

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 62

Сентябрь

№ 9, 2021

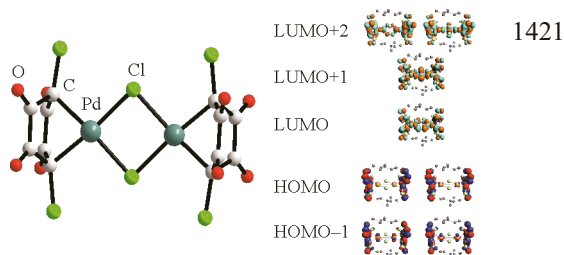
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Новиков А.С., Гушин А.Л.

**Теоретическое исследование
супрамолекулярных контактов
Br...Br и I...I в халькогалогенидах титана,
ванадия и тантала**

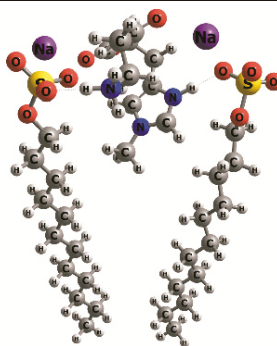
Ключевые слова: нековалентные взаимодействия,
галогенные связи, халькогалогенидные кластеры, титан,
ванадий, тантал, квантово-химические расчеты



Баранников В.П., Курбатова М.С.,
Гиричева Н.И.

**Квантово-химическое моделирование
взаимодействия баленина
с димером додецилсульфата натрия
как фрагментом анионной мицеллы.
Влияние ионного состояния дипептида**

Ключевые слова: пептиды, баленин,
додецилсульфат натрия, комплексы,
квантово-химические расчеты, структура,
энергии комплексообразования

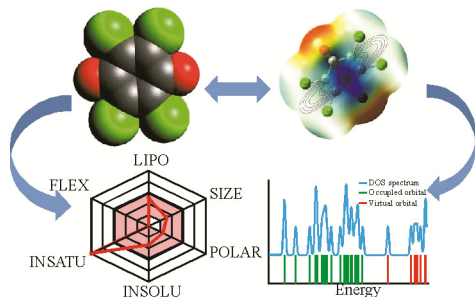


1428

Suvitha A., El-Mansy M.A.M.,
Kothandan G., Steephen A.

**Molecular structure, FT-RAMAN, IR, NLO, NBO,
HOMO—LUMO analysis, physicochemical
descriptors, ADME parameters,
and pharmacokinetic bioactivity
of 2,3,5,6-tetrachloro-*p*-benzoquinone**

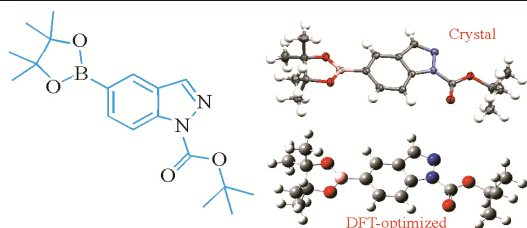
Keywords: 2,3,5,6-tetrachloro-*p*-benzoquinone (TCBQ),
NBO, NLO, HOMO—LUMO, ADME, MEP, CADD



Ye W.-J., Chen D.-M., Wu Q.-M., Chen Y.-M.,
Yang D.-Z., Liao T.-H., Zhou Z.-X.

**Synthesis, crystal structure, and a DFT study
of *tert*-butyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-
dioxaborolan-2-yl)-1*H*-indazole-1-carboxylate**

Keywords: indazole, 4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-
dioxaborolan-2-yl, synthesis, X-ray diffraction, DFT



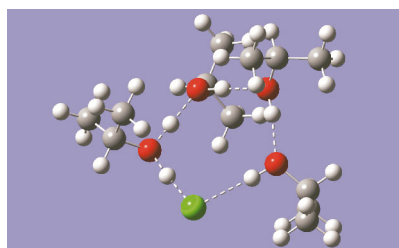
1454

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

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

**Структура комплексов в растворах
HCl–изопропиловый спирт
и равновесный состав системы**

Ключевые слова: изопропиловый спирт, HCl,
микроструктура растворов, водородная связь,
строение сольватов протона, ИК спектроскопия,
квантово-химические расчеты



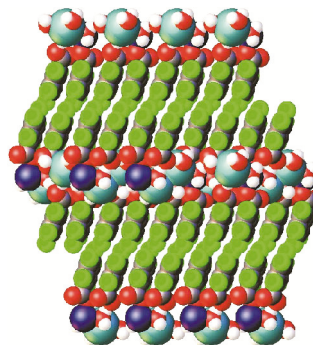
1461

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Яшкова К.А., Мельников С.Н., Николаевский С.А.,
Шмелев М.А., Сидоров А.А., Кискин М.А.,
Еременко И.Л.

**Синтез и строение необычного
координационного полимера
{[Na₂Co(pfb)₂(H₂O)₈](pfb)₂}_n
с анионами пентафторбензойной кислоты**

Ключевые слова: комплексы кобальта(II),
координационные полимеры,
гетерометаллические комплексы,
рентгеноструктурный анализ

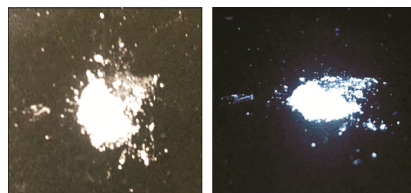


1475

Li P., Li M., Li S.-Z., Wang J.-F., Dong W.-K.

**Investigation on fluorescence property
and Hirshfeld surface analysis of a novel
heterobimetallic Cd(II)–Na(I) pyridine-terminal
salamo-type coordination polymer**

Keywords: salamo-type pyridine terminal ligand,
synthesis, heterometallic coordination polymer,
Hirshfeld surface analysis, fluorescent material

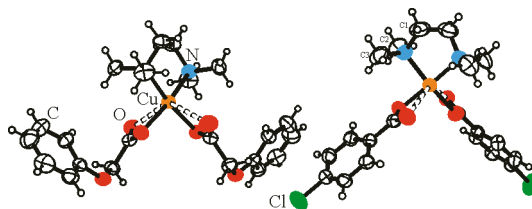


1482

Saini A., Gupta P., Bansal P., Sharma R.P., Krishan B.,
Kaur P., Ferretti V.

**Syntheses, characterization, X-ray structural
determination, and packing analyses of ternary
copper(II) complexes:
[Cu(2-phenoxyacetate/4-chlorobenzoate)₂(temed)]**

Keywords: N,N,N',N'-tetramethylethylenediamine,
2-phenoxyacetate, 4-chlorobenzoate, X-ray



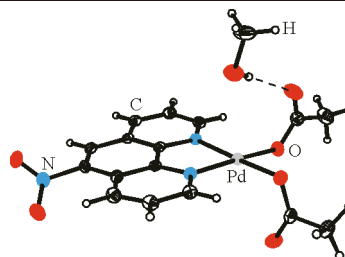
1495

Якушев И.А., Стеблецова И.А., Черкашина Н.В.,
Корнев А.Б., Смирнова Н.С., Балакина А.А.

1508

**Синтез и структурная характеристика
диацетато-(5-нитро-1,10-фенантролин)
палладия(II)**

Ключевые слова: палладий, бидентатные лиганды,
5-нитро-1,10-фенантролин, координационные соединения,
рентгеноструктурный анализ

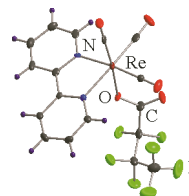


Абрамов П.А.

1513

**Синтез и кристаллическая структура
[LRe(CO)₃(O₂CC₃F₇)]**

Ключевые слова: рений, карбонильный комплекс,
бипиридин, фенантролин, кристаллическая структура,
перфторбутират

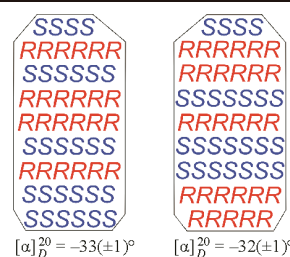


Герасимова Д.П., Лодочникова О.А.,
Курбангалиева А.Р., Литвинов И.А.

1522

**Рацемическое двойникование кристаллов
7-хлор-2,3,4а,6-тетрагидрофуоро-
[2,3-*b*][1,4]оксатиин-6-она**

Ключевые слова: спонтанное разделение энантиомеров,
рацемический конгломерат, рацемическое двойникование,
параметр Флака

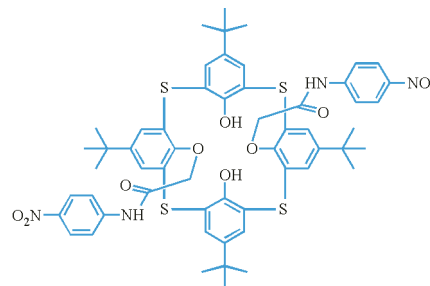


Литвинов И.А., Исламов Д.А., Овсянников О.А.,
Соловьёва С.Е.

1529

**Пространственное строение моно-
и бис-замещенных амидными заместителями
n-трет-бутил-тиакаликс[4]аренов
в кристаллической фазе**

Ключевые слова: трет-бутил-тиакаликс[4]арены,
пространственное строение, конформационный анализ,
рентгеноструктурный анализ



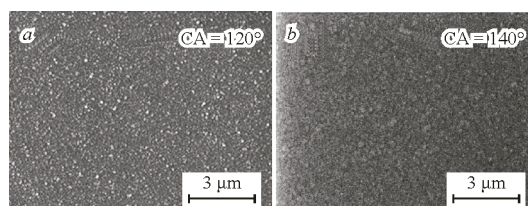
СТРУКТУРА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Сафонов А.И., Богословцева А.Л., Суляева В.С.,
Киселева М.С., Жидков И.С., Старинский С.В.

1539

**Влияние отжига на строение
и свойства тонких фторполимерных покрытий,
полученных методом HW CVD**

Ключевые слова: фторполимерные покрытия, HW CVD,
гидрофобные свойства, отжиг тонких пленок

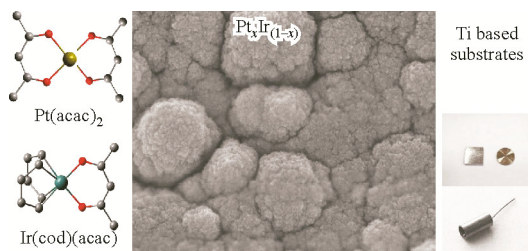


Доровских С.И., Викулова Е.С., Корольков И.В.,
Максимовский Е.А., Кальный Д.Б., Морозова Н.Б.

1546

**Особенности микроструктуры
иридийобогащенных пленок Pt_xIr_(1-x),
полученных методом химического осаждения
из газовой фазы**

Ключевые слова: биметаллические пленки, иридий,
платина, развитая поверхность,
химическое осаждение из газовой фазы,
электрохимические исследования

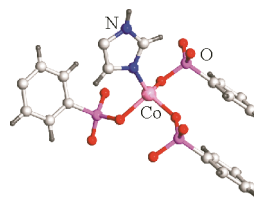


СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Li W., Li C.-L.

A two-dimensional Co(II)-phosphonate framework: Promotion activity on fractures via activating the Wnt signaling pathway

Keywords: coordination complex, fracture, molecular docking

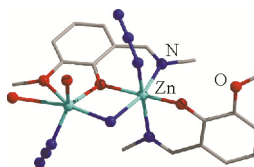


1556

Huang H., Li Y.-Y., Li H.-R.

Synthesis and anticancer activity against retinoblastoma of novel Zn(II) and Co(II) complexes

Keywords: Schiff base ligand, coordination complexes, cluster-based unit, retinoblastoma cancer

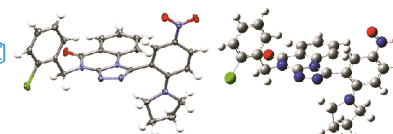
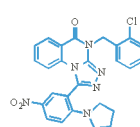


1563

Ren Q., Huang P.-Y., Liu Y., Liao W.-K., Zhou Z.-X., Zhao C.-S.

Synthesis, crystal structure and DFT study of 4-(2-chlorobenzyl)-1-(5-nitro-2-(pyrrolidin-1-yl)phenyl)-[1,2,4]triazolo[4,3-a]quinazolin-5(4H)-one

Keywords: quinazolinone, synthesis, X-ray diffraction, DFT, molecular docking, vibration analysis



Crystal structure

DFT-optimized structure

1571

Содержание следующего номера — в конце журнала