

## РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор Владимир Петрович Федин  
Зам. гл. редактора Сергей Васильевич Коренев  
Отв. секретарь Александр Викторович Артемьев

## ЧЛЕНЫ РЕДКОЛЛЕГИИ

Е.Г. Багрянская, В.А. Блатов, А.И. Боронин, К.А. Брылев, Ю.Г. Горбунова, Н.П. Грицан,  
С.А. Громилов, Д.Н. Дыбцев, Я.В. Зубавичус, В.Б. Кобычев, С.Г. Козлова, С.Н. Конченко,  
И.А. Литвинов, Н.Г. Наумов, А.В. Окотруб, А.В. Пискунов, Г.В. Романенко, М.Н. Соколов,  
А.В. Солдатов, С.Ф. Солодовников, М.В. Федин, А.В. Шевельков

## РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

академик РАН В.П. Анаников, академик РАН В.В. Болдырев,  
академик РАН В.И. Бухтияров, академик РАН И.Л. Еременко,  
академик РАН Ю.Н. Молин, академик РАН В.И. Овчаренко,  
академик РАН Р.З. Сагдеев

## УЧРЕДИТЕЛИ ЖУРНАЛА

Сибирское отделение РАН,  
Учреждение Российской академии наук  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева  
Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН),  
Новосибирский национальный исследовательский государственный университет

Адрес редакции: 630090 Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева, 3. ИНХ СО РАН.  
Телефон (383)-330-63-66  
E-mail: jsc@niic.nsc.ru

Электронная страница Журнала структурной химии  
<http://jsc.niic.nsc.ru/>

Журнал переводится на английский язык и издается  
издательством Springer в США под названием  
Journal of Structural Chemistry

[www.springerlink.com](http://www.springerlink.com)

Редактор английского перевода Л.В. Черникова

Зав. редакцией Елена Львовна Таскаева  
Выпускающие редакторы Е.Л. Таскаева, М.В. Першина  
Художественный редактор С.М. Маслакова  
Компьютерная верстка: С.М. Маслакова, И.Г. Трефилова, Л.В. Кукаркина

---

Сдано в набор 30.08.2022. Подписано к печати 18.10.2022. Бум. оф. №1 80 г/м<sup>2</sup>  
Формат 60 × 84 1/8. Офсетная печать. Усл. печ. л. 18,38.  
Уч.-изд. л. 19,53. Тираж 70 экз. Заказ № 156. Цена свободная

---

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий  
и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации средства массовой информации  
ПИ № ФС77-70770 от 21.08.2017.

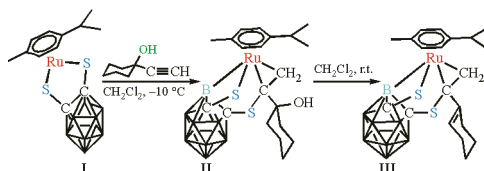
Оригинал-макет подготовлен в редакционно-издательском отделе ИНХ СО РАН  
630090 Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева, 3  
Отпечатано 24.10.2022 на полиграфическом участке ИНХ СО РАН  
630090 Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева, 3

СОДЕРЖАНИЕ

Hu J.R., Wang J.H.

**Reactivity of 16-electron (*p*-cymene)Ru half-sandwich complex containing a chelating 1,2-dicarba-*closo*-dodecaborane-1,2-dithiolate ligand with 1-ethynyl-1-cyclohexanol**

**Keywords:** ruthenium complexes, *o*-carborane, 1-ethynyl-1-cyclohexanol, synthesis, structure

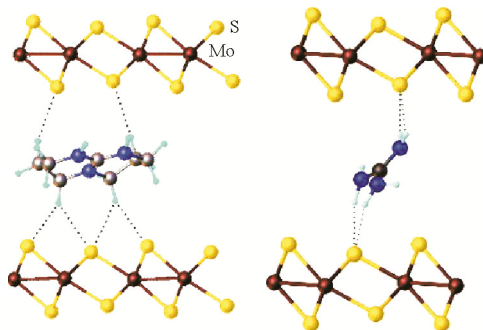


98943

Ушаков И.Е., Лененко Н.Д., Головешкин А.С.,  
Бужин М.И., Таказова Р.У., Корлюков А.А.,  
Зайковский В.И., Голубь А.С.

**Исследование строения и связывающих взаимодействий в слоистых соединениях дисульфида молибдена с производными гуанидина экспериментальными и расчетными методами**

**Ключевые слова:** дисульфид молибдена, органо-неорганические соединения, порошковая рентгеновская дифракция, квантово-химические расчеты, нековалентные взаимодействия, водородные связи

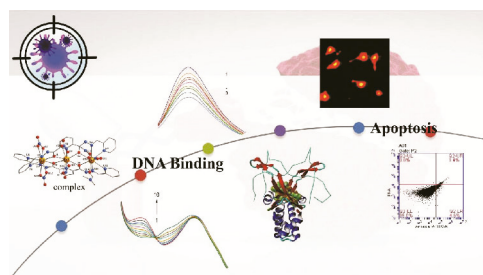


99124

Chen S.Y., Ji X.X., Song D.X., Chen Q., Li Y., Sun N.,  
Wang L., Wu S.Y., Zhang Y., Zhu M.C.

**A new monomer Ce(III) complex based on bis[(2-pyridyl)methylene]pyridine-2,6-dicarbohydrazone: Synthesis, DNA binding, apoptosis, and molecular docking**

**Keywords:** monomer complex, DNA, molecular docking, apoptosis

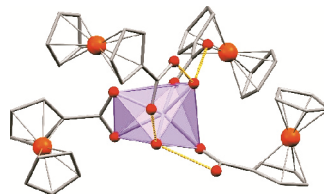


99148

Романенко Г.В., Толстиков С.Е., Фурсова Е.Ю.,  
Овчаренко В.И.

**Моноядерные комплексы Mn(II) и Co(II) с ферроценкарбоновой кислотой**

**Ключевые слова:** марганец, кобальт, ферроцен-монокарбоновая кислота, кристаллическая структура

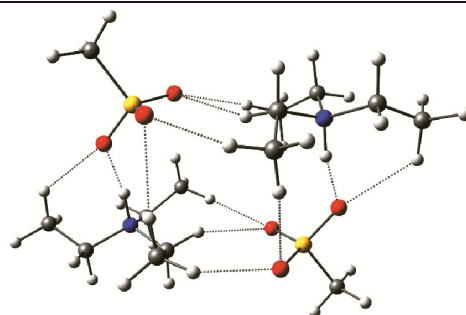


99181

Майоров В.Д., Тараканова Е.Г., Майоров А.В.,  
Кислина И.С.

**Равновесный состав и строение нанофрагментов  
системы триэтиламин–метансульфоновая  
кислота**

**Ключевые слова:** триэтиламин,  
метансульфоновая кислота, микроструктура растворов,  
водородная связь, нанофрагменты,  
механизм стеклообразования, ИК спектроскопия,  
квантово-химические расчеты

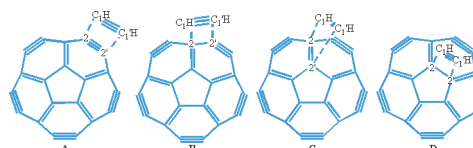


99312

Sarghein M.G., Ghiasi R., Baniyaghoob S.

**Chemisorption of  $C_2H_2$  on  $C_{20}$  bowl:  
A computational investigation**

**Keywords:**  $C_{20}$  bowl, acetylene, chemisorption,  
Electrophilicity-based charge transfer (ECT)

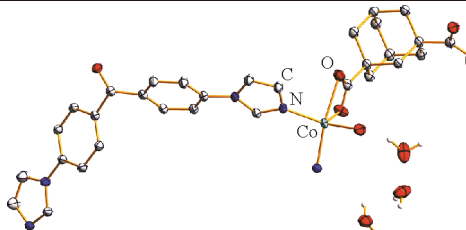


99318

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

**Syntheses of cobalt and nickel coordination polymers  
composed of 1,3-adamantanedicarboxylate  
and bis(4-(1*H*-imidazol-1-yl)phenyl)methanone  
ligands**

**Keywords:** cobalt complex, nickel complex,  
coordination polymers, synthesis, crystal structure

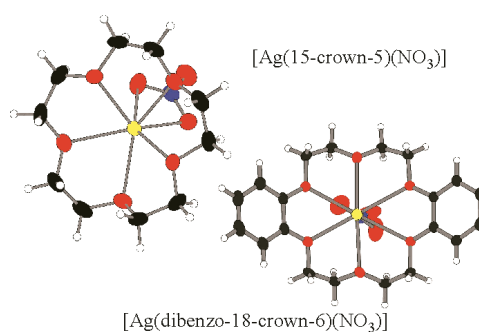


99360

Герасимова Д.П., Фаизова Р.Г., Захарычев Д.В.,  
Сайфина А.Ф., Курбангалиева А.Р.,  
Лодочникова О.А.

**Устойчивость и воспроизводимость димерного  
мотива в кристаллах тиоэфиров 3-бром-5-  
гидрокси-1-(4-метилбензил)-1,5-дигидро-2*H*-  
пиррол-2-онов**

**Ключевые слова:** спонтанное разделение энантимеров,  
рацемическое соединение, рацемический конгломерат,  
3-пирролин-2-оны, межмолекулярные взаимодействия,  
гетерохиральные димеры, фазовое поведение

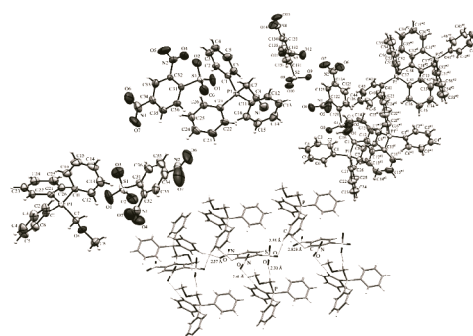


99529

Шарутин В.В., Шарутина О.К., Механошина Е.С.

**Исследование кристаллических структур  
2,4-динитробензолсульфонатов  
органилтрифенилфосфония  
[ $Ph_3PR$ ][ $OSO_2C_6H_3(NO_2)_2-2,4$ ],  $R = CH_2OMe$ ,  
 $CH_2CN$ ,  $CH_2CH=CHCH_2PPh_3$**

**Ключевые слова:** 2,4-динитробензолсульфоновая  
кислота, галогенид органилтрифенилфосфония,  
2,4-динитробензолсульфонаты  
органилтрифенилфосфония, синтез,  
молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ

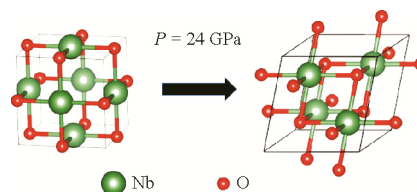


99532

Попов И.С., Шеин И.Р., Валеева А.А., Еняшин А.Н.

**Ромбоэдрический монооксид ниобия:  
теоретически предсказываемая фаза  
высокого давления NbO**

**Ключевые слова:** монооксид ниобия, вакансии,  
фазовый переход, полиморфизм, DFT

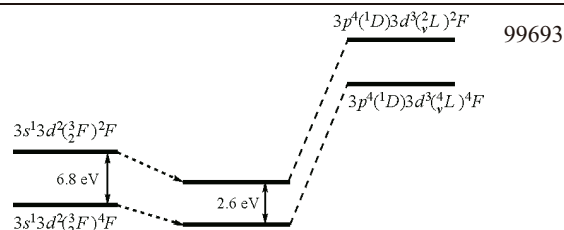


99671

Тетерин Ю.А., Перфильев Ю.Д., Маслаков К.И.,  
Яржемский В.Г., Тетерин А.Ю., Иванов К.Е.,  
Дедушенко С.К.

#### Структура спектров РФЭС $K_2FeO_4$

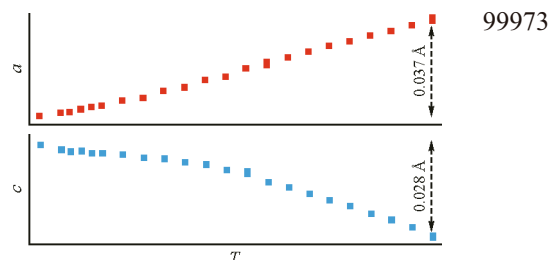
**Ключевые слова:** рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, электронное строение, химическая связь, феррат калия



Панченко А.В., Сухих А.С., Исаенко Л.И.,  
Громилов С.А.

#### Методика изучения динамики параметров элементарной ячейки монокристаллов в широком интервале температур на примере $Ag_{0.39}Li_{0.61}GaSe_2$

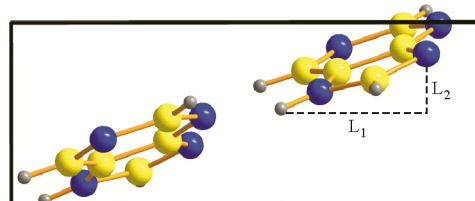
**Ключевые слова:** рентгеновская дифрактометрия монокристаллов, параметры элементарной ячейки, температурная зависимость



Федоров И.А., Корабельников Д.В.

#### Первопринципное исследование сжимаемости и электронных свойств кристаллического пурина

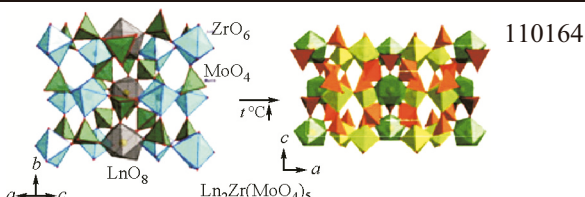
**Ключевые слова:** кристалл пурина, теория функционала плотности, дисперсионные взаимодействия, давление, сжимаемость, электронная плотность, ширина запрещенной зоны



Базарова Ж.Г., Субанакоев А.К., Базаров Б.Г.

#### Активные диэлектрики на основе сложных молибдатов циркония

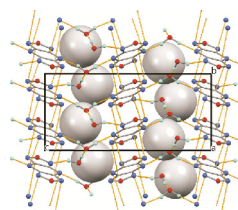
**Ключевые слова:** двойные, тройные молибдаты, цирконий, РЗЭ, фазовые диаграммы, кристаллическая структура, свойства



Овчаренко В.И., Фокин С.В., Шереметев А.Б.,  
Стриженко К.В., Романенко Г.В., Богомяков А.С.,  
Егоров М.П.

#### Соли цезия с анион-радикалом дифуразанопиразина

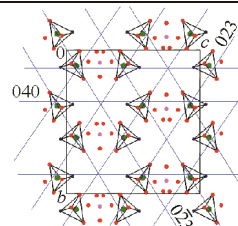
**Ключевые слова:** бис(фуразано)пирозин, цезий, стабильный радикал, структура, магнитные свойства



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

#### О стабильности структуры $[Li_2Zn_2(bpy)(ndc)_3]$ с металл-органическим каркасом

**Ключевые слова:** «молекулярные сита», металл-органический каркас (МОК), кристаллографический анализ, катионная подрешетка, симметрия – стабильность

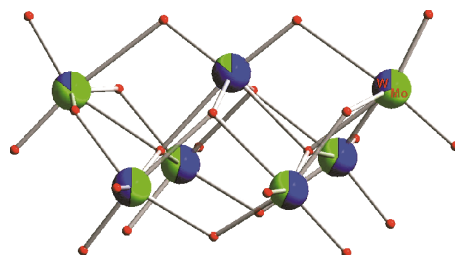


Сухих А.С., Громилов С.А.

#### Закономерности строения смешанных гептаанионов в структурах

$Na_2[Pd(NH_3)_4]_5(Mo_{7-x}W_xO_{24})_2 \cdot nH_2O$   
и  $Na[Pd(NH_3)_4]_2(HMo_{3.75}W_{3.25}O_{24}) \cdot 7H_2O$

**Ключевые слова:** тетрааммин палладия, гептавольфрамат, гептамолибдат, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия



Панюшкин В.Т.

**XIX международная конференция  
«Спектроскопия координационных соединений»:  
обзор докладов**

**Ключевые слова:** ЯМР и ЭПР спектроскопия координационных соединений, люминесценция координационных соединений и материалов на их основе, фотохимия координационных соединений, синтез и спектральные свойства комплексных соединений, методы оптической спектроскопии и квантовой химии в исследовании координационных соединений, методы исследования и получения супра- и наносистем, практическое применение и биологическая активность координационных соединений



103189

Отзыв статьи

102971

Guo H., Zhan W.Z., Tang S., Wang Y., Peng Y., Wang L., Chen W.H., Ye L.

**Crystal structure and anticancer activity  
on retinoblastoma of an In(III)–Na(I)  
coordination polymer based on flexible  
4,4'-dithiodibenzoic acid**

Отзыв статьи

103173

Fu G.-Q., Fang Y., Yao J.-J., Ren B., Zan X.-F., Liu E.-L., Chen M.-J.

**Two mixed-ligand Cu(II) coordination polymers:  
Protective effect on sepsis by reducing an excessive  
inflammatory response**

Отзыв статьи

103174

Zheng X.-Y., Yang P.

**Crystal structures and anti-gastric cancer activities  
of two Cd(II)-based coordination polymers  
constructed from different donor ligands**

Содержание следующего номера — в конце журнала