

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 62

Февраль

№ 2, 2021

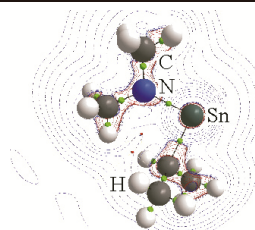
## СОДЕРЖАНИЕ

### ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Алексеев Н.В.

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

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

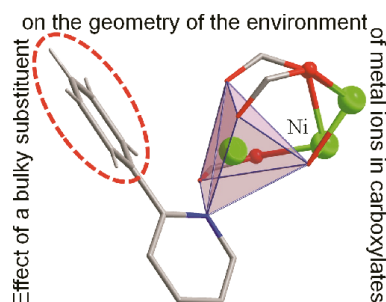


185

Кузнецова Г.Н., Николаевский С.А.,  
Ямбулатов Д.С., Шмелев М.А., Кискин М.А.,  
Стариков А.Г., Сидоров А.А., Еременко И.Л.

**Особенности связывания 2-фенилпиридина  
с ионами 3d-металлов  
в полиядерных пивалатах**

**Ключевые слова:** карбоксилатные комплексы,  
переходные металлы, 2-фенилпиридин,  
стерические взаимодействия, структура,  
квантово-химические расчеты

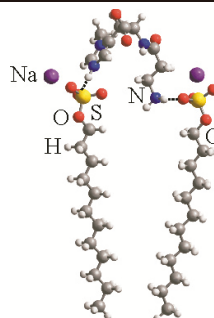


197

Баранников В.П., Курбатова М.С.,  
Гиричева Н.И.

**Квантово-химическое моделирование  
взаимодействия дипептидов карнозина  
и ансерина с димером додецилсульфата натрия  
как фрагментом анионной мицеллы**

**Ключевые слова:** пептиды,  
димер додецилсульфата натрия, комплексы,  
квантово-химические расчеты, метод DFT,  
структура, энергии комплексообразования



209

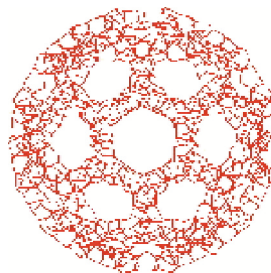
## СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Тытик Д.Л.

219

### Моделирование гидратных оболочек растворенных в воде нанопузырьков газов

**Ключевые слова:** самоорганизация, гидраты, сильные водородные связи, спираль 30/11, модель поверхностного слоя воды Н.А. Бульenkova, межфазная область, поверхностное натяжение, промежуточные фазы вращения, усеченный икосаэдр, додекаэдр, полиэдры Аллена, нанопузырьки



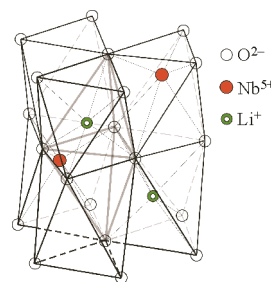
## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Сидоров Н.В., Титов Р.А., Воскресенский В.М., Палатников М.Н.

235

### Особенности локализации катиона $B^{3+}$ в структуре кристалла $LiNbO_3$ и их влияние на свойства кристалла

**Ключевые слова:** монокристалл ниобата лития, оксид бора, кластер, тетраэдрические пустоты, компьютерное моделирование, комбинационное рассеяние света

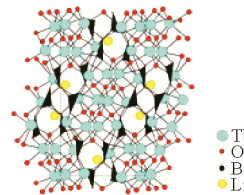


Николаев Р.Е., Тарасенко М.С., Куратьева Н.В., Трифонов В.А., Наумов Н.Г.

244

### Синтез и кристаллическая структура $LiTb_6O_5(BO_3)_3$

**Ключевые слова:** тербий, борат, твердофазный синтез, кристаллическая структура

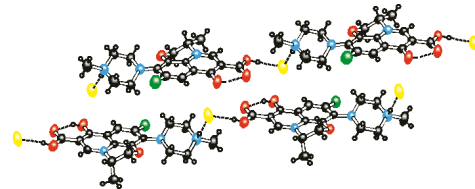


Головнев Н.Н., Васильев А.Д., Демина А.В.

250

### Структура двух новых солей фторхинолонов

**Ключевые слова:** дихлорид ципрофлоксацина, дихлорид *трис*{гексахлоростаннат(IV)} *тетраakis*(левофлоксациниума), синтез, структура, свойства

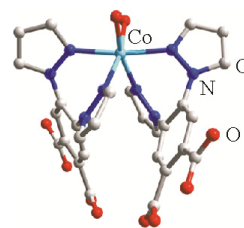


Zhu M., Wang J., Wu S., Gao E.

258

### Synthesis, crystal structure, and anticancer activity against the HeLa cell line of a novel Co(II) complex with 4,5-bis(pyrazol-1-yl) phthalic acid

**Keywords:** Co(II) complex, fluorescence, apoptosis, flow cytometry

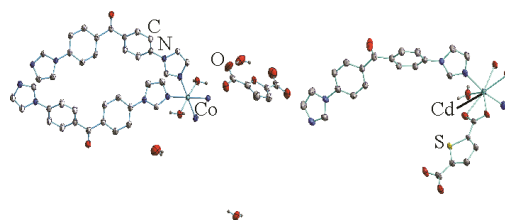


Wang G.-F., Sun S.-W.

265

### Syntheses of cobalt and cadmium coordination polymers composed of dicarboxylate and bis(4-(1H-imidazol-1-yl)phenyl)methanone ligands

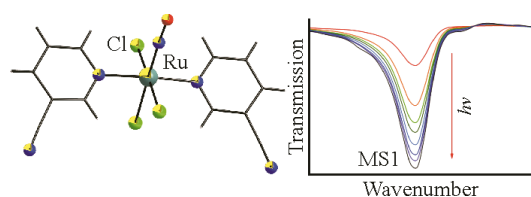
**Keywords:** cobalt complex, cadmium complex, coordination polymer, synthesis, topology



Речицкая Е.Д., Воробьев В.А., Куратьева Н.В.,  
Костин Г.А.

**Гетеролигандный нитрозокомплекс рутения(II)  
с 3-цианопиридином: синтез,  
кристаллическая структура и связевая изомерия**

**Ключевые слова:** рутений, нитрозокомплексы,  
цианопиридин, рентгеноструктурный анализ,  
фотоизомеризация, метастабильные состояния

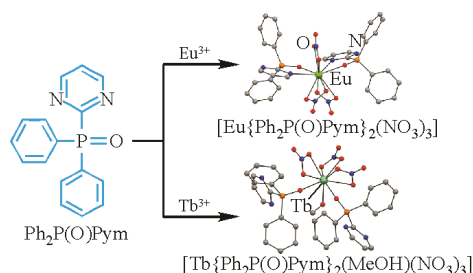


270

Брылева Ю.А., Артемьев А.В., Глинская Л.А.,  
Самсоненко Д.Г., Рахманова М.И., Давыдова М.П.,  
Бужикова К.М.

**Комплексы Eu(III) и Tb(III)  
на основе дифенил(пиридин-2-ил)-  
фосфиноксида: синтез, строение,  
фотолюминесцентные свойства**

**Ключевые слова:** лантаниды, комплексы, фосфиноксид,  
пиридин, структура, фотолюминесценция

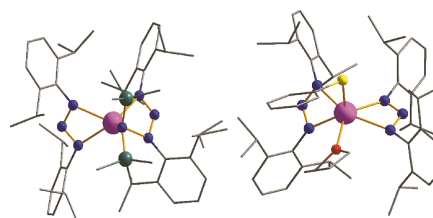


280

Колыбалов Д.С., Сухих Т.С., Баширов Д.А.,  
Конченко С.Н.

**Синтез и строение новых комплексов Er(III)  
с N,N'-1,3-бис(2,6-диизопропилфенил)-  
триазенидом**

**Ключевые слова:** координационные соединения,  
лантаноиды, эрбий, триазены, синтез,  
кристаллическая структура

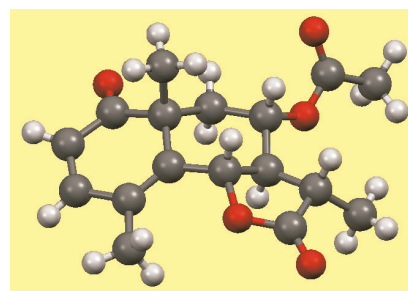


292

Турдыбеков К.М., Рахимова Б.Б., Турдыбеков Д.М.,  
Адекенов С.М.

**Сесквитерпеновые лактоны эвдесманового ряда  
из полыни полусухой: выделение  
и пространственное строение**

**Ключевые слова:** полынь полусухая,  
сесквитерпеновые лактоны, эвдесманолиды, таурин,  
8α-ацетокситаурин, 8α-гидрокситаурин,  
8α-ацетокси-2-ен-таурин, рентгеноструктурный анализ,  
ЯМР-спектроскопия



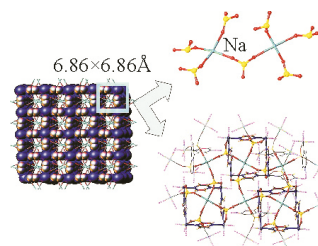
301

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ  
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Zheng Z., Xu P., Jiang Y., Liang Y.-J., Li J.-X.

**«Soft—hard» strategy to construct  
a pyrazine sulfonic acid copper(II)  
supramolecular structure  
and a study of its fluorescent property**

**Keywords:** heterocyclic sulfonate,  
coordination chemistry, copper(II) polymer,  
supramolecular structure, luminescent property

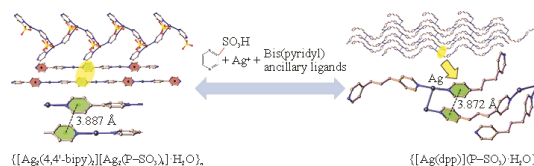


308

Liang Y.-J., Feng G., Zhang X., Li J.-X., Jiang Y.

**Bis(pyridyl) ancillary ligands  
and pyrazine sulfonic acid in the synthesis  
of two Ag(I) supramolecular structures  
and fluorescent properties of the latter**

**Keywords:** pyrazine sulfonate, silver polymer,  
weak interaction, crystal engineering, luminescent property



316

---

## СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

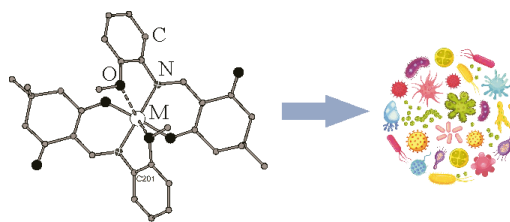
---

Еремина Ю.А., Ермакова Е.А., Сухих Т.С.,  
Клюшова Л.С., Ельцов И.В., Самсоненко Д.Г.,  
Доценко В.В., Зубенко А.А., Фетисов Л.Н.,  
Кононенко К.Н., Лидер Е.В.

325

**Синтез, строение и исследование биологической активности комплексов Co(II), Ni(II) и Cu(II) с производным енаминдиона**

**Ключевые слова:** медь, кобальт, никель, енаминдион, моноядерные комплексы, кристаллическая структура, цитотоксичность, антибактериальная активность

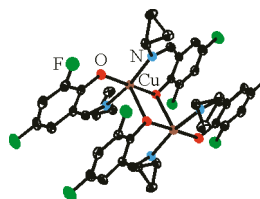


Wang N., Liu H.-Y., Zhou M.-Z.

338

**Syntheses, characterization, and antibacterial properties of copper(II) complexes derived from fluoro-containing Schiff bases**

**Keywords:** Schiff base, copper complex, crystal structure, antibacterial property



---

Содержание следующего номера — в конце журнала