

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 61

Март

№ 3, 2020

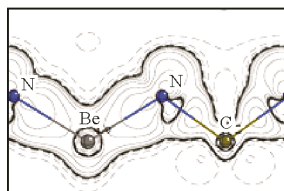
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Басалаев Ю.М., Басалаева О.Г., Сидорова А.В.

**Первопринципное моделирование
электронного строения кристаллов
 MCN_2 ($M = Be, Mg, Ca, Zn, Cd, Hg$)**

Ключевые слова: халькопирит, $BeCN_2$, $MgCN_2$, $CaCN_2$,
 $ZnCN_2$, $CdCN_2$, $HgCN_2$

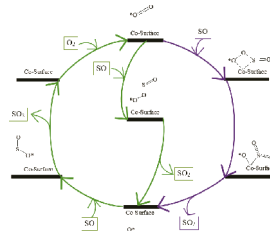


361

Ashraf M.A., Liu Z., Peng W.-X., Najafi M.

**CH_2 and SO oxidation on surfaces
of scandium-doped nanocages
and cobalt-doped nanocages:
A DFT investigation**

Keywords: DFT, oxidation, catalyst, mechanism,
nanocage, cobalt

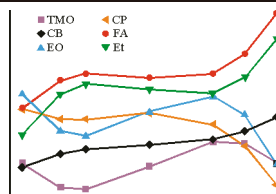


368

Ghafari H., Mohammadi-Manesh H.

**How does the guest–host hydrogen bonding affect
the thermal properties of clathrate hydrates?**

Keyword: lattice parameter, unit cell volume, thermal expansivity,
isothermal compressibility, specific heat capacity,
guest–host hydrogen bonding

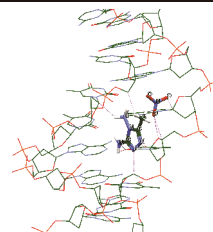


378

Hosseini S.G., Moeini K., Abdelbaky M.S.M.,
García-Granda S.

**Synthesis, characterization, crystal structure,
and thermal behavior of a new triazolium salt along
with docking studies**

Keywords: triazole, X-ray crystal structure, docking studies,
TGA, DSC, DFT



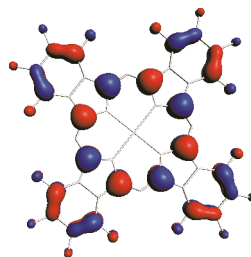
389

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Семущкина Г.И., Мазалов Л.Н., Лаврухина С.А.,
Гуляев Р.В., Клямер Д.Д., Басова Т.В.

**Экспериментальное и теоретическое исследование
электронной структуры фталоцианинов цинка
 $ZnPc$ и $ZnPcF_{16}$**

Ключевые слова: фталоцианины цинка,
рентгеновская эмиссионная спектроскопия,
фотоэлектронная спектроскопия, метод функционала плотности

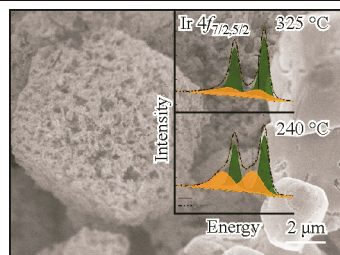


400

Асанова Т.И., Асанов И.П., Максимовский Е.А.,
Васильченко Д.Б., Корнев С.В.

**Исследование процесса термического разложения
(NH_4)₂[$IrCl_6$] методами рентгеновской фотоэлектронной
спектроскопии и электронной микроскопии**

Ключевые слова: гексахлороиридат аммония, РФЭС, РЭМ,
процесс формирования металлических частиц,
термическое разложение, комплексные соли

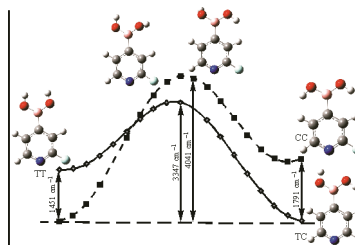


412

Soliman U.A.

**Computational studies, NMR and IR spectral analysis,
normal coordinate analysis, and thermodynamic properties
of 2-fluoro-4-pyridineboronic acid**

Keywords: 2-fluoro-4-pyridineboronic acid,
B3LYP calculations, infrared spectroscopy,
normal coordinate analysis,
thermodynamic properties, vibrational assignments



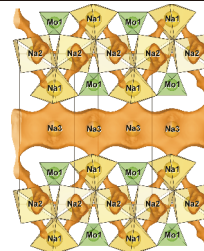
424

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Солодовников С.Ф., Савина А.А., Солодовникова З.А.,
Юдин В.Н., Кучумов Б.М., Хайкина Е.Г.

**Строение и нестехиометрия двойных молибдатов натрия
со скандием и индием типа аллюодита**

Ключевые слова: натрий, скандий, индий,
двойной молибдат, тип аллюодита, синтез, кристаллы,
нестехиометрия, структура, карты сумм валентных усилий,
ионная проводимость

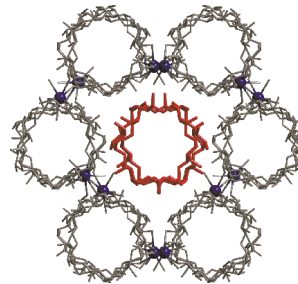


442

Кошевой Е.И., Самсоненко Д.Г., Дороватовский П.В.,
Лазаренко В.А., Федин В.П.

**Кристаллическая структура металл-органических
координационных полимеров на основе катионов калия
и бария с α -циклодекстрином**

Ключевые слова: α -циклодекстрин,
комплексы калия, комплексы бария,
металл-органический координационный полимер,
кристаллическая структура

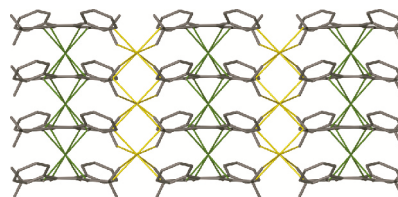


454

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

**Бензоилтрифторацетонаты калия и рубидия:
кристаллохимическое исследование
и термические свойства**

Ключевые слова: калий, рубидий, бензоилтрифторацетон,
рентгеноструктурный анализ, термический анализ



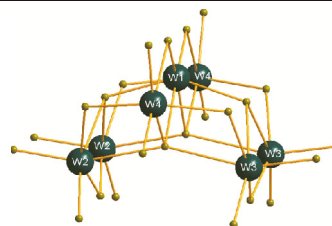
462

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

472

Комплексные соли с участием катионов $[\text{Pd}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ и анионов WO_4^{2-} и $\text{W}_7\text{O}_{24}^{6-}$ – предшественники металлических сплавов Pd–W

Ключевые слова: тетрааммин палладия, вольфрамат-анион, гептавольфрамат-анион, термическое разложение, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ

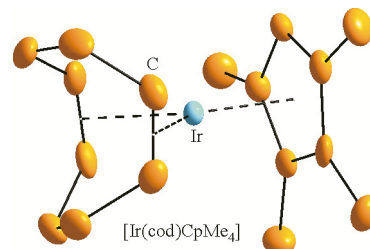


Бонегардт Д.В., Ильин И.Ю., Сухих Т.С., Ильина Е.В., Морозова Н.Б.

479

Кристаллическая структура и свойства (1,5-циклооктадиен)(η^5 -тетраметилциклопентадиенил)иридия(I) $[\text{Ir}(\text{cod})\text{Cp}^{\text{Me}_4}]$

Ключевые слова: иридий(I), 1,5-циклооктадиен, тетраметилциклопентадиен, рентгеноструктурный анализ, термогравиметрия, МOCVD прекурсор

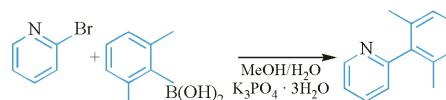


Adamson A., Budiman Y.P., Mkhali I., Muhammad R., Arshad M.N., Alhaddad M.R., Asiri A.M.

489

Palladium(II) complexes containing 2-phenylpyridine derivatives: Synthesis, molecular structures, and catalytic activity for Suzuki–Miyaura cross-coupling reactions

Keywords: phenylpyridine, Pd, Suzuki–Miyaura coupling

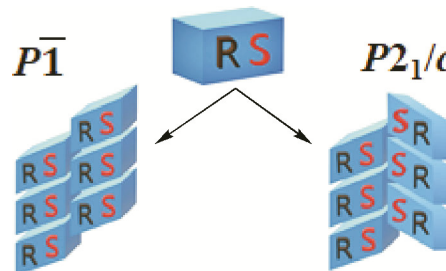


Герасимова Д.П., Сайфина А.Ф., Захарычев Д.В., Вандюкова И.И., Файзуллин Р.Р., Курбангалиева А.Р., Лодочникова О.А.

498

Упаковочный полиморфизм на примере 5-гидрокси-1-(4-метилбензил)-3-хлор-4-[(4-хлорфенил)сульфанил]-1,5-дигидро-2H-пиррол-2-она: кристаллографическое, термодинамическое и спектроскопическое исследование

Ключевые слова: упаковочный полиморфизм, конформация, рентгеноструктурный анализ, кристаллизация, фазовое поведение, пирролины, Cl...O взаимодействие



СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

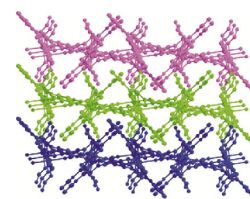
Wang Y., Yang Y., Ren Z., Yin S., Yang W.

511

A new Co-based coordination polymer with an N-tripodal ligand:

Synthesis, crystal structure, and inhibition of human osteosarcoma cells

Keywords: coordination polymer, Co(II)-based complex, N-donor ligand, osteosarcoma, CCK-8 assay

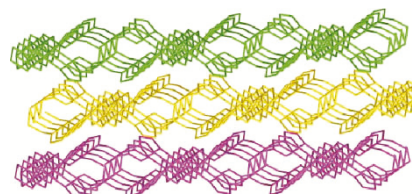


Huo W.-X., Liu X.-T., Zhang Z.-F., Zhao M., Zhang Q.-S.

518

A new Co(II)-containing coordination polymer constructed by the mixed-ligand approach: Crystal structure and alleviation of CVB3-induced myocarditis by inhibiting inflammatory cytokines production

Keywords: coordination polymer, Co-containing complex, mixed-ligand, myocarditis, histopathology



Содержание следующего номера — в конце журнала

© Сибирское отделение РАН, 2020
© Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 2020
© Новосибирский государственный университет, 2020