

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 62

Август

№ 8, 2021

СОДЕРЖАНИЕ

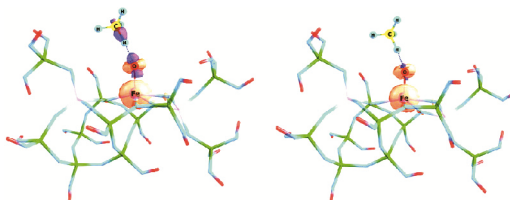
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Овчинников Д.А., Рузанкин С.Ф., Ковальский В.Ю.,
Зильберберг И.Л.

1231

**Проектирование однодетерминантных решений
спин-поляризованных уравнений
самосогласованного поля
в базисе парных орбиталей**

Ключевые слова: спиновая плотность,
парные орбитали, спиновое проектирование

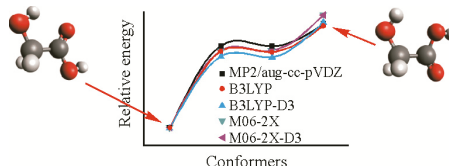


Ganesan M., Paranthaman S.

1251

**Dispersion-corrected density functional theory
studies on glycolic acid-metal complexes**

Keywords: glycolic acid, metal interaction,
hydrogen bond, reactivity, density functional theory, NBO



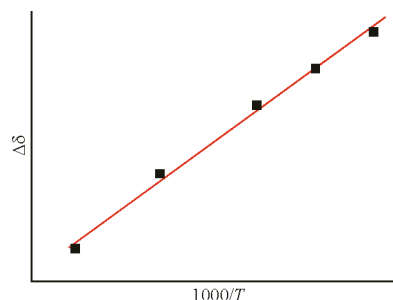
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Бабайлов С.П., Стабников П.А., Ткачев С.В.,
Круппа А.И.

1270

**¹H ЯМР исследование разнолигандных
комплексов лантанидов.
Стехиометрия и температурная
чувствительность парамагнитных
химических сдвигов β-дикетонатов празеодима
и их соединений с 18-краун-6**

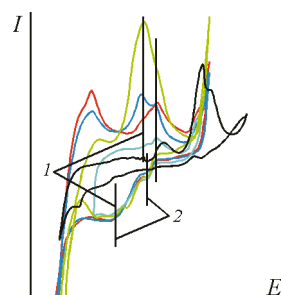
Ключевые слова: ЯМР, температурная чувствительность
парамагнитных химических сдвигов,
β-дикетонаты лантаноидов, 18-краун-6,
магниторезонансные термосенсоры,
парамагнитные лантаноидные зонды
локальной температуры



Коковкин В.В., Коротаев Е.В., Миронов И.В.,
Лавренова Л.Г.

**Физико-химическое исследование
спин-кроссовера в комплексе
нафталин-2-сульфоната железа(II)
с 4-амино-1,2,4-триазолом**

Ключевые слова: координационные соединения,
железо(II), 4-амино-1,2,4-триазол, 2-нафталинсульфонат,
спин-кроссовер, спектрофотометрия, кондуктометрия,
циклическая вольтамперометрия

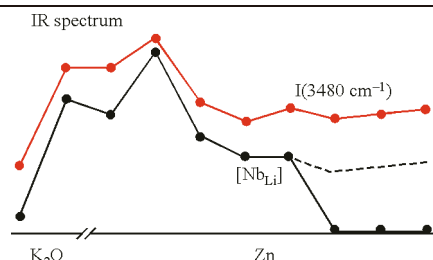


1277

Сидоров Н.В., Теплякова Н.А., Палатников М.Н.

**Особенности дефектной структуры кристаллов
ниобата лития разного состава и их влияние
на оптические и электрические свойства**

Ключевые слова: кристаллы, ниобат лития, легирование,
ИК спектроскопия, фотоэлектрические поля, дефекты,
протонная и поляронная проводимость,
ширина запрещенной зоны

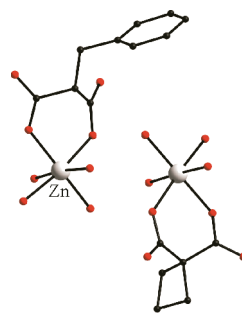


1286

Зорина-Тихонова Е.Н., Чистяков А.С.,
Матюхина А.К., Ефимов Н.Н., Шмелев М.А.,
Скабицкий И.В., Кискин М.А., Сидоров А.А.,
Еременко И.Л.

**Влияние заместителя в малонатных анионах
на строение координационных полимеров Zn(II)**

Ключевые слова: координационные полимеры, цинк,
комплексы цинка, карбоксилаты цинка, дикарбоксилаты,
циклобутан-1,1-дикарбоновая кислота,
бензилмалоновая кислота

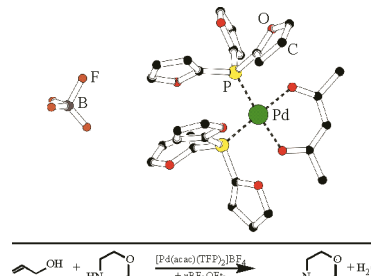


1296

Быков М.В., Абрамов З.Д., Орлов Т.С.,
Пахомова М.В., Бородин Т.Н., Смирнов В.И.,
Суслов Д.С.

**Структура и каталитические свойства
(ацетилацетонато-κ²O,O')-
бис(три-2-фурилфосфин)палладия(II)
тетрафторобората**

Ключевые слова: палладий(II), три-2-фурилфосфин,
ацетилацетонат, аллиловый спирт, реакция Цудзи–Троста



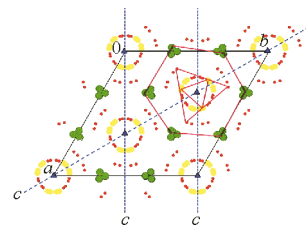
1305

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

**Кристаллографический анализ
и кристаллодинамика типовых структур
с анионами (BO₃) и (B₃O₆)**

Ключевые слова: кристаллографический анализ,
анионные и катионные подрешетки, арагонит,
кристаллодинамика, KCaNd(BO₃)₂, BaB₂O₄

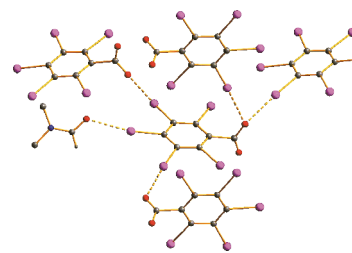


1317

Бондаренко М.А., Новиков А.С., Чернова К.В.,
Соколов М.Н., Адонин С.А.

**2-Метилпиридиниевая соль пентаиодобензойной
кислоты: роль галогенной связи
в образовании кристаллической упаковки**

Ключевые слова: карбоновые кислоты,
галогенная связь, нековалентные взаимодействия,
квантово-химические расчеты, кристаллическая структура

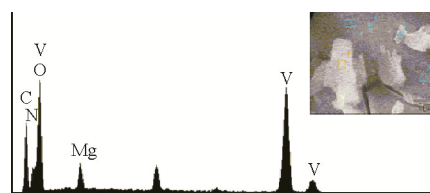


1325

Ksiksi R., Jendoubi I., Chebbi H., M. Graia, Zid M.F.

Synthesis, characterization and crystal structure of a novel decavanadate $\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})_6(\text{C}_6\text{H}_{14}\text{N}_2)_2\text{V}_{10}\text{O}_{28}\cdot 8\text{H}_2\text{O}$

Keywords: decavanadate, synthesis, X-ray analysis, crystal structure, characterization

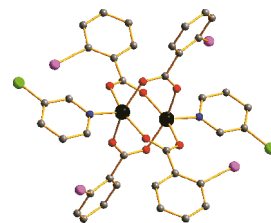


1331

Бондаренко М.А., Адонин С.А.

Кристаллические структуры гетеролигандных биядерных 2-иодобензоатных комплексов $\text{Zn}(\text{II})$ с 4-этил- и 3-хлорпиридином

Ключевые слова: цинк, карбоксилатные комплексы, кристаллическая структура, нековалентные взаимодействия

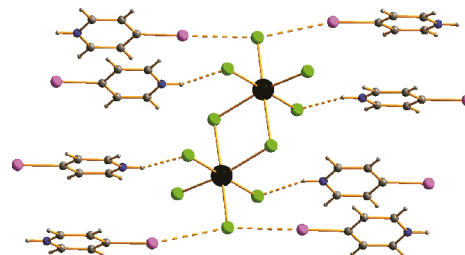


1339

Адонин С.А.

Кристаллические структуры биядерных хлоровисмутатных комплексов с катионами 3-метилпиридиния и 4-иодпиридиния

Ключевые слова: висмут, галогенидные комплексы, кристаллическая структура, нековалентные взаимодействия

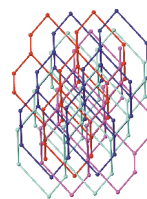


1345

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

Two interpenetrating cobalt coordination polymers constructed by dicarboxylate and V-shaped N-donor ligands

Keywords: cobalt complex, interpenetration, coordination polymer, synthesis, X-ray crystallography

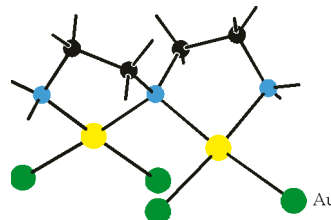


1351

Макотченко Е.В., Байдина И.А., Корольков И.В.

Строение соединений, полученных на основе $[\text{Au}(\text{Dien})\text{Cl}]\text{Cl}_2$ и хлоридных комплексов платины

Ключевые слова: золото, платина, двойная комплексная соль, диэтиленetriамин, рентгеноструктурный анализ

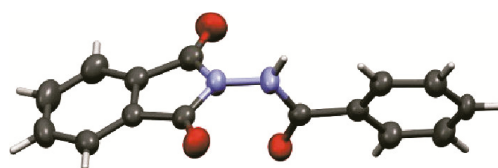


1357

Турдыбеков К.М., Нуркенов О.А., Фазылов С.Д., Махмутова А.С., Турдыбеков Д.М., Сейлханов Т.М., Аринова А.Е.

Синтез, кристаллическая структура и конформация N-изоникотиноилфталимида

Ключевые слова: ацилгидразиды, N-изоникотиноилфталимид, фталевый ангидрид, ЯМР спектроскопия, рентгеноструктурный анализ, квантово-химические расчеты

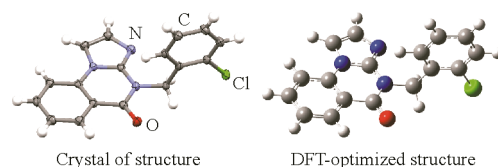


1366

Liu Y., Zheng Z., Deng H., Ren Q., Zhou Z., Zhao C., Chai H.

Synthesis, and characterization of a new compound 4-(2-chlorobenzyl) imidazo[1,2-a]quinazolin-5(4H)-one and DFT study of crystal structure, MEP and HOMO–LUMO

Keywords: imidazoquinolinone, synthesis, X-ray diffraction, DFT

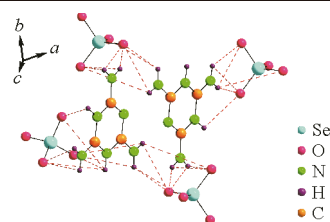


1372

Messoudi N., Messoudi N., Elleuch S., Jarraya K.

Structure study, Hirshfeld surface analysis, thermal, vibrational and DFT investigation of 2,4,6-triamino-1,3,5-triazin-1-iumselenate

Keywords: hybrid material, X-ray diffraction, Hirshfeld surface, FTIR spectroscopy, DFT investigation, thermal studies



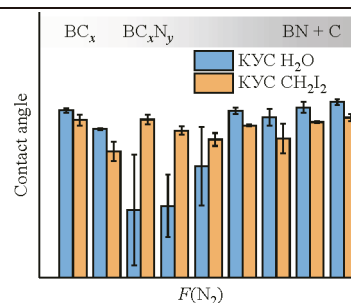
1380

СТРУКТУРА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Суляева В.С., Гатапова Е.Я., Кожевников А.К.,
Роголо Д.И., Сараев А.А., Юшина И.В.,
Хомяков М.Н., Шаповалова А.А., Шаяпов В.Р.,
Баскар Н., Ту Р., Косинова М.Л.

Химическое строение и функциональные свойства аморфных пленок карбонитрида бора

Ключевые слова: карбонитрид бора, тонкие пленки, магнетронное распыление, оптические свойства, механические свойства, смачиваемость поверхности



1396

Содержание следующего номера — в конце журнала