# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук *(Новосибирск)*

## Том: 62 Номер: 11 Год: 2021

**ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ ТОРСИОННОГО ПОТЕНЦИАЛА В ПОЛНОАТОМНЫХ МОДЕЛЯХ МОЛЕКУЛ УГЛЕВОДОРОДОВ С УПРОЩЕННЫМ УЧЕТОМ ЭНЕРГИИ ДЕФОРМАЦИИ ВАЛЕНТНЫХ СВЯЗЕЙ И УГЛОВ** 1765-1779
*Теплухин А.В.*

**SYNTHESIS, CRYSTAL STRUCTURES, AND UREASE INHIBITORY ACTIVITY OF SCHIFF BASE COPPER AND NICKEL COMPLEXES** 1780-1790
*Wang Y.*

**СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА N-ЭТИЛ-N-ЦИТИЗИНОКАРБОТИОАМИДА** 1791-1796
*Турдыбеков К.М., Нуркенов О.А., Турдыбеков Д.М., Сатпаева Ж.Б., Фазылов С.Д.*

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ $C(C_2H)_4$ И $GE(C_2H)_4$ МЕТОДОМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДАННЫХ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ** 1797-1806
*Татевосян М.М., Жукова Т.Н., Власенко В.Г.*

**ОТ СТЕРЕОХИМИИ МОЛЕКУЛЫ К СТЕРЕОХИМИИ КРИСТАЛЛА: ХИРАЛЬНАЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ *ЭНДО*ИЗОМЕРОВ В СРАВНЕНИИ С ЦЕНТРОСИММЕТРИЧНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИЕЙ *ЭКЗО*ИЗОМЕРОВ ТИИРАНОВОГО И ОКСИРАНОВОГО ПРОИЗВОДНЫХ ФЕНИЛЗАМЕЩЕННОГО СЕМИЧЛЕННОГО АЦЕТАЛЯ** 1807-1815
*Герасимова Д.П., Павельев Р.С., Лодочникова О.А.*

**TWO NEW SELF-ASSEMBLED CADMIUM(II) METAL-ORGANIC FRAMEWORKS CONSTRUCTED OF A FLEXIBLE TRIPODAL LIGAND: SYNTHESIS, STRUCTURE, AND THERMAL STABILITY** 1816-1826
*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.*

**СИНТЕЗ, СТРУКТУРА, ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $YNBXTA_{1-X}O_4$** 1827-1834
*Щербина О.Б., Маслобоева С.М., Палатников М.Н., Ефремов В.В.*

**SYNTHESIS, CRYSTAL STRUCTURE, AND PROPERTIES OF HETEROLEPTIC CU(I) DITHIOCARBAMATE COMPLEX CONTAINING DIPHENYL PHOSPHINOFERROCENE (DPPF)** 1835-1843
*Kumar V., Singh S.*

**КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ ВОДЫ: РОЛЬ ЭКСТРЕМУМОВ В ЭНЕРГИИ ВОДОРОДНОЙ СВЯЗИ O-H...O И ВЫРОЖДЕННОСТИ ЕЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ СОСТОЯНИЙ** 1844-1851
*Ефимов Ю.Я.*

**ЯМР ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ПАРАМАГНИТНЫХ ХИМИЧЕСКИХ СДВИГОВ $[CO(DTPA)]^{3-}$** 1852-1856
*Заполоцкий Е.Н., Бабайлов С.П.*

**COMPUTATIONAL INVESTIGATIONS, HIRSHFELD SURFACE ANALYSIS, INTERACTION ENERGY CALCULATIONS, AND ENERGY FRAMEWORK CRYSTAL STRUCTURE OF METHYL 2-AMINO-5-HYDROXYBENZOATE** 1857-1869
*Saeed A., Shabir G., Channar P.A., Flörke U., Hökelek T., Erben M.F.*

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ЭПР КРИСТАЛЛОВ АЛМАЗА, СИНТЕЗИРОВАННЫХ В СИСТЕМАХ $MG\text{-}EUF_2\text{-}C$ И $MG\text{-}EUF_3\text{-}C$ ПРИ ВЫСОКИХ *PT* ПАРАМЕТРАХ** 1870-1877
*Надолинный В.А., Комаровских А.Ю., Борздов Ю.М., Пальянов Ю.Н.*

**КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ПРОДУКТОВ КВАТЕРНИЗАЦИИ НОРФЛУОРОКУРАРИНА** 1878-1884
*Адизов Ш.М., Ташходжаев Б.*

**СИНТЕЗ И СТРУКТУРНАЯ ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ ГЕКСАХЛОРОГАФНАТА ЦЕЗИЯ $CS_2HFCL_6$** 1885-1894
*Смирнова Е.С., Сидорова Е.В., Синельников А.Н., Синельников Н.Н., Сорокин Т.А., Артемов В.В., Алексеева О.А.*

**STRUCTURAL ANALYSIS AND MOLECULAR DOCKING STUDIES OF THYMOGEN** 1895-1906
*Akverdieva G.A., Godjayev N.M., Demukhamedova S.D.*

**SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF THE DIRHODIUM TETRAACETATE-DI(CYCLOHEXYLISOCYANIDE) COMPLEX** 1907-1912
*Grudova M.V., Kubasov A.S., Tskhovrebov A.G.*

**THE SYNTHESIS AND PROPERTIES OF A SODIUM SUPRAMOLECULAR CRYSTAL NETWORK CONSTRUCTED WITH FUNCTIONAL PYRAZINE SULFONIC ACID** 1913-1920
*Liang Y.J., Hu D., Zhang L., Jiang Y., Li J.X.*

**A NOVEL MERCURY COORDINATION COMPOUND WITH YELLOW PHOTOLUMINESCENCE** 1921-1928
*Tao Y.L., Zhu Z.H., Zhao Z., Zhu Q.T., Wang O., Liu X.*