

ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 64

Август

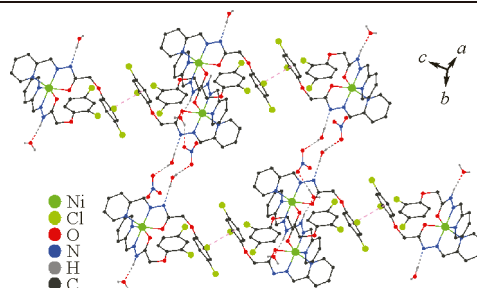
№ 8, 2023

СОДЕРЖАНИЕ

Конник О.В., Кискин М.А., Балаев Д.С.,  
Шульгин В.Ф., Гусев А.Н.

**Координационные соединения никеля(II)  
с 2,4-дихлорфеноксиацетилгидразоном  
пиридин-2-карбальдегида**

**Ключевые слова:** никель(II),  
2,4-дихлорфеноксиацетилгидразон,  
пиридин-2-карбальдегид, стэкинг-взаимодействие,  
рентгеноструктурный анализ

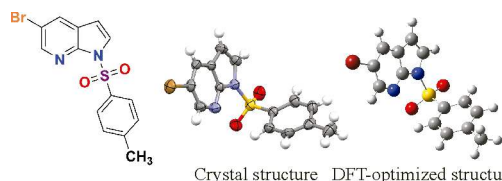


113683

Cheng T., Jing J., Yang C.-Y., Nie D.-N., Yang K.-M.,  
Tang S., Fu S.-X., Zhang Y.-N., Zhou Z.-X.

**Synthesis, crystal structure and DFT study  
of 5-bromo-1-tosyl-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine**

**Keywords:** 7-azaindoles derivatives, crystal structure,  
infrared analysis, density functional theory (DFT)

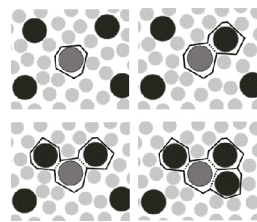


113762

Ничипоренко В.А., Кадцын Е.Д., Медведев Н.Н.

**Новый подход к изучению ассоциации  
в растворах**

**Ключевые слова:** молекулярно-динамическое  
моделирование, разбиение Вороного, соседство молекул,  
водные растворы неэлектролитов, ассоциация в растворах,  
кластеры

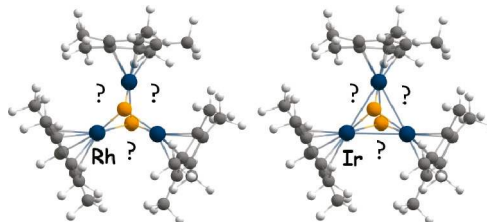


113908

Мирзаева И.В.

**Делокализация электронов и релятивистские  
эффекты в электронном строении и параметрах  
ЯМР комплексных катионов  $[\text{Cr}^*{}_3\text{M}_3\text{Se}_2]^{2+}$   
( $\text{M} = \text{Rh}, \text{Ir}$ )**

**Ключевые слова:** ЯМР  $^{77}\text{Se}$ , DFT, NBO, AIM,  
связи металл–металл

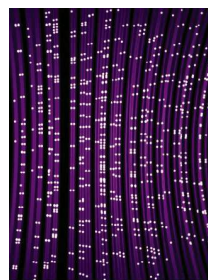


113998

Панченко А.В., Серебrenникова П.С.,  
Комаров В.Ю., Громилов С.А.

**Новые подходы к калибровке дифрактометра.  
Изучение InSb в интервале 90–490 К**

**Ключевые слова:** монокристалльный дифрактометр, 2D-детектор, монокристалл InSb, обработка дифракционных данных, калибровка гониометра, точность измерения параметров элементарной ячейки, высокотемпературная рентгенография

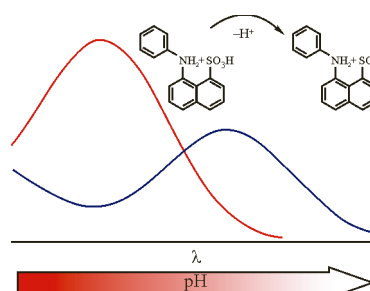


114114

Федоров М.С., Лапыкина Е.А., Гиричева Н.И.,  
Филиппов А.А.

**Квантово-химический анализ электронных  
спектров молекулярных, ионных,  
цвиттер-ионных форм 1-амино-  
и 1-(N-фенил)аминонафталин-8-сульфокислот**

**Ключевые слова:** сульфоновые кислоты, квантово-химические расчеты, DFT, электронные спектры, геометрическое и электронное строение

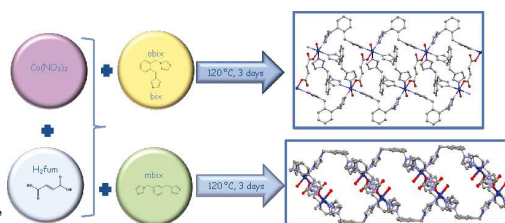


114392

Biçer F.A., Yeşilel O.Z.

**Synthesis, characterization and the effect  
of the auxiliary ligands on the dimensionality  
of two cobalt(II)-fumarate coordination polymers  
with bis(imidazole) ligands**

**Keywords:** fumarate, 1,2-bis(imidazol-1-yl-methyl)benzene, 1,3-bis(imidazol-1-yl-methyl)benzene, coordination polymers, fumaric acid, cobalt(II) complexes

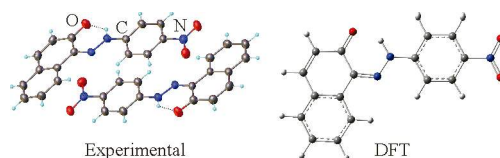


114396

Gümüşhan İ.Y.

**Synthesis, crystal structure, Hirshfeld surface  
analysis and DFT studies of (Z)-1-(2-(4-  
nitrophenyl)hydrazineylidene)naphthalen-2(1H)-one**

**Keywords:** Schiff base, X-ray structure, spectroscopy, DFT calculation, proton transfer

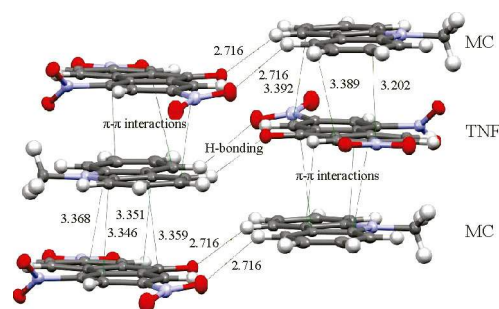


114403

Линко Р.В., Рябов М.А., Давыдов В.В.,  
Хрусталева В.Н.

**Комплексы с переносом заряда производных  
9H-флуорен-9-она с 9-метил-9H-карбазолом:  
квантово-химическое моделирование,  
рентгеноструктурное исследование**

**Ключевые слова:** 2,4,7-тринитро-9H-флуорен-9-он, 9-метил-9H-карбазол, комплексы с переносом заряда, квантово-химическое моделирование, рентгеноструктурный анализ

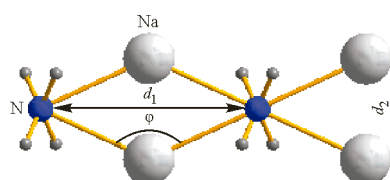


114432

Корабельников Д.В., Федоров И.А.,  
Кравченко Н.Г., Корабельникова Е.Ю.

**Сжимаемость амида натрия и влияние  
давления на его электронные свойства**

**Ключевые слова:** амид натрия, теория функционала плотности, давление, сжимаемость, электронная плотность, ширина запрещенной зоны



114448

114618

Chemical structures of the complexes  $[\text{Ni}_2(\text{hfac})_2(\text{IN})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  and  $[\text{Ni}_2(\text{hfac})_2(\text{NN})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ .

114621

### XRD analysis, Hirshfeld surface analysis, and energy framework

Казачкова В.И., Нгуен С.Т., Буланов А.О.,  
Цатурян А.А., Чан Л.Д., Шербаков И.Н.

Ligand	Sequoia	E	Z
s-NH	46.4	45.8	48.3
s-OH	46.4	45.8	48.3
EEZ-OH	21.6	20.6	27.6
EEZ-NH	21.6	20.6	27.6
ZEZ-OH	21.6	20.6	27.6
ZEZ-NH	21.6	20.6	27.6
ZEZ	21.6	20.6	27.6

114649

Герасимова Д.П., Веремейчик Я.В.,  
Лодочникова О.А.

Chemical structure of a sulfonamide derivative. The structure shows a sulfonamide group ( $\text{SO}_2\text{NH}_2$ ) attached to a bicyclic system. The nitrogen atom is bonded to two hydrogen atoms, one labeled "Reverse" and the other "Straight". The structure also includes a benzene ring with a substituent  $R$ .

114890

The diagram shows the generation of 1D, 2D, and 3D data from RRR and SSS inputs. At the top, two ovals labeled 'RRR' (red) and 'SSS' (blue) are separated by a plus sign. Three arrows point down from this combination to three rectangular boxes. The first box, labeled '1D', contains a vertical stack of four pairs of RRR and SSS. The second box, labeled '2D', contains a 2x2 grid of RRR and SSS pairs. The third box, labeled '3D', contains a 3x2 grid of RRR and SSS pairs.

## 114892

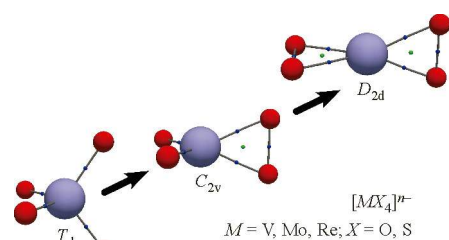
РЫЖИКОВ М.Р., КОЗЛОВА С.Г.

114895

Артемкина С.Б., Брылев К.А., Иванова М.Н.,  
Козлова С.Г., Рыжиков М.Р., Федоров В.Е.

**Внутримолекулярные электронно-структурные  
перестройки в оксо- и тиометаллатах ванадия,  
молибдена и рения**

**Ключевые слова:** тиометаллаты, оксометаллаты,  
переходные металлы, внутримолекулярные реакции,  
теория функционала плотности,  
топологические методы квантовой химии

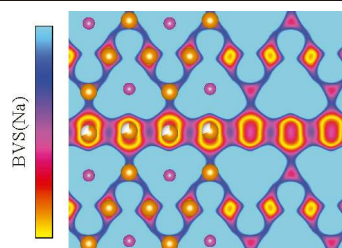


114992

Юдин В.Н., Солодовников С.Ф., Золотова Е.С.,  
Солодовникова З.А., Саранчина Е.М.

**Аллюодитоподобные фазы  
в системе  $Na_2MoO_4$ – $Cs_2MoO_4$ – $NiMoO_4$**

**Ключевые слова:** молибдаты, аллюодит, синтез,  
фазовые диаграммы, нестехиометрия, твердые растворы,  
кристаллическая структура, модулированная структура,  
карты сумм валентных усилий, ионная проводимость

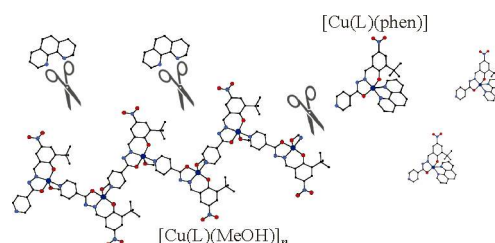


114998

Матюхина А.К., Зорина-Тихонова Е.Н.,  
Новикова В.А., Скабицкий И.В., Кискин М.А.,  
Еременко И.Л.

**Синтез и строение координационных  
соединений Cu(II) с  $N'$ -(3-*tert*-бутил-5-нитро-2-  
гидроксипензалиден)-изоникотиногидразидом**

**Ключевые слова:** ацилгидразоны, комплексы меди(II),  
изониазид, 3,5-ди-*tert*-бутилсалициловый альдегид,  
1,10-фенантролин

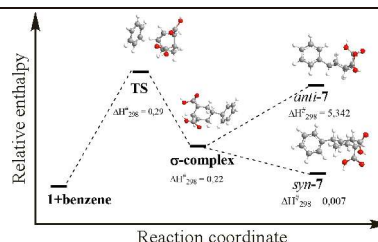


115003

Фирстова А.А., Кофанов Е.Р.

**Квантово-химическое исследование реакции  
алкилирования бензола  
циклогекс-4-ен-1,2-дикарбоновой кислотой**

**Ключевые слова:** алкилирование по Фриделю–Крафтсу,  
циклогекс-4-ен-1,2-дикарбоновая кислота, квантово-  
химическое моделирование, переходное состояние



115027

**Содержание следующего номера — в конце журнала**