

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ**  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 61

Май

№ 5, 2020

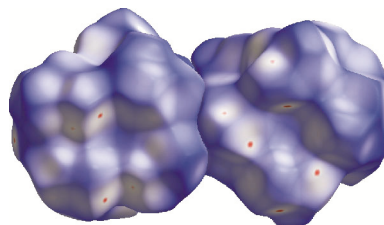
**СОДЕРЖАНИЕ**

**ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ**

Головнев И.Ф., Кучумов Б.М., Пирязев Д.А., Игуменов И.К.

**Гибридный метод расчета потенциалов  
межмолекулярного взаимодействия многоатомных  
молекул в газовой фазе**

**Ключевые слова:** потенциал межмолекулярного взаимодействия,  
потенциал Букингема, потенциал Леннарда-Джонса,  
метод Монте-Карло, метод молекулярной динамики,  
тетраakis-дипивалоилметанат гафния

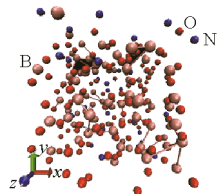


713

Юрьев А.А., Самойлова М.А.

**Расчеты натриево-боратных систем  $\text{Na}_2\text{O}-\text{B}_2\text{O}_3$   
методом квантовой молекулярной динамики**

**Ключевые слова:** натриево-боратные расплавы,  
квантовая молекулярная динамика, электронная структура,  
ближний порядок, функция радиального распределения атомов

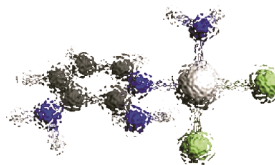


722

Alvarado-Soto L., Ramirez-Tagle R.

**Relativistic structure-activity relationship  
of cisplatin(II) complexes**

**Keywords:** relativistic, DFT, structure-activity relationship,  
cisplatin(II) complexes



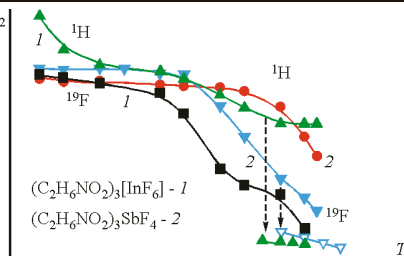
729

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Кавун В.Я., Земнухова Л.А., Удовенко А.А., Полянцев М.М.,  
Макаренко Н.В., Бровкина О.В.

**Термические свойства и ионная подвижность  
в комплексных фторидах  $(\text{C}_2\text{H}_6\text{NO}_2)\text{SbF}_4$   
и  $(\text{C}_2\text{H}_6\text{NO}_2)_3[\text{InF}_6]$**

**Ключевые слова:** фториды сурьмы(III) и индия(III), глицин,  
ионная подвижность, структура, спектры ЯМР



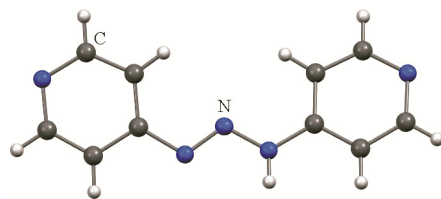
734

## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

### 1,3-Ди(4-пиридил)триазен – новый лиганд для синтеза координационных полимеров

**Ключевые слова:** 4,4'-(триаз-1-ен-1,3-диил)дипиридин, координационный полимер, гексафторацетилацетонат, медь

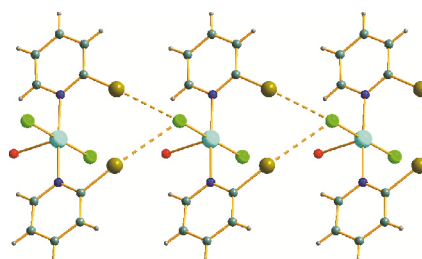


748

Адонин С.А., Новиков А.С., Смирнова Ю.К., Тушакова З.Р.,  
Федин В.П.

### Гетеролигандные комплексы Cu(II) с 2-галогенопиридинами: кристаллическая структура и особенности контактов галоген...галоген в твердом теле

**Ключевые слова:** медь, галогенная связь, галогенидные комплексы, нековалентные взаимодействия, квантово-химические расчеты

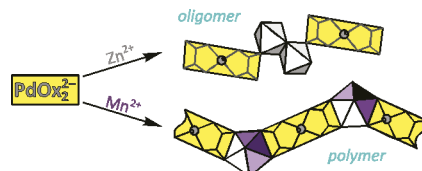


753

Гаркуль И.А., Задесенец А.В., Корольков И.В.,  
Байдина И.А., Корнев С.В.

### Вторичная координация в структурах оксалатопалладатов(II) цинка(II) и марганца(II)

**Ключевые слова:** палладий, цинк, марганец, оксалаток комплексы, рентгеноструктурный анализ

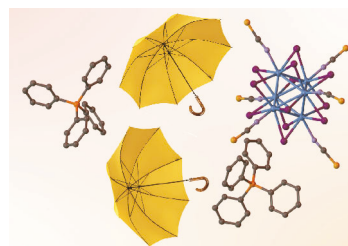


760

Шамшурин М.В., Сухих Т.С., Михайлов М.А., Шевень Д.Г.,  
Соколов М.Н.

### Координация тиоцианата к кластеру {Ta<sub>6</sub>I<sub>12</sub>}<sup>2+</sup>. Получение и кристаллическая структура [K(дибензо-24-краун-8)(CH<sub>3</sub>COCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>](Ph<sub>4</sub>P)<sub>2</sub> [Ta<sub>6</sub>I<sub>12</sub>(NCS)<sub>6</sub>]

**Ключевые слова:** кластеры, иодиды, тантал, краун-эфиры, рентгеноструктурный анализ, изотиоцианатный комплекс {Ta<sub>6</sub>I<sub>12</sub>}<sup>2+</sup>

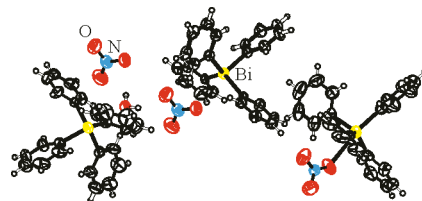


768

Шарутин В.В., Шарутина О.К., Сенчурин В.С.

### Исследование кристаллических структур гидросульфата тетрафенилвисмута, 2,4-динитробензолсульфоната тетрафенилвисмута и аддукта нитрата тетрафенилвисмута с водой

**Ключевые слова:** гидросульфат тетрафенилвисмута, 2,4-динитробензолсульфонат тетрафенилвисмута, аддукт нитрата тетрафенилвисмута с водой, кристаллическая структура

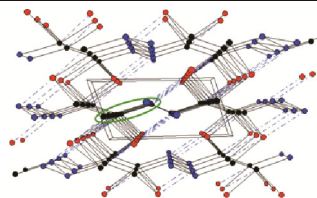


776

Гридин Д.М., Банару А.М.

### Координационные числа и критическая топология углеводов C Z'' = 2

**Ключевые слова:** кристаллографическая сеть, молекулярное координационное число, структурный класс, энергия межмолекулярного взаимодействия

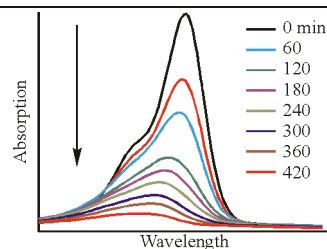


784

Yuan Y.C., Liu S.N., Xu X.J.

**A two-dimensional framework based on 1,3-bis(2-methyl-imidazol-1-yl)-benzene exhibiting luminescent and photocatalytic properties**

**Keywords:** two-dimensional framework, 1,3-bis(2-methyl-imidazol-1-yl)benzene, 4,4'-oxybis(benzoic acid), luminescence, photocatalytic activity

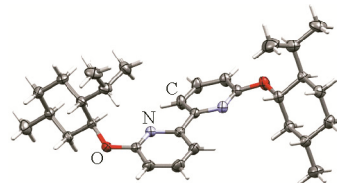


799

De Carvalho A.B., Diogo G.M., Correa R.S., Taylor J.G.

**Synthesis and molecular structure of a chiral bipyridine-menthol ether**

**Keywords:** menthol, bipyridine, ligand, metal, crystal structure, synthesis



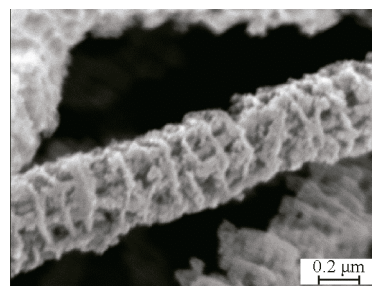
805

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ  
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Мишаков И.В., Кутаев Н.В., Бауман Ю.И., Шубин Ю.В.,  
Коскин А.П., Серкова А.Н., Ведягин А.А.

**Механохимический синтез, структура и каталитическая активность сплавов Ni–Cu, Ni–Fe и Ni–Mo в процессе получения углеродных нановолокон при разложении хлоруглеводородов**

**Ключевые слова:** углеродные нановолокна, сплавы никеля, механохимическое сплавление, 1,2-дихлорэтан, углеродная эрозия, сегментированные нити



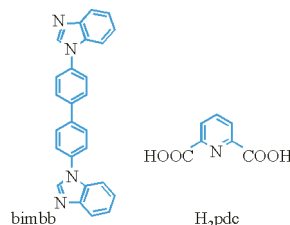
811

**СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ**

Guo W., Zhang F., Yang S., Rao B., Wang Y., Li X., Li S.

**Two coordination polymers containing 4,4'-di(1H-benzo[d]imidazol-1-yl)biphenyl ligand: Crystal structures and anticancer activity on human multiple myeloma cells**

**Keywords:** coordination polymer, mixed-ligand, MTT assay, multiple myeloma

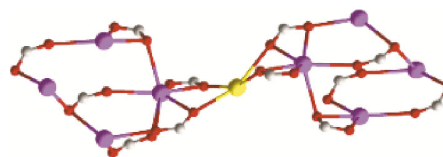


822

Li D., Li L.-F., Zhang Z.-F., Yan J., Li S.-Z.

**Coordination polymers constructed from the 3,3',5,5' biphenyltetracarboxylic acid ligand and their application for anti-lung cancer reagents**

**Keywords:** coordination compounds, 3,3',5,5' biphenyltetracarboxylic acid, CCK-8 assay, LDH release assay

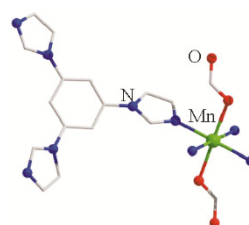


831

Zhang Y., Zhou L., Yao Y., Liu Y., Zhao F., Wu H., Gu Z.

**Structural characterization of a Mn(II)-based coordination polymer and application of its nanoparticles for the protective effect in peri-implantitis therapy by enhancing immune cell response**

**Keywords:** coordination polymer, Mn complex, nanoparticles, peri-implantitis



839