

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 65

Март

№ 3, 2024

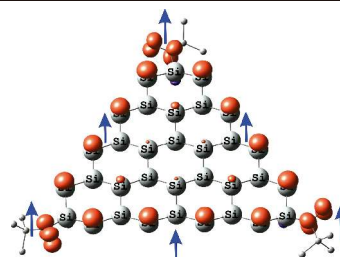
СОДЕРЖАНИЕ

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

123328

Квантово-химическое исследование полициклических кремневодородов с радикальными группами

Ключевые слова: полициклические соединения кремния,
радикал, магнитные свойства, теория функционала
плотности

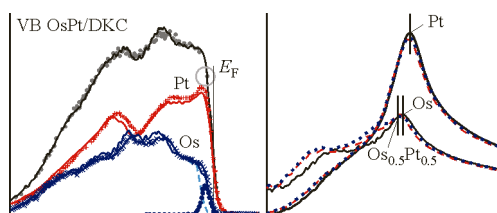


Асанов И.П., Зверева В.В., Федоренко А.Д.,
Асанова Т.И.

123441

Природа химической связи Pt–Os в наносплавах

Ключевые слова: осмий, платина,
биметаллические наносплавы, электронная структура,
рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия,
рентгеновская спектроскопия поглощения

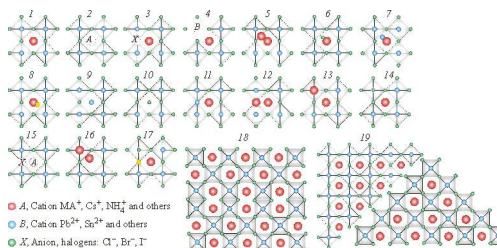


Нургалиев И.Н., Марасулов М.Б., Ашуров Н.Р.

123450

Исследование влияния замещения катиона на структуру галогенидных перовскитов на основе теории функционала плотности и молекулярной динамики

Ключевые слова: гибридный органо-неорганический
материал, перовскит, теория функционала плотности,
катион

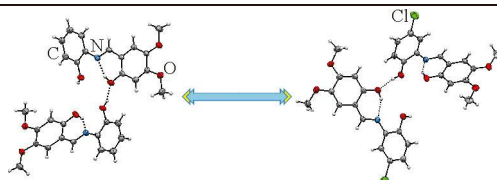


Yeşilbağ S., Kansız S., Dege N., Açar E.

123641

Structural investigation and Hirshfeld surface analysis of two [ONO]-type Schiff bases

Keywords: Schiff base, ONO donor, NMR, XRD,
crystal structure, Hirshfeld surface

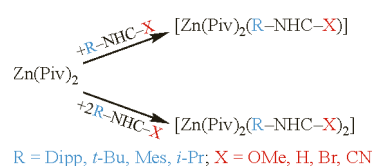


Николаевский С.А., Старикова А.А.

123769

Квантово-химическое изучение строения и устойчивости аддуктов пивалата Zn(II) с N-гетероциклическими карбенами

Ключевые слова: пивалат цинка(II), N-гетероциклические карбены, квантово-химические расчеты, теория функционала плотности

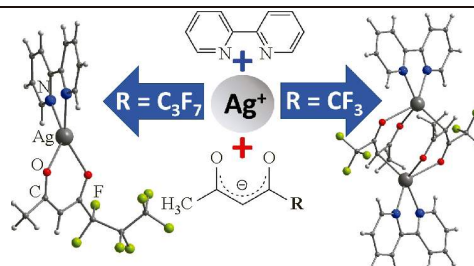


Викулова Е.С., Сухих Т.С., Барышева А.С., Ильин И.Ю., Пищур Д.П., Морозова Н.Б.

123772

Строение и термические свойства комплексов серебра с 2,2'-бипиридином и фторированными β-дикетонатными лигандами

Ключевые слова: серебро, β-дикетонат, разнолигандный комплекс, рентгеноструктурный анализ, термические свойства

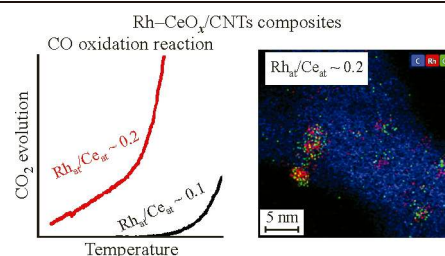


Кибис Л.С., Задесенец А.В., Кардаш Т.Ю., Коренев С.В., Столкус О.А., Славинская Е.М., Подъячева О.Ю., Боронин А.И.

123828

Структурные и каталитические свойства композитных катализаторов Rh-CeO2/МУНТ

Ключевые слова: наночастицы, кластеры, низкотемпературное окисление CO, МУНТ, Rh/CeO2, композитный катализатор

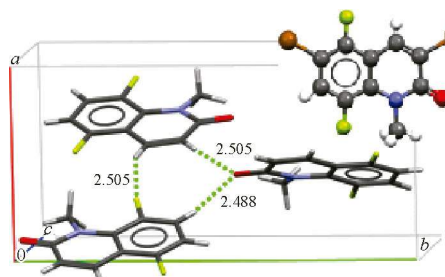


Верхов Ф.К., Багрянская И.Ю., Краснов В.И., Шундрин И.К., Селиванова Г.А.

123874

Кристаллическая структура галогенированных N-метилхинолин-2-онов: получение и исследование межмолекулярных взаимодействий в кристаллах

Ключевые слова: фторированные N-метилхинолин-2-оны, бромсодержащие N-метилхинолин-2-оны, рентгеноструктурный анализ, кристаллическая структура, межмолекулярные взаимодействия

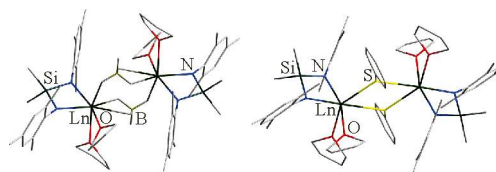


Баширов Д.А., Лашенко Д.И., Сухих Т.С., Конченко С.Н.

123953

Синтез и строение комплексов $[\{\text{Ln}(\text{Me}_2\text{Si}(\text{NMes})_2)(\text{THF})_2\}_2(\mu\text{-L})_2]$ ($\text{L} = \text{BH}_4^-$, $\text{Ln} = \text{Y, Dy}$; $\text{L} = \text{PhS}^-$, $\text{Ln} = \text{Y, Tb, Dy}$)

Ключевые слова: координационные соединения, редкоземельные элементы, диспрозий, иттрий, тербий, силандиамида, синтез, кристаллическая структура, люминесценция

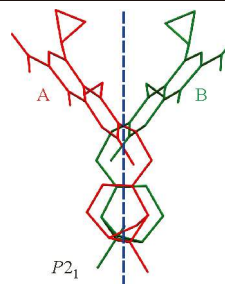


Французова Л.В., Герасимова Д.П., Гильфанов И.Р., Сударинов Д.В., Никитина Л.Е., Лодочникова О.А.

124068

Псевдосимметричная кристаллизация производных фторхинолона с терпеновым фрагментом

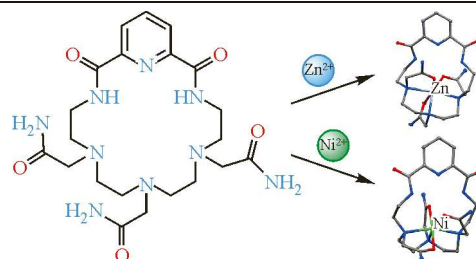
Ключевые слова: псевдосимметрия, супрамолекулярный ассоциат, межмолекулярные взаимодействия, квантово-химические расчеты



Шукина А.А., Зубенко А.Д., Карноухова В.А., Федоров Ю.В., Федорова О.А.

Новое пиридиназакраун-соединение Py3Am и изучение кристаллической структуры его комплексов с катионами Zn^{2+} и Ni^{2+}

Ключевые слова: лиганд, пиридиназакраун-соединения, комплексные соединения, рентгеноструктурный анализ, хелатирующие группы

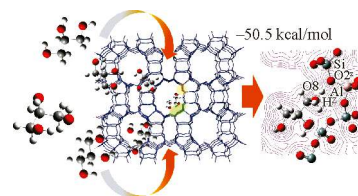


124070

Шеляпина М.Г., Максимова Е.П., Егоров А.В.

Адсорбция глицерина на бренстедовских центрах морденита по данным теории функционала плотности

Ключевые слова: глицерин, цеолиты, морденит, теория функционала плотности

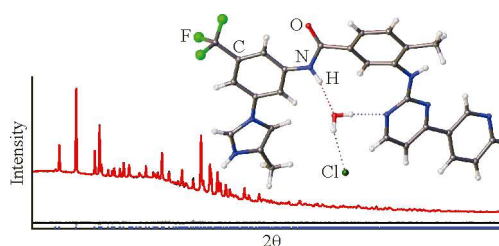


124080

Головешкин А.С., Куликова Е.С., Новиков Р.А., Вологжанина А.В., Корлюков А.А.

Кристаллическое строение моногидрата гидрохлорида нилотиниба по данным порошковой рентгеновской дифракции

Ключевые слова: активный фармацевтический ингредиент, кристаллическая структура, порошковая рентгеновская дифракция, ритвельдовское уточнение, спектроскопия ЯМР твердого тела

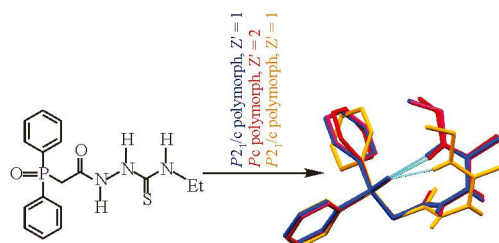


124349

Самигуллина А.И., Исаева А.О., Комунарова Д.К., Бурангулова Р.Н., Гаврилова Е.Л., Захарычев Д.В., Губайдуллин А.Т.

Полиморфизм в кристаллах N4-этил-N1-(дифенилфосфорил)ацетил-тиосемикарбазида

Ключевые слова: дифенилфосфорилацетил тиосемикарбазид, рентгеноструктурный анализ, супрамолекулярный мотив, полиморфизм, поверхность Хиршфельда

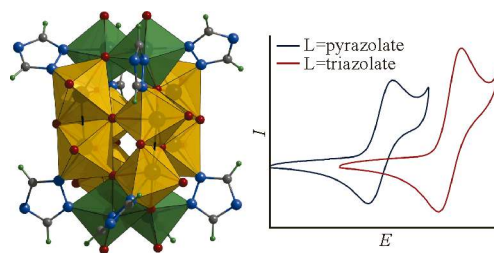


124401

Конькова А.В., Евтушок Д.В., Воротников Ю.А., Ельцов И.В., Яньшолё В.В., Иванов А.А., Шестопапов М.А.

Тетрабутиламмонийные соли полиоксометаллокластеров $[Mo_{12}O_{28}(\mu-L)_8]^{4-}$ с пиразолат- и триазолат-лигандами

Ключевые слова: молибден, полиоксометаллаты, кластерные комплексы, квантово-химические расчеты, циклическая вольтамперометрия

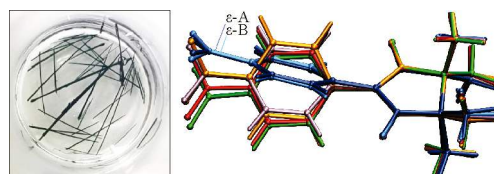


124492

Федянин И.В., Самигуллина А.И., Третьяков Е.В.

Новая ϵ -полиморфная модификация 4-нитрофенилзамещенного нитронилнитроксила

Ключевые слова: органический радикал, рентгеноструктурный анализ, супрамолекулярный синтон, полиморфизм, поверхность Хиршфельда



124494

Содержание следующего номера — в конце журнала