

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

ТОМ 61

Ноябрь

№ 11, 2020

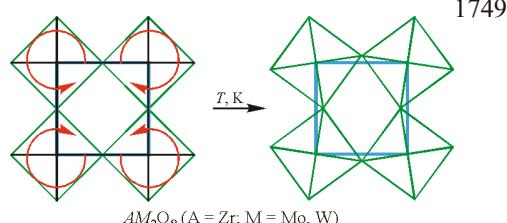
СОДЕРЖАНИЕ

ОБЗОРЫ

Петрушина М.Ю., Коренев С.В., Дедова Е.С.,
Губанов А.И.

**Материалы AM_2O_8 ($A = Zr, Hf$; $M = W, Mo$)
с отрицательным тепловым расширением**

Ключевые слова: отрицательное тепловое расширение,
твердые растворы,
гидротермальный синтез,
новые функциональные наноматериалы,
особые теплофизические свойства



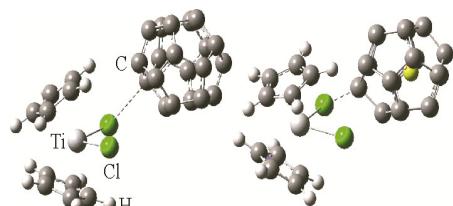
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Ghiasi R., Rahimi M., Ahmadi R.

**Quantum-chemical investigation into
the complexation
of titanocene dichloride with C_{20}
and $M^+@C_{20}$ ($M^+ = Li, Na, K$) cages**

Keywords: titanocene dichloride,
 C_{20} and $M@C_{20}$ cages, thermodynamics,
electrophilicity-based charge transfer (ECT),
quantum theory of atoms in molecules (QTAIM)

1777

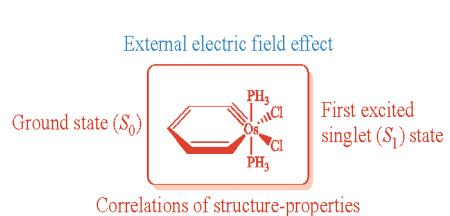


Daneshdoost V., Ghiasi R., Marjani A.

1787

**Investigating the effects of external electric field
on the osmabenzyne in the ground state (S_0)
and first excited singlet (S_1) state:
Insight from structures,
energetics and properties**

Keywords: osmabenzyne, excited state,
external electric field (EEF), electron-donating power,
electron-accepting power,
para-delocalization index (PDI)



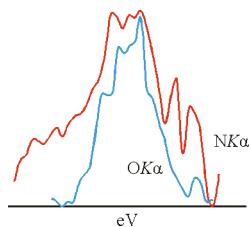
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Куликова И.М., Набелкин О.А., Иванов В.А.

1795

Исследование некоторых особенностей электронной структуры азотсодержащих соединений методом рентгеноспектрального микроанализа (PCMA)

Ключевые слова: $\text{K}\alpha$ -спектры, нитриты, нитраты, резонансные уровни, спиновая плотность, рентгеноспектральный микроанализ (PCMA)

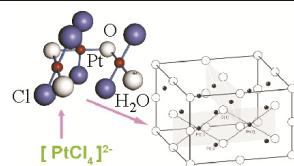


Троицкий С.Ю., Белякова О.А., Тригуб А.Л.

1804

Наночастицы оксо-гидроксокомплексов платины(II): состав, структура, механизм образования

Ключевые слова: наночастицы, Pt(II), гидролиз, EXAFS, SAXS, TEM, ЯМР, активные центры катализаторов

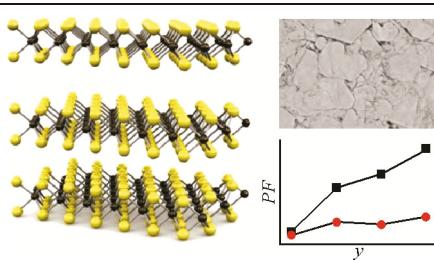


Яковлева Г.Е., Леднева А.Ю., Романенко А.И.,
Федоров В.Е., Колесов Б.А., Жданов К.Р.

1817

Влияние состава и размеров кристаллитов на термоэлектрические свойства слоистых дихалькогенидов вольфрама

Ключевые слова: слоистые дихалькогениды переходных металлов, размеры кристаллитов, электропроводность, коэффициент Зеебека, термоэлектрический фактор мощности

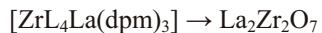
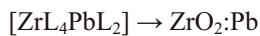
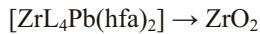


Крисюк В.В., Самелор Д., Тургамбаева А.Е., Эсван Ж.,
Корольков И.В., Максимовский Е.А., Трубин С.В.,
Шевцов Ю.В., Валас К.

1825

Контроль состава и структуры многокомпонентных пленок на основе диоксида циркония, полученных химическим осаждением из газовой фазы с помощью новых смешанных металлоорганических прекурсоров

Ключевые слова: β -дикетонаты металлов, термические свойства, смешанные металлоорганические прекурсоры, пленки на основе диоксида циркония, многокомпонентные пленки, MOCVD

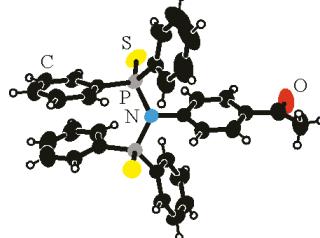


Al-Masri H.T., Moussa Z., Al-Masaeid N.M.

1837

**Synthesis and characterizations of *N*-(4-acetylphenyl)-*N*-(diphenylphosphino)-*P,P*-diphenylphosphinous amide derivatives:
Application of Pd(II) derivative as pre-catalyst in Suzuki cross-coupling reaction**

Keywords: *P,P*-donor, selenium, sulfur, group-10B, Suzuki, catalyst

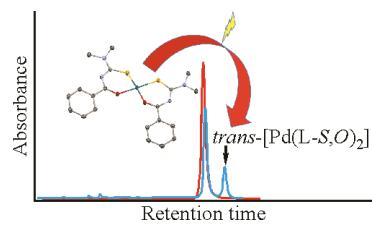


Nkabyo H.A., Olaoye O.

1847

Synthesis, structural characterization, *cis-trans* isomerism and DFT studies on *cis*-bis(*N,N*-di-methyl-*N'*-benzoylthioureato) palladium(II)

Keywords: palladium acylthiourea complex, crystal structure, *cis* – *trans* isomerism, DFT studies

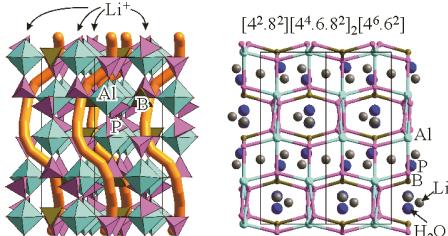


КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Аксенов С.М., Ямнова Н.А., Боровикова Е.Ю.,
Стефанович С.Ю., Волков А.С., Дейнеко Д.В.,
Димитрова О.В., Гурбанова О.А., Хиксон А.Е.,
Кривовичев С.В.

1856

Топологические особенности борофосфатов со смешанными каркасами: синтез, кристаллическая структура первого борофосфата алюминия и лития $\text{Li}_3\{\text{Al}_2[\text{BP}_4\text{O}_{16}]\}\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и сравнительная кристаллохимия

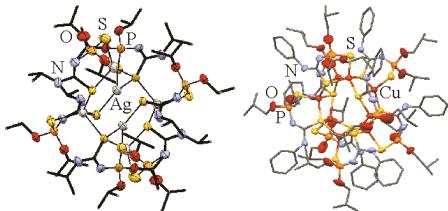


Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, топология, катионные сетки, гетерополиэдрические каркасы, борофосфаты

Литвинов И.А., Лодочникова О.А., Карамов Ф.А.

1882

Структура «координационных олигомеров» на основе комплексов тиофосфорилтиокарбамидных соединений с катионами одновалентной меди и серебра

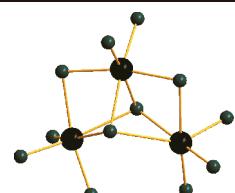


Ключевые слова: тиокарбамиды, комплексы одновалентной меди, комплексы одновалентного серебра, молекулярная структура, кристаллическая структура

Петров М.Д., Соколов М.Н., Федин В.П., Адонин С.А.

1890

Кристаллические структуры полиядерных бромидных комплексов сурьмы $(\text{Et}(n\text{-Pr})_3\text{N})_3[\text{Sb}_3\text{Br}_{12}]$ и $(2,2\text{-бipy})_4[\text{Sb}_4\text{Br}_{20}]$

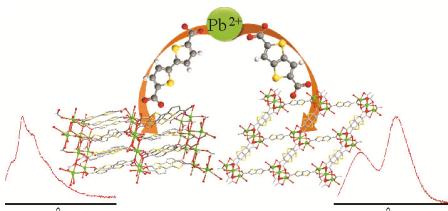


Ключевые слова: сурьма, галогенидные комплексы, полиядерные комплексы, кристаллическая структура

Дубских В.А., Лысова А.А., Самсоненко Д.Г., Самсонов В.А., Рядун А.А., Дыбцев Д.Н., Федин В.П.

1895

Строение и люминесцентные свойства координационных полимеров, содержащих свинец(II) и тиофеновые лиганда

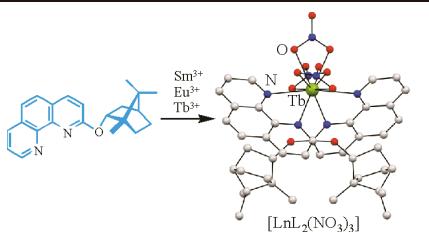


Ключевые слова: металло-органические координационные полимеры, рентгеноструктурный анализ, люминесценция

Брылева Ю.А., Пирязев Д.А., Глинская Л.А., Агафонцев А.М., Рахманова М.И., Ткачев А.В.

1906

Синтез, структура и фотолюминесцентные свойства комплексов лантанайдов(III) с лигандом на основе 1,10-фенантролина и борнеола



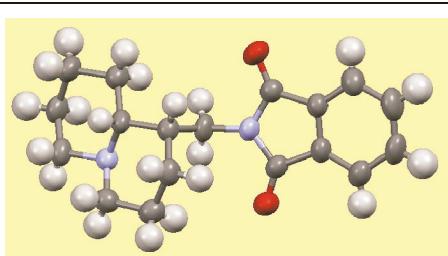
Ключевые слова: лантанайды, комплексы, терпены, борнеол, рацемат, структура, фотолюминесценция

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Турдыбеков К.М., Нуркенов О.А., Нурмаганбетов Ж.С., Сатпаева Ж.Б., Турдыбеков Д.М., Махмутова А.С., Фазылов С.Д.

1920

Синтез, кристаллическая структура и устойчивость конформеров N-лупинилфталимида



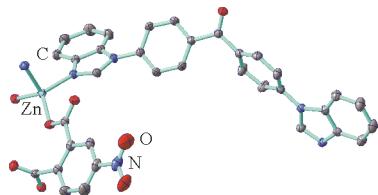
Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, квантово-химические расчеты, конформационный анализ, N-лупинилфталимид, производные лупинина

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

**Syntheses and structural characterization
of two zinc coordination polymers composed
of polycarboxylate and N-donor ligands**

Keywords: zinc complex, crystal structure, coordination polymer, synthesis, topology

1924



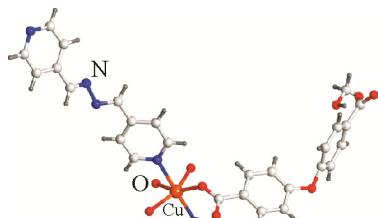
Li L., Xie H.-Y., Cao J., Li W.-Y., Shao X.-Z.

**Metal ion-directed synthesis of two mixed-ligand
coordination polymers:**

**Protective activity on acute kidney injury by reducing
Nagl content in urine**

Keywords: coordination polymer, X-ray diffraction, acute kidney injury

1930



Содержание следующего номера — в конце журнала