

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 62

Май

№ 5, 2021

## СОДЕРЖАНИЕ

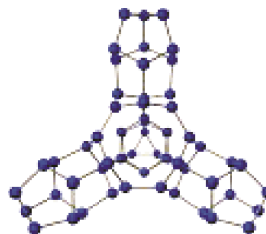
### ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Меринов В.Б.

711

**Азотные астралены:**  
теоретическое исследование структуры  
новых высокоэнергетических  
аллотропов азота

**Ключевые слова:** азот, каркасные молекулы,  
высокоэнергетические кристаллы, астралены,  
теория функционала плотности

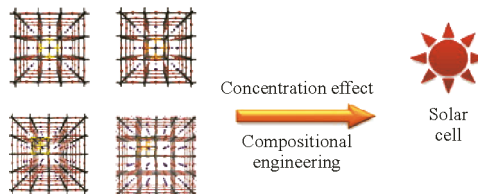


Su J., Zhang L., Qiang Y.

722

**A first-principles investigation  
of heterostructures consisting of halide perovskite  
CsPbI<sub>3</sub> and lead chalcogenide toward  
optoelectronic applications**

**Keywords:** halide perovskite, solar cell, lead chalcogenide,  
PbS, heterostructure, interface, first-principles calculation

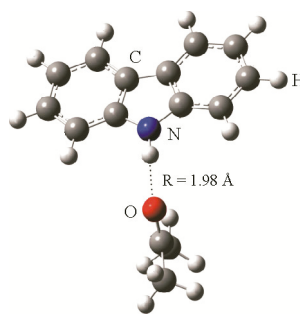


Муллоев Н.У., Файзиева М.Р., Ходиев М.Х.,  
Лаврик Н.Л.

729

**Изучение природы водородных связей  
Н-комплексов производных пиррола  
с ацетоном по данным ИК спектроскопии  
и квантово-химических расчетов**

**Ключевые слова:** природа Н-связи,  
кулоновская и ковалентная составляющие,  
Н-комплексы производных пиррола с ацетоном,  
ИК спектры, квантово-химические расчеты

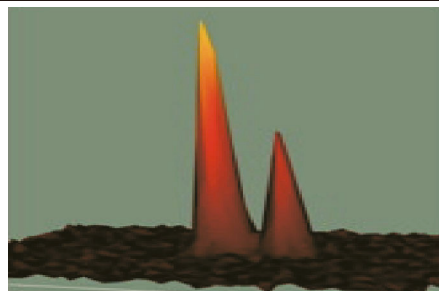


## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Серебренникова П.С., Комаров В.Ю., Сухих А.С., Громилов С.А.

**К вопросу о точности определения параметров элементарной ячейки монокристаллов на современных лабораторных дифрактометрах**

**Ключевые слова:** рентгеноструктурный анализ, рентгеновская дифрактометрия поликристаллов, параметры элементарной ячейки, точность



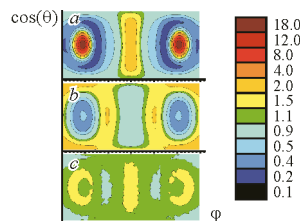
734

## СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Волошин В.П., Медведев Н.Н.

**Ориентация молекул воды вблизи глобулярного белка**

**Ключевые слова:** Молекулярно-динамическое моделирование, глобулярные белки, гидратная оболочка, ориентация молекул, поверхность раздела жидкостей



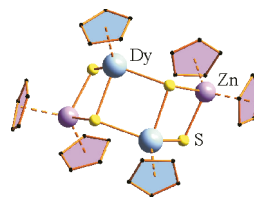
745

## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Конохова А.Ю., Афонин М.Ю., Сухих Т.С., Конченко С.Н.

**Первый пример диспрозий-циркониевого халькогенидного комплекса**

**Ключевые слова:** гетерометаллические комплексы, диспрозий, цирконий, сера, кристаллическая структура

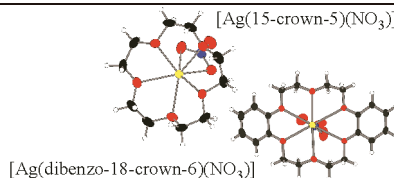


758

Чупина А.В., Абрамов П.А., Соколов М.Н.

**Комплексы AgNO<sub>3</sub> с 15-краун-5 и дибензо-18-краун-6**

**Ключевые слова:** серебро, 15-краун-5, дибензо-18-краун-6, кристаллическая структура

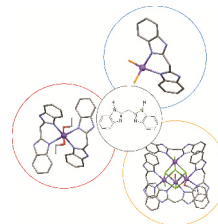


765

Смирнова К.С., Сухих Т.С., Адонин С.А., Ельцов И.В., Лидер Е.В.

**Структурные особенности комплексов кадмия(II) с бис(бензимидазол-2-ил)метаном**

**Ключевые слова:** кадмий, бензимидазол, мономерные комплексы, катионно-анионные соединения, кристаллическая структура

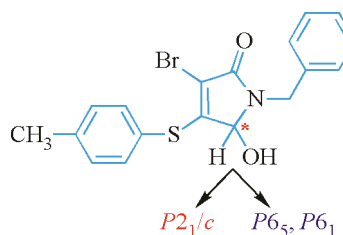


772

Герасимова Д.П., Сайфина А.Ф., Захарычев Д.В., Зарипова А.Р., Файзуллин Р.Р., Курбангалиева А.Р., Лодочникова О.А.

**Хирально-зависимое водородное связывание и энергетика диастереоморфных кристаллов 1-бензил-3-бром-5-гидрокси-4-[(4-метилфенил)-сульфанил]-1,5-дигидро-2H-пиррол-2-она**

**Ключевые слова:** диастереоморфизм, рацемический конгломерат, рацемическое соединение, водородная связь, кристаллическая структура, кристаллизация, фазовое поведение, 3-пирролин-2-оны



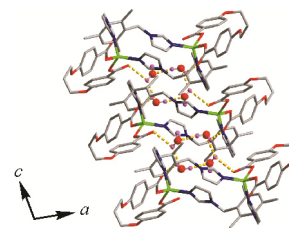
781

Liu Y., Li W., Yang Y.-Q., Chen M.-S., Fu W.-W.

795

**Two Zn(II) and Co(II) coordination polymers with 3-fold right-handed helical chains: Syntheses, structural characterization and photoluminescence property**

**Keywords:** crystal structure, helical chain, photoluminescence, hydrogen bonding

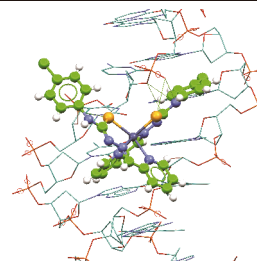


Saghatforoush L., Hosseinpour S., Moeini K., Mardani Z., Bezpalko M.W., Kassel W.S.

803

**Investigation on binding ability of a new thiosemicarbazone-based ligand and its Zn(II) complex toward proteins and DNA: Spectral, structural, theoretical and docking studies**

**Keywords:** zinc(II), thiosemicarbazone, docking study, protein, DNA



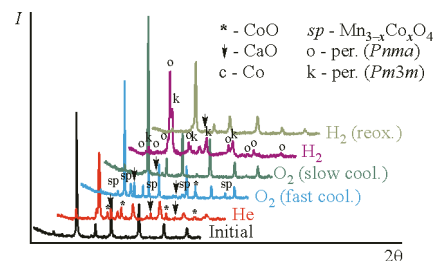
## СТРУКТУРА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Капишников А.В., Герасимов Е.Ю., Просвирин И.П., Николаева О.А., Исупова Л.А., Цыбуля С.В.

817

**Структурная стабильность перовскита  $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{O}_{3\pm\delta}$  в средах с различным парциальным давлением кислорода**

**Ключевые слова:** неорганические соединения, сложные оксиды, перовскиты, рентгеновская дифракция in situ, фазовые превращения

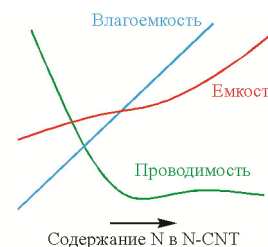
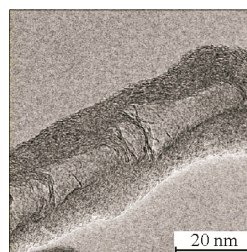


Подъячева О.Ю., Субоч А.Н., Яшник С.А., Сальников А.В., Черепанова С.В., Кибис Л.С., Сименюк Г.Ю., Романенко А.И., Исмагилов З.Р.

827

**Влияние структуры и состояния поверхности углеродных нанотрубок, допированных азотом, на их функциональные и каталитические свойства**

**Ключевые слова:** углеродные нанотрубки, допирование, азот, структура, дефекты, удельная емкость, катализаторы, окислительное обессеривание дибензотиофена



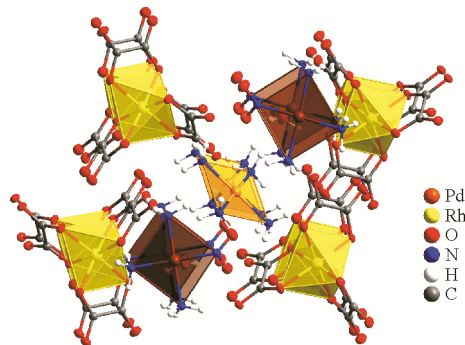
## СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Гладышева М.В., Плюснин П.Е., Воробьева С.Н., Комаров В.Ю., Ткачев С.В., Шубин Ю.В., Корнев С.В.

839

**Комплексная соль  $[\text{Pd}(\text{NH}_3)_4][\text{Pd}(\text{NH}_3)_3\text{NO}_2][\text{RhOx}_3]\cdot\text{H}_2\text{O}$  – перспективный предшественник наносплавов Pd–Rh. Кристаллическая структура  $\text{Na}_3[\text{RhOx}_3]\cdot 4\text{H}_2\text{O}$**

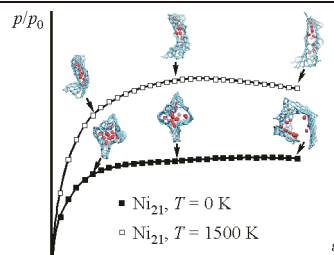
**Ключевые слова:** палладий, родий, комплексные соли, рентгеноструктурный анализ, термический анализ, наносплавы



Сафина Л.Р., Мурзаев Р.Т.

**Размер наночастиц металла  
как решающий фактор формирования композита  
никель-графен:  
молекулярная динамика**

**Ключевые слова:** скомканный графен, наночастицы Ni, композит никель-графен, гидростатическое сжатие, молекулярная динамика

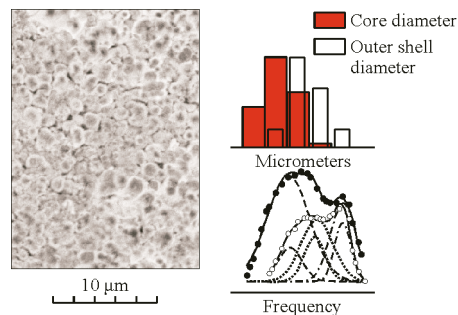


852

Кузовникова Л.А., Денисова Е.А., Немцев И.В.,  
Исхаков Р.С., Комогорцев С.В., Кузовников А.А.,  
Мальцев В.К., Шепета Н.А.

**Исследование наноструктурированных  
и аморфных объемных сплавов (Co-P)<sub>100-x</sub>Cu<sub>x</sub>  
магнитоструктурными методами**

**Ключевые слова:** композиционные материалы  
кобальт-медь, химическое осаждение,  
магнитные свойства, аморфные объемные сплавы,  
динамическое компактирование

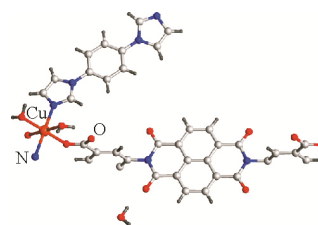


861

Fu G.-Q., Fang Y., Yao J.-J., Ren B., Zan X.-F.,  
Liu E.-L., Chen M.-J.

**Two mixed-ligand Cu(II) coordination polymers:  
Protective effect on sepsis by reducing excessive  
inflammatory response**

**Keywords:** coordination polymer, mixed-ligand, sepsis,  
bactericidal effect



870

Содержание следующего номера — в конце журнала