



*Российская
академия наук*

ISSN 1026—3500

Известия Академии наук

Серия
химическая

2021 **2**
стр. 213—426

Журнал издается одновременно на русском («Известия Академии наук. Серия химическая») и английском («Russian Chemical Bulletin») языках. Подробную информацию о журнале, содержания номеров журнала в графической форме и аннотации статей, а также годовые предметные и авторские указатели можно получить в Интернете по адресу: <http://www.russchembull.ru/rus/>

The Journal is published in Russian and English.

The International Edition is published under the title «Russian Chemical Bulletin» by Springer:

233 Spring St. New York NY 10013 USA. Tel.: 212 460 1572. Fax: 212 647 1898.

Detailed information concerning the journal contents of issues with graphical and text abstracts as well as annual subject and author indices can be found in the Internet at <http://www.russchembull.ru>

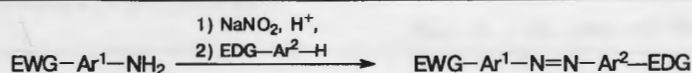
Иванов Владимир Константинович (к пятидесятилетию со дня рождения)

Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, ix

Содержание

Обзоры

Азохромофоры — компоненты материалов с нелинейными оптическими свойствами



Композитные материалы с нелинейными оптическими свойствами

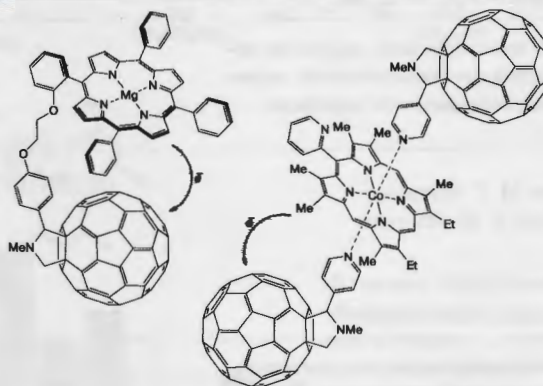
($\lambda_{\text{max}} = 400\text{--}680$ нм; коэффициенты тензора нелинейной оптической восприимчивости второго порядка $d_{33} > 100$ пм · В⁻¹)

Г. А. Селиванова

EWG и EDG — электроноакцепторная и электронодонорная группы соответственно.

Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 213

Ковалентные и нековалентные системы на основе макрогетероциклических комплексов s-, p-, d-металлов и фуллеренов

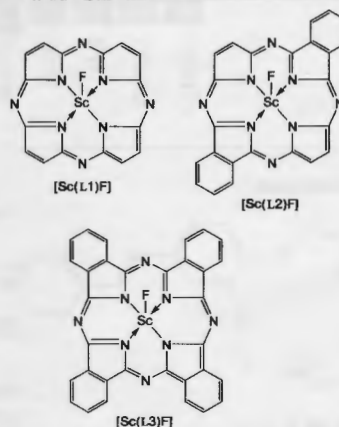


Н. Г. Бичан, Е. Н. Овченкова

Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 239

Полные статьи

Молекулярные структуры гетеролигандных комплексов Sc^{III} с порфиразином, его ди- и тетрабензопроизводными и фторидным лигандом по данным квантово-химического расчета в рамках метода DFT

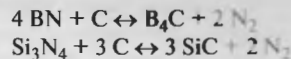


Д. В. Чачков, О. В. Михайлов

Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 276

Термодинамическое моделирование осаждения пленок SiBCN из газовой фазы в системе Si–B–N–C–H

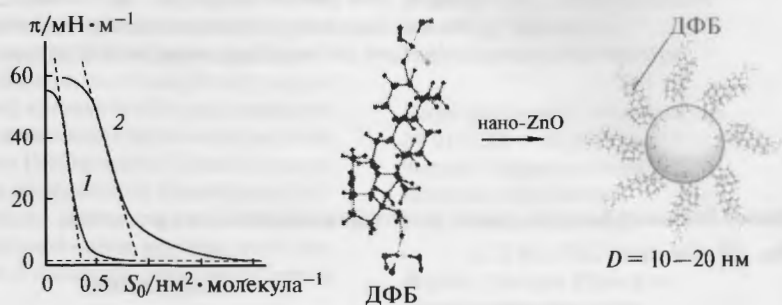
В. А. Шестаков, М. Л. Косинова



Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 283

Свойства ленгмюровских и иммобилизованных слоев дифосфата бетулина на водных растворах сульфата цинка и на поверхности наночастиц оксида цинка

Н. Б. Мельникова, Д. С. Малыгина,
О. А. Воробьева, А. Г. Соловьева,
К. Л. Беляева, Д. В. Орехов,
А. В. Князев

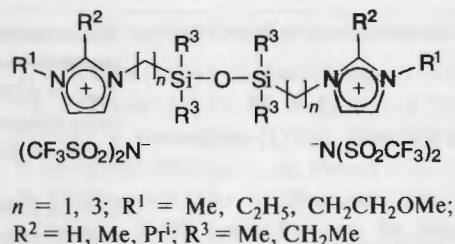


Изотермы сжатия ленгмюровских монослоев дифосфата бетулина (ДФБ) на воде (1) и на водной субфазе ZnSO_4 (2).

Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 289

Дикаationные дисилоксановые ионные жидкости как теплоносители в вакууме

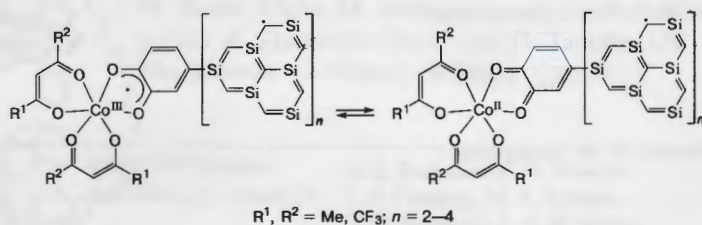
В. Г. Красовский, Г. И. Капустин,
О. Б. Горбачевич, Л. М. Глухов,
Е. А. Черникова, А. А. Коротеев,
Л. М. Кустов



Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 301

Компьютерное моделирование аддуктов дикетонатов кобальта с *o*-бензохионами, включающими кремнийорганические радикалы

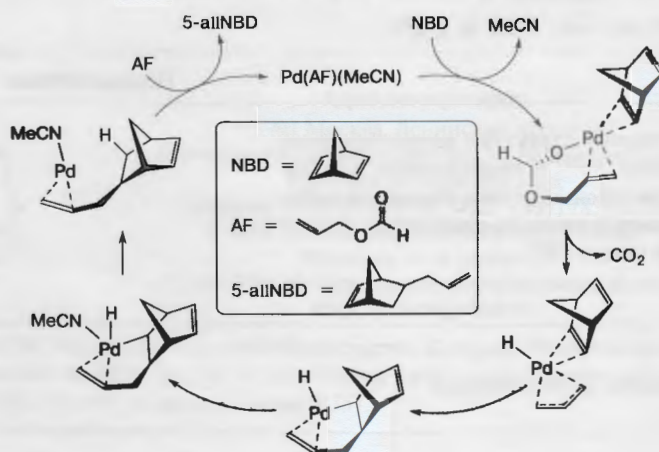
А. Г. Стариков, М. Г. Чегерев,
А. А. Старикова, В. И. Минкин



Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 309

Моделирование механизма восстановительного аллилирования норборнадиена в присутствии комплексов Pd^0

Р. С. Шамсиев, К. Т. Егиазарян,
В. Р. Флид

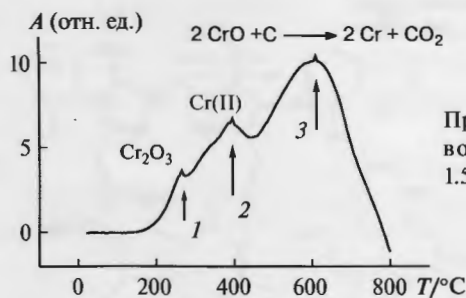


Механизм гидроаллилирования норборнадиена по данным DFT-расчетов.

Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 316

Формирование поверхности Pt–Ni–Cr/C-катализаторов в восстановительных условиях

А. Н. Каленчук, К. И. Маслаков,
Т. В. Богдан, П. А. Чернавский,
В. И. Богдан



Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 323

Энтальпии образования фениламинильных радикалов

Е. М. Чернова, М. Ю. Орлов,
В. В. Туровцев, Ю. Д. Орлов

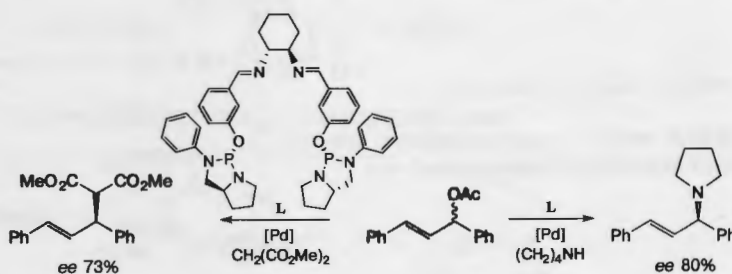
$$D(\text{PhN-H}) = \Delta_f H^\circ(\text{PhN}^\cdot) + \Delta_f H^\circ(\text{H}^\cdot) - \Delta_f H^\circ(\text{PhN-H})$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{PhN}^\cdot)$$

Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 330

Катализируемое палладием асимметрическое аллилирование с участием бис(диамидо-фосфита) на основе хирального димина саленового типа

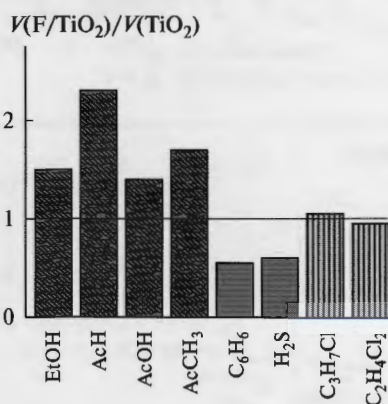
К. Н. Гаврилов, И. В. Чучелкин,
В. К. Гаврилов, С. В. Жеглов,
И. Д. Фирсин, В. М. Трунина,
А. В. Максимычев, А. М. Перепухов



Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 336

Влияние модифицирования фтором TiO₂ на его физико-химические свойства и активность в фотокаталитическом окислении загрязнителей в воздухе под действием УФ-излучения

И. Р. Субботина, Д. В. Барсуков,
А. О. Терентьев, И. Б. Крылов

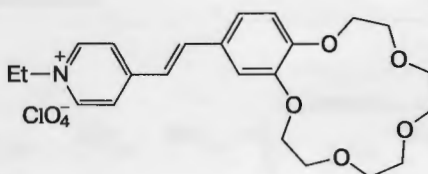


Влияние модифицирования фтором поверхности TiO₂ на его активность в фотокаталитическом окислении загрязнителей в воздухе.

Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 340

Фотопревращения 15-краун-5-содержащего стирилового красителя и его комплекса с катионом бария в присутствии кукурбит[7,8]-урилов

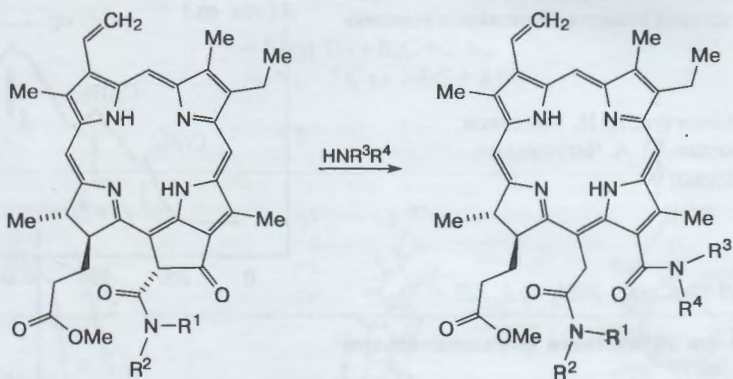
Л. С. Атабекян, Н. А. Александрова,
С. П. Громов



Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 350

Размыкание экзоцикла 13²-амидных производных метилфеорбида *a* под действием аминов

Л. А. Тулаева, Е. И. Пушкарева,
О. В. Толстикова, Д. В. Белых

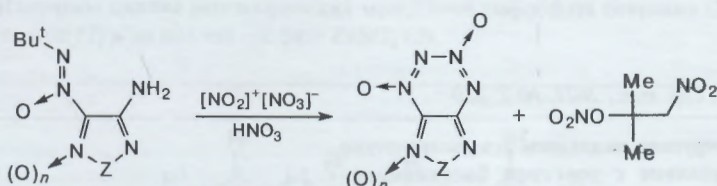


$NR^1R^2 = NHBu, NEt_2, NBu_2$, морфолинил; $NR^3R^4 = NHMe, NMe_2, NHBu$, морфолинил

Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 359

Эффективные методы синтеза 1,2,3,4-тетразин-1,3-диоксидов, аннелированных пятичленными полиазотными гетероциклами

В. П. Зеленов, М. Е. Миняев

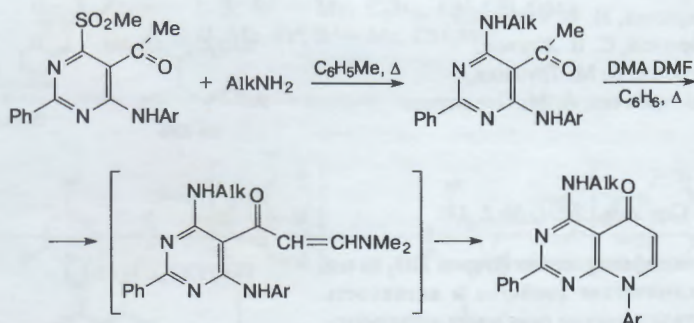


$Z = O, n = 0$; $Z = N-Alk, n = 0$ или 1

Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 369

Новый путь синтеза 4-аминозамещенных производных пиrido[2,3-*d*]пиримидин-5-она

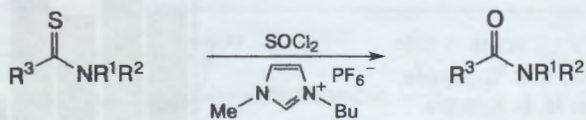
А. В. Комков, С. В. Баранин,
А. С. Дмитренко, Н. Г. Колотыркина,
И. В. Заварзин



Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 378

Десульфуррующий реагент для тиамидов

А. В. Полушина, И. В. Заварзин,
М. М. Краюшкин, Г. М. Родионова,
В. Н. Яровенко



$NR^1R^2 = \text{морфолин-4-ил, NHPh}$; $R^3 = \text{ArNHC(O), HetNHC(O), Het, PhCH}_2, \text{PhC(O)}$

Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 383

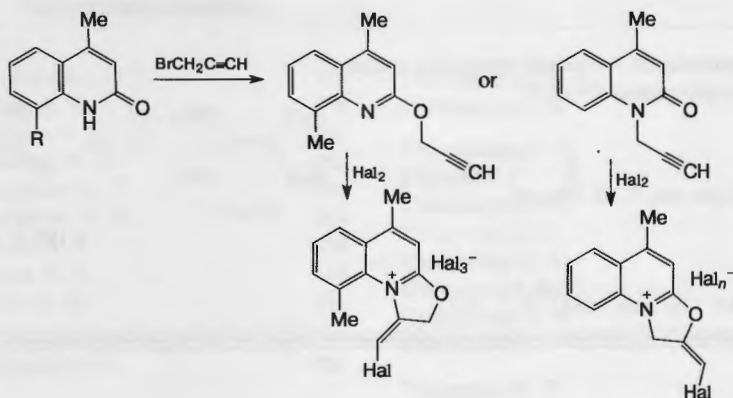
2,2-Диметил-3-[(4-метилфенил)сульфонил]-2,3-дигидро-1,3,2-бензоксазол: синтез, свойства и строение

А. Ю. Никонов, И. В. Стерхова,
Н. Ф. Лазарева



$X = Cl, NMe_2$

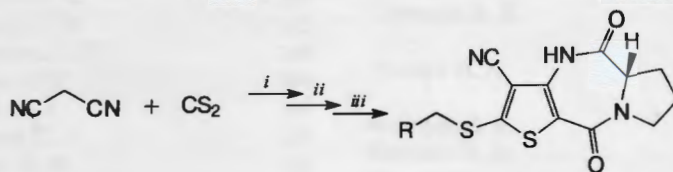
Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 386

Синтез и галогенициклизация *N*- и *O*-пропаргильных производных хинолин-2(1*H*)-онов

Е. А. Вершинина, Д. Г. Ким,
А. А. Осипов

R = H, Me; Hal = Br, I; n = 1, 3

Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 391

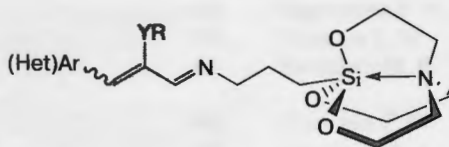
Синтез (5*aS*)-2-бензилтио-3-циано-4,5*a*,6,7,8,10-гексагидро-5*H*-пирроло[1,2-*a*]-тиено[3,2-*e*][1,4]дизапин-5,10-дионов

А. Е. Федоров, Л. А. Родиновская,
А. М. Шестопалова, А. С. Сигеев

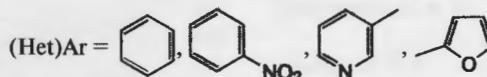
i. KOH, EtOH; ii. ; iii. RCH₂Cl

R = Ph, 4-ClC₆H₄, 4-BrC₆H₄, 4-MeC₆H₄, 2,6-F₂C₆H₃

Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 394

O- и *S*-содержащие 1-азадиеновые производные 3-аминопропилсилатрана

С. Н. Адамович, И. А. Ушаков,
А. В. Афонин, Н. В. Вчисло,
Е. Н. Оборина, Д. В. Павлов

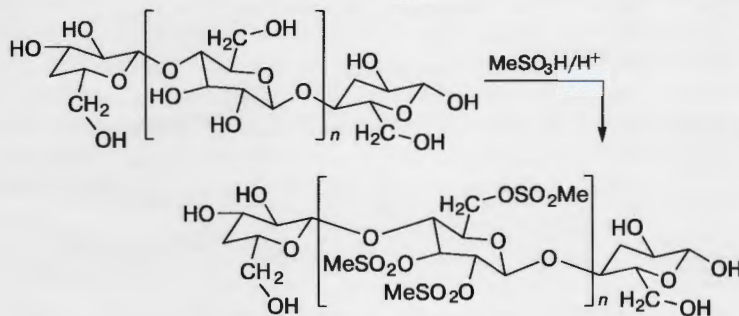


Y = O, 1*E*,2*Z*-изомер

Y = S, 1*E*,2*Z*/1*E*2*E* (смесь изомеров)

Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 406

Модифицирование целлюлозы в растворах метансульфокислоты



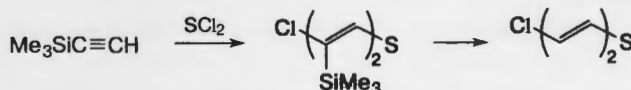
М. А. Ахмедов, Ш. Ш. Хидиров,
Х. С. Хибиев

Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 412

Краткие сообщения

Стереоселективный синтез функциональных дивинилсульфидов на основе дихлорида серы и (триметилсилил)ацетилена

М. В. Мусалов, А. А. Майлян,
М. В. Мусалова, С. В. Амосова,
В. А. Потапов

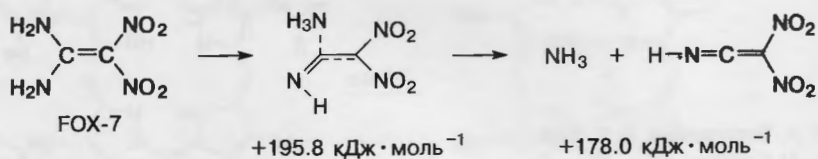


Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 420

Письма редактору

Альтернативный механизм термолита диаминодинитроэтилена (FOX-7)

Б. Э. Крисюк, Т. М. Сыпко



Изв. АН. Сер. хим., 2021, № 2, 424