

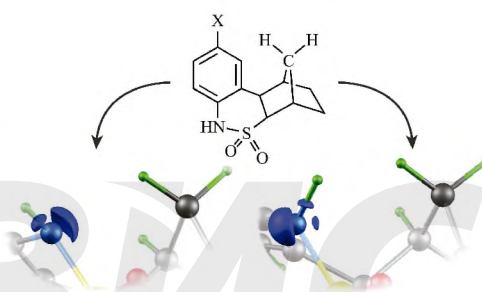
СО Д Е Р Ж А Н И Е

Карташов С.В., Федонин А.П., Файзуллин Р.Р.

162445

**Распределение атомных зарядов и химическое связывание в изолированных молекулах производных 3,4-дигидро-1*H*-бензо[*c*][1,2]тиазин-2,2-диоксида**

**Ключевые слова:** атомный заряд, электронная пара, межатомный перенос заряда, межатомное взаимодействие, неклассическая водородная связь, квантово-химический отклик, сульфонамиды

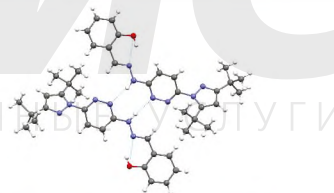


Нафиков М.Д., Тайгина М.Д., Наумов Д.Ю.,  
Гущин А.Л., Виноградова К.А.

163022

**Синтез и строение *N*- и *O*-донорных лигандов различной дентатности на основе пиридазина**

**Ключевые слова:** пиридазин, синтез, конденсация, кристаллическая структура, водородная связь

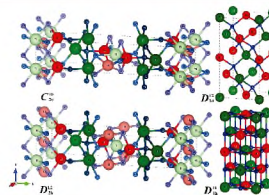


Дугинова Е.Б., Басалаев Ю.М., Кравченко Н.Г.

163082

**Электронная структура и упругие свойства полиморфных фаз оксоталлата лития (LiTiO<sub>2</sub>)**

**Ключевые слова:** химическая связь, зонная структура, халькопирит, LiTiO<sub>2</sub>, оксоталлаты, упругие свойства, микротвердость

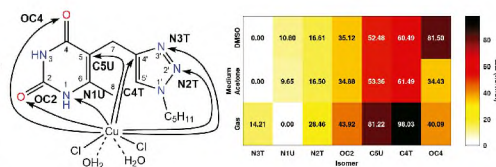


Пышкин А.А., Хамитов Э.М., Алехина И.Е.,  
Иванов С.П.

163164

**Комплексообразование 5-(1-пентил-4-метил-1,2,3-триазол-4-ил)-6-метилурацила с хлоридом меди в органических растворителях**

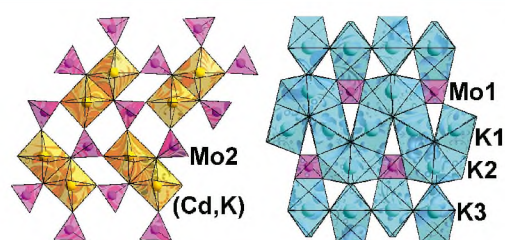
**Ключевые слова:** 1,2,3-триазол, урацил, хлорид меди(II), комплексообразование, DFT, <sup>13</sup>C ЯМР-спектроскопия



Солодовников С.Ф., Солодовникова З.А.,  
Золотова Е.С., Юдин В.Н., Саранчина Е.М.

### Кристаллические структуры двойных молибдатов калия и кадмия

**Ключевые слова:** калий, кадмий, молибдаты, синтез,  
нестехиометрия, аллюодит, кристаллическая структура,  
фазовые переходы, суммы валентных усилий,  
ионная проводимость

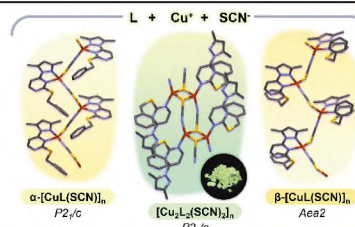


163167

Скворцова С.В., Верхов Ф.К.

### Комплекс тиоцианата меди(I) с 2-бензилтио-4- (3,5-диметил-1H-пиразол-1-ил)пиримидином: синтез, полиморфизм и люминесценция

**Ключевые слова:** медь, пиримидин, тиоцианат,  
координационные полимеры, полиморфизм,  
сольватоморфизм, люминесценция

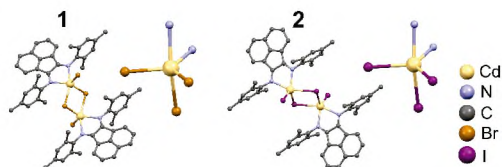


163308

Чехов Е.В., Бакаев И.В., Комлягина В.И.,  
Уланчиков А.А., Ромашев Н.Ф., Гушин А.Л.

### Биядерные комплексы кадмия(II) на основе 1,2- бис-{(2,4,6-триметилфенил)имино}аценафтена: синтез, строение и электрохимические свойства

**Ключевые слова:** бис(имино)аценафтены,  
координационные соединения, кадмий,  
рентгеноструктурный анализ,  
циклическая вольтамперометрия



163406

Копылова Ю.О., Волков С.Н., Аксенов С.М.,  
Бубнова Р.С.

### Синтез и кристаллическая структура нового смешанного NH<sub>4</sub>/Cs бората (NH<sub>4</sub>)<sub>0.858</sub>Cs<sub>0.142</sub>[B<sub>5</sub>O<sub>7</sub>(OH)<sub>2</sub>]<sub>2</sub>·0.5H<sub>2</sub>O

**Ключевые слова:** бораты, лардереллит,  
гидротермальный синтез, кристаллическая структура

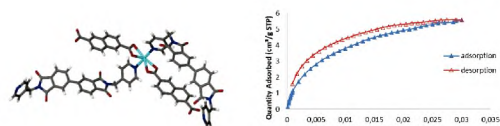


163538

Mahwasane R., Mbonzhe L., Chatterjee N., Batisai E.

### Coordination complexes of Cd(II), Cu(II), Zn(II), and substituted diimide ligands: syntheses, structural analyses and gas sorption studies

**Keywords:** metal-organic frameworks, gas sorption,  
diimide, solvothermal, porosity

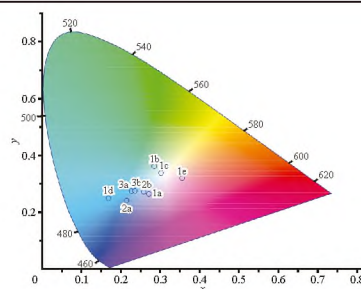


163757

Симонова Е.А., Храмова Д.М., Гороявчева А.А.,  
Нигматулина Е.Н.

### Рост кристаллов и люминесцентные характеристики Li-Ва-фторидов, боратов и фторидоборатов, допированных РЗЭ (РЗЭ = Sm, Eu, Tb)

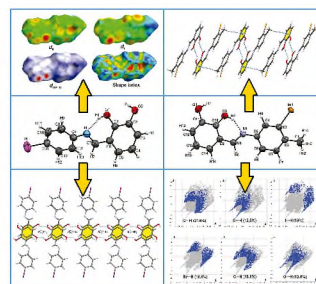
**Ключевые слова:** спонтанная кристаллизация, РЗЭ,  
люминесценция, перенос энергии, LiBa<sub>2</sub>B<sub>5</sub>O<sub>10</sub>, LiBaF<sub>3</sub>,  
LiBa<sub>12</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>7</sub>F<sub>4</sub>



Şimşek O., Atalay Ş., Taşdoğan M., Açar E., Bülbül H., Kansız S.

**Synthesis, characterization, and hirshfeld surface analysis of two schiff bases: (E)-3-(((4-iodophenyl)imino)methyl)benzene-1,2-diol and (E)-3-(((3-bromo-4-methylphenyl)imino)methyl)benzene-1,2-diol**

**Keywords:** Schiff base, benzaldehyde, iodophenyl, bromine, crystal structure, Hirshfeld surface

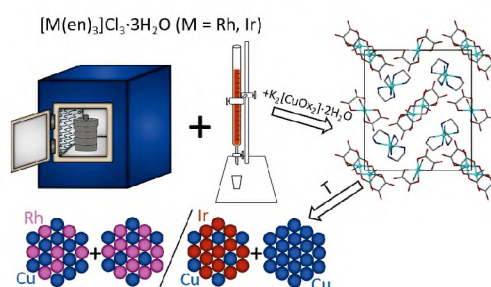


164073

Синица В.И., Смирнов П.С., Филатов Е.Ю., Куратьева Н.В., Плюснин П.Е., Корнев С.В.

**трис-Этилендиаминовые комплексы родия(III) и иридия(III): синтез, кристаллические структуры и формирование двойных комплексных солей с оксалатокупратом(II)**

**Ключевые слова:** родий, иридий, комплексы с этилендиамином, двойные комплексные соли, термическое разложение, твердые растворы

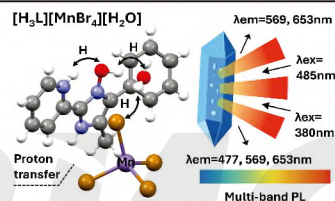


164077

Berezin A.S., Danilenko A., Sukhikh A., Selivanov B., Komarovskikh A.

**Switching colors: Multiple emission in a Manganese(II) bromide compound**

**Keywords:** manganese(II), multiband luminescence, EPR; non-covalent interaction, proton transfer, DFT

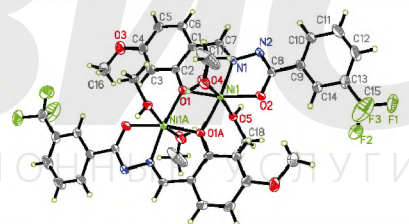


164080

Wei F.-Y., Liu W.

**Synthesis, characterization and crystal structures of N'-(2-hydroxy-4-methoxybenzylidene)-3-trifluoromethylbenzohydrazide and its nickel(II) and iron(III) complexes with antibacterial activity**

**Keywords:** aroylhydrazone, nickel(II) complex, iron(III) complex, crystal structure, antibacterial activity

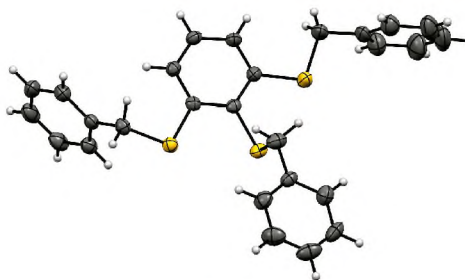


164151

Буравлев А.А., Багрянская И.Ю., Макаров А.Ю.

**Молекулярная и кристаллическая структура 1,2,3-трибензилтиобензола и 1,2-добензилтио-3-фторбензола по данным рентгеноструктурного анализа и расчетов по теории функционала плотности**

**Ключевые слова:** арилбензилсульфиды, конформации, межмолекулярные взаимодействия, рентгеноструктурный анализ, квантово-химические расчеты

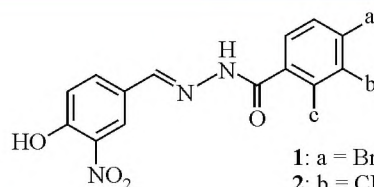


164153

Wang Y., Li W., Song N.

**Synthesis, characterization and crystal structures of aroylhydrazones derived from 4-hydroxy-3-nitrobenzaldehyde with various hydrazides**

**Keywords:** aroylhydrazones, 4-hydroxy-3-nitrobenzaldehyde, X-ray crystallography, antibacterial activity



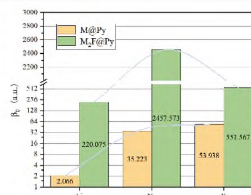
1: a = Br, b = c = H;  
2: b = CF<sub>3</sub>, a = c = H;  
3: c = NH<sub>2</sub>, a = b = H.

164295

Lu Y., Li X.

**Structures and nonlinear optical properties of the functionalized porphyrin with the alkalides: A DFT study**

**Keywords:** porphyrin, alkali species, chemical stability, nonlinear optical properties, density functional theory

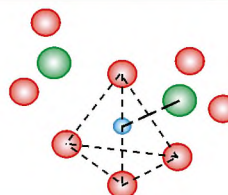


164298

Смирнов П.Р., Гречин О.В.

**Структурные параметры ближнего окружения ионов в водных растворах хлорида никеля по результатам рентгеноструктурного анализа**

**Ключевые слова:** растворы электролитов, рентгенодифракционный анализ, структура

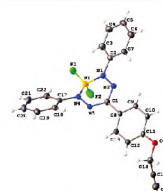


164389

Коншина Дж.Н., Лупанова И.А., Спесивая Е.А., Сухно И.В., Коншин В.В.

**Синтез и строение «кликабельного» формазаната дифторида бора**

**Ключевые слова:** дифторборные комплексы, формазанаты, «кликабельные» флуорофоры

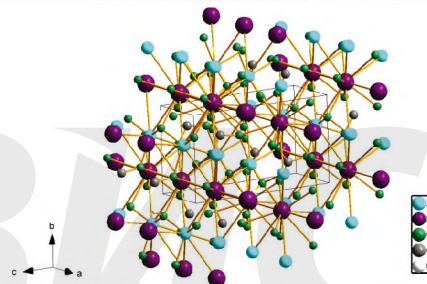


164507

Журавлев Ю.Н., Гвоздикова Е.В.

**Структура, механические, колебательные свойства нелинейно-оптических кристаллов LiZnCO<sub>3</sub>(OH) и NaZnCO<sub>3</sub>(OH) из первых принципов**

**Ключевые слова:** гидроксикарбонаты, гидроксиды, функционал плотности, структура, химическая связь, модули упругости, ИК спектры, КР-спектры, коэффициенты SHG

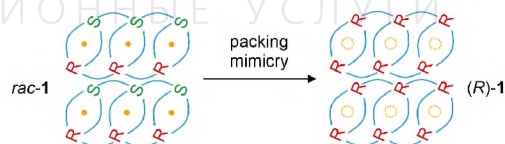


164583

Французова Л.В., Герасимова Д.П., Метлушка К.Е., Никитина К.А., Ившин К.А., Катаева О.Н., Лодочникова О.А.

**Кристаллизация N-(1-(1-нафтил)этил)-N'-фенилтиомочевины: перенос устойчивого упаковочного мотива из рацемической среды в гомохиральную**

**Ключевые слова:** тиомочевины, кристаллизация, синтонная мимикрия, псевдосимметрия

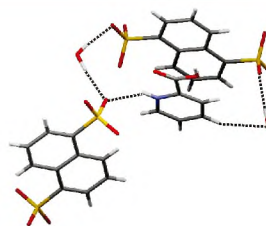


164654

Gao R., Chen S., Jin S., Ni Y., Li Z., Hong R., Hong H., He Q., Wang D.

**Preparation, spectral, crystal structures, synthons Investigation and Hirshfeld surface analysis of each of a salt and cocrystal derived from picolinic acid**

**Keywords:** crystal structures, picolinic acid, salt, cocrystal, synthon analysis, HSA



164735

Содержание следующего номера — в конце журнала