

ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 65

Март

№ 3, 2024

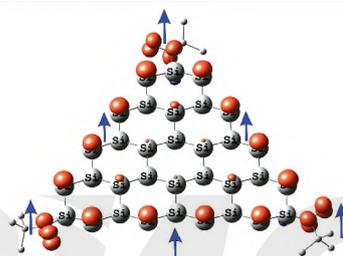
СОДЕРЖАНИЕ

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

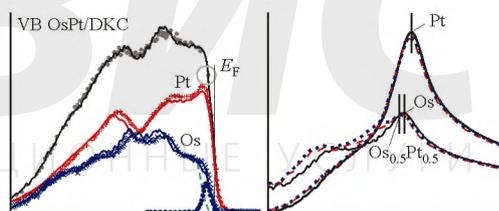


Асанов И.П., Зверева В.В., Федоренко А.Д.,  
Асанова Т.И.

123441

Природа химической связи Pt–Os  
в наносплавах

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

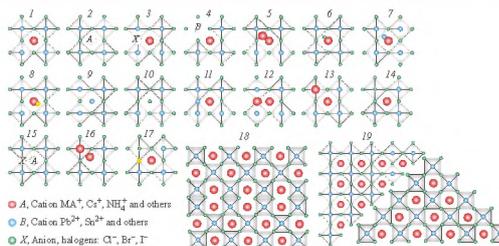


Нургалиев И.Н., Марасулов М.Б., Ашуров Н.Р.

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

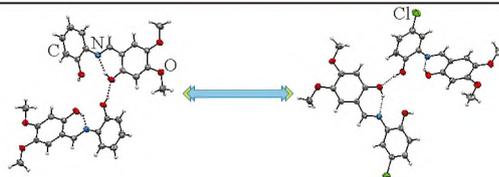


Yeşilbağ S., Kansız S., Dege N., Açar E.

123641

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

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

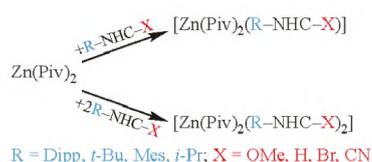


Николаевский С.А., Старикова А.А.

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

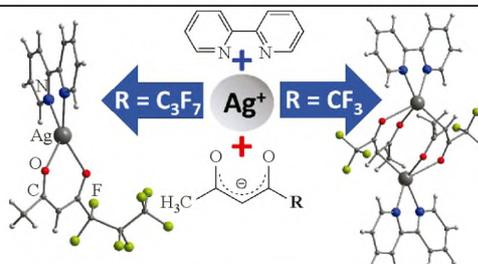


Викулова Е.С., Сухих Т.С., Барышева А.С., Ильин И.Ю., Пищур Д.П., Морозова Н.Б.

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

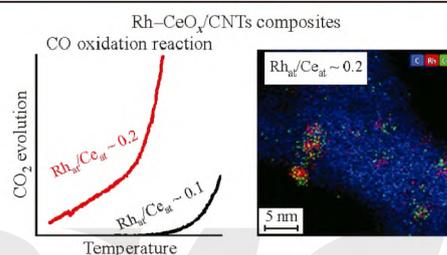


Кибис Л.С., Задесенец А.В., Кардаш Т.Ю., Корнев С.В., Стонкус О.А., Славинская Е.М., Подъячева О.Ю., Боронин А.И.

123828

**Структурные и каталитические свойства композитных катализаторов Rh-CeO2/МУНТ**

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

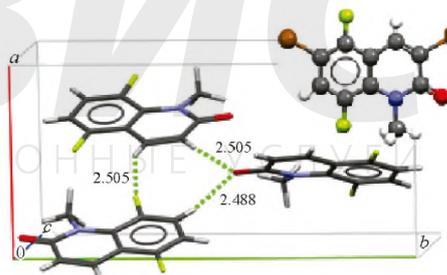


Верхов Ф.К., Багрянская И.Ю., Краснов В.И., Шундрин И.К., Селиванова Г.А.

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

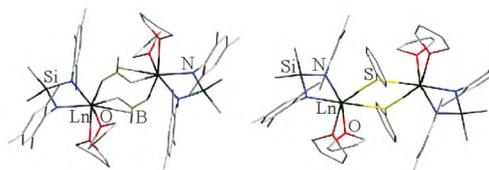


Баширов Д.А., Лащенко Д.И., Сухих Т.С., Конченко С.Н.

123953

**Синтез и строение комплексов [Ln(Me2Si(NMes)2)(THF)2]2(μ-L)2 (L = BH4-, Ln = Y, Dy; L = PhS-, Ln = Y, Tb, Dy)**

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

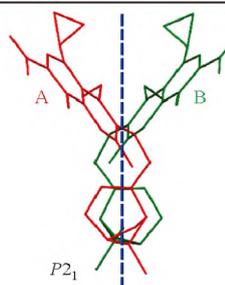


Французова Л.В., Герасимова Д.П., Гильфанов И.Р., Судариков Д.В., Никитина Л.Е., Лодочникова О.А.

124068

**Псевдосимметричная кристаллизация производных фторхинолона с терпеновым фрагментом**

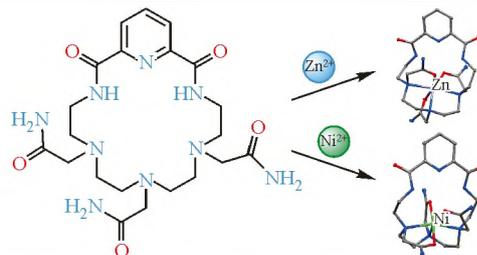
**Ключевые слова:** псевдосимметрия, супрамолекулярный ассоциат, межмолекулярные взаимодействия, квантово-химические расчеты



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

### Новое пиридиназакраун-соединение Ru3Am и изучение кристаллической структуры его комплексов с катионами Zn<sup>2+</sup> и Ni<sup>2+</sup>

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

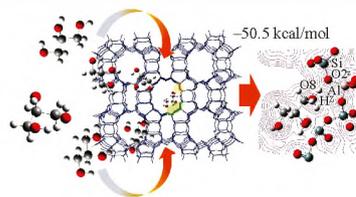


124070

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

### Адсорбция глицерина на брэнстедовских центрах морденита по данным теории функционала плотности

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

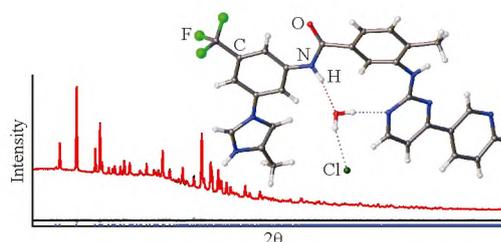


124080

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

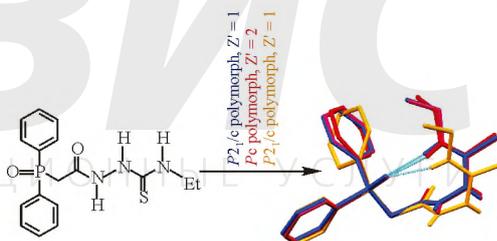


124349

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)ацетилтиосемикарбазида

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

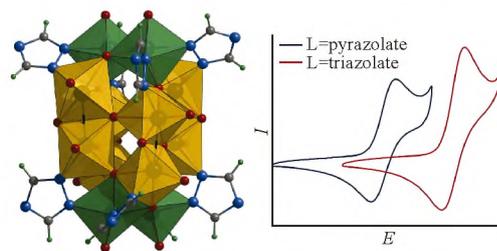


124401

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<sub>12</sub>O<sub>28</sub>(μ-L)<sub>8</sub>]<sup>4-</sup> с пиразолат- и триазолат-лигандами

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

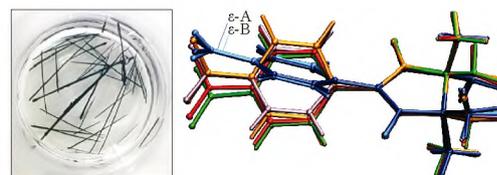


124492

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

### Новая ε-полиморфная модификация 4-нитрофенилзамещенного нитроилнитроксила

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



124494

Содержание следующего номера — в конце журнала

© Сибирское отделение РАН, 2024  
© Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 2024  
© Новосибирский государственный университет, 2024