

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

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. Кукарина

Сдано в набор 20.09.2022. Подписано к печати 15.11.2022. Бум. оф. №1 80 г/м²
Формат 60 × 84 1/8. Офсетная печать. Усл. печ. л. 18,38.
Уч.-изд. л. 19,53. Тираж 70 экз. Заказ № 170. 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.

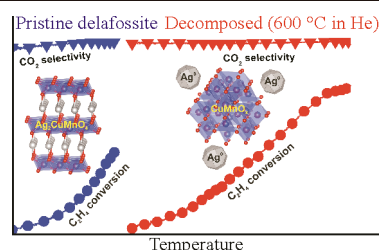
Оригинал-макет подготовлен в редакционно-издательском отделе ИНХ СО РАН
630090 Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева, 3
Отпечатано 24.11.2022 на полиграфическом участке ИНХ СО РАН
630090 Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева, 3

СОДЕРЖАНИЕ

Свиницкий Д.А., Соколов Н.А., Славинская Е.М.,
Федорова Е.А., Боронин А.И.

**Каталитические свойства тройного оксида
серебра, меди и марганца
в реакции окисления этилена**

Ключевые слова: делафоссит, серебро, медь, марганец,
окисление этилена, смешанный оксид, селективное
окисление

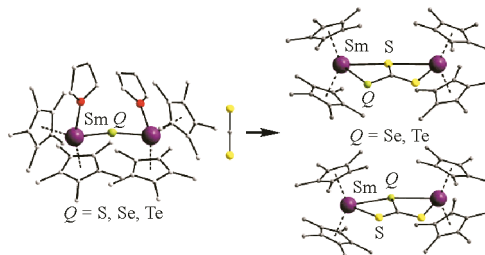


100518

Савков Б.Ю., Сухих Т.С., Конченко С.Н.

**Самароценхалькогениды $[\{\text{Cr}^*\text{Sm}(\text{THF})\}_2\text{Q}]$
(Q = S, Se, Te) – синтетические эквиваленты
синтона Q^{2-} в реакциях с CS_2**

Ключевые слова: координационные соединения,
f-элементы, самарий, сера, селен, теллур,
халькогенокарбонаты, синтез,
рентгеноструктурный анализ монокристаллов

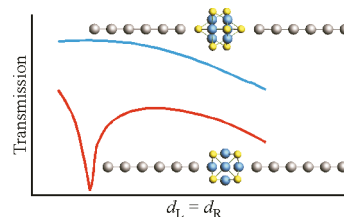


100561

Рыжиков М.Р., Козлова С.Г.

**Транспорт электронов через молекулу Mo_6S_8
в системе электрод-кластер-электрод:
влияние удаленности и ориентации кластера
по отношению к электродам**

Ключевые слова: Mo_6S_8 , электронный транспорт,
NEGF, теория функционала плотности

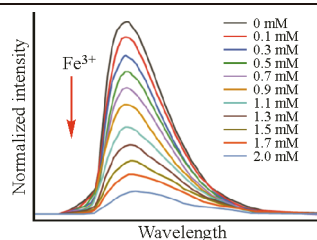


100779

Tang Y., Yao X.

**Synthesis of a new layered Zn(II) coordination
polymer via dual-ligand strategy:
Luminescence sensing for detection of Fe^{3+} ion**

Keywords: Zn(II) compound, 2D layer,
hydrothermal synthesis, luminescence,
supramolecular framework



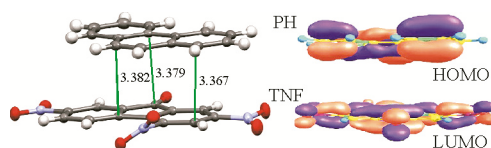
101100

Линко Р.В., Рябов М.А., Давыдов В.В.,
Хрусталеv В.Н.

101104

Квантово-химическое моделирование комплексов с переносом заряда 2,4,7-тринитро-9H-флуорен-9-она с нелинейными полициклическими ароматическими углеводородами. Кристаллическая и молекулярная структура комплекса (1:1) 2,4,7-тринитро-9H-флуорен-9-она с фенантреном

Ключевые слова: 2,4,7-тринитро-9H-флуорен-9-он, фенантрен, комплексы с переносом заряда, квантово-химическое моделирование, рентгеноструктурный анализ

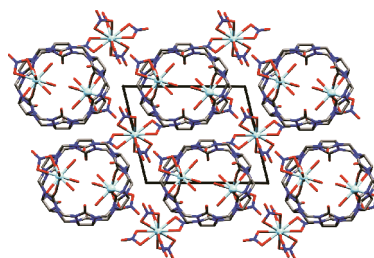


Коваленко Е.А., Андриенко И.В., Самсоненко Д.Г.,
Федин В.П.

101107

Синтез и кристаллическая структура одномерных координационных полимеров на основе комплексов лантаноидов и кукурбит[6]урила

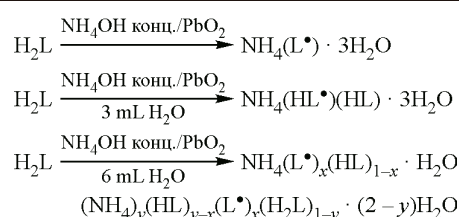
Ключевые слова: празеодим, гольмий, кукурбитурил, кристаллическая структура, рентгеноструктурный анализ



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

Структура парамагнитных аммонийных солей дифуразанопиразина

Ключевые слова: пиразин, аммоний, стабильный радикал, структура, магнитные свойства



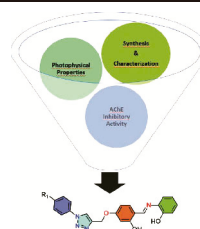
101265

Şahin İ.

101283

Synthesis and characterization of Schiff bases containing 1,2,3-triazole unit: Photophysical and acetyl choline (AChE) inhibitory properties

Keywords: 1,2,3-triazoles, Schiff bases, AChE, X-ray, spectroscopy

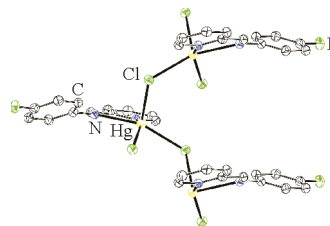


Aminian M., Khalaj M.

101498

Synthesis, spectral characterization, crystal structure and antibacterial activity of dichloro-{2-[(4-fluorophenyl)iminomethyl]pyridine-κ²N,N'}mercury(II)

Keywords: crystal Structure, Hg(II) complex, antibacterial activity, Schiff base ligand

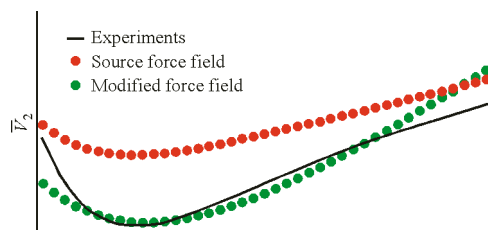


Ничипоренко В.А., Кадцын Е.Д., Медведев Н.Н.

101105

Простой способ модификации поля сил для молекулярно-динамического моделирования водно-спиртовых растворов

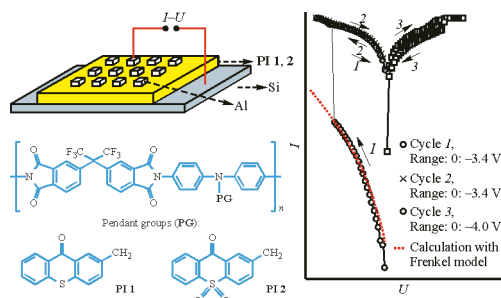
Ключевые слова: водные растворы спиртов, молекулярно-динамическое моделирование, параметризация поля сил, дипольный момент, кажущийся мольный объем, парциальный мольный объем



Одинцов Д.С., Шундрин И.К., Гисматулин А.А.,
Азаров И.А., Андреев Р.В., Гриценко В.А.,
Шундрин Л.А.

**Термостойкие полиимиды
с электроноакцепторными пendantsными
группами тиоксантенового ряда
для запоминающих устройств резистивного типа
с малым напряжением переключений**

Ключевые слова: амбиполярные полиимиды,
пendantsные группы, тиоксантеноны,
диэлектрические пленки, резистивная память,
сканирующая эллипсометрия, органическая электроника

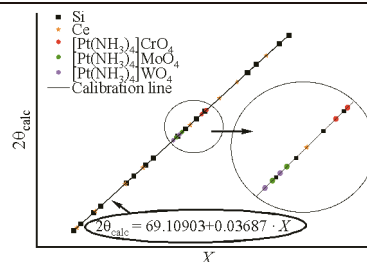


101782

Серебrenникова П.С., Громилов С.А.

**Калибровка экваториальной окружности
гониометра и уточнение параметров
элементарных ячеек
[Pt(NH₃)₄]MO₄ (M = Cr, Mo, W)**

Ключевые слова: рентгеновская дифрактометрия
монокристаллов, параметры элементарной ячейки,
точность

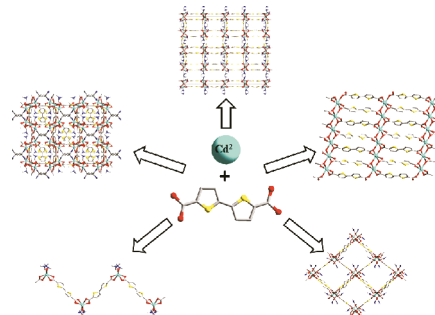


101790

Дубских В.А., Лысова А.А., Самсоненко Д.Г.,
Дороватовский П.В., Лазаренко В.А., Дыбцев Д.Н.,
Федин В.П.

**Разнообразие координационных полимеров
на основе кадмия(II)
и битиофендикарбоновой кислоты**

Ключевые слова: металл-органические
координационные полимеры,
2,2'-битиофен-5,5'-дикарбоновая кислота,
рентгеноструктурный анализ

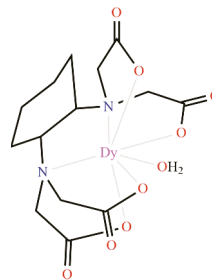


101883

Заполоцкий Е.Н., Бабайлов С.П., Фомин Э.С.

**Исследование строения и парамагнитных
свойств комплекса [Dy(H₂O)_n(CyDTA)]⁻
в водном растворе по данным ЯМР**

Ключевые слова: Ln(III),
транс-1,2-диаминоциклогексан-N,N,N',N'-тетрауксусная
кислота, парамагнитный ЯМР,
температурная зависимость химических сдвигов
в спектрах ЯМР

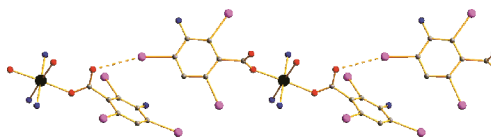


102000

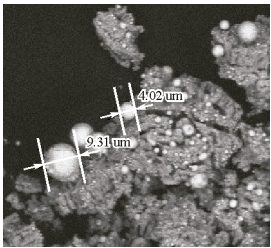
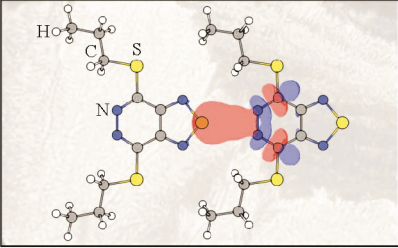
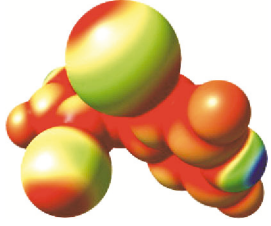
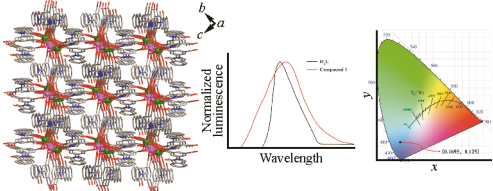
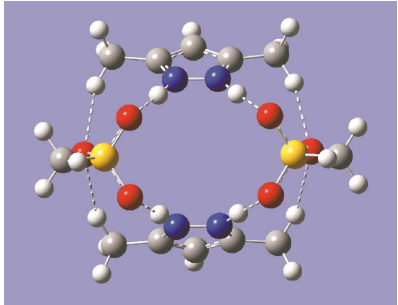
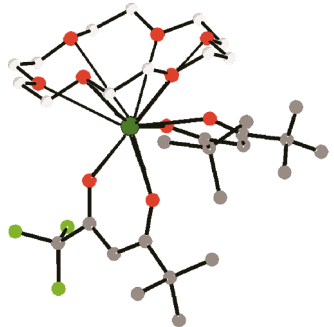
Жеребцов Д.А., Шарутин В.В., Полозов М.А.,
Найферт С.А., Раджакумар К., Адонин С.А.,
Осипов А.А., Луценко А.И.

**2,4,6-Триод-3-аминобензоатные комплексы
никеля: синтез, строение и особенности
нековалентных взаимодействий в твердом теле**

Ключевые слова: карбоксилатные комплексы,
координационная химия, нековалентные взаимодействия,
кристаллическая структура, никель



102097

<p>Серебренникова П.С., Громилов С.А.</p> <p>Изучение твердых растворов $[\text{Pd}(\text{NH}_3)_4](\text{MoO}_4)_x(\text{CrO}_4)_{1-x}$ и продуктов их термолита</p> <p>Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, рентгеновская дифрактометрия поликристаллов, параметры элементарной ячейки, точность, правило Вегарда, правило Зена</p>		102106
<p>Федоров М.С., Филиппов И.А., Гиричева Н.И., Сырбу С.А., Киселев М.Р.</p> <p>Роль нековалентных межмолекулярных взаимодействий в стабилизации мезофазы анизотропных производных 1,2,5-тиадиазола</p> <p>Ключевые слова: мезоморфизм, жидкие кристаллы, тиадиазол, квантово-химические расчеты, DFT, NBO-анализ, самоорганизация</p>		102145
<p>Новиков А.С., Сахапов И.Ф., Загузин А.С., Федин В.П., Адонин С.А.</p> <p>Галогенная связь в пористых материалах: рациональный выбор строительных блоков</p> <p>Ключевые слова: галогенная связь, карбоксилаты, бипиридины, квантово-химические расчеты, нековалентные взаимодействия</p>		102234
<p>Tang Y., Yao X.-Q.</p> <p>Synthesis, crystal structure, and luminescent property of a new heterometallic compound based on a large π-conjugated dicarboxylate ligand</p> <p>Keywords: heterometallic compound, solvothermal synthesis, carboxylate ligand, 3D framework, luminescence</p>		102260
<p>Майоров В.Д., Тараканова Е.Г., Кислина И.С.</p> <p>Механизм кислотно-основных взаимодействий и строение комплексов в растворах 3,5-диметилпиразола в метансульфоновой и трифторуксусной кислотах</p> <p>Ключевые слова: 3,5-диметилпиразол, метансульфоновая кислота, трифторуксусная кислота, кислотно-основные взаимодействия, водородная связь, Н-связанные комплексы, ИК спектроскопия, квантово-химические расчеты</p>		102285
<p>Бабайлов С.П., Стабников П.А., Заполоцкий Е.Н.</p> <p>^1H ЯМР исследование разнолигандных комплексов лантанидов: кинетика межмолекулярной динамики в комплексах дипивалоилметанатов празеодима с 18-краун-6</p> <p>Ключевые слова: ЯМР, кинетика обратимых процессов, температурная чувствительность парамагнитных химических сдвигов, β-дикетонаты лантаноидов, 18-краун-6, магнитрезонансные термосенсоры, парамагнитные лантаноидные ЯМР зонды локальной температуры</p>		102320

Содержание следующего номера — в конце журнала

© Сибирское отделение РАН, 2022
 © Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 2022
 © Новосибирский государственный университет, 2022