

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 62

Июнь

№ 6, 2021

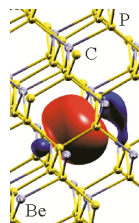
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Басалаев Ю.М., Гордиенко А.Б.

**Функции Ванье и химическая связь
в соединениях Be-IV-P₂ (IV = C, Si, Ge, Sn)
со структурой халькопирита**

Ключевые слова: халькопирит,
электронная структура, функции Ванье,
химическая связь

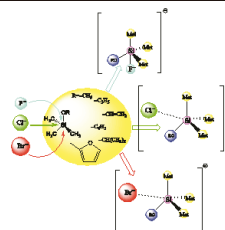


885

Aichi M., Hafied M.,
Dibi A.

**Theoretical study
of the pentavalent halosiliconates:
Structure and charge delocalization**

Keywords: DFT, pentavalent halosiliconates,
Si-F bond, NBO, charge delocalization

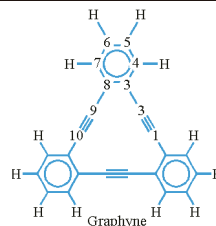


892

Ghiasi R., Valizadeh A.

**Hydrogen adsorption and storage on palladium –
functionalized graphyne and its boron
nitride analogue**

Keywords: graphyne, hydrogen storage, adsorption,
electrophilicity-based charge transfer (ECT),
recovery time, field emission properties

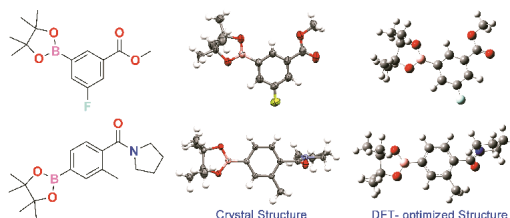


903

Huang P.-Y., Yang Z.-S., Wu Q.-M., Yang D.-Z.,
Chen J.-J., Chai H.-F., Zhao C.-S.

**Synthesis, crystal structure and DFT study
of methyl 3-fluoro-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-
dioxaborolan-2-yl)benzoate
and (2-methyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-
dioxaborolan-2-yl)phenyl)-(pyrrolidin-
1-yl)methanone compounds**

Keywords: 4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl,
synthesis, X-ray diffraction, DFT



913

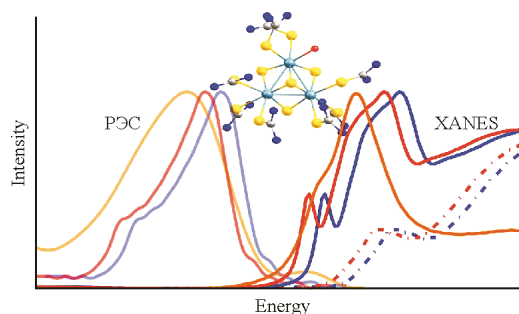
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Федоренко А.Д., Семушкина Г.И., Перегудова Н.Н., Лаврухина С.А., Гушин А.Л., Фоменко Я.С., Соколов М.Н., Гусельников А.В., Калинин А.В., Николенко А.Д., Ивлюшкин Д.В., Заверткин П.С., Мазалов Л.Н.

921

Изучение особенностей электронной структуры сульфидных трехъядерных комплексов молибдена с кластерными ядрами $\{Mo_3S_4\}$ и $\{Mo_3S_7\}$ методами рентгеновской спектроскопии

Ключевые слова: сульфидные трехъядерные кластеры молибдена, рентгеновская эмиссионная спектроскопия, XANES, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, теория функционала плотности, электронная структура

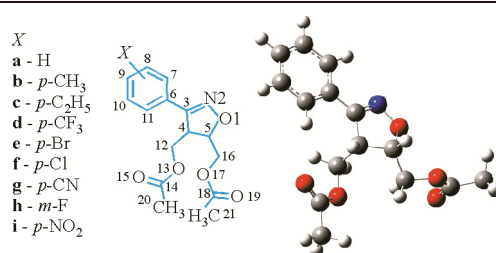


Eşme A., Sagdinc S.G., Kara Y.S.

934

Experimental and theoretical study of the substituent type and position effects on 3-(substituted phenyl)-cis-4,5-dihydroisoxazole-4,5-diylbis(methylene)diacetate derivatives

Keyword: diacetate derivatives, isoxazole, theoretical calculation, UV-Vis spectra, FTIR spectra

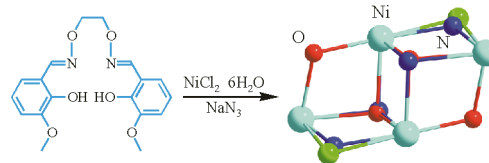


Xie K.-F., Li L.-L., Li W.-D., Xu X., Dong W.-K.

945

Novel tetranuclear nickel(II) salamo-based complex adopting two open cubic structures: Synthesis, chracterization, DFT calculation, hirshfeld analysis and fluorescence properties

Keywords: salamo-based ligand, Ni(II) complex, hirshfeld surface analysis, DFT computation, fluorescence property



КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Манаков А.Ю., Хлыстов О.М., Сагидуллин А.К., Адамова Т.П., Хабуев А., Родионова Т.В., Юношев А.С.

958

Структура, морфология и состав природных газовых гидратов, отобранных на грязевом вулкане Кедр-1 (оз. Байкал)

Ключевые слова: природные газовые гидраты, оз. Байкал, структура, порошковая дифрактометрия, грязевой вулкан

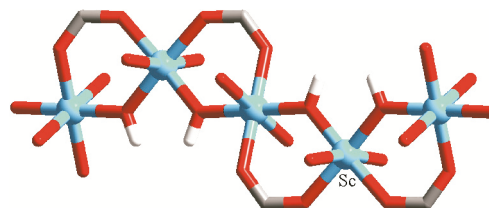


Черезова С.В., Барсукова М.О., Самсоненко Д.Г., Федин В.П.

966

Кристаллическая структура плотных металл-органических координационных полимеров на основе Sc(III) и двух типов лигандов

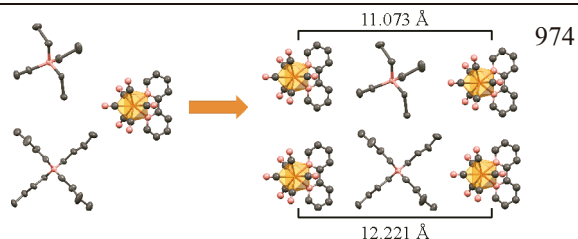
Ключевые слова: скандий, 2,2'-бипиридил-4,4'-дикарбоновая кислота, терефталевая кислота, металл-органические координационные полимеры, рентгеноструктурный анализ



Hodorowicz M., Szklarzewicz J., Jurowska A., Mikuriya M., Mitsuhashi R., Yoshioka D.

Anion-cation versus weak intermolecular interactions in structures of Et_4N^+ , Pr_4N^+ and Bu_4N^+ cation salts with $[\text{W}(\text{CN})_6(\text{bpy})]^{2-}$ anion

Keywords: tungsten, cyano ligands, 2,2'-bipyridine, tetraalkylammonium cations, structure

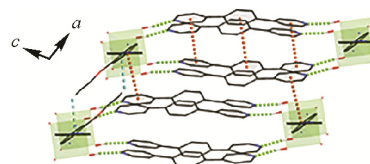


974

Zhang C.L., Qian J.L., Zhou T., Li Y.Q.

Construction of a cobalt coordination polymer based on linear ligand with flexible branched chains

Keywords: coordination polymer, linear ligand, UV-Visible spectra

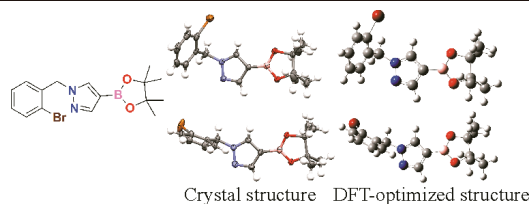


987

Yang Z.-S., Huang P.-Y., Chen J.-J., Chen Y.-M., Gao T., Chai H.-F., Zhao C.-S.

Synthesis, crystal structure and DFT study of 1-(2-bromobenzyl)-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-pyrazole

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

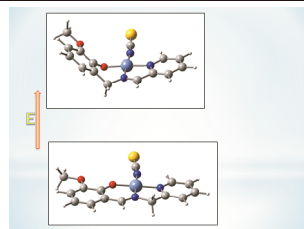


997

Thakurta S., Maiti, Butcher R.J., Wang J., Leszczynski J.

Combined experimental and computational approach to the structure of a new nickel(II) complex with tridentate Schiff base ligand

Keywords: crystal structure, density functional theory, nickel(II), Schiff base, isomers

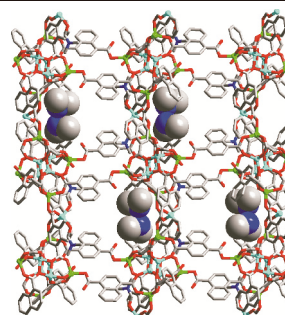


1007

Дудко Е.Р., Сапьяник А.А., Самсоненко Д.Г., Федин В.П.

Новые металл-органические координационные полимеры из предсинтезированных гетерометаллических пивалатных комплексов: синтез и кристаллическая структура

Ключевые слова: литий, цинк, европий, гетерометаллические комплексы, поликарбоновые кислоты, координационные полимеры, рентгеноструктурный анализ

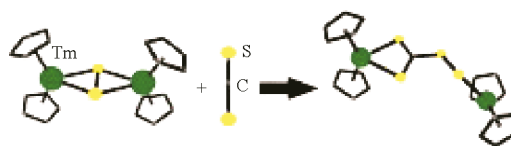


1016

Дёмкин А.Г., Савков Б.Ю., Сухих Т.С., Конченко С.Н.

Первые примеры молекулярных полихалькогенидных комплексов тулия

Ключевые слова: координационные соединения, лантаноиды, тулий, халькогенидные комплексы, кристаллическая структура

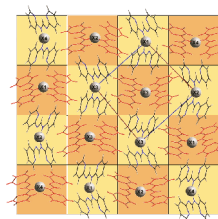


1026

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

Конформационный дуализм дипиридилзамещенного формамида

Ключевые слова: полиморфная модификация, формамидин, кристаллическая структура, водородная связь



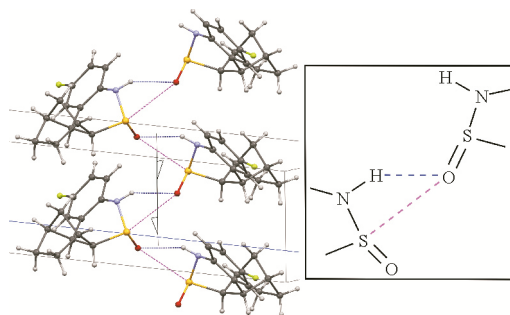
1035

Герасимова Д.П., Племенков В.В.,
Лодочникова О.А.

1043

**Кристаллическая структура сульфинамидов
тиазинового ряда: особенности перенесения
открытоцепочечного супрамолекулярного
синтона из рацемического окружения
в гомохиральное**

Ключевые слова: сульфинамиды,
супрамолекулярный синтон, водородные связи,
вторичное сшивание, кристаллическая структура,
рентгеноструктурный анализ, топологический анализ



Содержание следующего номера — в конце журнала