

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 65

Май

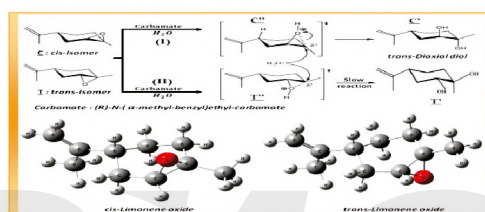
№ 5, 2024

СОДЕРЖАНИЕ

Nassri A., Hammoumi M.M.El, Bachiri A.El,
Youssfi S.El, Kandri Rodi Y., Touimi Benjelloun A.

**DFT study of (1R, 2R, 4R)-limonene-1, 2-diol
synthesized by hydrolysis of *cis*- and *trans*-limonene
oxide**

Keywords: *cis-trans* limonene oxide,
frontier molecular orbital theory, local softness, local hardness

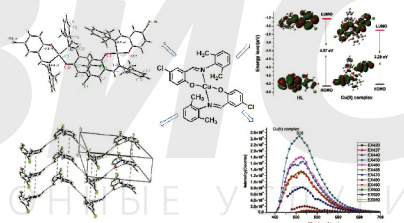


125906

Guo Y.-N., Hu X.-B., Zhang H.-G., Han Y.-F., Wang H.

**Synthesis, crystal structures, photophysical
properties and antibacterial activities
of copper(II) complex derived from 4-chloro-2-
{[(2,6-dimethylphenyl)imino]methyl}phenol**

Keywords: Schiff base, copper complex, crystal structure,
photophysical property, antimicrobial activity

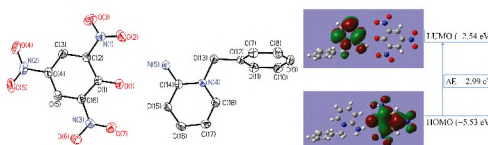


126185

Zheng Y., Xu Y.-L., Ni C.-L.

**Synthesis, crystal structure, weak interactions
and optical properties of an organic charge-transfer
benzyl 2-aminopyridinium picrate compound**

Keywords: benzyl 2-aminopyridinium picrate,
crystal structure, weak interaction, Optical properties,
Hirshfeld surface analysis

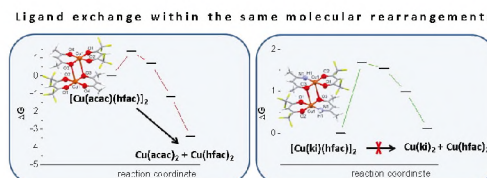


126187

Крючкова Н.А., Стадниченко А.И., Коротаяв Е.В.,
Крисюк В.В.

**Исследование электронной структуры
и моделирование молекулярных
перегруппировок МОСVD прекурсоров
для прогнозирования их термической
стабильности при испарении на примере
гетеролепитических комплексов меди(II)**

Ключевые слова: дикетонаты металлов,
гетеролепитические комплексы меди,
термическая устойчивость, обмен лигандами,
электронная структура, МОСVD прекурсоры

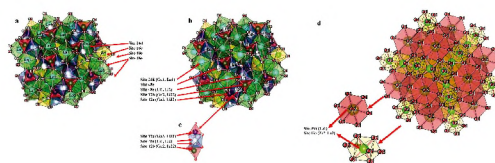


126248

Mishra A.K., Shaikh N., Patel Y.K., Mukhopadhyay I.

Synthesis of Garnet-type solid electrolyte for all-solid-state battery application

Keywords: solid state electrolyte, rietveld refinement, electronic density, Li-ion hopping, Li symmetric cell, critical current density

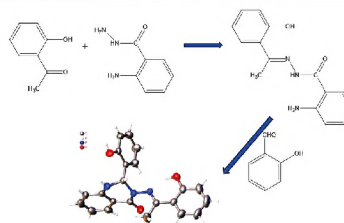


126498

Mondal B.

Synthesis and crystal structure of (E)-2-(2-hydroxyphenyl)-3-((1-(2-hydroxyphenyl)ethylidene)amino)-2,3-dihydroquinazolin-4(1H)-one

Keywords: hydrazone, 2,3-dihydroquinazolin-4(1H)-one derivative, hydrogen bond

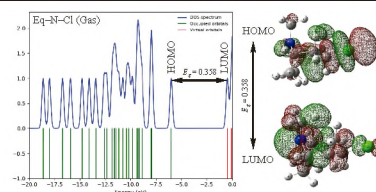


126533

Hasanzadeh N.

Theoretical study of solvent effect on elimination reactions: Hybrid-DFT study, and NBO analysis

Keywords: anomeric effect, hybrid-DFT, natural bond orbital (NBO), total steric exchange energy (TSEE)

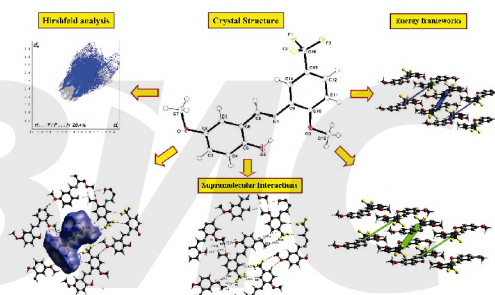


126617

Ozsanlı H., Simsek O., Yılmaz O.R., Cicek C., Agar E., Coruh U., Vazquez-Lopez E.M.

Synthesis, crystal structure, Hirshfeld surface analysis, supramolecular and computational investigation of compound (E)-4-methoxy-2-(((2-methoxy-5-(trifluoromethyl) phenyl)imino) methyl)phenol

Keywords: Schiff base, X-ray diffraction method, Hirshfeld surface analysis, supramolecular geometric properties, interaction energy and energy frameworks

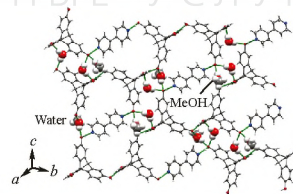


126708

Dua A., Titi H.M., Sharma H.K., Roy S.

Two-component supramolecular adduct based on hydroxyl substituted triptycene with 4,4'-bipyridine: Crystal structure analysis

Keywords: triptycene, cocrystal, hydrogen bond statistics, crystal structure, full interaction maps

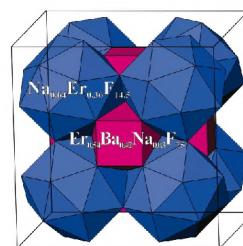


126837

Федоров П.П., Волков С.В., Вайтиева Ю.А., Александров А.А., Кузнецов С.В., Конюшкин В.А.

Флюоритоподобные фазы на основе фторидов бария и редкоземельных элементов

Ключевые слова: неорганические фториды, фторид бария, фторид иттрия, фторид эрбия, фторид натрия, кристаллические структуры, флюорит, упорядочение

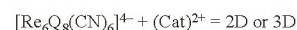
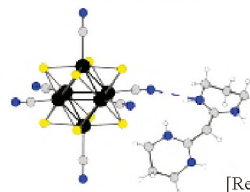


126843

Ledneva A.Yu., Naumov N.G., Kyritsakas N., Ferlay S.

Tuning the dimensionality of H-bonded networks using different chalcogen atoms in $[\text{Re}_6\text{Q}_8(\text{CN})_6]^{4-}$ ($\text{Q} = \text{S}, \text{Se}$) clusters

Keywords: rhenium cluster, dications, H-bonds, amidinium, charge-assisted hydrogen bonding

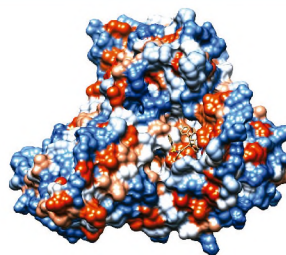


126941

Muppuli M.V., Rajesh K., Devaraj A.R., Anandan K., Gayathri K., Mani A., Devendran P., Thayanithi V., Kurinjinathan P., Suresh Kumar M.

Investigation of the molecular structure and DFT insights into (4-(4-nitrophenyl)-9-(phenylsulfonyl)-9H-carbazole-2,3-diyl)bis(*p*-tolylmethanone)

Keywords: carboxylate, molecular modelling studies, Hirshfeld surface analysis and density functional theory

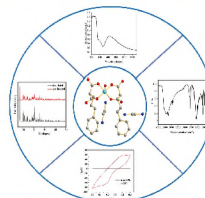


126947

Ma X., Wang B., Gao E.

Synthesis, structure and electrochemical properties of copper(II) complex with 3-phenylpropylmalonic acid

Keywords: complex, copper(II), crystal structure, electrochemical

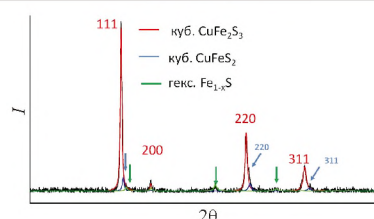


127050

Васильева И.Г., Синякова Е.Ф., Громилов С.А.

Структурные и химические превращения изокубанита CuFe_2S_3 при охлаждении от момента плавления

Ключевые слова: Cu-Fe-S система, кубический кубанит, фракционная кристаллизация, медленное охлаждение, распад, кубический халькопирит, Fe-моносulfид

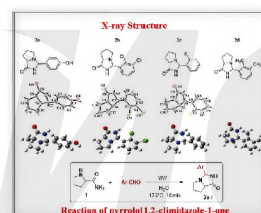


127132

Kumari N., Kumar S., Desai V.A., Patel D.B., Sharon A.

A one-pot microwave green synthesis of pyrrolo[1,2-*c*]imidazole-1-one analogs and structural studies

Keywords: synthesis, intermolecular interactions, drug-likeness, molecular electrostatic potential, green method

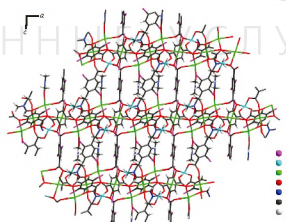


127314

Загузин А.С., Зайцев А.В., Абрамов П.А., Усольцев А.Н., Федин В.П., Адонин С.А.

Анионные трехмерные координационные полимеры $\text{Zn}(\text{II})$ с 2,5-диодтерефталатными мостиковыми лигандами

Ключевые слова: цинк, координационные полимеры, карбоксилаты, МОКП, рентгеноструктурный анализ

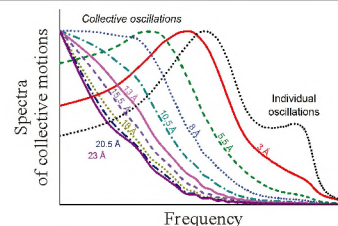


127419

Волошин В.П., Наберухин Ю.И.

Интерпретация автокорреляционных функций поступательного движения молекул воды в молекулярно-динамических моделях

Ключевые слова: молекулярная динамика, модели воды, автокорреляционная функция скорости молекул, спектр автокорреляционной функции



127422

Содержание следующего номера — в конце журнала