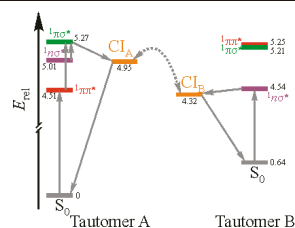


СОДЕРЖАНИЕ

Delchev V.B., Shterev I.G.

**Crystal structure and photochemistry  
of 5-azacytosine:  
Experimental and theoretical study**

**Keywords:** conical intersections, crystal structure,  
excited states, Rietveld refinement, TD DFT calculations,  
UV spectra

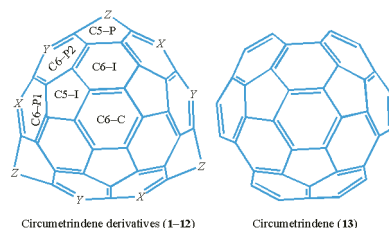


255

Kazemi S., Zabarjad Shiraz N., Samadizadeh M.,  
Ezabadi A.

**Evaluation of the structure and characteristics  
of circumtrindene derivatives:  
A DFT study**

**Keywords:** DFT calculation, Circumtrindene, NBO,  
UV spectra, NICS, HOMHED



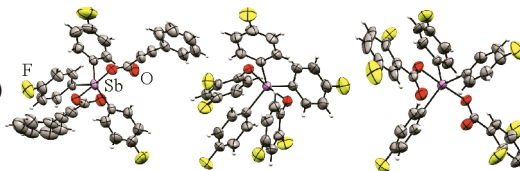
no	X	Y	Z
1	CH	CH	CH <sub>3</sub>
2	CH	CH	NH
3	CH	CH	O
4	CH	CH	S
5	N	N	CH <sub>3</sub>
6	N	N	NH
7	N	N	O
8	N	N	S
9	CH	N	CH <sub>3</sub>
10	CH	N	NH
11	CH	N	O
12	CH	N	S
13	CH	CH	-

258

Ефремов А.Н., Шарутин В.В., Шарутина О.К.

**Синтез и строение производных  
трис(4-фторфенил)сурьмы (4-FC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>)<sub>3</sub>SbX<sub>2</sub>  
(X = OC<sub>6</sub>H<sub>3</sub>F<sub>2</sub>-2,4, OC(O)C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>F<sub>2</sub>-2,5, OC(O)C≡CPh)**

**Ключевые слова:** трис(4-фторфенил)сурьма,  
2,4-дифторфенол, 2,5-дифторбензойная,  
фенилпропионовая, кислота, бис(арилоксид),  
дикарбоксилат, реакция окислительного присоединения,  
молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ

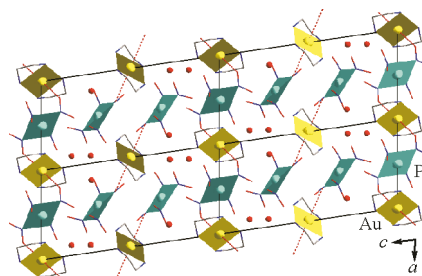


261

Плюсин П.Е., Шубин Ю.В., Корнев С.В.

**Синтез, структура и термические свойства  
двойных комплексных солей –  
предшественников наносплавов  
несмешивающихся металлов**

**Ключевые слова:** двойные комплексные соли,  
наносплавы, несмешивающиеся металлы,  
термический анализ, рентгеноструктурный анализ,  
рентгенофазовый анализ



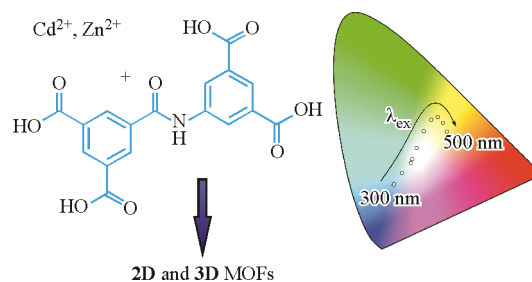
271

Андрейченко А.А., Бурлак П.В., Коваленко К.А.,  
Самсоненко Д.Г., Федин В.П.

298

**Металл-органические координационные полимеры цинка(II) и кадмия(II) на основе амидофункционализированного тетракарбоксилатного лиганда: синтез, кристаллическая структура и люминесцентные свойства**

**Ключевые слова:** координационные полимеры, поликарбоновые кислоты, рентгеноструктурный анализ, цинк(II), кадмий(II), люминесцентные свойства

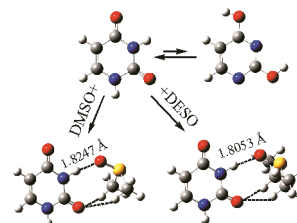


Zatikyan A.L., Markarian Sh.A.

308

**FTIR ATR spectral and theoretical based vibrational studies of uracil in dimethylsulfoxide or diethylsulfoxide solutions**

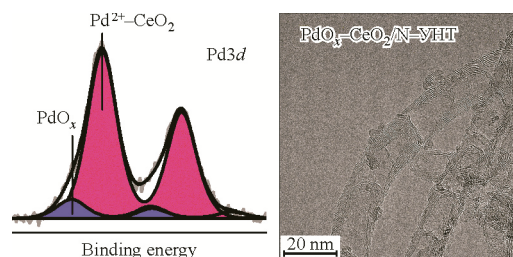
**Keywords:** uracil, dimethylsulfoxide, diethylsulfoxide, ab initio and DFT studies, solvent effect, intermolecular interaction



Кибис Л.С., Коробова А.Н., Федорова Е.А.,  
Кардаш Т.Ю., Задесенец А.В., Корнев С.В.,  
Стонкус О.А., Славинская Е.М., Подъячева О.Ю.,  
Боронин А.И.

**Применение азотсодержащих углеродных нанотрубок для получения высокодисперсных PdO–CeO<sub>2</sub> композитных катализаторов**

**Ключевые слова:** азотсодержащие углеродные нанотрубки, палладий, оксид церия, наночастицы, кластеры, низкотемпературное окисление CO

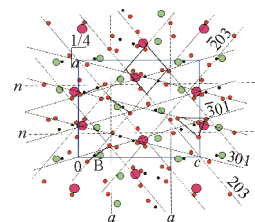


311

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

**Доминирующая роль тяжелых катионов в кристаллодинамике ряда ортоборатов**

**Ключевые слова:** кристаллографический анализ, Lu<sub>5</sub>Ba<sub>6</sub>B<sub>9</sub>O<sub>27</sub>, Sr<sub>3</sub>Bi<sub>2</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, симметрия – стабильность, анионные и катионные подрешетки, кристаллодинамика образования

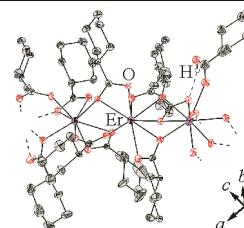


328

Гребенюк Д.И., Цымбаренко Д.М.

**Синтез и кристаллическая структура полимерного циклогексанкарбоксилата эрбия с необычным строением полимерной цепи**

**Ключевые слова:** кристаллическая структура, комплексы лантанидов, координационные полимеры, алифатические карбоксилаты, термическое поведение



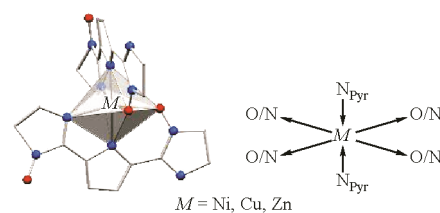
338

Романенко Г.В., Фокин С.В., Богомяков А.С.,  
Зуева Е.М., Овчаренко В.И.

347

**Сжатый октаэдр – окружение металла в комплексах с пирролизамещенными нитроксильными бирадикалами**

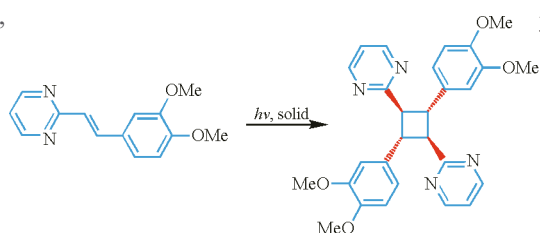
**Ключевые слова:** никель, медь, цинк, комплексы, нитроксилы, бирадикалы, пиррол, рентгеноструктурный анализ, квантово-химические расчеты, магнетохимия



Карноухова В.А., Сайфутярова А.Э., Федорова О.А., Вологжанина А.В.

**[2+2]-Фотоциклоприсоединение  
(*E*)-2-(3,4-диметоксистирил)пиримидина  
и его солей в кристаллах**

**Ключевые слова:** диазины, стириловые производные, димеризация, [2+2]-фотоциклоприсоединение, кристаллическая структура



357

Zhang X., Shang Y.-C.

**N-doped red emission carbon dots  
and detection of Fe<sup>3+</sup>**

**Keywords:** carbon dots, red emission, ion detection, Fe<sup>3+</sup>

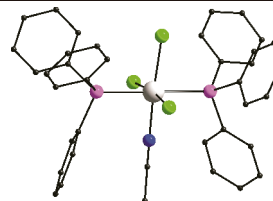


366

Петров П.А., Филиппова Е.А., Компаньков Н.Б., Сухих Т.С., Соколов М.Н.

**Новая полиморфная модификация комплекса  
[ReCl<sub>3</sub>(MeCN)(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] и продукты его окисления**

**Ключевые слова:** рений, фосфины, рентгеноструктурный анализ

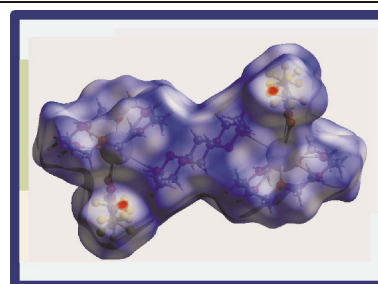


369

Кочелаков Д.В., Викулова Е.С., Куратьева Н.В., Громилов С.А.

**Синтез и строение двух островных комплексов  
гексафторацетилацетоната цезия  
с 18-краун-6 эфиром**

**Ключевые слова:** цезий, разнوليгандный комплекс, β-дикетонат, 18-краун-6 эфир, рентгеноструктурный анализ, поверхность Хиршфельда, трансляционная подрешетка

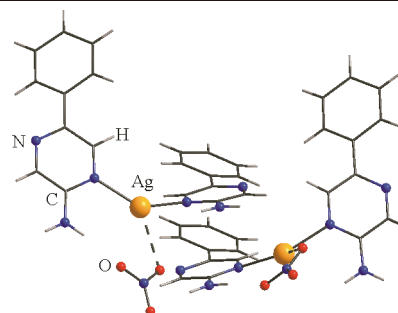


375

Малахова Ю.А., Сухих Т.С., Рахманова М.И., Виноградова К.А.

**Влияние полиморфизма  
на люминесцентные свойства  
комплексов нитрата серебра(I)  
с 2-амино-5-фенилпиразином**

**Ключевые слова:** координационные соединения, серебро, пиразин, рентгеноструктурный анализ, люминесцентный полиморфизм, фотолюминесценция, квантовый выход, время жизни



384

**Содержание следующего номера — в конце журнала**