

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 61

Декабрь

№ 12, 2020

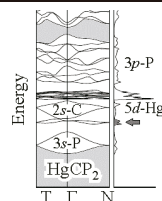
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Басалаев Ю.М., Басалаева М.Ю., Дугинова Е.Б.,
Маринова С.А.

Особенности электронного строения
пниктидов HgCX_2

Ключевые слова: химическая связь, зонная структура,
халькопирит, HgCX_2 , пниктиды

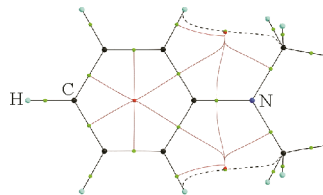


1945

Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д.

Слабые взаимодействия в диметиланилине
и его производных

Ключевые слова: квантовая теория атомов в молекулах,
электронная плотность, внутримолекулярные связи,
N,N-диметиланилин, метиловый красный

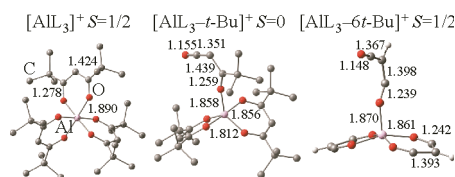


1951

Гиричев Г.В., Гиричева Н.И.

Строение ионов и энергия процессов
их образования в насыщенном паре
трис-дипивалоилметаната алюминия
при ионизации электронами

Ключевые слова: β -дикетонаты,
трис-дипивалоилметанат алюминия, масс-спектр, DFT,
геометрическое и электронное строение ионов,
граничные молекулярные орбитали,
энергия процессов ионизации



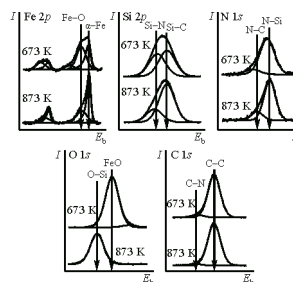
1958

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Файнер Н.И., Плеханов А.Г., Пушкарев Р.В., Шаяпов В.Р.,
Максимовский Е. А., Надолинный В.А., Коротаев Е.В.,
Каичев В.В.

Синтез магнитных композитных пленок $\text{SiC}_x\text{N}_y\text{Fe}_z$
плазмохимическим разложением газовой смеси
1,1,1,3,3,3-гексаметилдисилазана, ферроцена и гелия

Ключевые слова: 1,1,1,3,3,3-гексаметилдисилазан,
ферроцен, плазмохимическое осаждение пленок,
магнитные свойства композитных пленок $\text{SiC}_x\text{N}_y\text{Fe}_z$

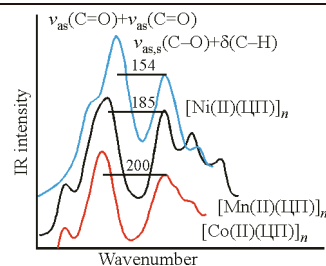


1971

Берестова Т.В., Носенко К.Н., Лусина О.В., Кузина Л.Г.,
Кулиш Е.И., Мустафин А.Г.

**Применение ИК спектроскопии для оценки
стабильности связи металл-лиганд
в комплексах карбоксилсодержащих полимеров**

Ключевые слова: Цитрусовый пектин, сукцинат хитозана,
 $\Delta\nu(\text{COO})$, комплексные соединения, ИК спектроскопия,
оценка стабильности связи металл-лиганд

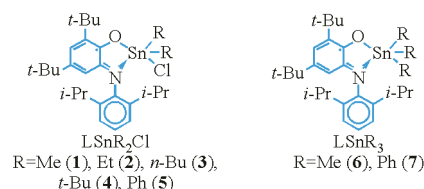


1982

Хамалетдинова Н.М., Мещерякова И.Н., Пискунов А.В.,
Кузнецова О.В.

**Колебательные спектры в дальнем ИК-диапазоне
и эффекты заместителей
для *o*-иминосемихиноновых комплексов олова(IV)**

Ключевые слова: *o*-иминосемихиноновые комплексы,
олово(IV), инфракрасные спектры, эффекты заместителей,
корреляционный анализ



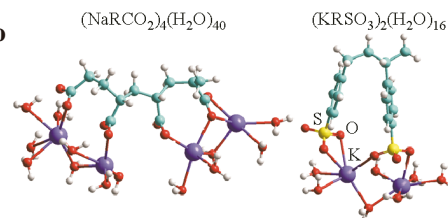
1995

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Солдатов В.С., Косандрович Е.Г., Безъязычная Т.В.

**Квантово-химическое подтверждение фундаментального
различия в гидратации и ионообменной селективности
ионов натрия и калия на карбоксильных
и сульфостирольных катионитах**

Ключевые слова: гидратация, ионит,
квантово-химические расчеты, структура воды, ион калия,
ион натрия, положительная гидратация,
отрицательная гидратация, координационное число

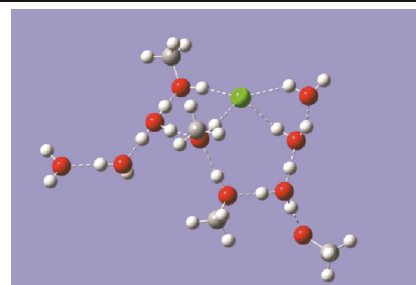


2005

Тараканова Е.Г., Майоров В.Д., Волошенко Г.И.,
Кислина И.С.

**Конкуренция между молекулами метанола
и воды при образовании и сольватации ионов
в системе $\text{CH}_3\text{OH}-\text{H}_2\text{O}-\text{HCl}$**

Ключевые слова: водно-метанольные растворы, HCl,
водородная связь, дисольваты протона,
строение сольватных комплексов, ИК спектроскопия,
квантово-химический расчет



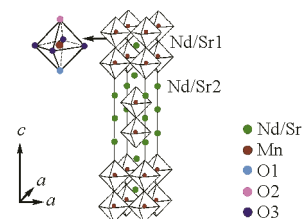
2017

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Федорова О.М., Ведмидь Л.Б.

**Влияние температуры на структуру сложного оксида
 $\text{NdSr}_2\text{Mn}_2\text{O}_{7+\delta}$**

Ключевые слова: фазы Раддлсдена–Поппера,
рентгеноструктурный анализ,
дифференциальная сканирующая калориметрия,
длины связей

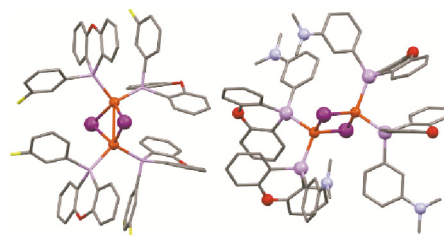


2032

Добрынин А.Б., Галимова М.Ф., Мусина Э.И.,
Мингалеева С.В., Карасик А.А.

**Структурные особенности биядерных комплексов
меди(I) с 10-м-(арил)феноксарсинами**

Ключевые слова: медь, галогениды,
галогенидные комплексы меди, арсиновые лиганды,
феноксарсины, кристаллическая и молекулярная структура,
рентгеноструктурный анализ

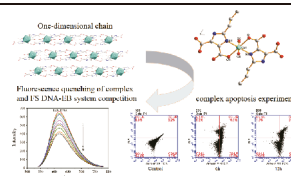


2039

Wu S., Wang S., Zhu M., Gao E.

Synthesis, characterization, DNA binding and anticancer ability of a Co(II) complex constructed by 2-propyl-1H-imidazole-4,5-dicarboxylic acid

Keywords □ DNA binding, apoptotic, crystal structure

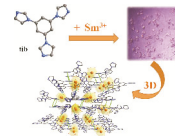


2045

Wu S., Wang S., Zhu M., Gao E.

Crystallographic analysis of a samarium(III) complex with 1,3,5-tris(1-imidazolyl)benzene

Keywords: complex; samarium(III); crystal structure

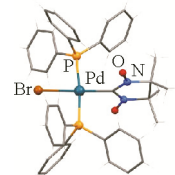


2052

Романенко Г.В., Фокин С.В., Богомяков А.С., Овчаренко В.И.

Строение Pd-органического парамагнетика

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, палладийорганические соединения, нитрокислые радикалы, магнетохимия

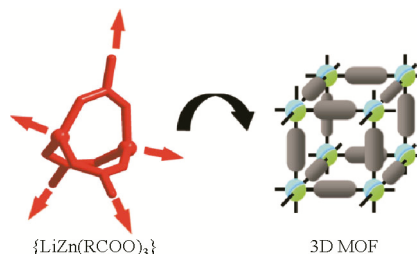


2059

Сапьяник А.А., Дудко Е.Р., Самсоненко Д.Г., Федин В.П.

Кристаллическая структура металл-органических координационных полимеров, полученных из гетерометаллического пивалатного комплекса [Li₂Zn₂(py)₂(piv)₆]

Ключевые слова: литий, цинк, гетерометаллические комплексы, координационные полимеры, поликарбоновые кислоты, рентгеноструктурный анализ

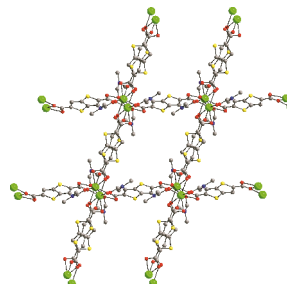


2064

Демаков П.А., Рядун А.А., Самсоненко Д.Г., Дыбцев Д.Н., Федин В.П.

Строение и люминесцентные свойства металл-органических координационных полимеров европия(III) с лигандами тифенового ряда

Ключевые слова: лантаноиды, комплексы европия, координационные полимеры, металл-органические каркасы, рентгеноструктурный анализ, люминесценция, люминесцентная детекция

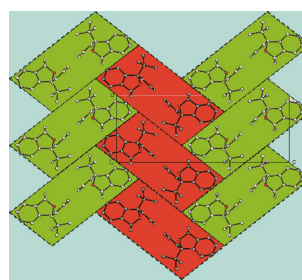


2072

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

Сравнение молекулярных упаковок кристаллических структур (1S,3S)- и (1S,3R)-1-трет-бутил-3-метил-1-фенил-1,3-дигидро-2-бензофурана

Ключевые слова: аминспирты, иодметилаты, диастереомеры, стереоселективность, конфигурация, циклизация, дигидро-2-бензофураны (фталаны), атом-атомные потенциалы, молекулярные агломераты в кристаллах



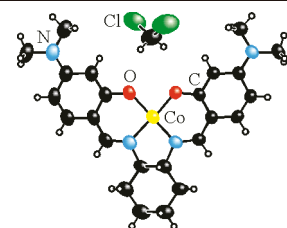
2082

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Rawajfeh R.S., Awwadi F.F., Bardaweel S.K., Hodali H.A.

Synthesis, X-ray structures and anticancer activity of Co(II), Cu(II), Ni(II) and Pd(II) complexes with a salen ligand derived from trans-1,2-diaminocyclohexane

Keywords: trans-1,2-diaminocyclohexane, salen ligand, anticancer, cobalt(II), copper(II), nickel(II), palladium(II)



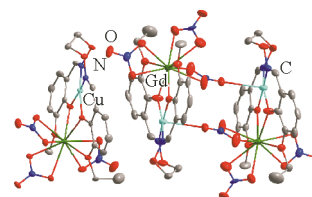
2092

Li S., An X.-X., Wang J.-F., Wang L., Xue L.-G.

An novel antibacterial active [Cu^{II}–Gd^{III}] complex constructed from an unsymmetric salamo-based ligand:

Synthesis, structural characterizations

Keywords: salamo-based ligand, complex, crystal structure, property

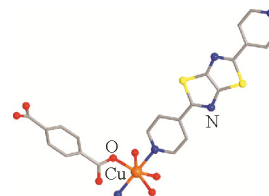


2100

Liu Y.-Q., Liu F.-Z., Liu Y.-J., Zhang J., Xiong Q.-X.

Two Cu(II)-based coordination polymers: Reduction activity on serum procalcitonin production and protective effect on children sepsis

Keywords: coordination polymers, children sepsis, serum procalcitonin



2114

Содержание следующего номера — в конце журнала