

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 61

Апрель

№ 4, 2020

СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Новосадов Б.К.

533

**Структура ЛКАО релятивистских волновых функций
электрона в поле многих кулоновских центров**

$$(D - EI_4)\psi(\mathbf{p}) = \frac{1}{2\pi^2\hbar} \int d\mathbf{p}' \frac{Ze^2}{(\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2} \psi(\mathbf{p}')$$

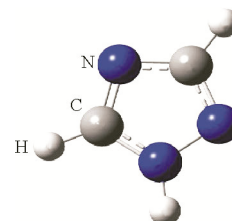
Ключевые слова: релятивистская квантовая механика,
теория МО ЛКАО, стационарные электронные состояния молекул

Абдулов Х.Ш., Муллоев Н.У., Табаров С.Х., Ходиев М.Х.

540

**Квантово-химическое определение молекулярной
структуры 1,2,4-триазола и расчет
его инфракрасного спектра**

Ключевые слова: квантово-химический метод,
молекулярная структура 1,2,4-триазола, ИК - спектр,
метод функционала плотности, комплекс программ Gaussian

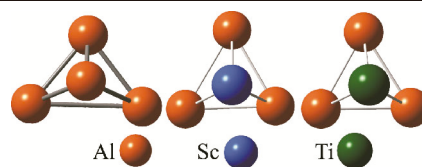


Saedi L., Alipour E., Alimohammady F., Dodangi M.

545

**Oxygen activation on the four-atom metal clusters
and alloys**

Keyword: O₂ activation, four-atom metal nanocluster, Al₄ alloy,
density functional theory



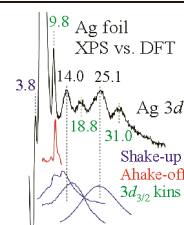
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Чолач А.Р., Асанов И.П., Брылякова А.А., Калинин А.В.,
Смирнов М.Ю.

553

**Особенности протяженных спектров РФЭС
интеркалата C₂FBr_{0.15} и серебряной фольги**

Ключевые слова: РФЭС, потери энергии,
валентная зона,
сопряженные электронные переходы

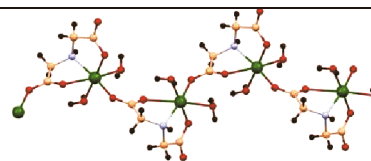


Ahmad M.S., Khalid M., Khan M.S., Shahid M., Ahmad M.

563

**Synthesis, characterization and catecholase mimic activity
of a new 1D Cu(II) polymer constructed from iminodiacetate**

Keyword: 1D polymer, crystal structure, catecholase activity

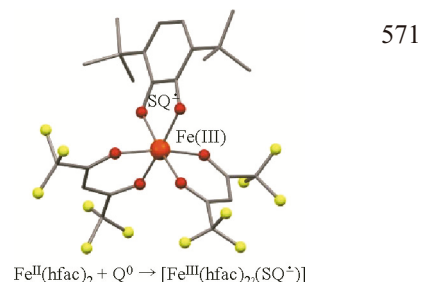


КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Фокин С.В., Фурсова Е.Ю., Летягин Г.А., Богомяков А.С., Морозов В.А., Романенко Г.В., Овчаренко В.И.

Структура и магнитные свойства разнолигандных комплексов гексафторацетилацетонатов 3d металлов с 3,5- и 3,6-ди-*трет*-бутил-*о*-бензохинонами

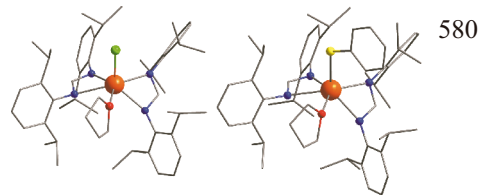
Ключевые слова: железо, марганец, кобальт, гексафторацетилацетонат, 3,6-ди-*трет*-бутил-*о*-бензохинон, 3,5-ди-*трет*-бутил-*о*-бензохинон, рентгеноструктурный анализ, квантово-химические расчеты, магнетохимия



Баширов Д.А., Колыбалов Д.С., Сухих Т.С., Конченко С.Н.

Синтез и строение гетеролептических бис-формамидинатных комплексов Tm

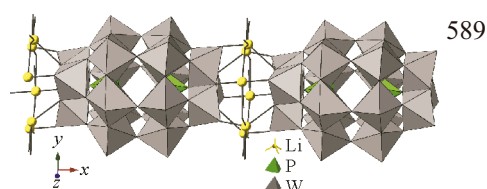
Ключевые слова: координационные соединения, лантаноиды, туллий, амидинаты, формамидинаты, синтез, кристаллическая структура



AlDamen M.A., Sinnokrot M.O., Atta S.B., Al Qawasmeh R.A., Gómez-García C.J.

Crystal structure and magnetic properties of a new wells-dawson $[\beta\text{-P}_2\text{CoW}_{17}\text{O}_{62}]^{10-}$ polyoxoanion

Keywords: Wells-Dawson, cobalt(II), polyoxometalate, magnetism, crystal structure

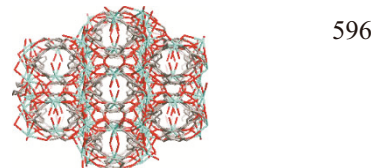


СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Han L., Li X., Yan B., Han X., Wang C., Yang W., Liu X.

Crystal structure and evaluation of anti-gastric cancer activity of a new Sr(II)-based coordination polymer

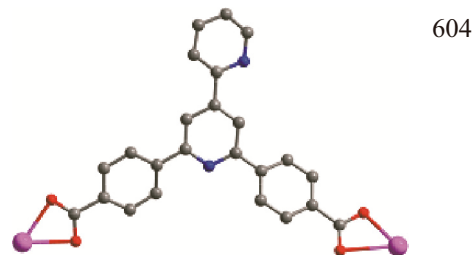
Keywords: coordination polymer, Sr(II) complex, nanostructure, anticancer activity



Ren H.-Y., Fu L., Li Y.

A new coordination polymer based on two dual-functional ligands: Structural insights and treatment effect against inflammatory metrorrhagia by inhibiting NF- κ B activation and IL-1 β release

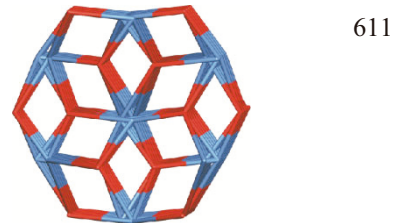
Keywords: mixed-ligand, hydrothermal reaction, nanoparticles, anti-inflammatory



Liu D.-X., Chen G., Guo H.-L., Chen D.-M., Li S.-H., Zhang W.-X.

Synthesis, crystal structure and anticancer activity of a In(III) coordination polymer based on a flexible ligand 5-(4-carboxybenzyl)isophthalic acid

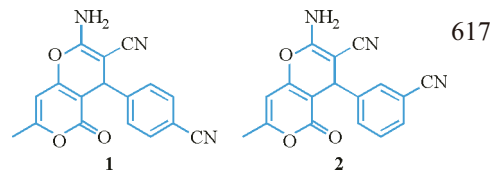
Keywords: coordination polymer, In(III) complex, nanostructure, anticancer activity



Li D., Wang H.-Y., Chen W.-H., Guo Q.

Two novel pyran derivatives: Crystal structures, anti-liver cancer activity and docking study

Keywords: pyran derivatives, anticancer activity, molecular docking

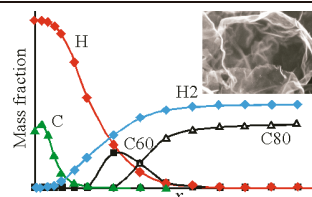


**МАТЕРИАЛЫ ТРЕТЬЕЙ РОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
«ГРАФЕН: МОЛЕКУЛА И 2D КРИСТАЛЛ»,
5–9 августа 2019 г., Новосибирск**

Шавелкина М.Б., Иванов П.П., Амиров Р.Х., Бочаров А.Н.

Влияние профиля температур на состав конденсированного углерода в плазменной струе

Ключевые слова: графен, плазмохимический синтез, термическая струя плазмы, квазиодномерная газодинамика, термодинамическое моделирование



623

Алексеев Н.И., Багрец В.В., Бройко А.П., Корляков А. В., Калёнов В.Е., Лучинин В.В., Севостьянов Е.Н., Тестов Д.О., Хмельницкий И.К.

Ионные полимерные электроактивные актюаторы на основе ионообменной мембраны МФ-4СК.

Часть 1. Ионные полимер-металлические композиты

Ключевые слова: актюаторы, ионные полимер-металлические композиты, электроактивные полимеры, МЭМС, МФ-4СК, Nafion (Нафлон)



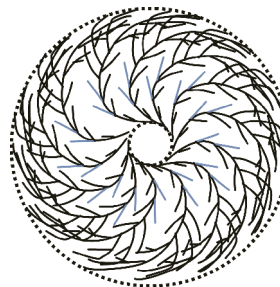
631

Алексеев Н.И., Багрец В.С., Бройко А.П., Корляков А.В., Лучинин В.В., Калёнов В.Е., Севостьянов Е.Н., Хмельницкий И.К.

Ионные полимерные электроактивные актюаторы на основе ионообменной мембраны МФ-4СК.

Часть 2. Ионные полимер-графеновые композиты

Ключевые слова: актюаторы, ионные полимер-металлические композиты, электроактивные полимеры, МЭМС, МФ-4СК, Nafion, графеновые электроды

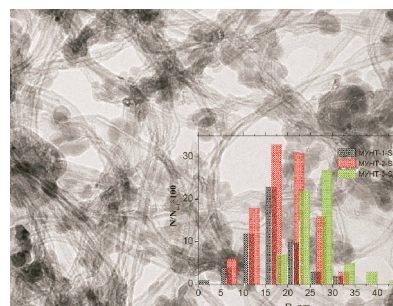


639

Заворин А.В., Кузнецов В.Л., Мосеенков С.И., Цог-Очир Цэндсурэн, Володин В.А., Галкин П.С., Ищенко А.В.

Газофазное химическое осаждение наноразмерных частиц кремния на поверхности многослойных углеродных нанотрубок

Ключевые слова: наноразмерный кремний, многослойные углеродные нанотрубки, газофазное химическое осаждение, псевдооживленный слой, аноды литий-ионных аккумуляторов

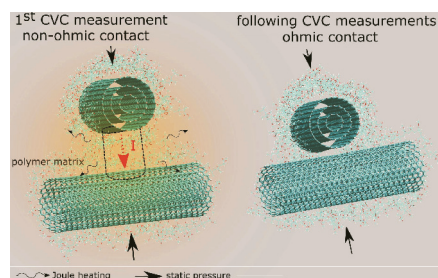


648

Мосеенков С.И., Заворин А.В., Ищенко А.В., Серкова А.Н., Селютин А.Г., Кузнецов В.Л.

Использование вольт-амперных характеристик для контроля структуры контактов в композитах на основе полиэтилена, модифицированных многослойными углеродными нанотрубками

Ключевые слова: многослойные углеродные нанотрубки, композиты, механическое смешение в расплаве, контакты между нанотрубками, вольт-амперные характеристики, перколяция



659