

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 61

Январь

№ 1, 2020

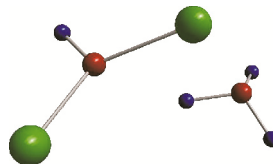
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Кравченко Н.Г., Кайзер Е.Б., Поплавной А.С.

Ab initio исследование механизма химической реакции
разложения амида лития

Ключевые слова: амид лития, термодинамические потенциалы,
энергия активации, модель реакции

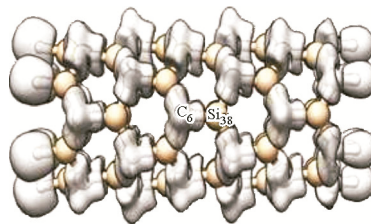


5

Roohi H., Shirbina S., Maleki L.

**Axial strain tuning of the electronic
and structural properties of a (6,0) silicon
carbide nanotube containing an ionic Si—C bond:
A quantum chemical approach**

Keywords: SiCNT, axial strain, electronic and structural properties,
M05-2X



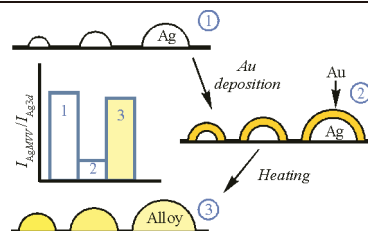
12

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Смирнов М.Ю., Калинин А.В., Бухтияров В.И.

**Исследование методом РФЭС пространственного
распределения металлов в биметаллических Au–Ag
частицах с учетом распределения частиц по размерам**

Ключевые слова: серебро, золото,
биметаллические частицы, структура ядро–оболочка,
рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия



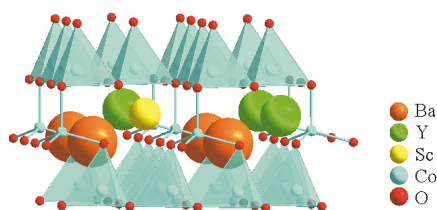
24

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Каменева М.Ю., Козеева Л.П., Лавров А.Н., Комаров В.Ю.,
Подберезская Н.В., Кучумов Б.М., Рудина Н.А.

**Получение и исследование соединений
с типом структуры 114 в системе Y–Sc–Ba–Co–O**

Ключевые слова: кобальтаты, катионные замещения, Sc,
фазообразование, керамики, монокристаллы,
кристаллическая структура

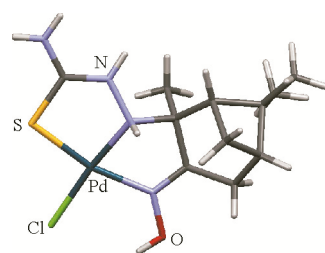


33

Кокина Т.Е., Комаров В.Ю., Глинская Л.А., Бизяев С.Н., Шелудякова Л.А., Еремина Ю.А., Ключова Л.С., Ткачев А.В.

Синтез, строение и цитотоксичность комплексов Pd(II) и Cu(II) с 1-терпенил-3-тиосемикарбазидами пинанового и *n*-ментанового рядов

Ключевые слова: тиосемикарбазида, терпены, комплексы, медь, палладий, структура, цитотоксичность



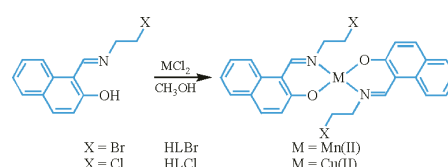
48

Tahmasebi V., Grivani G., Eigner V., Dusek M., Khalaji A.D.

New Mn(II) and Cu(II) complexes of naphthalaldimine Schiff base ligands:

Synthesis, characterization, and crystal structures

Keywords: Schiff bases, Mn(II), Cu(II), complex, crystal structure, square planar geometry

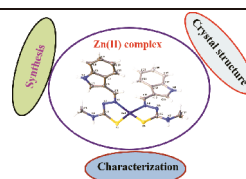


62

Haribabu J., Priyarega S., Bhuvanesh N.S.P., Karvembu R.

Synthesis and molecular structure of zinc(II) complex bearing an N, S donor ligand

Keywords: zinc(II) complex, thiosemicarbazone, molecular structure, distorted tetrahedral geometry

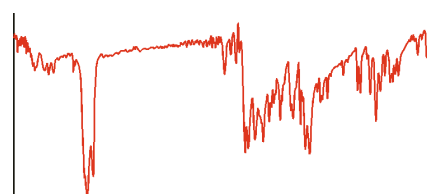


71

Турсунов М.А., Умаров Б.Б., Эргашов М.Я., Аvezов К.Г.

Синтез и кристаллическая структура комплекса никеля(II) с ароилгидразоном этилового эфира 5,5-диметил-2,4-диоксогексановой кислоты

Ключевые слова: ароилгидразон, этиловый эфир 5,5-диметил-2,4-диоксогексановой кислоты, кристаллическая структура

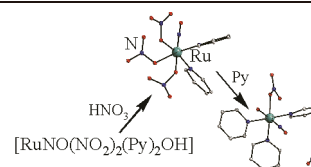


78

Костин Г.А., Никифоров Я.А., Куратьева Н.В.

Синтез и строение нитрозокомплексов рутения с нитрат-анионами и пиридином в качестве лигандов

Ключевые слова: рутений, нитрозокомплексы, нитратокомплексы, пиридин, PCA

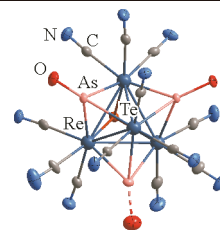


91

Пронин А.С., Смоленцев А.И., Миронов Ю.В.

Синтез и строение тетраэдрического комплекса рения со смешанно-лигандным кластерным ядром {Re₄As_{0.75}(AsO)_{2.25}Te}⁵⁺

Ключевые слова: рений, мышьяк, теллур, смешанно-лигандные комплексы, кластерные комплексы, кристаллическая структура

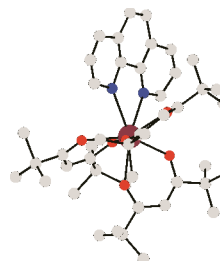


100

Стабников П.А., Уркасым кызы С., Трубин С.В., Первухина Н.В., Корольков И.В., Березин А.С., Морозова Н.Б.

Структура, летучесть и люминисценция аддуктов фенантролина с трис-дипивалоилметанатами лантаноидов

Ключевые слова: Ln(III) β-дикетонаты, фенантролин, кристаллическая структура, люминесценция, летучесть

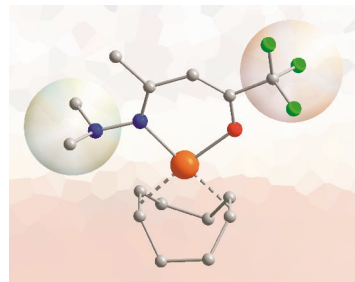


106

Караковская К.И., Викулова Е.С., Сухих Т.С., Ильин И.Ю., Морозова Н.Б.

Строение и термические свойства летучих комплексов иридия(І) с циклооктадиеном-1,5 и β-кетогидразонатными лигандами

Ключевые слова: иридий(І), β-кетогидразонат, летучий прекурсор, рентгеноструктурный анализ, термический анализ

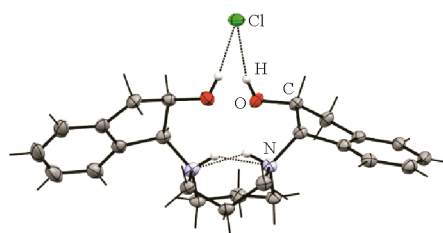


115

Лодочникова О.А., Чулакова Д.Р., Герасимова Д.П., Литвинов И.А., Прадипта А.Р., Танака К., Курбангалиева А.Р.

Стереохимические особенности кристаллизации восьмичленных 1,5-диазагетероциклов с хиральными амининданольными фрагментами при атомах азота

Ключевые слова: 1,5-диазациклооктаны, N-гетероциклы, конформации, стереохимия, рентгеноструктурный анализ, кристаллическая структура, хиральные кристаллы, кристаллизация

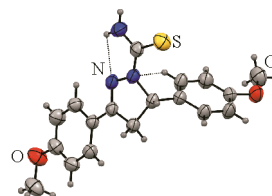


125

Kanmazalp S.D., Dege N., İlhan I.O., Akin N.

Crystal structure and hirshfeld surface analysis of 3,5-bis(4-methoxyphenyl)-4,5-dihydro-1H-pyrazole-1-carbothioamide

Keywords: crystal structure, Hirshfeld surface, pyrazoline, carbothioamide



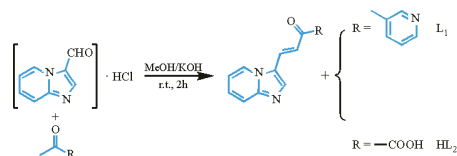
132

СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Li Y.-H., Gai L.-X., Zhang C.-G., Zhang C.-C., Liu X.-J., Hou B., Wu X.

Effects of substituent groups on the crystal structures and anti-cervical cancer activity of zero-/two-dimensional Cu(II) complexes

Keywords: coordination complexes, Cu(II) chelating, imidazo[1,2-a]pyridine ligand, anticancer activity

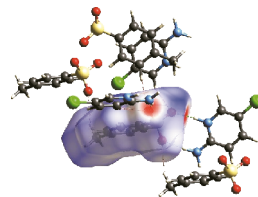


139

Jagan R., Boopathi K.

Hydrogen bonded supramolecular framework, Hirshfeld surface analysis and interaction energy studies on 2-amino-5-chloropyridinium P-toluenesulfonate

Keywords: crystal structure, supramolecular network, motif, Hirshfeld, interaction energy

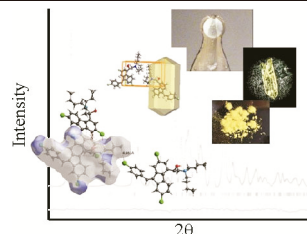


147

De Freitas-Marques M.B., Yoshida M.I., Fernandes C., Rodrigues B.L., Mussel W.N.

Lumefantrine comparative study: Single crystal, powder X-ray diffraction, hirshfeld surface and thermal analysis

Keywords: lumefantrine, single crystal, thermal analysis, Hirshfeld surface analysis



157

Содержание следующего номера — в конце журнала

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