



ISSN 0136-7463

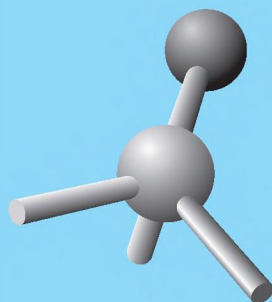
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 65

Январь

2024

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 1

НОВОСИБИРСК

ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

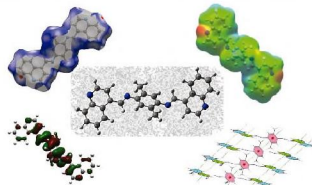
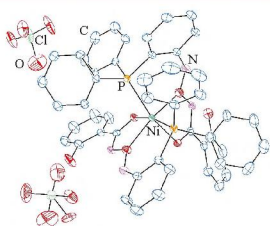
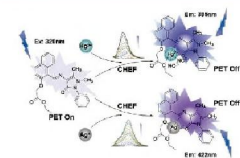
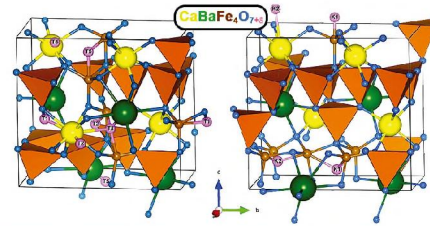
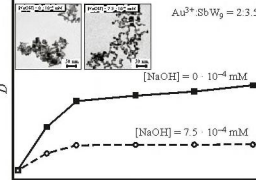
Выходит 12 раз в год

Т О М 65

Январь

№ 1, 2024

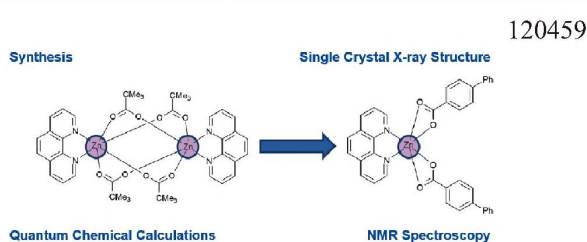
СОДЕРЖАНИЕ

- |                                                                                                                                                                                                                                                                                               |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |        |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|
| Halder S., Mandal P.C., Guin M., Konar S.<br><b>Structural elucidation, Hirshfeld surface, FMO, molecular electrostatic potential (MEP) and fukui function analyses of a quinoline based Schiff base compound</b><br>Keywords: crystal structure, DFT, Hirshfeld surface                      |                                                                                                                                                                                                                                            | 119220 |
| Göktürk T., Topkaya C.G., Hökelek T., Güp R.<br><b>Serendipitous synthesis of an octahedral Ni(II) complex: single crystal structure, Hirshfeld surface and voids analysis</b><br>Keywords: octahedral nickel(II) complex, crystal structure, Hirshfeld surface analysis, crystal voids       |  <ul style="list-style-type: none"><li><input checked="" type="checkbox"/> Single crystal XRD</li><li><input checked="" type="checkbox"/> Hirshfeld surface analysis</li><li><input checked="" type="checkbox"/> Crystal voids</li></ul> | 119753 |
| Zhou Y., Cao J.-W., Zhang D.-H.<br><b>An antipyrine based fluorescent probe and selective detection of Hg<sup>2+</sup> and Ag<sup>+</sup></b><br>Keywords: antipyrine, fluorescent probe, Hg <sup>2+</sup> , Ag <sup>+</sup>                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                          | 120025 |
| Сунцов А.Ю., Жуков В.П., Кожевников В.Л.<br><b>Сверхстехиометрический кислород и структурная неустойчивость феррита CaBaFe<sub>4</sub>O<sub>7</sub>: подход «из первых принципов»</b><br>Ключевые слова: феррит, сведенборгит, структурная неустойчивость, мультиферроик, ab initio PAW метод |                                                                                                                                                                                                                                          | 120093 |
| Tan R., Li Y., Wang Q., Guo Y., Wang J.<br><b>Convenient and green synthesis of POM-coated gold nanostructures and photocatalytic activity under visible light</b><br>Keywords: polyoxometalate (POM), Au, nanostructure, synthesis, photocatalysis                                           |  <p><math>Au^{3+}/StW_9 = 2.3:5</math></p> <p><math>[NaOH] = 0 \cdot 10^{-4} \text{ mM}</math></p> <p><math>[NaOH] = 7.5 \cdot 10^{-4} \text{ mM}</math></p>                                                                             | 120099 |

Самулионис А.С., Мельников С.Н., Павлов А.А., Старикова А.А., Гоголева Н.В., Николаевский С.А., Кискин М.А., Еременко И.Л.

### Синтез и строение моноядерного комплекса цинка с 4-бифенилкарбоксилат-анионами и 1.10-фенантролином

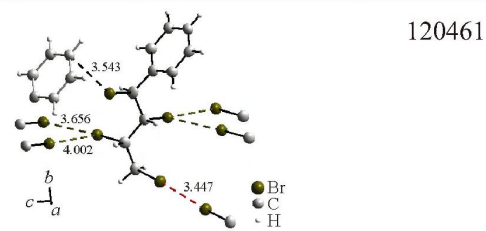
**Ключевые слова:** комплексы цинка(II), карбоксилаты, молекулярная структура, квантово-химические расчеты, теория функционала плотности (DFT)



Кораблев Г.Г., Дороватовский П.В., Ефремов А.Н., Осипов А.А., Раджакумар К., Найферт С.А., Жеребцов Д.А.

### Галогенные связи в структуре тетрабромфенилбутана

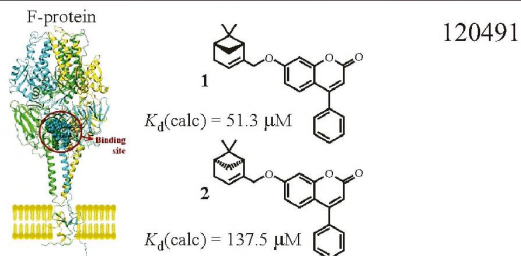
**Ключевые слова:** кристаллическая структура, галогенная связь, термический анализ



Борисевич С.С., Волчо К.П., Салахутдинов Н.Ф.

### Могут ли методы молекулярной динамики объяснить различную активность стереоизомеров в отношении респираторно-синцитиального вируса?

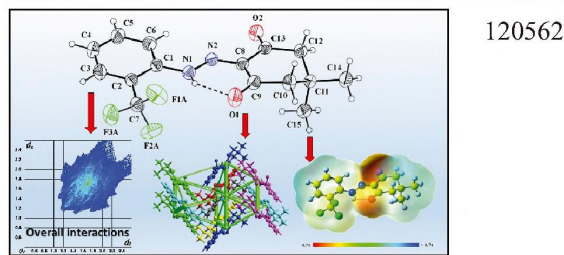
**Ключевые слова:** F-белок, респираторно-синцитиальный вирус, монотерпен-арилкумариновые конъюгаты, молекулярный докинг, метадинамика



Kurbanova M., Ashfaq M., Sadigova A., Feizi-Dehnaeyebi M., Maharramov A., Tahir M.N.

### A hydrazone derivative: synthesis, crystal structure, supramolecular assembly exploration by Hirshfeld surface analysis and computational study

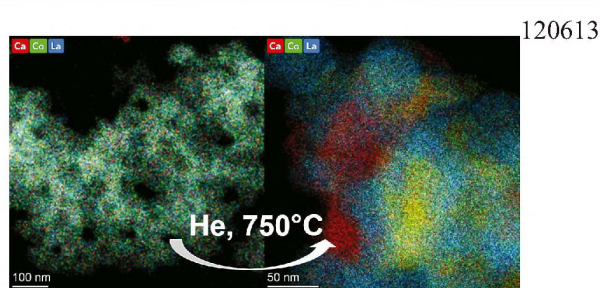
**Keywords:** 5,5-dimethylcyclohexane-1,3-dione, XRD, crystal packing, intermolecular interactions, Hirshfeld surface analysis, computational study



Капишников А.В., Беспалко Ю.Н., Шувараква Е.И., Цыбуля С.В., Исупова Л.А., Герасимов Е.Ю.

### Влияние кислородной нестехиометрии на структурную стабильность в сложных оксидах $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Mn}_{0.5}\text{CO}_{0.5}\text{O}_3$ ( $x = 0.2-0.6$ ) в условиях нагрева в атмосфере He

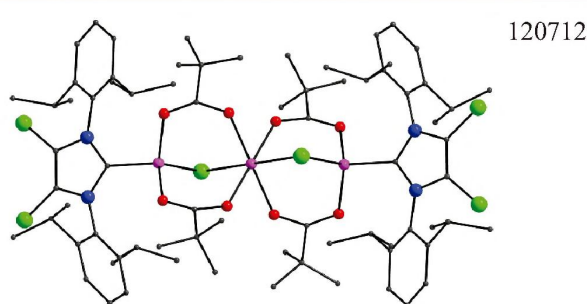
**Ключевые слова:** перовскитоподобные оксиды, нестехиометрия, твердые растворы, манганит лантана, фазовые переходы



Петров П.А., Николаевский С.А., Филиппова Е.А., Компаньков Н.Б., Сухих Т.С., Кискин М.А., Соколов М.Н., Еременко И.Л.

### Новая полиморфная модификация 1,3-бис(2,6-ди-изопропилфенил)-4,5-дихлоримидазол-2-илидена и комплекс кобальта с ним

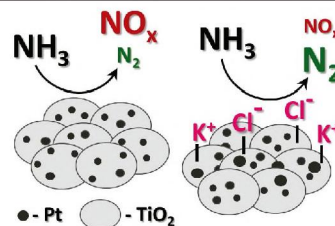
**Ключевые слова:** кобальт, карбоксилаты, N-гетероциклические карбены, рентгеноструктурный анализ



Кибис Л.С., Свинцицкий Д.А., Овсяк И.Ю.,  
Кардаш Т.Ю., Романенко А.В., Боронин А.И.

**Модификация физико-химических свойств  
платино-титановых катализаторов  
нейтрализации остаточного аммиака**

**Ключевые слова:** платина, оксид титана,  
селективное окисление аммиака, кислотные свойства

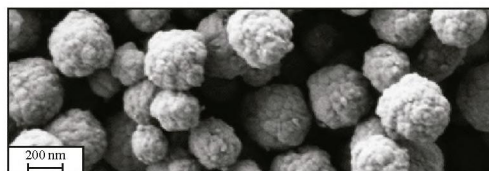


120714

Захарова А.С., Александров А.А., Поминова Д.В.,  
Федоров П.П., Кузнецов С.В., Иванов В.К.

**Синтез люминофоров KGd<sub>2</sub>F<sub>7</sub>:Yb:Er  
методом соосаждения из водных растворов**

**Ключевые слова:** метод соосаждения,  
неорганические фториды,  
ап-конверсионная люминесценция, система KF-GdF<sub>3</sub>,  
фторид калия, нитрат гадолиния

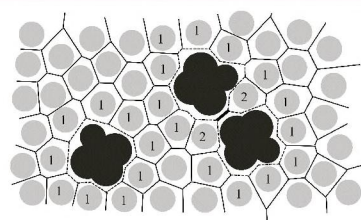


120730

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

**Взаимное соседство молекул компонентов  
в водных растворах ТБС и ТМАО**

**Ключевые слова:** молекулярно-динамическое  
моделирование, ассоциация в растворах,  
разбиение Вороного, водные растворы неэлектролитов,  
*tert*-бутиловый спирт, триметиламиноксид

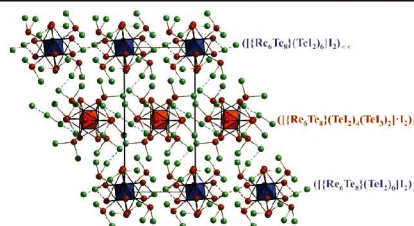


120787

Новикова Е.Д., Коновалов Д.И., Иванов А.А.,  
Куратьева Н.В., Шестопалов М.А.

**Новая фаза октаэдрического теллуриоидного  
кластерного комплекса рения**

**Ключевые слова:** рений, теллур,  
октаэдрические кластеры, кластерные комплексы,  
рентгенофазовый анализ, кристаллическая структура

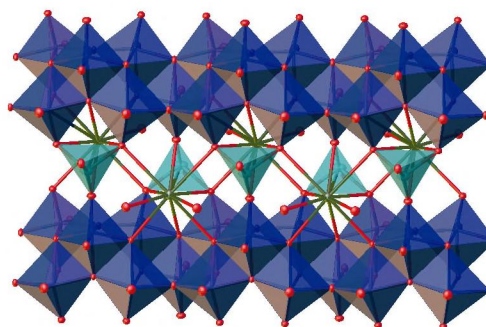


121167

Серебренникова П.С., Комаров В.Ю.,  
Трифонов В.А., Панченко А.В., Громилов С.А.

**Комбинированный подход к калибровке  
монокристалльного дифрактометра.  
Изучение структуры CsLiMo<sub>3</sub>O<sub>10</sub>  
в интервале 90–450 К**

**Ключевые слова:** рентгеноструктурный анализ,  
монокристалльный дифрактометр,  
калибровка 2D детектора, обработка дифракционных  
данных, калибровка гониометра,  
точность измерения параметров элементарной ячейки,  
высокотемпературная рентгенография

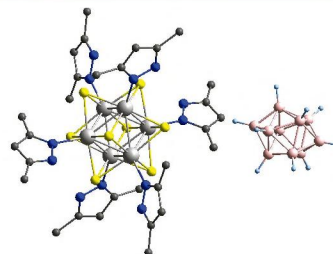


121273

Давыдова М.П., Сухих Т.С., Рахманова М.И.,  
Брылев К.А., Артемьев А.В.

**Кластерные комплексы рения  
с полиборгидридными анионами  
[Re<sub>6</sub>S<sub>8</sub>(Me<sub>2</sub>PzH)<sub>6</sub>]X (X = B<sub>10</sub>H<sub>10</sub>, B<sub>12</sub>H<sub>12</sub>)**

**Ключевые слова:** кластеры рения,  
полигидридные кластеры бора, синтез,  
кристаллическая структура, фосфоресценция



121365

---

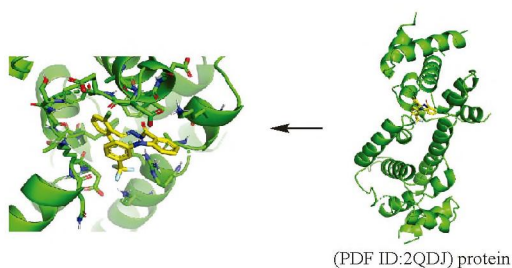
Suhta A., Saral S., Çoruh U., Karakuş S.,  
Vazquez-Lopez E.M.

**Synthesis, single crystal X-ray, Hirshfeld surface analysis and DFT calculation based NBO, HOMO-LUMO, MEP, ECT and molecular docking analysis of *N'*-[(2,6-dichlorophenyl)methylidene]-2-[[3-(trifluoromethyl)phenyl]amino]benzohydrazide**

**Keywords:** hydrazone, DFT calculations, X-ray diffraction, Hirshfeld surfaces, DNA/ECT charge transfer method, molecular docking

---

121415



---

Содержание следующего номера — в конце журнала

© Сибирское отделение РАН, 2024  
© Институт неорганической химии  
им. А.В. Николаева СО РАН, 2024  
© Новосибирский государственный  
университет, 2024