

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ**  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 62

Ноябрь

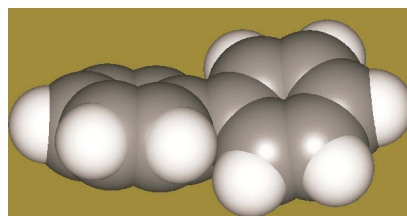
№ 11, 2021

**СО Д Е Р Ж А Н И Е**

Теплухин А.В.

**Параметризация торсионного потенциала  
в полноатомных моделях молекул  
углеводородов с упрощенным учетом энергии  
деформации валентных связей и углов**

**Ключевые слова:** внутреннее вращение,  
моделирование, Монте-Карло, полимеры

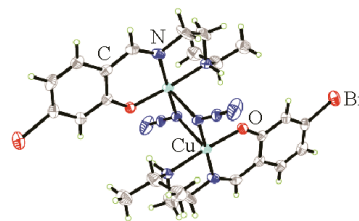


1765

Wang Y.

**Synthesis, crystal structures  
and urease inhibitory activity of Schiff base  
copper and nickel complexes**

**Keywords:** Schiff base, copper complex,  
nickel complex, X-ray diffraction,  
urease inhibitory activity

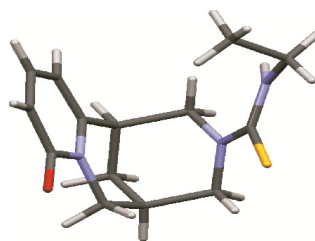


1780

Турдыбеков К.М., Нуркенов О.А., Турдыбеков Д.М.,  
Сатпаева Ж.Б., Фазылов С.Д.

**Синтез и кристаллическая структура  
N-этил-N-цитизинокарботиоамида**

**Ключевые слова:** алкалоиды, цитизин,  
карботиоамид, этилизотиоцианат,  
ЯМР спектроскопия,  
рентгеноструктурный анализ

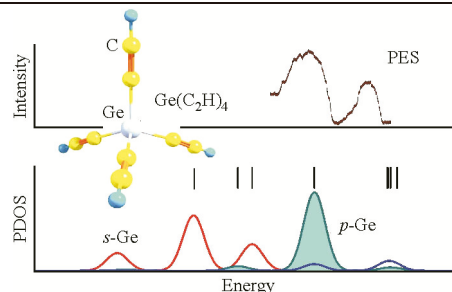


1791

Татевосян М.М., Жукова Т.Н., Власенко В.Г.

**Моделирование электронного строения  $C(C_2H)_4$   
и  $Ge(C_2H)_4$  методом теории  
функционала плотности с использованием  
данных фотоэлектронной спектроскопии**

**Ключевые слова:** тетраэтинилметан,  
тетраэтинилгерманий, электронное строение,  
фотоэлектронная спектроскопия,  
теория функционала электронной плотности



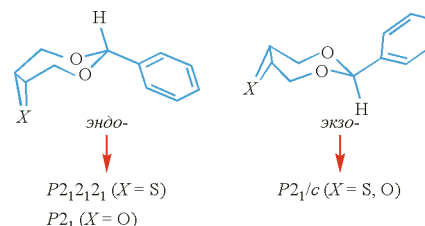
1797

Герасимова Д.П., Павельев Р.С., Лодочникова О.А.

1807

**От стереохимии молекулы к стереохимии кристалла: хиральная кристаллизация эндоизомеров в сравнении с centrosymmetric кристаллизацией экзоизомеров тиранового и оксиранового производных фенилзамещенного семичленного ацетала**

**Ключевые слова:** хиральная кристаллизация, ахиральные соединения, межмолекулярные взаимодействия

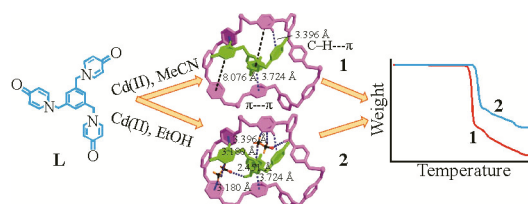


Yang Q.-L., Zhang X.-Y., Xiong D.-Q., Zhu Y.-Y., Yun M., Jia M.-M., Fu P.-K., Liu J.-C., Dong X.-Y.

1816

**Two new self-assembled cadmium(II) metal-organic frameworks constructed of a flexible tripodal ligand: Synthesis, structure, and thermal stability**

**Keywords:** tripodal ligand, interpenetration, weak interaction, stability, 2D fingerprint

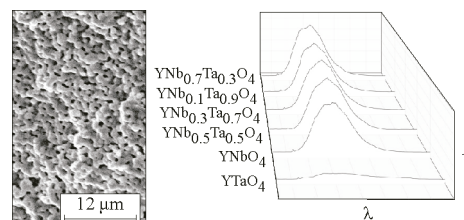


Щербина О.Б., Маслобеова С.М., Палатников М.Н., Ефремов В.В.

1827

**Синтез, структура, люминесцентные и механические свойства твердых растворов  $YNb_xTa_{1-x}O_4$**

**Ключевые слова:** керамика, люминесценция, твердые растворы, микроструктура трещиностойкость

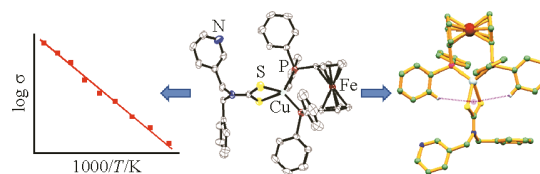


Kumar V., Singh S.

1835

**Synthesis, crystal structure, and properties of heteroleptic Cu(I) dithiocarbamate complex containing diphenyl phosphinoferrocene (dppf)**

**Keywords:** heteroleptic, Cu(I) dithiocarbamate complex, crystal structure, diphenyl phosphinoferrocene (dppf), semiconductor

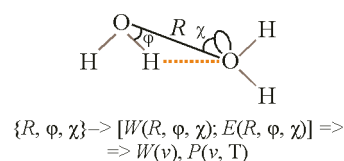


Ефимов Ю.Я.

1844

**Колебательные спектры воды: роль экстремумов в энергии водородной связи O-H...O и вырожденности ее геометрических состояний**

**Ключевые слова:** вода, водородная связь, геометрия, энергия, колебательные спектры

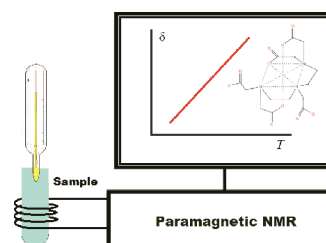


Заполоцкий Е.Н., Бабайлов С.П.

1852

**ЯМР исследование температурной зависимости парамагнитных химических сдвигов  $[Co(DTPA)]^{3+}$**

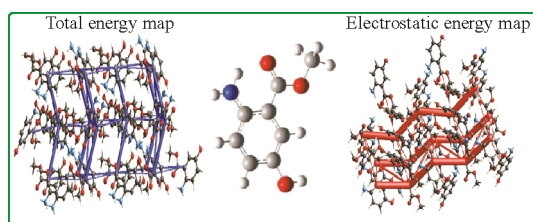
**Ключевые слова:** кобальт(II), диэтилентриаминпентаацетат, парамагнитный ЯМР, химический сдвиг, температурная зависимость



Saeed A., Shabir G., Channar P.A., Flörke U., Hökelek T., Erben M.F.

# Computational investigations, Hirshfeld surface analysis, interaction energy calculations and energy frameworks crystal structure of methyl 2-amino-5-hydroxybenzoate

**Keywords:** methyl-2-amino-5-hydroxybenzoate, crystal structure, DFT, Hirshfeld surface analysis, MEP analysis

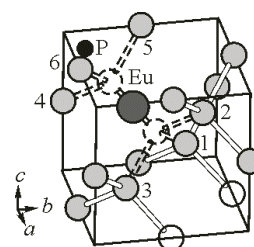


1857

Надолинный В.А., Комаровских А.Ю., Борздов Ю.М., Пальянов Ю.Н.

# Исследование методом ЭПР кристаллов алмаза, синтезированных в системах Mg-EuF<sub>2</sub>-C и Mg-EuF<sub>3</sub>-C при высоких РТ параметрах

**Ключевые слова:** синтетические алмазы, ЭПР спектроскопия, люминесценция дефектов, содержащих европий

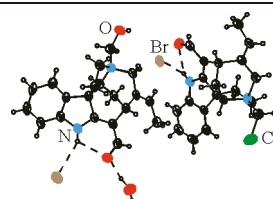


1870

Адизов Ш.М., Ташходжаев Б.

# Кристаллическая структура продуктов кватернизации норфлуорокурина

**Ключевые слова:** индолный алкалоид, норфлуорокурин, четвертичные солевые формы, PCA

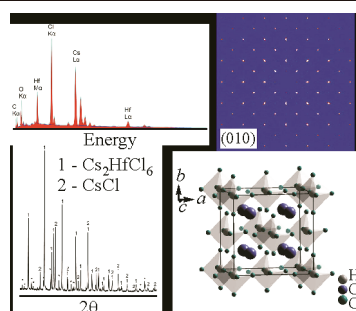


1878

Смирнова Е.С., Сидорова Е.В., Синельников А.Н., Синельников Н.Н., Сорокин Т.А., Артемов В.В., Алексеева О.А.

# Синтез и структурная характеристика сцинтилляционных монокристаллов гексахлорогафната цезия Cs<sub>2</sub>HfCl<sub>6</sub>

**Ключевые слова:** сцинтилляторы, гексахлорогафнат цезия, кристаллическая структура, монокристаллы, кристаллизация из раствора, фазовый состав, элементный состав

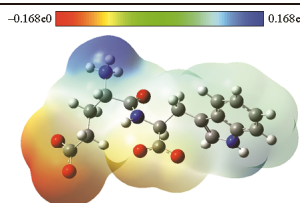


1885

Akverdieva G.A., Godjajev N.M., Demukhamedova S.D.

# Structural analysis and molecular docking studies of thymogen

**Keywords:** thymogen, molecular mechanics, DFT calculations, molecular docking

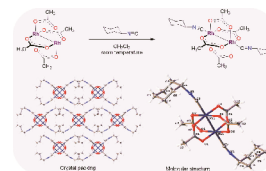


1895

Grudova M.V., Kubasov A.S., Tskhovrebov A.G.

# Synthesis and crystal structure of dirhodium tetraacetate-di(cyclohexylisocyanide) complex

**Keywords:** isocyanides, rhodium, carbenes

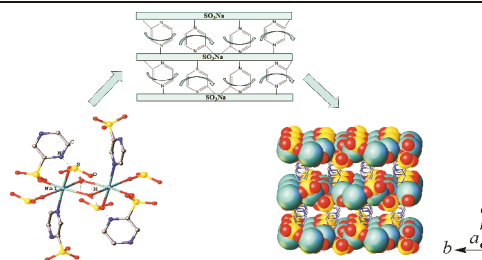


1907

Liang Y.-J., Hu D., Zhang L., Jiang Y., Li J.-X.

# The synthesis and property of a sodium supramolecular crystal network constructed with functional pyrazine sulfonic acid

**Keywords:** metal-organic architecture, pyrazine sulfonate, alkali metal, bridging pattern, supramolecular structure



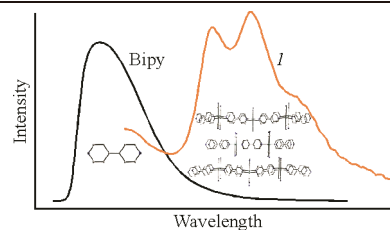
1913

Tao Y.-L., Zhu Z.-H., Zhao Z., Zhu Q.-T., Wang O.,  
Liu X.

1921

**A novel mercury coordination compound  
with yellow photoluminescence**

**Keywords:** coordination compound,  
crystal structure, photoluminescence,  
mercury compound, bipyridine



**Содержание следующего номера — в конце журнала**