

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 64

Июль

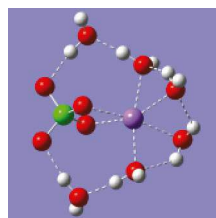
№ 7, 2023

СОДЕРЖАНИЕ

Майоров В.Д., Кислина И.С., Тараканова Е.Г.

Строение гидратов $\text{NaClO}_4 \cdot (\text{H}_2\text{O})_n$ ($n = 1-7$) и равновесный состав системы $\text{NaClO}_4\text{-H}_2\text{O}$

Ключевые слова: водный раствор NaClO_4 , водородная связь, строение гидратов, нуклеофильное содействие анионов, ИК спектроскопия, квантово-химические расчеты

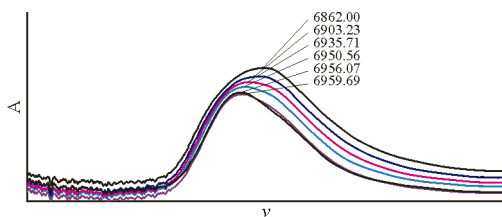


112758

Пашаев Б.Г.

Изучение структуры воды в водных растворах КГ методами вискозиметрии, денситометрии, кондуктометрии и ИК спектроскопии

Ключевые слова: КГ, вязкость, плотность, электропроводность, число гидратации, энергия водородной связи

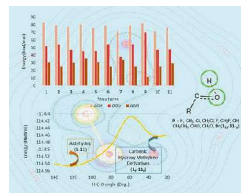


112762

Poorghasem E., Piri F.

Novel carbene hydroxymethylene derivatives: Gibbs free energy, NBO, AIM, and Hammett approaches via DFT and MP2 methods

Keywords: aldehyde, carbene, radical, hydroxymethylene, bond dissociation energy, free energy, AIM, NBO, Hammett

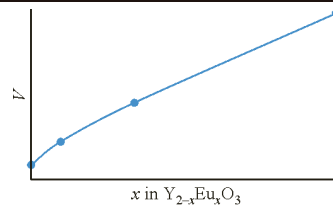


112766

Николаев Р.Е., Яковлева А.М., Тарасенко М.С., Сухих А.С., Трифионов В.А., Наумов Н.Г.

Кристаллы твердого раствора $(\text{Y}_{1-x}\text{Eu}_x)_2\text{O}_3$: рост и кристаллическая структура

Ключевые слова: иттрий, европий, твердый раствор, кристаллическая структура

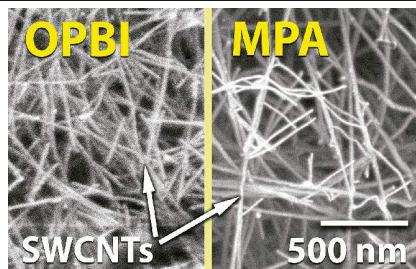


112774

Кузнецов В.А., Федоров А.А., Холхоев Б.Ч., Герасимов Е.Ю., Бурдуковский В.Ф.

Влияние типа высокотемпературной полимерной матрицы на морфологию и электропроводность композитов с ОУНТ

Ключевые слова: полибензимидазол, ароматический полиамид, электросопротивление, механизмы проводимости, микроструктура



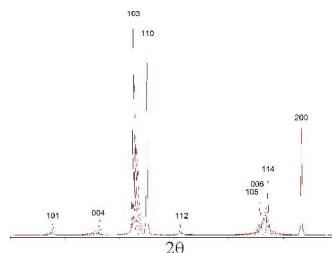
112912

Горкуша А.С., Цыбуля С.В., Черепанова С.В.,
Шмаков А.Н., Павлова С.Н.

112975

**Методика оценки содержания планарных
дефектов в структурах A_2BO_4 ряда
Раддлсдена–Поппера на примере Sr_2TiO_4**

Ключевые слова: структуры ряда Раддлсдена–Поппера,
дефекты чередования слоев, дифракция,
синхротронное излучение

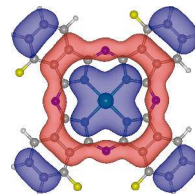


Низовцев А.С.

112979

**Оптический спектр тетрафторзамещенного
фталоцианина цинка**

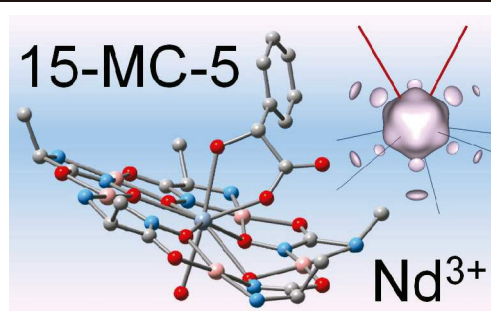
Ключевые слова: цинк, фтор, фталоцианины,
электронная структура, оптические спектры,
квантовая химия



Жигулин Г.Ю., Каткова М.А., Муравьева М.С.,
Забродина Г.С., Баранов Е.В., Маркин Г.В.,
Кетков С.Ю.

**15-Металлакраны-5 на основе легких
лантаноидов: топология электронной плотности
и ЯМР распознавание энантиомеров
манделат-аниона**

Ключевые слова: гетерометаллические комплексы,
макроциклы, аминоксидоксиматные лиганды, медь,
лантаноиды, ЯМР, DFT

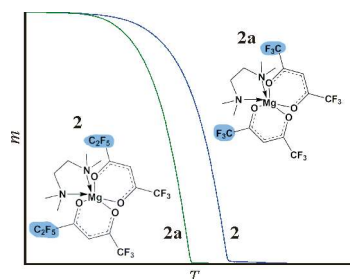


112989

Рихтер Э.А., Ли С., Викулова Е.С., Кочелаков Д.В.,
Корольков И.В., Хрусталева В.Н., Gao E.,
Морозова Н.Б.

**Разнолигандные прекурсоры для получения
пленок MgF_2 : влияние фторированного
заместителя на строение и термические свойства**

Ключевые слова: магний, β -дикетонат,
фторированный прекурсор, летучесть,
рентгеноструктурный анализ, термический анализ



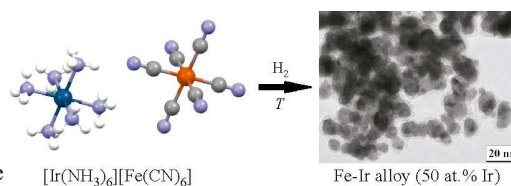
113129

Варыгин А.Д., Попов А.А., Громилов С.А.,
Плюснин П.Е., Корнев С.В.

113132

**Термическое разложение $[Ir(NH_3)_6][Fe(CN)_6]$
в различных атмосферах, кристаллические
структуры $[Ir(NH_3)_6][Fe(CN)_6]$ и $[Ir(NH_3)_6]X_3$
($X = Cl, Br$)**

Ключевые слова: иридий, железо, двойные комплексные
соли, аминоксидоксиматные лиганды, термическое разложение,
наносплавы

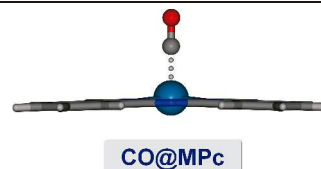


Низовцев А.С.

113185

**Взаимодействие монооксида углерода
с фталоцианинами переходных металлов**

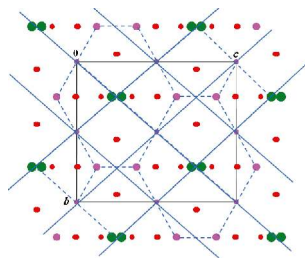
Ключевые слова: фталоцианины 3d-металлов,
адсорбция, перенос заряда, квантовая химия



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

Кристаллографический анализ и особенности строения сотовых катионных каркасов в структурах $\text{Na}_2\text{FePO}_4\text{F}$, NaFePO_4 и LiVOPO_4

Ключевые слова: кристаллографический анализ, псевдосимметрия, сотовые катионные каркасы, «скелетные подрешетки»

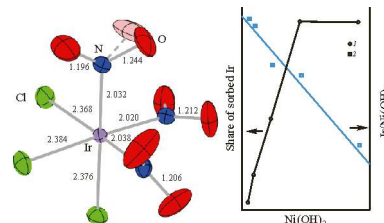


113238

Топчийн П.А., Николаев В.А., Куратьева Н.В., Васильченко Д.Б., Коренев С.В.

Синтез, структура и свойства гран-трихлоротринитроиридата(III) калия

Ключевые слова: иридий, нитрокомплексы, хлорокомплексы, аквакомплексы, рентгеноструктурный анализ, спектроскопия, сорбция

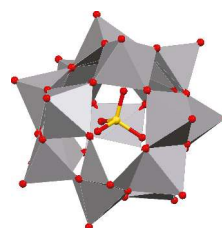


113295

Румянцев Р.В., Забродина Г.С., Каткова М.А., Кетков С.Ю., Фукин Г.К.

Исследование внутримолекулярных взаимодействий в полиоксованадатном кластере Cambria $[(\text{SO}_4)_2\text{C}_2\text{V}_{16}\text{O}_{42}]^{6-}$

Ключевые слова: полиоксованадат, кластер, PCA, DFT, электронная плотность, QTAIM

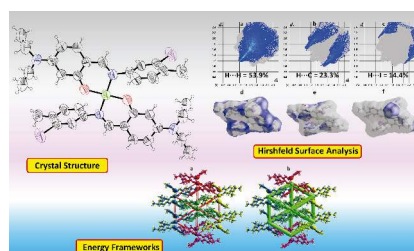


113298

Alaman E., Ağar A.A., Tahir M.N., Ashfaq M., Poyraz E.B., Dege N.

Synthesis, structural, spectroscopic, Hirshfeld surface analysis and computational study of copper complex containing salicylaldimine ligands

Keywords: Schiff base complex, single crystal X-ray diffraction, supramolecular assembly, Hirshfeld surface analysis, non-covalent interactions



113301

Булавченко О.А., Винокуров З.С., Селютин А.Г., Мищенко Д.Д., Сараев А.А., Гольденберг Б.Г., Цыбуля С.В., Зубавичус Я.В.

Концептуальный дизайн экспериментальной станции 1-7 ЦКП «СКИФ»-НГУ «Базовые методы синхротронной диагностики для образовательной, исследовательской и инновационной деятельности студентов»

Ключевые слова: монокристаллическая рентгеновская дифракция, порошковая рентгеновская дифракция, рентгеновская спектроскопия поглощения, *in situ / operando*, рентгенофлуоресцентный анализ, функция радиального распределения атомов, подготовка кадров СИ, научно-практическая работа студентов, образование

Базовые методы синхротронной диагностики для образовательной, исследовательской и инновационной деятельности студентов

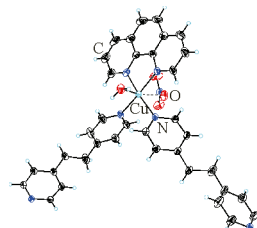


113304

Kawade Vitthal A., Bhat Satish S., Naveen S., Lokanath N.K., Butcher R.J.

One-Dimensional copper(II) coordination polymer based on 1,2-bis-(4-pyridyl) ethane and 1,10-phenanthroline

Keywords: copper(II) coordination polymer, hydrogen bonding, 1,10-phenanthroline, bridging ligand

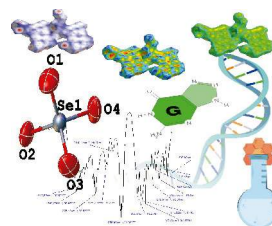


11314

Baaziz S., Poyraz E.B., Benali-Cherif R., Falek W.,
Hannachi B., Dege N., Bendeif E.-E., Benali-Cherif N.

**Crystal structure, Hirshfeld surface analysis
and IR analysis of 2-amino-1,9-dihydro-6H-purin-
6-one-selenate-water**

Keywords: selenic acid, guanine complex, synthesis,
crystal structure, IR analysis



113392

Содержание следующего номера — в конце журнала