

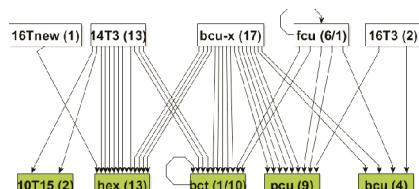


1959

Банару А.М., Гридин Д.М.

Координационные числа и критическая топология центросимметричных углеводородов

Ключевые слова: координационное число, энергия межмолекулярного взаимодействия, кристаллографическая сеть, полиздр Вороного–Дирихле

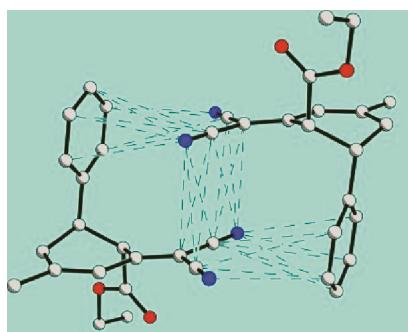


1968

Исмиев А.И., Потехин К.А., Малеев А.В.,
Магеррамов А.М.

Синтез этил-2-дицианметилен-4-метил-6-фенил-3-циклогексен-1-карбоксилата и молекулярные агломераты в его кристаллической структуре

Ключевые слова: трехкомпонентные реакции, малононитрил, бензилиденакетон, ацетоуксусный эфир, дицианметиленциклогексены, метод атом-атомных потенциалов, двойной плоский и двойной двухсторонний захваты, молекулярные агломераты

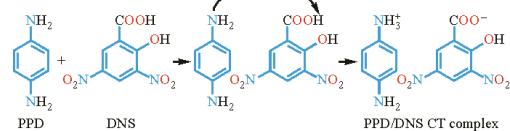


1980

Athmani A.S., Madi F., Laafifi I., Cheriet M., Issaoui N., Nouar L., Merdes R.

DFT investigation of a charge-transfer complex formation between *p*-phenylenediamine and 3,5-dinitrosalicylic acid

Keywords: PPD, DNS, energy, EDA, NBO, QTAIM and NCI

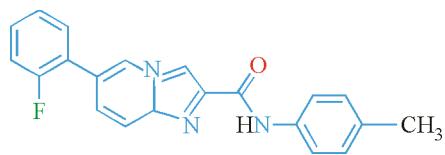


1991

Qin Y., Long D., Zhu X., Zhou Z., Chai H., Zhao C.

Synthesis, crystal structure, and DFT study of a new compound 6-(2-fluorophenyl)-N-(*p*-tolyl)imidazo[1,2-*a*]pyridine-2-carboxamide

Keywords: imidazopyridine, synthesis, X-ray diffraction, DFT



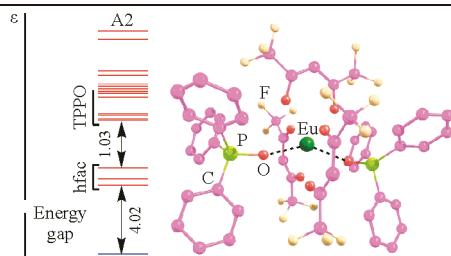
2002

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Шурыгин А.В., Вовна В.И., Короченцев В.В.,
Мирочник А.Г., Сергиенко В.И.

**Электронная структура аддуктов Eu(III)
с OP(C₆H₅)₃ и OP[NMe₂]₃**

Ключевые слова: фотоэлектронная спектроскопия, теория функционала плотности, аддукты β-дикетонатов, Eu(hfac)₃, электронное строение, OP(C₆H₅)₃, OP[NMe₂]₃, SP[NMe₂]₃

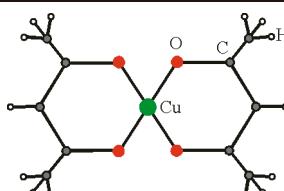


2010

Костюк Н.Н., Дик Т.А., Казак М.С., Метельский Ю.М.

**Масс-спектрометрическое исследование
бис-ацетилацетоната меди с учетом изотопного
состава металла**

Ключевые слова: бис-ацетилацетонат меди,
масс-спектр, хелат

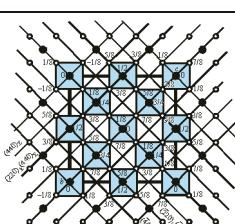


2025

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

Кристаллографический анализ полиморфных модификаций SiO₂

Ключевые слова: кристаллографический анализ, катионные и анионные подрешетки, полиморфизм SiO₂, α-кварц, β-тридимит, α- и β-кристобалит, коэсит, стишовит, факторы относительной стабильности



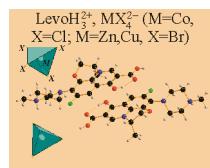
2031

Васильев А.Д., Головнев Н.Н.

2044

Кристаллическая структура трех ионных соединений левофлоксацина

Ключевые слова: двухзарядный катион левофлоксациниума, тетрагалогениды *d*-элементов, ионные соединения, структура

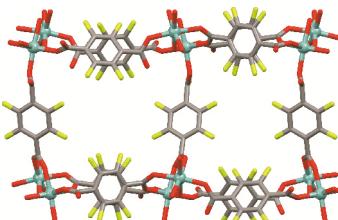


Чеплакова А.М., Самсоненко Д.Г., Федин В.П.

2050

Металл-органические координационные полимеры на основе анионов перфторированных дикарбоновых кислот

Ключевые слова: кристаллическая структура, металл-органический координационный полимер, цинк, скандий

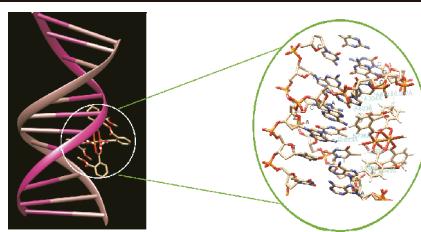


Vakil F., Mantasha I., Shahid M., Ahmad M.

2057

A dinuclear paddle-wheel Cu(II) complex, $[\text{Cu}_2(\text{L})_4(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ [$\text{HL}=2\text{-}(m\text{-methoxycarbonyl})\text{benzoic acid}]$: Crystallographic, magnetic and theoretical analyses

Keywords: paddle-wheel Cu(II) complex, free ester group, crystal structure, magnetic studies, molecular docking

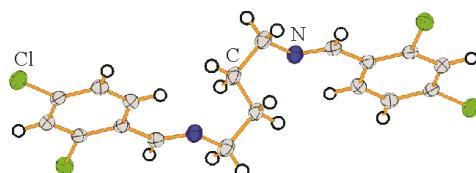


Khalaji A.D., Peyghoun S.J., Dusek M., Eigner V.

2069

1D copper(I) coordination polymer $[\text{Cu}_2(\mu-(2,4-\text{Cl}-\text{ba})_2\text{bn})(\mu-\text{I}_2)]_n$ with a flexible Schiff base ligand: Synthesis, crystal structure, and thermal stability

Keywords: 1D copper(I) coordination polymer, single crystal, triangle, thermogravimetry, crystal structure

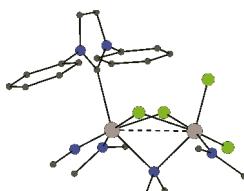


Петров П.А., Голубицкая Е.А., Компаньков Н.Б., Ельцов И.В., Сухих Т.С., Соколов М.Н.

2075

Биядерный комплекс ниобия с координированным N-гетероциклическим карбеном

Ключевые слова: ниобий, амиды, N-гетероциклические карбены, РСА

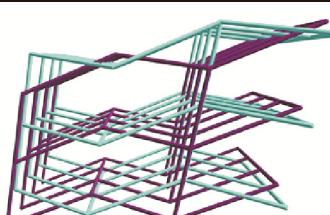


Zhang C., Tao J.-Q., Wang J.

2082

Crystal structure and luminescent property of a new three-dimensional polymer based on 3,5-di(1H-benzimidazol-1-yl)pyridine

Keywords: coordination polymer, twofold interpenetrating, 3,5-di(1H-benzimidazol-1-yl)pyridine, biphenyl-4,4'-dicarboxylic acid, luminescent property

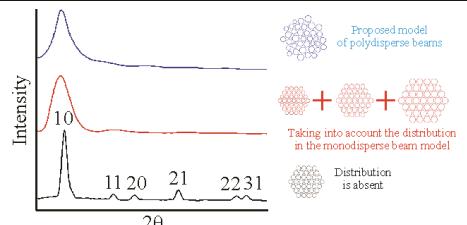


Саламатов И.Н., Яценко Д.А., Хасин А.А.

2089

Определение функции распределения одностенных углеродных нанотрубок по диаметрам по данным рентгеновской дифракции

Ключевые слова: рентгеновская дифракция, углеродные нанотрубки, пучки ОУНТ, плотнейшая упаковка, формула Дебая



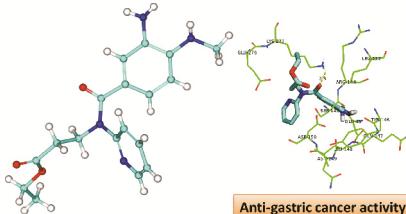
СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Liu L.-Z., Peng K.-Y., Yue F.-R., Li X.-H., Zhang L.

2097

**Synthesis, crystal structure,
and anti-gastric cancer activity of ethyl
3-(3-amino-4-(methylamino)-N-(pyridin-2-yl)-
benzamido)propanoate**

Keywords: heterocycles, X-ray crystallography,
anticancer activity



Anti-gastric activity

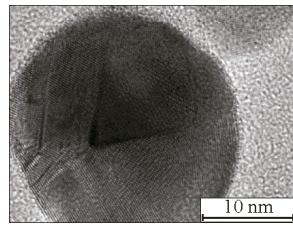
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Зюзин Д.А., Черепанова С.В., Мороз Э.М., Мороз Б.Л.,
Герасимов Е.Ю., Бухтияров В.И.

2103

**Особенности реальной структуры наночастиц
металлического серебра, размещенных
в каналах мезопористого силиката SBA-15**

Ключевые слова: рентгеновская дифракция,
наночастицы серебра, дефекты упаковки



Содержание следующего номера — в конце журнала