

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 63

Апрель

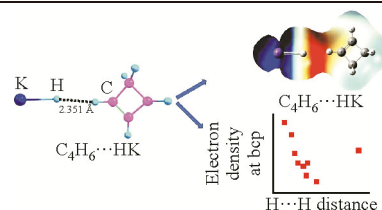
№ 4, 2022

СОДЕРЖАНИЕ

Parimala devi D., Praveena G., Jeba Beula, Abiram A.

**Investigation of dihydrogen bond interaction
between cycloalkenes and alkali metal hydrides:
A DFT approach**

Keywords: dihydrogen bond, metal hydrides, DFT,
cycloalkenes, MEP

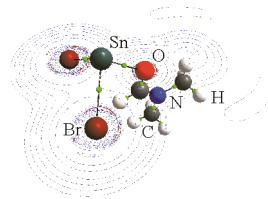


407

Алексеев Н.В.

**Квантово-химическое исследование
связей олово–заместитель
в соединениях трехкоординированного олова**

Ключевые слова: оловоорганические соединения,
квантовая химия, метод NBO, метод AIM

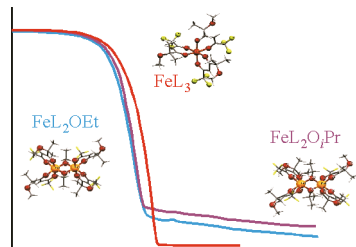


410

Уркасым кызы С., Рыбалова Т.В., Комаров В.Ю.,
Корольков И.В., Крисюк В.В.

**Летучие комплексы железа(III)
с метоксизамещенным β-дикетонатом**

Ключевые слова: β-дикетонаты железа,
бидерные комплексы железа(III),
метоксизамещенные β-дикетонаты,
кристаллическая структура, термические свойства

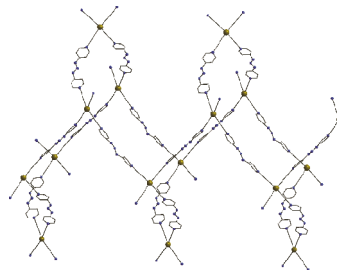


425

Романенко Г.В., Фурсова Е.Ю., Летягин Г.А.,
Толстиков С.Е., Овчаренко В.И.

**Координационные полимеры
на основе шестиядерного пивалата Mn
и 1,3-ди(4'-пиридил)триазена**

Ключевые слова: марганец, пивалат,
1,3-ди(4'-пиридил)триазен, координационные полимеры,
многоядерные соединения, синтез,
кристаллическая структура

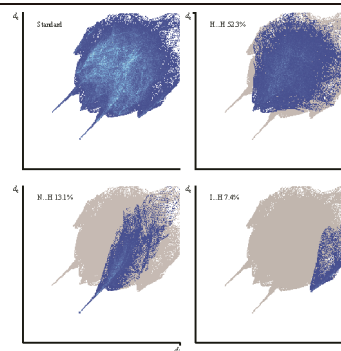


435

Patra G.K.

Synthesis, characterization, crystal structure and theoretical studies of a mixed-ligand copper(I) iodide complex of an asymmetric Schiff base ligand 2-((pyridin-4-yl)methelenamino)-3-aminomaleonitrile and triphenylphosphine co-ligand

Keywords: diaminomaleonitrile, 2-((pyridin-4-yl)methelenamino)-3-aminomaleonitrile, triphenylphosphine, crystal structure, electrochemistry, photophysics, Hirshfeld surfaces studies



445

Гладышева М.В., Плюснин П.Е., Комаров В.Ю., Цыганкова А.Р., Герасимов Е.Ю., Шубин Ю.В., Коренев С.В.

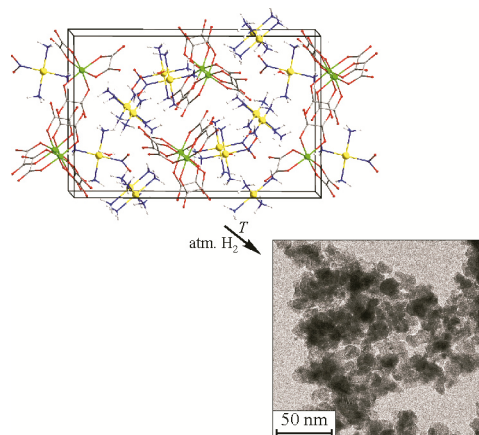
Комплексные соли

[Pd(NH₃)₄][Pd(NH₃)₃NO₂][CrOx₃]·H₂O и [Pd(NH₃)₄][Pd(NH₃)₃NO₂][CoOx₃]·H₂O

и твердые растворы

[Pd(NH₃)₄][Pd(NH₃)₃NO₂][CoOx₃]_x[RhOx₃]_{1-x}·H₂O – перспективные предшественники пористых наносплавов

Ключевые слова: палладий, кобальт, хром, комплексные соли, рентгеноструктурный анализ, рентгенофазовый анализ, термический анализ, пористые наносплавы

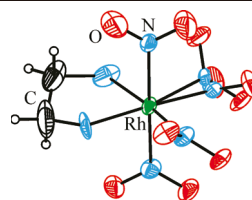


449

Воробьева С.Н., Байдина И.А., Сухих Т.С., Корольков И.В., Беляев А.В.

Получение нитритных комплексов родия(III) с этилендиамином

Ключевые слова: комплексы, родий, этилендиамин, нитриты, кристаллическая структура

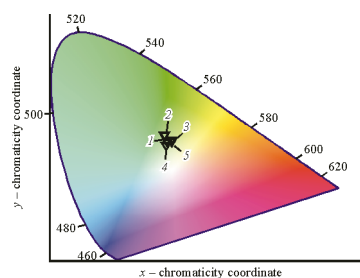


463

Grigorieva V.D., Rakhmanova M.I., Kasimkin P.V., Shlegel V.N.

Growth and spectroscopic investigations of Na₂W₂O₇ single crystals doped with cerium and chromium ions

Keywords: doping, low-thermal-gradient Czochralski technique, Na₂W₂O₇ crystals, luminescence properties, scintillators, bolometers

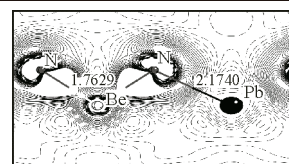


475

Басалаев Ю.М., Басалаева О.Г., Просвиркина Е.В.

Зонная структура пниктидов BePb-V₂: ab initio расчет

Ключевые слова: BePbN₂, BePbP₂, BePbAs₂, BePbSb₂, халькопирит, пниктиды



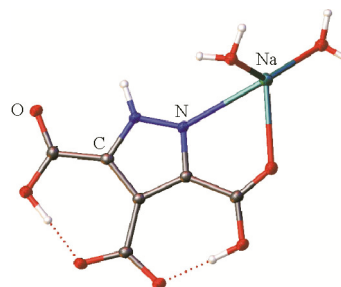
478

Гончаренко В.Е., Гудованный А.О., Лунёв А.М., Белоусов Ю.А., Лысенко К.А.

Кислая натриевая соль

1Н-пиразол-3,4,5-трикарбоновой кислоты: синтез, кристаллическая структура и особенности внутримолекулярных связей

Ключевые слова: пиразолы, карбоновые кислоты, карбоксилаты, гетероароматические карбоновые кислоты, водородные связи

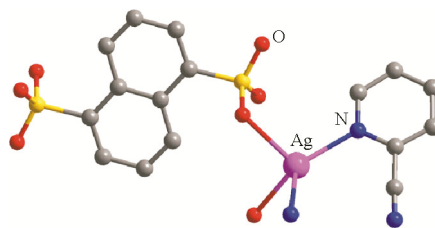


483

Liu Y., Tian S., Xin Z., Hao L., Hu L.

A new ternary Ag(I) coordination polymer: Photocatalytic activity, treatment and nursing application value on liver cancer by regulating TIMP-3

Keywords: Ag(I) compound, photocatalysis, liver cancer, bone metastasis

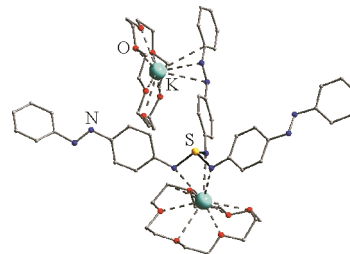


493

Афонин М.Ю., Сухих Т.С., Конченко С.Н.

Синтез и строение солей N,N',N''-трис(4-(фенилдиазенил)фенил)имидосульфит-аниона – органического аналога SO_3^{2-}

Ключевые слова: имидосульфит, тиодиимид, кристаллическая структура, изолобальная аналогия, рентгеноструктурный анализ монокристаллов

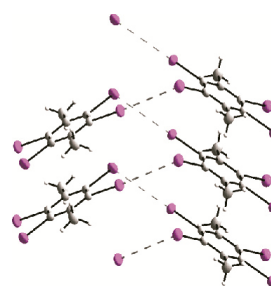


496

Раджакумар К., Шарутин В.В., Адонин С.А., Жеребцов Д.А., Сахапов И.Ф., Исламов Д.Р., Прабунатан П., Вершинин М.А., Найферт С.А., Полозов М.А.

Ди- и тетраиодоксидолы: строение и особенности нековалентных взаимодействий в твердом теле

Ключевые слова: иодарены, кристаллическая структура, нековалентные взаимодействия, галогенная связь



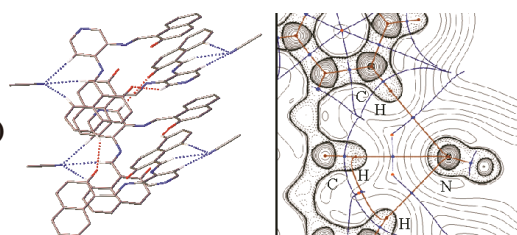
504

Mardaleishvili I.R., Vologzhanina A.V., Novikov A.S., Shienok A.I., Kol'tsova L.S., Zaichenko N.L., Nadtchenko V.A., Tskhovrebov A.G.

Hydrogen bonding in the crystal of 1,1'-((1E,1'E)-(pyridine-3,4-diylbis(azanylylidene))bis(methanylylidene))bis(naphthalen-2-ol) acetonitrile solvate:

Combined experimental and theoretical study

Keywords: azomethines, Schiff bases, imines, hydrogen bonding, weak interactions, DFT

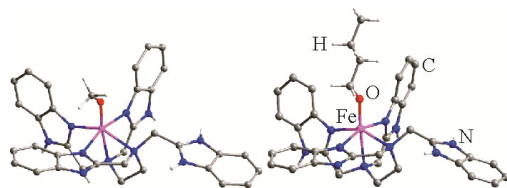


510

Wu G., Zheng C.

Models for lipoxygenase with two alkoxide-Fe(III) centers: Synthesis, structures and properties

Keywords: lipoxygenase model, crystal structures, reaction activity, iron complexes

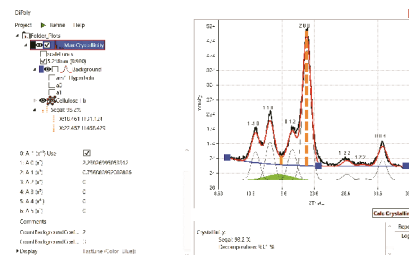


513

Яценко Д.А.

«DiPoly» (Diffraction analysis of Polymers) – программное обеспечение для диагностики биополимеров по порошковым дифракционным данным

Ключевые слова: программное обеспечение, рентгеновская дифракция, степень кристалличности, целлюлоза



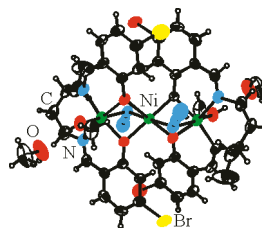
516

Xiao Y.-H., Wu H.-Y., Sun C., Hou J.-L.

521

Synthesis, crystal structures and biological activity of trinuclear nickel(II) and copper(II) complexes derived from N,N'-bis(4-bromosalicylidene)-1,3-pentanediamine

Keywords: nickel complex, copper complex, Schiff base, crystal structures, antimicrobial activity

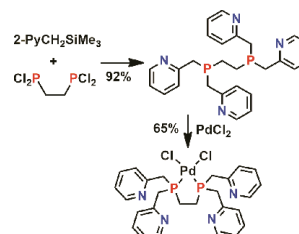


Baranov A.Y., Sukhikh T.S.,
Artem'ev A.V.

524

**1,2-Bis[bis(pyridin-2-yl-methyl)phosphino]ethane and its PdCl₂-based complex:
Synthesis and crystal structure**

Keywords: pyridylphosphine, diphosphine, Pd(II) complex, synthesis, crystal structure

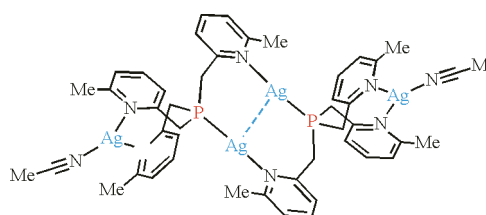


Laptev U.A., Baranov A.Y., Samsonenko D.G.,
Artem'ev A.V.

527

**A four-nuclear Ag(I) complex supported by a N,N',N'',P-ligand:
Synthesis, crystal and electronic structure**

Keywords: pyridylphosphine, Ag(I) complexes, crystal structure, photoluminescence, DFT calculations



Содержание следующего номера — в конце журнала