

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

*Основан в 1960 г.*

*Выходит 12 раз в год*

ТОМ 61

Октябрь

№ 10, 2020

## СОДЕРЖАНИЕ

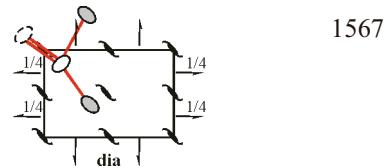
### ОБЗОРЫ

Банару А.М., Банару Д.А.

**Структурные классы по П.М. Зоркому**

**и критическая топология молекулярных кристаллов**

**Ключевые слова:** молекулярный кристалл, структурный класс, координационное число, сеть

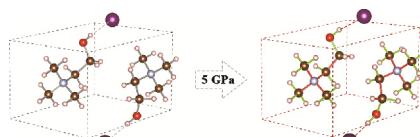


1567

Журавлев Ю.Н., Гордиенко К.А.

**Влияние давления на структурные, электронные и оптические свойства иодида холина**

**Ключевые слова:** теория функционала плотности, ванн-дер-ваальсово взаимодействие, кристаллическая структура, давление, плотность состояний, упругие постоянные, уравнение состояния, колебательные моды, иодид холина

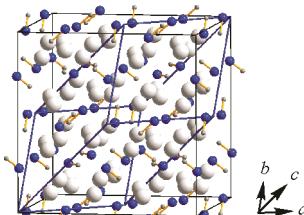


1586

Кайзер Е.Б., Кравченко Н.Г., Поплавной А.С.

**Первопринципное моделирование кристаллической структуры имида лития в низкотемпературной фазе**

**Ключевые слова:** функционал плотности, имид лития, кристаллическая структура, электронная структура, электронная плотность, химическая связь

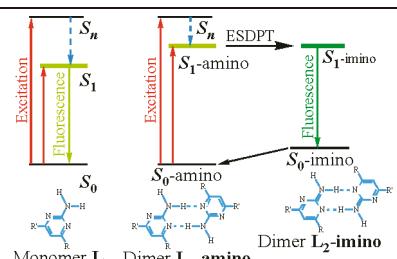


1596

Шеховцов Н.А., Виноградова К.А., Николаенкова Е.Б., Кривопалов В.П., Бушуев М.Б.

**Двойная эмиссия 2-амино-4-метилпиримидина: теоретическое исследование**

**Ключевые слова:** флуоресценция, пиримидин, водородная связь, фотоизомеризация, двойной фотоперенос протона в возбужденном состоянии, супрамолекулярная химия



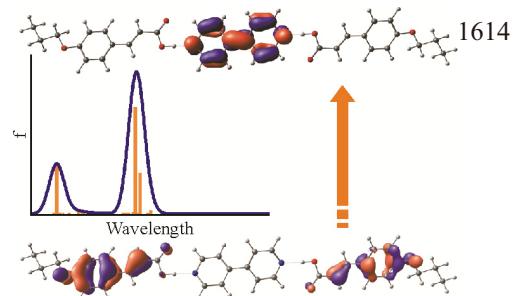
1605

ИНХ СО РАН  
НОВОСИБИРСК  
2020

Гиричева Н.И., Бубнова К.Е., Чернова Е.М., Федоров М.С., Сырбу С.А., Гиричев Г.В.

**Электронные спектры поглощения и межмолекулярная водородная связь в системах мезоген–немезоген**

**Ключевые слова:** жидкие кристаллы, водородная связь, Н-комплексы, 4-*n*-алкилксикоричная кислота, немезогены, 4,4'-бипиридин, квантово-химические расчеты, граничные молекулярные орбитали, электронные спектры поглощения

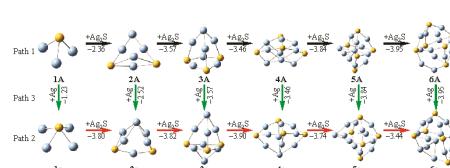


Tian Z., Song C.

**Theoretical study on the structures and growth mechanisms of Ag-rich clusters:**

$\text{Ag}(\text{Ag}_2\text{S})_n$  and  $\text{Ag}_2(\text{Ag}_2\text{S})_n$  ( $n = 1\text{--}6$ )

**Keywords:**  $\text{Ag}(\text{Ag}_2\text{S})_n$  ( $n = 1\text{--}6$ ) clusters,  $\text{Ag}_2(\text{Ag}_2\text{S})_n$  ( $n = 1\text{--}6$ ) clusters, density functional theory, structures, increment mechanism



1625

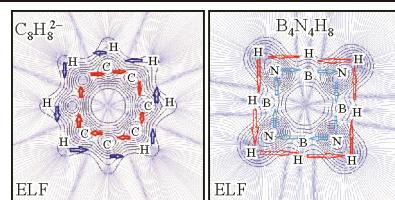
Monajjemi M.

**Analysis of localized orbitals**

**in azabora derivatives of [8] annulene:**

**In the viewpoint of aromaticity and induced ring currents**

**Keywords:** aromaticity, LOL, ELF, annulene, current density induced, paratropic, diatropic



1635

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Ларичев Ю.В., Селиванова Н.В., Бердникова П.В.,

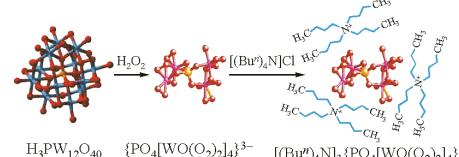
1652

Тузиков Ф.В., Пай З.П.

**Пероксополиоксокомплексы вольфрама – перспективные катализаторы окисления органических соединений.**

**I. Структура комплекса  $[(\text{Bu}^{\prime})_4\text{N}]_3\{\text{PO}_4[\text{WO}(\text{O}_2)_2]_4\}$  по данным метода малоуглового рентгеновского рассеяния**

**Ключевые слова:** металлокомплексы, пероксополиоксвольфраматы, четвертичные аммониевые катионы, МУРР

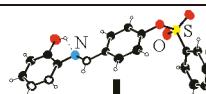


Özdemir N., Dayan O.

**Synthesis, spectroscopy, X-ray crystallography and DFT calculations**

**of (*E*)-4-{[(2-hydroxyphenyl)imino]methyl}phenyl benzenesulfonate**

**Keywords:** benzenesulfonate, X-ray structure, spectroscopy, DFT calculation



1659

**КРИСТАЛЛОХИМИЯ**

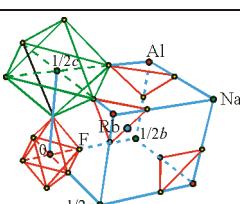
Борисов С.В., Магарилл С.А., Первухина Н.В.

1669

**Катионные и анионные подрешетки**

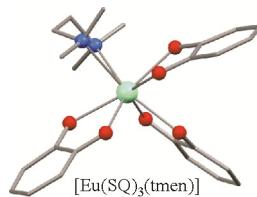
**в ряду типовых кристаллических структур**

**Ключевые слова:** кристаллографический анализ, «скелетные» подрешетки, анионные и катионные подрешетки, псевдосимметрия, симметрия – стабильность



Романенко Г.В., Фокин С.В., Летягин Г.А., Богомяков А.С.,  
Овчаренко В.И.

1679



**Структура семихинолятов лантаноидов  
с азотсодержащими лигандами**

**Ключевые слова:** лантаноиды, *o*-семихиноляты,  
кристаллическая структура, магнитные свойства

Бурлов А.С., Власенко В.Г., Кошиченко Ю.В., Ураев А.И.,  
Коршунова Е.В., Милутка М.С., Гарновский Д.А.,  
Линько И.В., Хрусталев В.Н.

**Синтез и кристаллическая структура комплекса Ni(II)  
с (4Z)-4-[(2-диэтиламиноэтиламино)метилен]-5-метил-2-  
фенилпирацол-3-оном**

**Ключевые слова:** металлокомплексы, магнитные свойства,  
рентгеноструктурный анализ, спектроскопия ИК и ЯМР  $^1\text{H}$

Кокина Т.Е., Глинская Л.А., Пирязев Д.А., Васильев Е.С.,  
Шелудякова Л.А., Рахманова М.И., Ткачев А.В.

**Комплекс Zn(II) с хиральным нопинан-аннелированным  
9,9'-би-4,5-диазафлуоренилиденом:  
синтез, структура, свойства**

**Ключевые слова:** терпены, диазафлуоренилиден,  
комплекс Zn(II), структура, фотолюминесценция

Стабников П.А., Алферова Н.И., Корольков И.В.,  
Первушина Н.В., Трубин С.В., Бабайлов С.П.,  
Тургамбаева А.Е.

**Новые  $\gamma$ -замещенные  $\beta$ -дикетонаты Al(III),  
Fe(III) и Cu(II)**

**Ключевые слова:** замещенные  $\beta$ -дикетонаты металлов,  
кристаллическая структура, летучесть, MOCVD прекурсоры

Бардин В.А., Иванов А.А., Коновалов Д.И., Смоленцев А.И.,  
Шестопалов М.А.

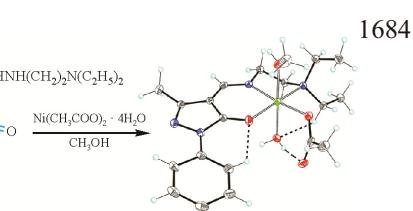
**Кристаллическая структура и люминесцентные  
свойства кластеров рения  $[\{\text{Re}_6(\mu_3-Q)_8\}(\text{imz-[1,2-a]py})_6]\text{Br}_2$**

**Ключевые слова:** рений, кристаллическая структура,  
октаэдрические халькогенидные кластеры,  
имидазо-[1,2-a]пиридин, люминесценция

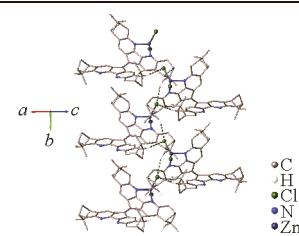
Литвинова Ю.М., Гайфулин Я.М., Самсоненко Д.Г.,  
Дороватовский П.В., Лазаренко В.А., Миронов Ю.В.

**Синтез и строение двух новых металл-органических  
каркасов на основе кластерных анионов  $[\text{Re}_6\text{Se}_8(\text{CN})_6]^{4-}$ ,  
катионов  $\text{Tb}^{3+}$  и изоникотинат-анионов**

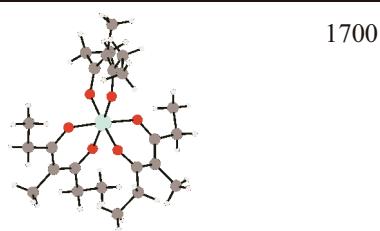
**Ключевые слова:** рений, кластер, лантаниды,  
кристаллическая структура, координационные полимеры



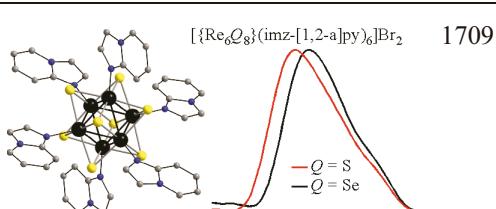
1684



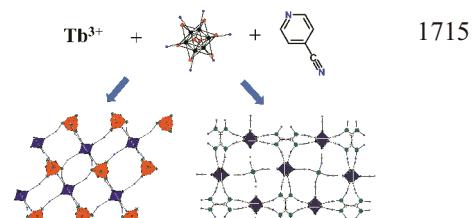
1690



1700



1709



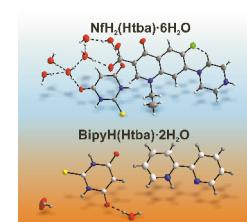
1715

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ  
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Головнев Н.Н., Молокеев М.С., Стерхова И.В.,  
Лесников М.К.

**Кристаллическая структура  
2-тиобарбитуратов норфлоксациниума  
и 2,2'-дипиридил-1'-иума**

**Ключевые слова:** 2-тиобарбитураты, норфлоксациния,  
2,2'-дипиридиния, синтез, структура, термическая устойчивость



1724

---

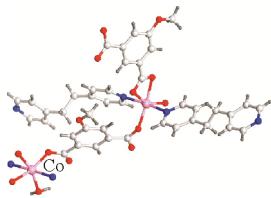
**СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ**

---

Wang W.-J., Wang X.-G., Hou B.-B.

1734

**Two Co(II)-based coordination polymers:  
Structural diversity and prevention activity  
on skin necrosis after fracture and internal fixation**  
**Keywords:** coordination polymer, ligand modification,  
cluster-based unit, skin necrosis



**Содержание следующего номера — в конце журнала**