

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 65

Апрель

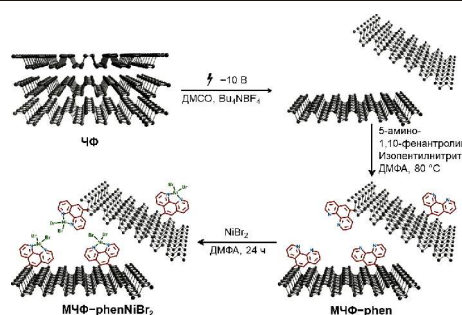
№ 4, 2024

СОДЕРЖАНИЕ

Кучкаев А.М., Кучкаев А.М., Сухов А.В.,
Сапарина С.В., Гнездилов О.И., Климовицкий А.Е.,
Зиганшина С.А., Низамеев И.Р., Файзуллин Б.А.,
Синяшин О.Г., Яхваров Д.Г.

**Ковалентная функционализация малослойного
черного фосфора комплексом $[\text{NiBr}_2(\text{phen})]$,
где phen – 1,10-фенантролин**

Ключевые слова: черный фосфор, фосфорен,
ковалентная функционализация, дииминные лиганды,
1,10-фенантролин, комплексы никеля, диазосоединения

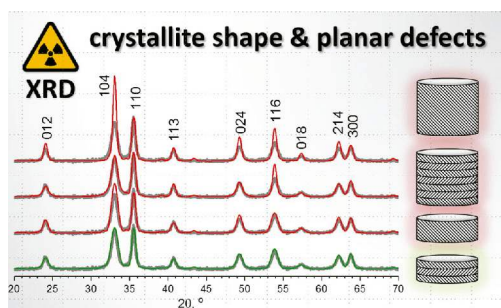


124527

Черепанова С.В., Сеница Н.А., Яценко Д.А.,
Герасимов Е.Ю., Сидельников А.А.,
Матвиенко А.А.

**Структура и форма частиц гематита,
полученного окислительным термолизом
дигидрата оксалата железа: анизотропное
уширение рентгеновских дифракционных пиков**

Ключевые слова: гематит, порошковая рентгеновская
дифракция, планарные дефекты, микродвойникование,
анизотропная форма частиц

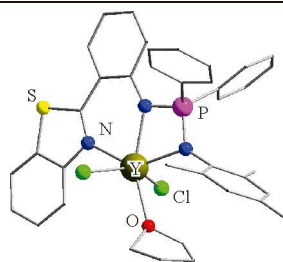


124535

Сеница Д.К., Сухих Т.С., Пушкаревский Н.А.,
Конченко С.Н.

**Новый несимметричный иминофосфонамидный
лиганд и комплекс иттрия с ним:
синтез и кристаллическая структура**

Ключевые слова: координационные соединения,
редкоземельные металлы, иттрий, иминофосфонамиды,
рентгеноструктурный анализ

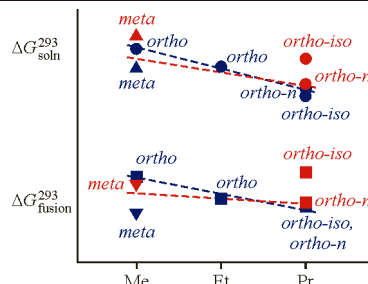


124619

Захарычев Д.В., Герасимова Д.П., Файзуллин Р.Р.

Анализ внутрикристаллической хиральной дискриминации для рядов ариловых эфиров глицерина на основании изменений стандартных свободных энергий растворения и плавления

Ключевые слова: хиральность, хиральная дискриминация, кристаллизация, растворимость, плавление, конгломерат, рацемическое соединение, эфиры глицерина

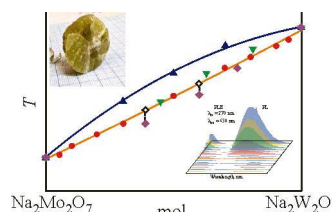


124813

Bondareva A.F., Artemieva M.A., Kuznetsov A.B., Ryadun A.A., Grigorieva V.D., Fedorenko A.D., Shlegel V.N., Musikhin A.E.

Formation of $\text{Na}_2\text{Mo}_2\text{W}_{2(1-x)}\text{O}_7$ solid solutions and derived phase diagram

Keywords: $\text{Na}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$, $\text{Na}_2\text{W}_2\text{O}_7$, solid-solutions, phase diagram, luminescence



124819

Rakhmanova M.I., Kokh K.A., Kononova N.G., Kuznetsov A.B.

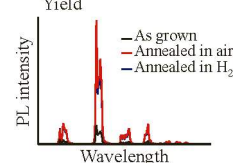
Crystal growth and luminescence properties of $\text{TbGa}_3(\text{BO}_3)_4$ crystals

Ключевые слова: crystal, borate, growth, luminescence, annealing

$\text{Tb}_{1.04}\text{Bi}_{0.04}\text{Ga}_{2.92}(\text{BO}_3)_4$

Luminescence Quantum Yield = 38%

124949



Kokh K.A., Kuznetsov A.B., Rakhmanova M.I., Kokh A.E.

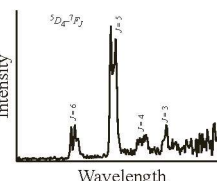
UP-conversion luminescence in $\text{TbAl}_3(\text{BO}_3)_4$: Yb^{3+} synthesized by solution combustion method

Ключевые слова: borates, synthesis, luminescence, up-conversion

$\lambda_{\text{exc}} = 980 \text{ nm}$



$\text{Tb}_{0.9}\text{Yb}_{0.1}\text{Al}_3(\text{BO}_3)_4$

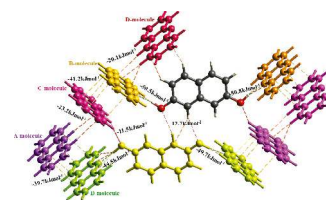


124954

Jagan R.

Self-assembled supramolecular frameworks and interaction energy studies of acridine and dihydroxynaphthalene based cocrystals

Keywords: supramolecular, hydrogen bond, $\pi \cdots \pi$, C—H \cdots π , cocrystal, interaction energy, framework, acridine

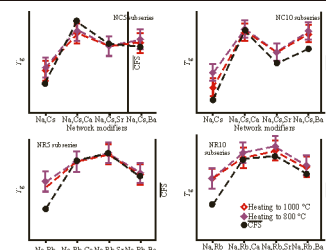


125018

Emeyashev V.E., Osipov A.A., Korinevskaya G.G., Zhivulin D.E., Danilina E.I.

Structural features and properties of multicomponent sodium-cesium/rubidium aluminoborosilicate model matrix glasses of basis composition

Keywords: borosilicate matrix materials, structure, vibrational spectroscopy, properties, high-level waste

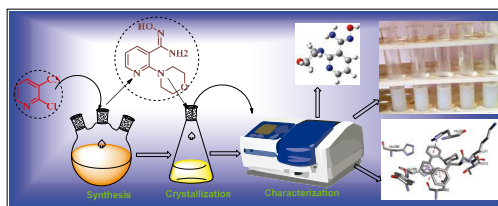


125065

Geetha S., Sribalan R., Lakshmi S.

Synthesis, crystal structure, spectroscopic characterization, in vitro and in silico studies of water-soluble (Z)-N'-hydroxy-2-morpholinonicotinimidamide

Keywords: water soluble, docking studies, anti-diabetic, anti-inflammatory, computational studies

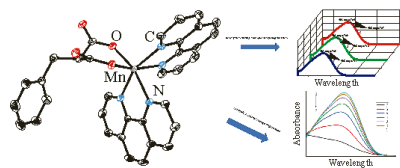


125328

Wang B., Ma X.Y., Liu W., Gao E.J.

The study on the novel complex structure and photocatalytic degradation ability of manganese

Keywords: coordination polymers, manganese, crystal structure, photodegradation, methyl orange

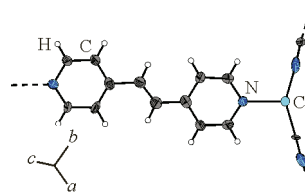


125336

Ермолаев А.В., Сухих Т.С., Миронов Ю.В.

**Кристаллическая структура цианомостикового координационного комплекса меди(I)
[Cu₈(dpe)₄(CN)₈] · 2dpe · H₂O**

Ключевые слова: гидротермальный синтез, медь, координационный полимер, кристаллическая структура

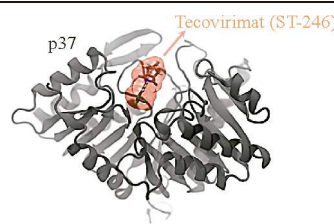


125376

Борисевич С.С., Горохов Я.В., Архипов С.Г.

Место связывания тековиримата – ингибитора мембранного белка р37 ортопоксвирусов

Ключевые слова: ортопоксвирус, мембранный вирусный белок р37, молекулярно-динамические симуляции, тековиримат, НИОХ-14

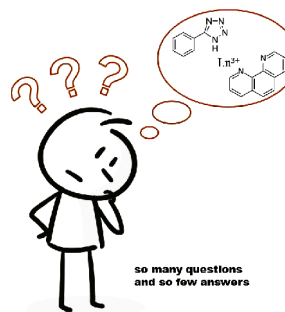


125428

Санженакowa Е.А., Смирнова К.С., Поздняков И.П.,
Лидер Е.В.

Структурные особенности и фотолюминесценция координационных соединений, полученных в системе ацетат лантанида(III) – 1,10-фенантролин в присутствии 5-фенилтетразола

Ключевые слова: комплексы лантанидов(III), 1,10-фенантролин, 5-фенилтетразол, кристаллическая структура, фотолюминесценция

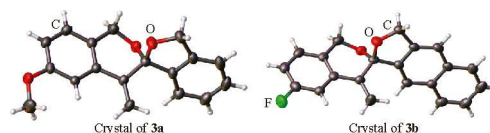


125553

Shen B.-Y., Li X.-H., Lu X.-H., Xin Z.-J.,
Yang A.-M.

Synthesis, crystal structure analysis and DFT studies of two benzospirocyclic ketones

Keywords: spirocyclic ketone, X-ray diffraction, DFT, vibration analysis

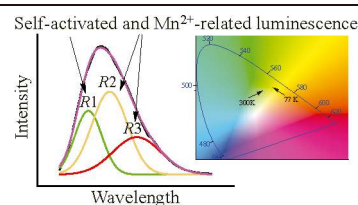


125683

Ryadun A.A., Trifonov V.A., Grigorieva V.D.,
Bondareva A.F., Pavluk A.A.

Self-activated and Mn²⁺-related luminescence in Li_{2-2x}Mg_{2+x}(MoO₄)₃ single crystals

Keywords: Li_{2-2x}Mg_{2+x}(MoO₄)₃:Mn²⁺, crystal growth, photoluminescence, temperature measurement

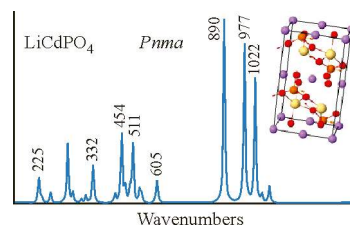


125687

Журавлев Ю.Н.

Первопринципные исследования структуры, электронных и колебательных свойств двойных фосфатов MCdPO₄ (M: Li, Na, Rb, Cs)

Ключевые слова: теория функционала плотности, фосфаты, структура, химическая связь, ИК спектры, КР-спектры

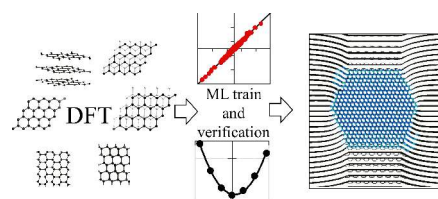


125692

С.В. Ерохин, М.А. Буйлова, П.Б. Сорокин

**Тренировка потенциалов машинного обучения
для моделирования зародышеобразования
в графите**

Ключевые слова: потенциалы машинного обучения,
теория функционала плотности, графит, алмаз,
фазовый переход, нуклеация

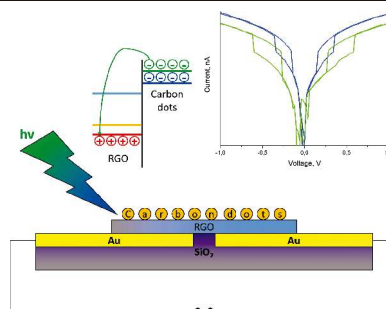


125695

Баранов А.Н., Митюшев Н.Д., Фирсов А.А.,
Кабачков Е.Н., Панин Г.Н.

**Фоточувствительные мемристорные структуры
на основе восстановленного оксида графена
и углеродных наночастиц**

Ключевые слова: оксид графена,
восстановленный оксид графена,
углеродные наночастицы, допирование азотом,
мемристивные состояния, фоточувствительность,
фотомемристор



125704

Содержание следующего номера — в конце журнала