

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 62

Январь

№ 1, 2021

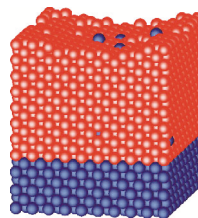
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Игошкин А.М.

**Молекулярно-динамическое исследование
диффузии водорода
в палладиево-серебряных пленках**

Ключевые слова: метод молекулярной динамики,
наноструктуры, тонкие пленки, палладий, серебро, сплавы,
границы раздела, диффузия, водород

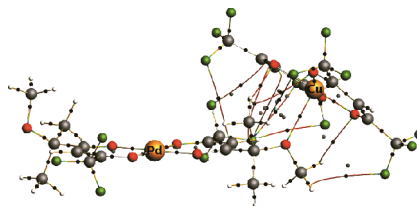


5

Мирзаева И.В., Козлова С.Г., Крисюк В.В.

**Квантово-химическое исследование
стабильности медно-палладиевых комплексов
в газовой фазе**

Ключевые слова: β -дикетонаты переходных металлов,
теория функционала плотности, невалентные взаимодействия,
теория AIM, NBO

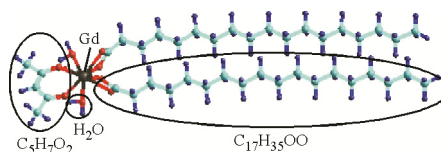


13

Иванин С.Н., Панюшкин В.Т., Бузько В.Ю.,
Селивантеев Ю.М., Костырина Т.В.

**Синтез, исследование
и молекулярное моделирование
возможных структур гетеролигандного комплекса
стеарата гадолиния с ацетилацетоном**

Ключевые слова: координационное соединение,
комплексы гадолиния, молекулярное моделирование,
колебательные характеристики, молекулярная механика

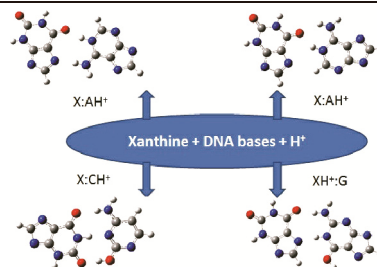


23

Qiu Z.-M., Zhang X.-P.

**The relative stability
of protonated base pairs
between xanthine
and DNA bases**

Keywords: DNA bases, proton affinity,
xanthine



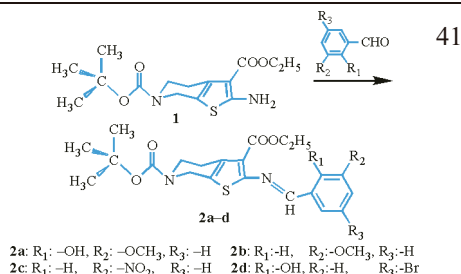
33

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Çolak N., Karayel A., Buldurun K., Turan N.

Synthesis, characterization, thermal, X-ray, and DFT analyses of 6-*tert*-butyl 3-ethyl 2-[(3-methoxy/5-bromo)-2-hydroxy and (3-nitro/3-methoxy)benzylideneamino]-4,5-dihydrothieno[2,3-*c*]pyridine-3,6(7*H*)-dicarboxylate

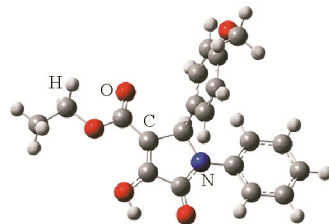
Keywords: heterocyclic amin, Schiff base, DFT, X-ray



Ahankar H., Ramazani A., Saeidian H., Ślepokura K., Lis T.

Synthesis, crystal structure, and DFT studies of ethyl 4-hydroxy-2-(4-methoxyphenyl)-5-oxo-1-phenyl-2,5-dihydro-1*H*-pyrrole-3-carboxylate

Keywords: pyrrolidinone derivative, multicomponent reaction, single-crystal X-ray analysis, density functional theory, electrophilicity index

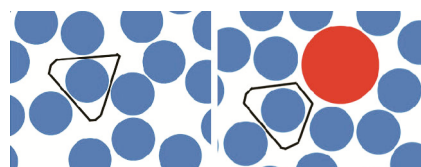


СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

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

Использование разбиения Вороного для интерпретации объемных свойств раствора

Ключевые слова: молекулярно-динамическое моделирование, водные растворы неэлектролитов, объемные свойства, метод Вороного, объем области Вороного, структура раствора, ассоциация, *трет*-бутанол



Теплухин А.В.

Расчет термодинамических и структурных характеристик жидких углеводородов методом Монте-Карло

Ключевые слова: полимеры, моделирование, Монте-Карло, *NpT*, параллельные вычисления

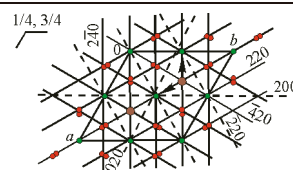


КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Борисов С.В., Первухина Н.В., Магарилл С.А.

Кристаллографический анализ BaV₆O₁₁ – стабильного трафарета гексагональной симметрии

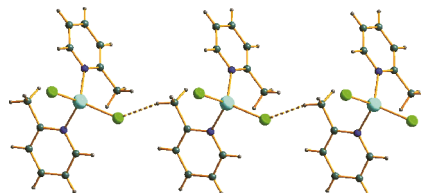
Ключевые слова: кристаллографический анализ, анионные и катионные подрешетки, симметрия–стабильность



Вершинин М.А., Адонин С.А.

Кристаллические структуры продуктов реакции CoCl₂·6H₂O с 2-метилпиридином и 2,6-диметилпиридином

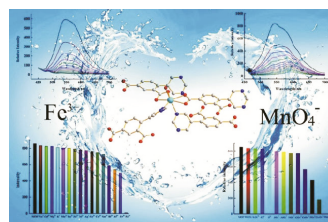
Ключевые слова: кобальт, галогенидные комплексы, N-донорные лиганды, кристаллическая структура



Zhu M., Zhu X., Wu S., Gao E.

A water stable Cd(II) metal-organic framework for sensing pollutants with high selectivity

Keyword: fluorescent probe, highly selectively sensing, MnO₄⁻ and Fe³⁺, aqueous solution

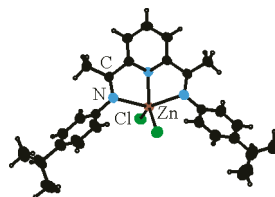


Zhu Z.M., Zhang W.J.

108

Synthesis, crystal structure, and fluorescence properties of a new monocular zinc(II) complex based on 2,6-bis{[(4-isopropylphenyl)imino]ethyl}pyridine

Keywords: zinc(II) complex, 2,6-bis(imino)pyridyl, crystal structure, fluorescence property

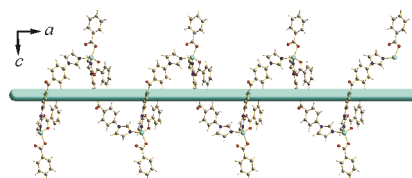


Wang G.-F., Sun S.-W., Sun H., Song S.-F.

114

Two complexes assembled from bis(4-(1H-imidazol-1-yl)phenyl)methanone and benzoic acid: Syntheses and structural characterization

Keywords: complex, ancillary ligand, coordination polymers, synthesis, topology

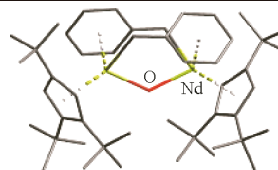


Демкин А.Г., Савков Б.Ю., Сухих Т.С., Конченко С.Н.

119

Синтез и строение нового комплекса неодима с необычным типом координации бензильного лиганда

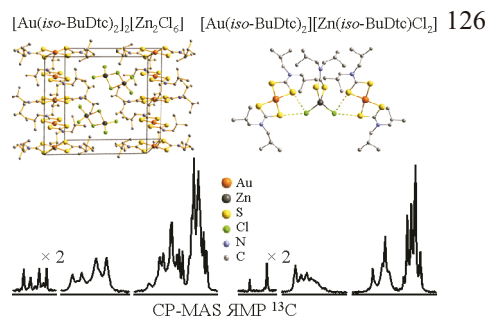
Ключевые слова: координационные соединения, лантаноиды, неодим, бензильные комплексы, кристаллическая структура



Родина Т.А., Лосева О.В., Иванов А.В.

Двойные ди-изо-бутилдитиокарбаматно-хлоридные комплексы золота(III) – цинка состава [Au(S₂CNR₂)₂][Zn₂Cl₆] и [Au(S₂CNR₂)₂][Zn(S₂CNR₂)Cl₂]: получение, структурная организация, CP-MAS ЯМР ¹³C и термическое поведение

Ключевые слова: ди-изо-бутилдитиокарбамат цинка, двойные комплексы золота(III)-цинка, кристаллическая и супрамолекулярная структура, вторичные связи S...Cl, CP-MAS ЯМР ¹³C, синхронный термический анализ

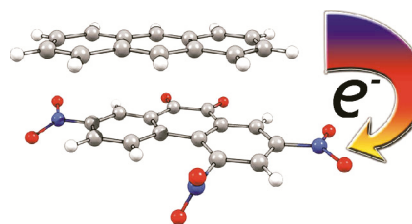


Линко Р.В., Рябов М.А., Страшнов П.В., Полянская Н.А., Давыдов В.В., Дороватовский П.В., Линько И.В., Хрусталев В.Н.

141

Комплексы с переносом заряда нитропроизводных 9,10-фенантренина с антраценом. Кристаллическая и молекулярная структура комплекса (1:1) 2,4,7-тринитро-9,10-фенатренхинона с антраценом

Ключевые слова: нитропроизводные 9,10-фенантренина, антрацен, комплексы с переносом заряда, квантово-химическое моделирование, электронные спектры поглощения, рентгеноструктурный анализ



СТРУКТУРА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

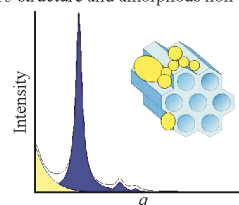
Ларичев Ю.В.

SBA-15 structure and amorphous non-porous silica

151

Исследование упорядоченности пористой структуры мезопористого материала SBA-15 методом малоугловой дифрактометрии

Ключевые слова: мезопористые упорядоченные материалы, SBA-15, МУРР, аморфный непористый кремнезем, созревание по Оствальду

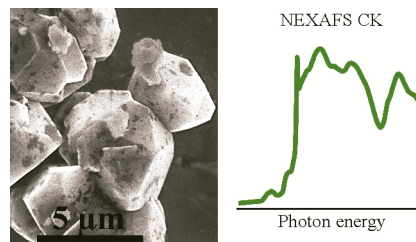


Федосеева Ю.В., Городецкий Д.В., Макарова А.А.,
Юдин И.Б., Тимошенко Н.И., Плотников М.Ю.,
Емельянов А.А., Ребров А.К., Окотруб А.В.

157

**Влияние температуры молибденовых подложек
на строение алмазных покрытий,
полученных методом газозафазного осаждения
из высокоскоростного потока СВЧ-плазмы**

Ключевые слова: алмазные покрытия, газозафазное осаждение,
СВЧ-плазма, газоструйный метод,
растровая электронная микроскопия,
спектроскопия комбинационного рассеяния света, NEXAFS,
рентгеноэлектронная спектроскопия

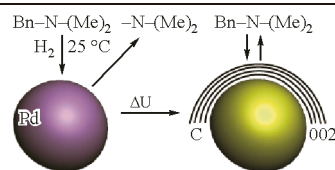


Троицкий С.Ю., Нартова А.В., Мороз Э.М.

167

**Низкотемпературное зауглероживание активных
центров – причина дезактивации катализаторов Pd/C**

Ключевые слова: наночастицы Pd, TEM, XRD, RFES, Pd/C,
дебензилирование, активные центры катализаторов, дезактивация



Содержание следующего номера — в конце журнала