

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 61

Февраль

№ 2, 2020

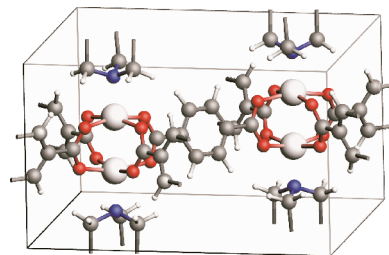
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Рыжиков М.Р., Козлова С.Г.

**Особенности взаимодействий строительных блоков
в металл-органическом каркасном полимере
 $Zn_2(BDC)_2DABCO$**

Ключевые слова: $Zn_2(BDC)_2DABCO$,
межмолекулярные взаимодействия,
теория функционала плотности,
периодические расчеты, хиральность

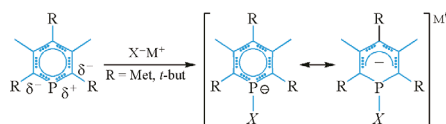


175

Sadi A., Ouamerali O.

**Theoretical study, NBO analysis, HOMO/LUMO
and first static hyperpolarizability for the structural
prediction of new $1X$ -tri- R - $\sigma^3\lambda^3$ -phosphacyclohexadienyl
anion ligands using DFT calculations**

Keywords: DFT, NBO, phosphinine, phosphacyclohexadienyl,
anion, HOMO/LUMO, hyperpolarizability

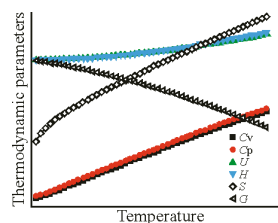


180

Ali N., Mansha A., Asim S., Ali H.S., Usman M.

**Insight into the molecular characterization and spectral
properties of 2-methoxy-1,4-naphthoquinone:
A computational approach**

Keywords: 2-methoxy-1,4-naphthoquinone, FTIR spectrum, vibrational
analysis, absorption spectrum, NBO,
thermodynamic parameters, HOMO–LUMO

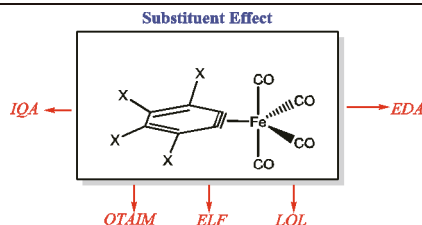


196

Zandiyeh Z., Ghiasi R., Jamaat P.R.

**Computational rationalization of the interaction
of $Fe(CO)_4$ and substituted benzyne ligands**

Keywords: benzyne complexes, electron localization function (ELF),
interacting quantum atoms (IQA), localized-orbital locator (LOL),
QTAIM analysis, substituent effect

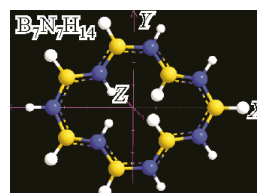


211

Monajjemi M., Mollaamin F.

Molecular structural properties of $[n]$ -annulene ($n = 8, 10, 12, 14$) and its boron nitride derivatives: Analysis of NMR, NBO, ELF and PDI

Keywords: aromaticity, LOL, ELF, annulene structures, current density induced, paratropic, diatropic



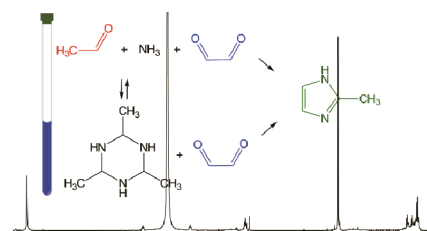
221

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Тугульдурова В.П., Котельников О.А., Челтыгмашева Р.С., Котов А.В., Фатеев А.В., Бакибаев А.А., Водянкина О.В.

Идентификация интермедиатов и продуктов реакции 2,4,6-триметил-1,3,5-гексагидротриазина тригидрата с глиоксалем в водной среде методом ЯМР спектроскопии

Ключевые слова: 2-метилимидазол, глиоксаль, 2,4,6-триметил-1,3,5-гексагидротриазин тригидрат, ЯМР спектроскопия, in situ, гликолевая кислота

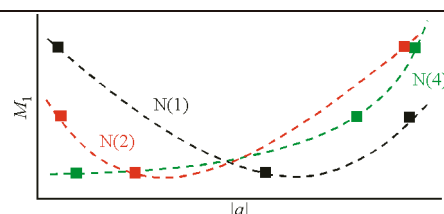


239

Муллоев Н.У., Ходиев М.Х., Ислотов З.З., Лаврик Н.Л.

Влияние структуры молекул производных триазола на эффективность образования межмолекулярной Н-связи

Ключевые слова: ИК спектроскопия, квантовая химия, триазолы, Н-связь



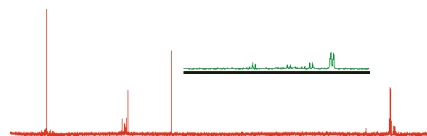
246

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Беляев А.В., Ткачев С.В., Воробьева С.Н.

Фотоактивация комплексов родия(III)

Ключевые слова: фотолиз, родий, нитроамминные комплексы, ЯМР



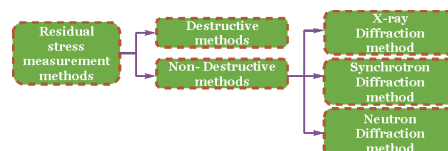
252

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Jagadeesh G.V., Srinivasu G.S.

A current status of the residual stress characterization by crystal lattice strain (diffraction) method

Keywords: peening, burnishing, compressive residual stress characterization, non-destructive methods, diffraction methods

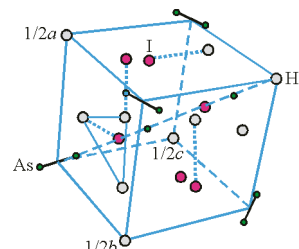


262

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

Кристаллографический анализ и генерация симметрии для ряда структур с кластерными группировками $[As_2]$ и $[Hg_n]$ ($n = 2, 3$)

Ключевые слова: структуры гость-хозяин, кристаллографический анализ, скелетные подрешетки, локальная симметрия, строительные модули, связь симметрия-стабильность

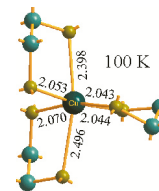


274

Храненко С.П., Сухих А.С., Николаев Р.Е., Громилов С.А.

$[CuEn_3]MoO_4$: синтез, структура, эффект Яна–Теллера, превращения в интервале 100–1263 К

Ключевые слова: комплексная соль, трис-этилендиамин меди, молибдат-анион, рентгеноструктурный анализ, эффект Яна–Теллера, кристаллохимия



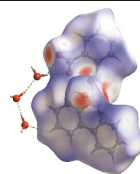
282

Pinto C.B., Rodrigues B.L.

290

Hirshfeld surface analysis and fingerprint plots in determining the resemblance of a new copper coordination polymer synthesized by two different methods

Keywords: hydrothermal synthesis, crystal structure, X-ray diffraction

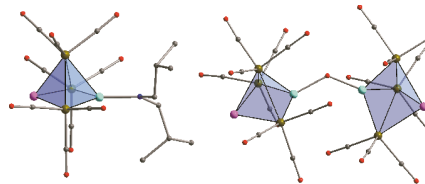


Баширов Д.А., Сухих Т.С., Куратьева Н.В., Конченко С.Н.

299

Синтез и строение кластеров $[\text{Fe}_3(\mu_3\text{-}Q)(\mu_3\text{-AsN}(i\text{-Bu})_2)(\text{CO})_9]$ ($Q = \text{Se, Te}$) и продуктов их гидролиза

Ключевые слова: карбонильный кластер, железо, халькоген, мышьяк, синтез, кристаллическая структура

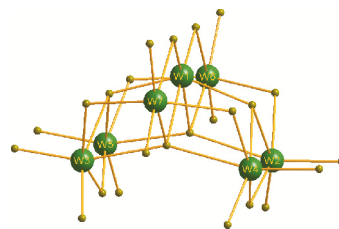


Храненко С.П., Сухих А.С., Громилов С.А.

309

Роль мостиковых катионов Na^+ в упаковке структур $\text{Na}_2[\text{Pd}(\text{NH}_3)_4]_5(\text{W}_7\text{O}_{24})_2 \cdot 16\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Na}[\text{Pd}(\text{NH}_3)_4]_2(\text{HW}_7\text{O}_{24}) \cdot 7\text{H}_2\text{O}$

Ключевые слова: комплексная соль, тетрааммин палладия, гептавольфрабат-анион, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ

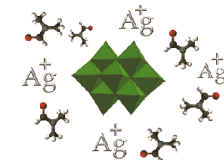


Чупина А.В., Мухачева А.А., Абрамов П.А., Соколов М.Н.

315

Комплексообразование и изомеризация $[\beta\text{-Mo}_8\text{O}_{26}]^{4-}$ в присутствии Ag^+ и ДМФА

Ключевые слова: серебро, октамолибдат, кристаллическая структура

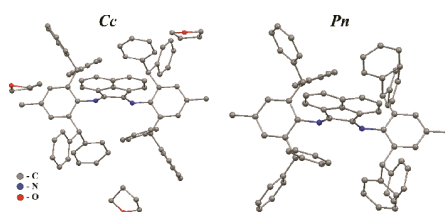


Москалёв М.В., Разборов Д.А., Копцева Т.С., Скатова А.А., Румянцев Р.В., Федюшкин И.Л.

325

Кристаллические структуры 1,2-бис[(2,6-дибензгидрил-4-метилфенил)имино]аценафтена

Ключевые слова: 1,2-бис(арилимино)аценафтен, редокс-активные лиганды, пространственно-затрудненные лиганды, кристаллическая структура



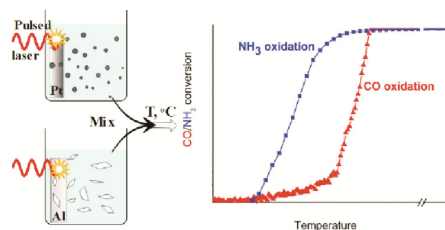
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Федорова Е.А., Стадниченко А.И., Славинская Е.М., Кибис Л.С., Столкус О.А., Свиницкий Д.А., Лапин И.Н., Романенко А.В., Светличный А.В., Боронин А.И.

332

Исследование $\text{Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$ нанокмппозитов, полученных методом импульсной лазерной абляции, в качестве катализаторов реакций окисления

Ключевые слова: платина, оксид алюминия, импульсная лазерная абляция, РФЭС, РФА



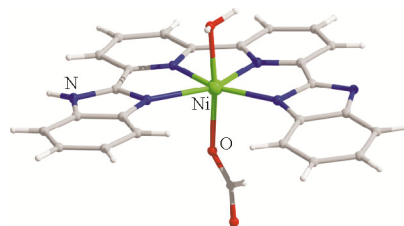
СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Gan J.-C., Zhao J.-J., Hu Y.-T., Dai Y.

347

A new Ni(II)-containing coordination complex based on the multiple N-donor ligand: Crystal structure and application of its nanoparticle as *P. gingivalis* biofilm inhibitor for periodontitis treatment

Keywords: metal coordination complex, Ni(II) complex, antibiofilm activity, RT-PCR



Содержание следующего номера — в конце журнала

- © Сибирское отделение РАН, 2020
- © Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 2020
- © Новосибирский государственный университет, 2020