ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

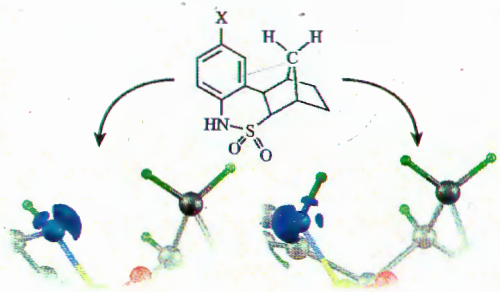
Основан в 1960 г. *Выходит 12 раз в год*

ТОМ 67 Апрель № 4, 2026

СОДЕРЖАНИЕ

Карташов С.В., Федонин А.П., Файзуллин Р.Р. 162445

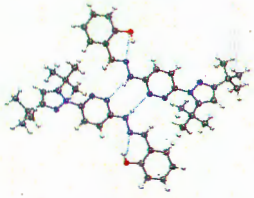
Распределение атомных зарядов и химическое связывание в изолированных молекулах производных 3,4-дигидро-1*H*-бензо[*c*][1,2]тиазин-2,2-диоксида



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

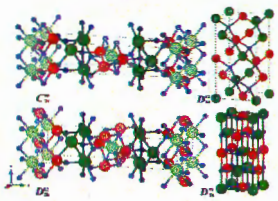
Синтез и строение N- и O-донорных лигандов различной дентатности на основе пиридазина



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

Дугинова Е.Б., Басалаев Ю.М., Кравченко Н.Г. 163082

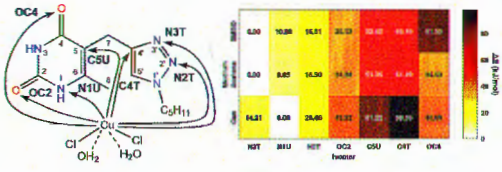
Электронная структура и упругие свойства полиморфных фаз оксоталлата лития ($LiTlO_2$)



Ключевые слова: химическая связь, зонная структура, халькопирит, $LiTlO_2$, 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



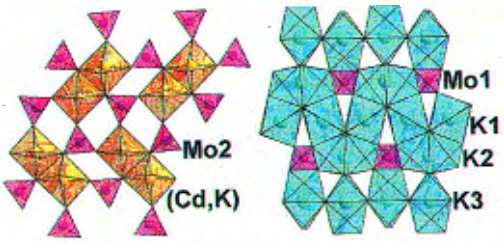
Ключевые слова: 1,2,3-триазол, урацил, хлорид меди(II), комплексообразование, DFT, ^{13}C ЯМР-спектроскопия

ИНХ СО РАН
НОВОСИБИРСК
2026

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

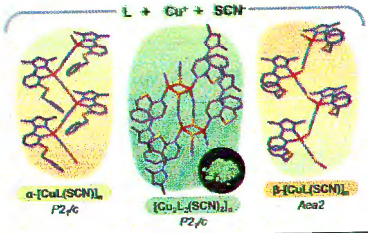


163167

Скворцова С.В., Верхов Ф.К.

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

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

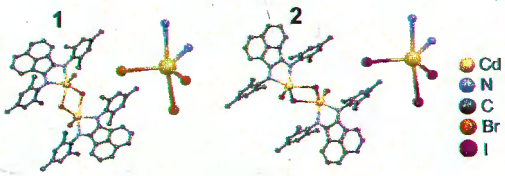


163308

Чехов Е.В., Бакаев И.В., Комлягина В.И., Улантиков А.А., Ромашев Н.Ф., Гущин А.Л.

Биядерные комплексы кадмия(II) на основе 1,2-бис-{(2,4,6-триметилфенил)}иминоаценафтена: 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_4/Cs бората $(NH_4)_{0.858}Cs_{0.142}[B_5O_7(OH)_2]\cdot 0.5H_2O$

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

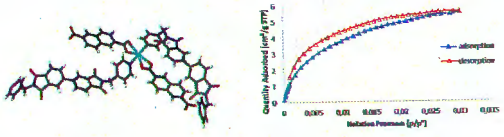


163538

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

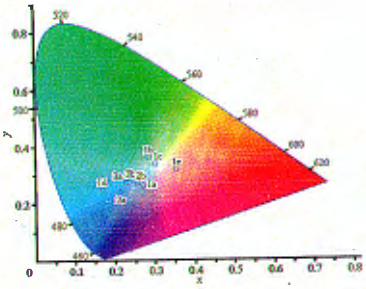


163757

Симонова Е.А., Храмцова Д.М., Гореявчева А.А., Нигматулина Е.Н.

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

Ключевые слова: спонтанная кристаллизация, РЗЭ, люминесценция, перенос энергии, $LiBa_2B_5O_{10}$, $LiBaF_3$, $LiBa_{12}(BO_3)_7F_4$

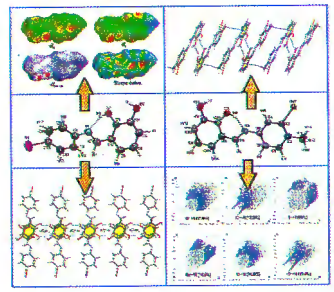


163763

Şimşek O., Atalay Ş., Taşdoğan M., Ağar 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

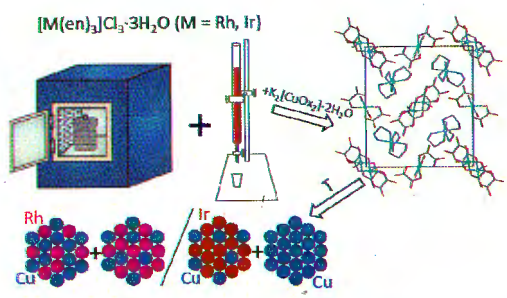


164073

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

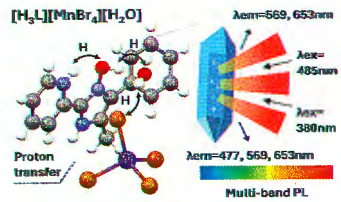


164077

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

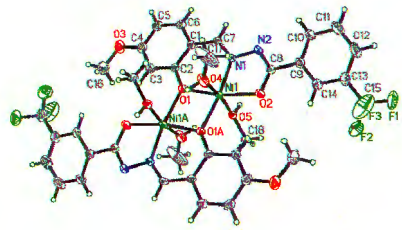


164080

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

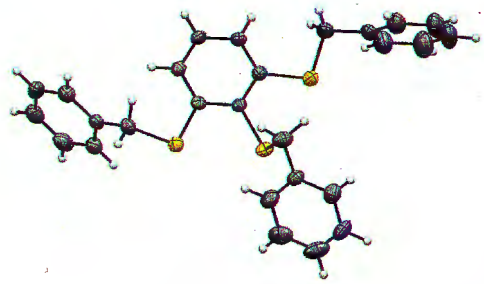


164151

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

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

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

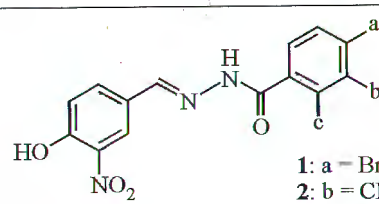


164153

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



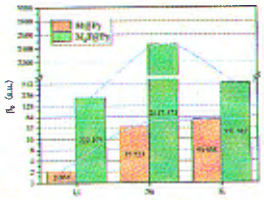
1: a = Br, b = c = H;
2: b = CF_3, a = c = H;
3: c = NH_2, a = b = H.

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

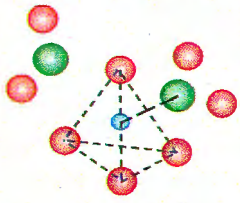


164298

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

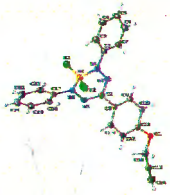


164389

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

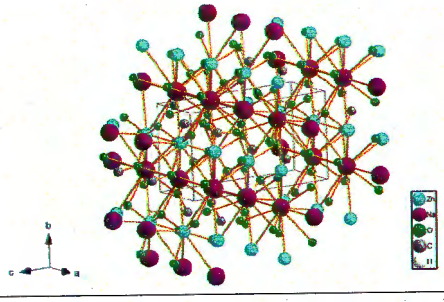


164507

Журавлев Ю.Н., Гвоздикова Е.В.

Структура, механические, колебательные свойства нелинейно-оптических кристаллов $LiZnCO_3(OH)$ и $NaZnCO_3(OH)$ из первых принципов

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

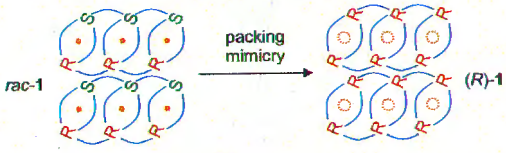


164583

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

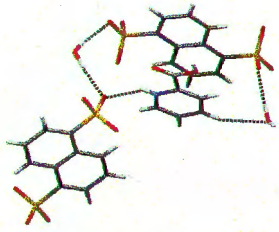


164654

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

© Сибирское отделение РАН, 2026
© Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 2026
© Новосибирский государственный университет, 2026

CONTENTS

Kartashov S.V., Fedonin A.P., Fayzullin R.R. Atomic charge distribution and chemical bonding in isolated molecules of 3,4-dihydro-1*H*-benzo[*c*][1,2]thiazine-2,2-dioxide derivatives 162445

Nafikov M.D., Taigina M.D., Naumov D.Yu., Gushchin A.L., Vinogradova K.A. Synthesis and structure of N- and O-donor pyridazine-based ligands of various denticity 163022

Duginova E.B., Basalaev Y.M., Kravchenko N.G. Electronic structure and elastic properties of polymorphic phases of lithium oxothallate ($LiTlO_2$) 163082

Pyshkin A.A., Khamitov E.M., Alekhina I.E., Ivanov S.P. Complexation of 5-(1-pentyl-4-methyl-1,2,3-triazol-4-yl)-6-methyluracil with copper chloride in organic solvents 163164

Solodovnikov S.F., Solodovnikova Z.A., Zolotova E.S., Yudin V.N., Saranchina E.M. Crystal structures of double molybdates of potassium and cadmium 163167

Skvortsova S.V., Verkhov F.K. Copper(I) thiocyanate complex with 2-benzylthio-4-(3,5-dimethyl-1*H*-pyrazol-1-yl)pyrimidine: Synthesis, polymorphism, and luminescence 163308

Chekhov E.V., Bakaev I.V., Komlyagina V.I., Ulantikov A.A., Romashev N.F., Gushchin A.L. Binuclear cadmium(II) complexes based on 1,2-bis-{(2,4,6-trimethylphenyl)}iminoacenaphthene: Synthesis, structure, and electrochemical properties 163406

Kopylova Yu.O., Volkov S.N., Aksenov S.M., Bubnova R.S. Synthesis and crystal structure of a new mixed NH_4/Cs borate $(NH_4)_{0.858}Cs_{0.142}[B_5O_7(OH)_2]\cdot 0.5H_2O$ 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 163757

Simonova E.A., Khramtsova D.M., Goreyavcheva A.A., Nigmatulina E.N. Crystal growth and luminescent characteristics of Li–Ba fluorides, borates, and fluoroborates doped with REE (REE = Sm, Eu, Tb) 163763

Simsek O., Atalay S., Tasdogan M., Agar E., Bülbül H., Kansiz 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 164073

Sinitsa V.I., Smirnov P.S., Filatov E.Yu., Kuratieva N.V., Plyusnin P.E., Korenev S.V. *Tris*-Ethylenediamine complexes of rhodium(III) and iridium(III): Synthesis, structural characterization and formation of double complex salts with oxalatocuprate(II) 164077

Berezin A.S., Danilenko A.M., Sukhikh A.S., Selivanov B.A., Komarovskikh A.Yu. Switching colors: Multiple emission in a manganese(II) bromide compound 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 164151

Buravlev A.A., Bagryanskaya I.Y., Makarov A.Yu. Molecular and crystal structure of 1,2,3-tribenzylthiobenzene and 1,2-dibenzylthio-3-fluorobenzene according to XRD data and density functional theory computations 164153

Wang Y., Li W., Song N. Synthesis, characterization and crystal structures of aroylhydrazones derived from 4-hydroxy-3-nitrobenzaldehyde with various hydrazides 164295

Lu Y., Li X. Structures and nonlinear optical properties of the functionalized porphyrin with the alkalides: A DFT study 164298

Smirnov P.R., Grechin O.V. Structural parameters of the nearest environment of ions in nickel chloride aqueous solutions according to XRD data 164389

Konshina D.N., Lupanova I.A., Spesivaya E.A., Sukhno I.V., Konshin V.V. Synthesis and structure of «clickable» boron difluoride formazanate 164507

Zhuravlev Yu.N., Gvozdikova E.V. First principles calculations of structures, mechanical and vibrational properties of nonlinear optical $LiZnCO_3(OH)$ and $NaZnCO_3(OH)$ crystals 164583

Frantsuzova L.V., Gerasimova D.P., Metlushka K.E., Nikitina K.A., Ivshin K.A., Kataeva O.N., Lodochnikova O.A. Crystallization of *N*-(1-(1-naphthyl)ethyl)-*N'*-phenylthiourea: Transferring a stable packing motif from a racemic medium to a homochiral one 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 164735