

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 60

Ноябрь

№ 11, 2019

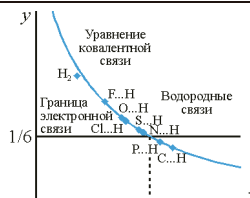
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Долгоносов А.М.

**Представление о водородной связи,
следующее из теории обобщенных зарядов**

Ключевые слова: водородная связь,
ковалентное взаимодействие,
энергия и длина химической связи, обобщенный заряд

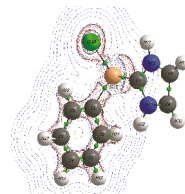


1765

Алексеев Н.В.

**Квантово-химическое исследование связей
кремний–заместитель в соединениях
трехкоординированного кремния**

Ключевые слова: кремнийорганические соединения,
квантовая химия, метод AIM, метод NBO



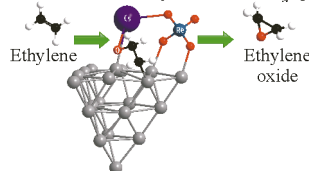
1775

Salaev M.A., Salaeva A.A., Poleschuk O.Kh.,
Vodyankina O.V.

**Re- and Cs-copromoted silver catalysts
for ethylene epoxidation:
A theoretical study**

Keywords: ethylene epoxidation, silver, rhenium, cesium, DFT

Formation of oxametallacycle and CsReO_x species

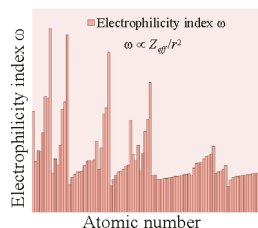


1785

Tandon H., Chakraborty T., Suhag V.

**A new scale of the electrophilicity index invoking
the force concept and its application in computing
the internuclear bond distances**

Keywords: electrophilicity index, effective nuclear charge,
absolute radii, periodicity, electrophilicity equalization principle,
internuclear bond distance

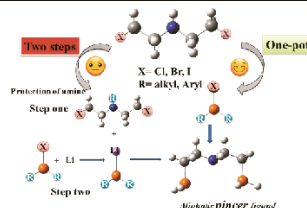


1797

Mohammadnezhad G., Abad S.,
Farrokhpour H.

**Theoretical evaluation of one-pot synthesis
of aliphatic PNP pincer ligands**

Keywords: aliphatic PNP, pincer, S_N2, kinetics,
thermodynamics

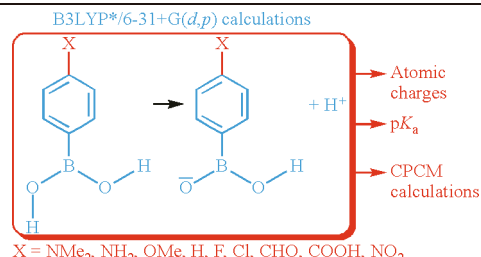


1806

Fereidoni S., Ghiasi R., Pasdar H., Mohtat B.

Substituent effect on the acidity strength of *para*-C₆H₄XB(OH)₂ boronic acid: A theoretical investigation

Keywords: boronic acid, pK_a, substituent effect, conductor-like polarized continuum model (CPCM), atomic polar tensors (APT), quantum theory of atoms in molecules (QTAIM)



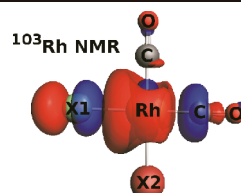
1814

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Мирзаева И.В., Козлова С.Г.

Природа смещения сигнала ЯМР ядра ¹⁰³Rh при замене галогена в комплексных анионах *cis*-[X1X2Rh(CO)₂]⁻ (X1, X2 = Cl, Br, I)

Ключевые слова: ЯМР ¹⁰³Rh, релятивистские эффекты, теория функционала плотности, электронное строение, NBO

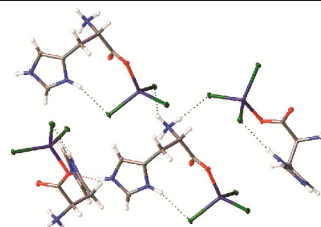


1821

Панюшкин В.Т., Волынкин В.А., Линдт Д.А., Цатурян С.П., Джабраилова Л.Х., Шамсутдинова М.Х., Аксенов Н.А.

О строении координационных соединений цинка(II) с *L*-гистидином

Ключевые слова: *L*-гистидин, ИК, ¹³C ЯМР, РСА, квантово-химические расчеты

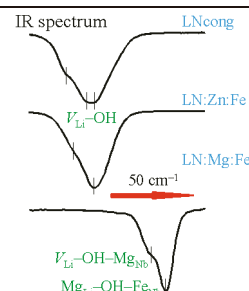


1829

Сидоров Н.В., Теплякова Н.А., Бобрева Л.А., Палатников М.Н.

Оптические свойства и дефекты кристаллов двойного легирования LiNbO₃:Mg(5.05):Fe(0.009) и LiNbO₃:Zn(4.34):Fe(0.02) (мол. %)

Ключевые слова: кристалл ниобата лития, двойное легирование, фотоиндуцированное рассеяние света, лазерная коноскопия, ИК спектроскопия, валентные колебания ОН-групп

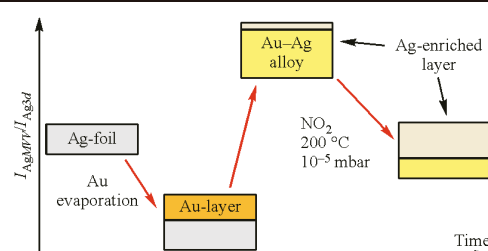


1837

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

Изменение пространственного распределения металлов под воздействием реакционной среды в системе, образованной напылением пленки золота на поверхность серебряной фольги

Ключевые слова: серебро, золото, NO₂, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС)



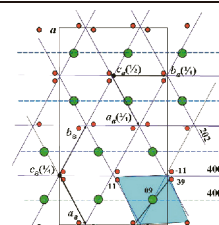
1846

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

Кристаллографический анализ полиморфизма TiO₂ (брукит, анатаз, рутил)

Ключевые слова: кристаллографический анализ, катионные и анионные подрешетки, полиморфизм TiO₂, брукит, анатаз, рутил, когерентная сборка, симметрия–стабильность



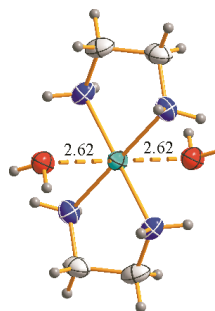
1857

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

1864

**Структурные превращения комплексной соли
[CuEn₃]WO₄ в интервале 100–390 К
и ее деградация до [CuEn₂](WO₄) · 2H₂O**

Ключевые слова: комплексная соль,
трис(этилендиамин) меди, эффект Яна–Теллера,
бис(этилендиамин) меди, вольфрамат-анион,
кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ,
термическое разложение

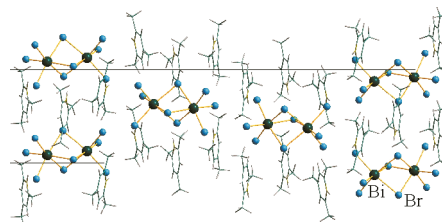


Горох И.Д., Адонин С.А., Ильина Е.В.,
Самсоненко Д.Г., Соколов М.Н., Федин В.П.

1873

**Кристаллические структуры би- и тетраядерных
галогенидных комплексов Bi(III) с катионами
2,6-диметил- и 2,4,6-триметилпиридиния**

Ключевые слова: висмут, галогенидные комплексы,
полиядерные комплексы, пиридины

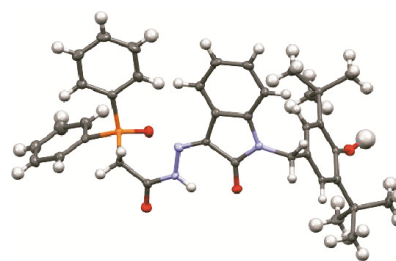


Литвинов И.А., Бухаров С.В., Карамов Ф.А.,
Хабибуллина Р.А., Акылбеков Н.И., Бурилов А.Р.,
Тагашева Р.Г., Гаврилова Е.Л.

1878

**Синтез и структура гибридных соединений
на основе гидразида фосфорилуксусной кислоты,
изатина и пространственно-затрудненных фенолов**

Ключевые слова: пространственно-затрудненные фенолы,
производные 2-(дифенилфосфорил)ацетогидразида, изатин,
гибридные соединения, структура

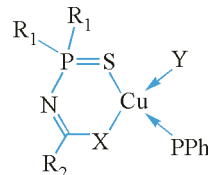


Литвинов И.А., Карамов Ф.А.

1886

**Структура двух комплексов
N-тиофосфорилированных тиаомидов
с катионом серебра(I) и трифенилфосфином**

Ключевые слова: тиобензамиды, трифенилфосфин,
комплексы одновалентного серебра, молекулярная структура,
кристаллическая структура

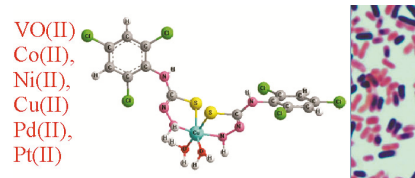


Shoukry A., Al-Fulaij O., Marzouk M., Aman N.

1892

**Structure and biological activity
of trichlorophenyl-thiosemicarbazone
and its complexes with some transition metal cations**

Keywords: thiosemicarbazone, coordination compounds,
structure, biological activity



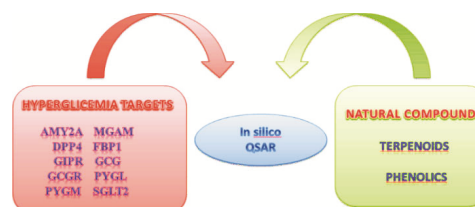
СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Васильев П.М., Лузина О.А., Бабков Д.А.,
Аппазова Д.Т., Салахутдинов Н.Ф., Спасов А.А.

1901

**Исследование зависимости между структурой
хемотипов некоторых природных соединений
и спектром их таргетных активностей,
соотносимых с гипогликемическим действием**

Ключевые слова: природные соединения, терпеноиды,
полифенолы, гипогликемическая активность, *in silico*,
QSAR, Microcosm BioS, мультитаргетное действие,
прогноз спектра таргетной активности

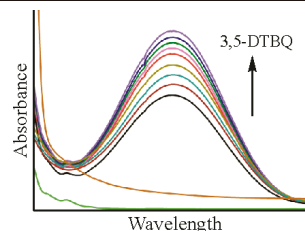


СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

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

Design and characterization of a Cu(II) coordination polymer based on α -diimine: Evaluation of the biomimetic activity

Keywords: Cu(II) coordination polymer, crystal structure,
catecholase activity

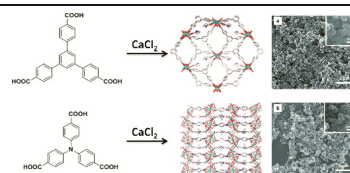


1907

Liang J., Yue W., Sun Z., Tong A.

Two novel Ca(II)-carboxylate coordination polymers: Crystal structures and antimyeloma activity evaluation

Keywords: Ca(II) coordination polymer, single crystal,
nanoparticles, myeloma, MTT assay

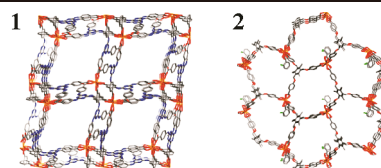


1916

Xin X.-T., Wang X.-K.

Synthesis, crystal structures of two novel metal coordination polymers and study of their inhibition of human hemangioma cells

Keywords: coordination polymer, single crystal, hemangioma



1924

Содержание следующего номера — в конце журнала

Кузнецовские чтения – 2020

Пятый семинар по проблемам химического осаждения из газовой фазы ИНХ СО РАН, Новосибирск, 3–5 февраля 2020 года

ИНХ СО РАН и ИрИХ СО РАН в рамках Кузнецовских чтений, посвященных памяти и научному наследию российского учёного и организатора науки, академика Ф.А. Кузнецова, проводят семинар по проблемам химического осаждения из газовой фазы. Данное мероприятие является продолжением серии семинаров, которые проходили в Иркутске (2010, 2013) и Новосибирске (2011, 2017).

Программа семинара

1. Фундаментальные основы процессов CVD (химия газовой фазы и поверхности, механизмы реакций, кинетика, моделирование, взаимосвязь структуры и свойств).
2. Новые исходные вещества для процессов CVD: синтез, очистка и характеристика.
3. Новые направления в развитии технологии CVD (активированные процессы, ALD, гибридные технологии и др.).
4. Новые материалы и сложные структуры, полученные в процессах CVD (однородные и градиентные слои, напряженные слои, структуры различной архитектуры: нанотрубы, нанонити, нанокомпозиты, наночастицы и квантовые точки).
5. Диагностика пленок и покрытий, контроль процессов CVD (состояние образующихся фаз, функциональные характеристики слоев и структур).
6. CVD: путь от лаборатории к промышленной технологии.
7. Применение процессов CVD.

Информация о семинаре:

<http://www.niic.nsc.ru/institute/conferences-inx/826-conferences-2020/3037-kuznetsovskie-cheniya-2020>

© Сибирское отделение РАН, 2019
© Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН, 2019
© Новосибирский государственный
университет, 2019