

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

ТОМ 61

Июнь

№ 6, 2020

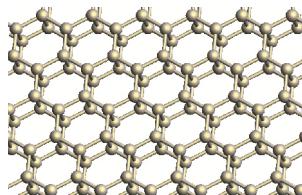
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Грешняков В.А., Беленков Е.А.

887

Первопринципные расчеты углеродных бислоев с алмазоподобными структурами

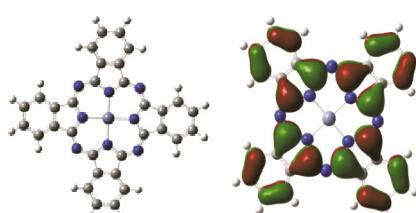


Ключевые слова: моделирование, графен, алмаз, полиморфизм, атомная структура, электронные свойства, порошковая рентгенограмма

Khazri M., Sahra K., Milet A., Jamoussi B., Messaoudi S.

896

DFT and TDDFT study of 4-((furan-2-ylmethyl)sulfonyl) substituted zinc(II) phthalocyanine:
Importance of Grimme dispersion with Becke–Johnson damping correction and the substituent effect

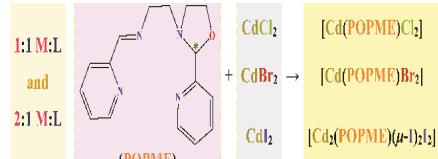


Keywords: DFT, zinc(II) phthalocyanine, dispersion forces

Mardani Z.

904

Coordination of a (N^{py})₂N^{imine}N^{amine}-donor oxazolidine ligand toward CdX₂ (X = Cl, Br, I) with 1:1 and 2:1 M:L molar ratios along with spectral, theoretical and structural studies



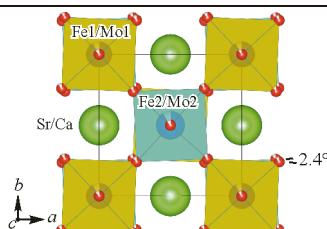
Keywords: oxazolidine, cadmium, DFT study, halide, X-ray analysis

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

El Hachmi A., Manoun B., Tamraoui Y., Louhi S., Bih L., Sajieddine M., Lazor P.

913

Structural and Mössbauer studies of Sr_{1.5}Ca_{1.5}Fe_{2.25}Mo_{0.75}O_{9-δ} and Sr_{1.92}Ca_{1.08}Fe_{2.04}W_{0.96}O_{9-δ} double perovskites



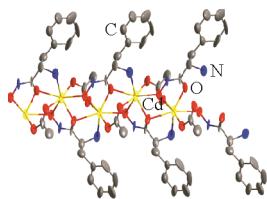
Keywords: double perovskite, Sr_{1.50}Ca_{1.50}Fe_{2.25}Mo_{0.75}O_{9-δ}, Sr_{1.92}Ca_{1.08}Fe_{2.04}W_{0.96}O_{9-δ}, X-ray diffraction, Mössbauer spectroscopy, Raman spectroscopy

Chen Y.M., Xiong X.J., Huang L.C., Chen Y.H., Huang Z., Zhang W.J.

925

Synthesis, structure and properties of a one-dimensional Cd(II) complex based on a chiral ligand

Keywords: Cd(II) complex, chiral ligand, L-phenylalanine hydroxamic acid (L-pheHA), single crystal structure



ЖИДКОСТИ

Масимов Э.А., Пашаев Б.Г., Раджабов М.Р.

932

Определение конформации и размеров макромолекул полиэтиленгликоля в системах вода–полиэтиленгликоль–LiOH методом вискозиметрии

Ключевые слова: LiOH, полиэтиленгликоль (ПЭГ), характеристическая вязкость, константа Хаггинса, среднеквадратичное расстояние, коэффициент набухания, сегмент Кунда

$$\beta = \left(\frac{[\eta]}{[\eta]_0} \right)^{1/3} = \frac{\langle h \rangle}{\langle h_0 \rangle}$$

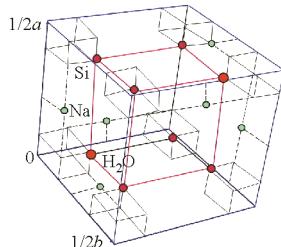
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

940

Кристаллографический анализ боро- и алюмосиликатов со структурами, близкими к структурам анальцима и поллуцитита

Ключевые слова: анальцим, поллуцитит, кирчхофйт, лейцит, кристаллографический анализ, стабильный шаблон (трафарет) катионных подрешеток, псевдосимметрия катионно-анионного упорядочения

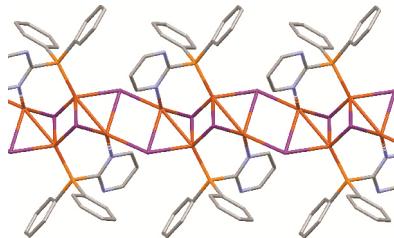


Davydova M.P., Rakhmanova M.I., Bagryanskaya I.Yu., Brylev K.A., Artem'ev A.V.

947

A 1D coordination polymer based on CuI and 2-(diphenylphosphino)pyrimidine: Synthesis, structure and luminescent properties

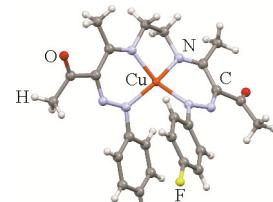
Keywords: Cu(I) iodide, coordination polymers, P,N-ligands, phosphines, luminescence, crystal structure



Бахманова Ф.Н., Мамедова Ф.О., Мамедова Г.З., Гаджиева С.Р., Чырагов Ф.М.

952

Исследование методом рентгеноструктурного анализа комплекса меди(II) с бис(4,4'-(этан-1,2-диилбис-(азандиил))бис(3-(2-(4-фторфенил)гидразинил)пентан-2-оном)

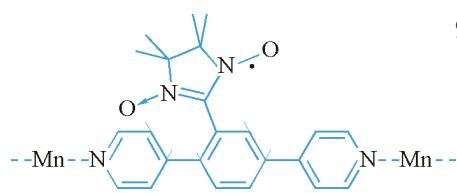


Ключевые слова: комплекс, медь(II), моноокристалл, дииминаты

Романенко Г.В., Фокин С.В., Толстиков С.Е., Летягин Г.А., Богомяков А.С., Овчаренко В.И.

959

Спин-меченный линкер для дизайна координационных полимеров

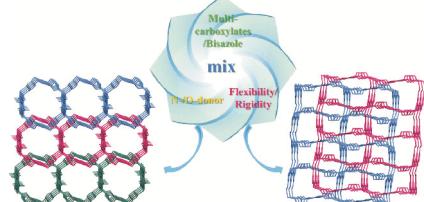


Ключевые слова: марганец, координационный полимер, нитроксильный радикал, водородная связь

Wang X.F.

966

Two new entangled Zn and Cd coordination polymers based on a rich “mix” feature of the O- and N-donor ligand system: Synthesis, structure, and fluorescent properties

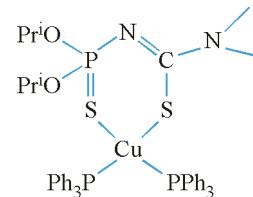


Keywords: coordination polymer, luminescent property, hydrothermal synthesis, interdigitation

Литвинов И.А., Лодочникова О.А., Карамов Ф.А.

Структура комплексов тиофосфорилтиокарбамидных соединений с катионом серебра(I) и трифенилfosфином

Ключевые слова: тиокарбамиды, трифенилфосфин, комплексы одновалентного серебра, молекулярная структура, кристаллическая структура

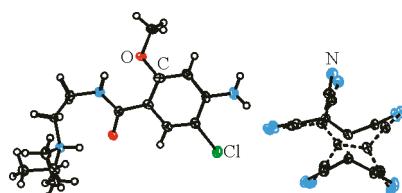


975

Штейнгольц С.А., Давыдова В.В., Марьясов М.А., Насакин О.Е., Файзуллин Р.Р., Лодочникова О.А.

Кристаллическая структура пентацианопропенидов дакарбазина, метоклопрамида и ацетилхолина

Ключевые слова: пентацианопропенид-анион, дакарбазин, метоклопрамид, ацетилхолин, разупорядоченность, водородная связь, органическая соль, кристаллическая структура



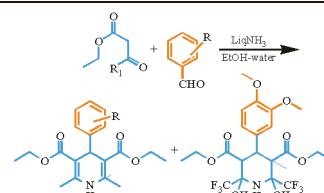
980

Shashi R., Prasad N.L., Begum N.S.

One-pot synthesis of 1, 4-dihydropyridines derivatives and their X-ray crystal structures:

Role of fluorine in weak interactions

Keywords: 1,4-dihydropyridines, crystal structure, intermolecular interactions



991

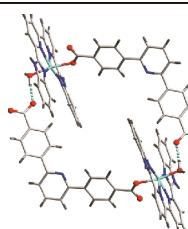
СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Huo W.-X., Bai D.-S., Liu X.-T., Zhang Z.-F., Zhao M.

A new mixed-ligand Ni(II) complex:

Crystal structure, protective and anti-inflammatory activities of its nanoparticles on acute viral myocarditis by reducing the release of inflammatory cytokines TNF- α and IL-1 β

Keywords: coordination complex, mixed-ligand, nanoparticles, anti-inflammatory, acute viral myocarditis



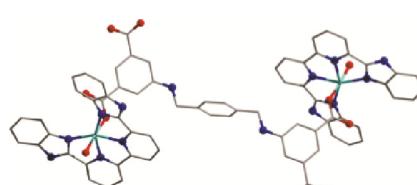
1001

Tai H., Wang S., Wang X., Gong X., Guo Y.

A new Ni(II)-containing coordination complex based on carboxylate and multinitrogen co-ligands:

Crystal structure and protective effect on type 2 diabetes by down-regulating PKC and MAPK activation

Keywords: Ni(II)-containing complex, X-ray diffraction, type 2 diabetes



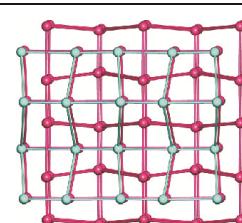
1008

Zhu L., Huang W., Liu J.

Crystal structure of a Co(II)-coordination polymer based on the 4,4'-bis(imidazol-1-yl)-biphenyl ligand

and application of its nanoparticles for inhibition of prostatic cancer cell growth

Keywords: Co(II)-based coordination polymer, X-ray diffraction, nanosizing, anticancer activity

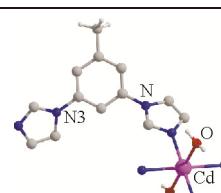


1016

Zheng X.-Y., Yang P.

Crystal structures and anti-gastric cancer activities of two Cd(II)-based coordination polymers constructed from different donor ligands

Keywords: Cd(II) coordination polymer, N-donor ligand, gastric cancer, CCK-8 assay



1023