

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 65

Сентябрь

№ 9, 2024

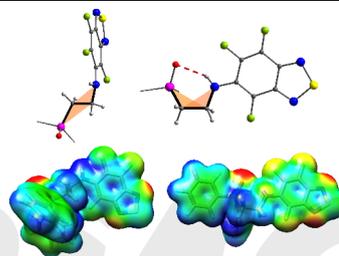
СОДЕРЖАНИЕ

Савков Б.Ю., Дурицын Р.В., Конченко С.Н.,
Сухих Т.С.

131750

**Рентгеноструктурное исследование
 β -аминофосфина и его оксида
на основе перфтор-2,1,3-бензотиадиазола**

Ключевые слова: бензотиадиазол, аминофосфин,
аминфосфиноксид, нуклеофильное замещение,
фторорганические соединения, конформация, DFT

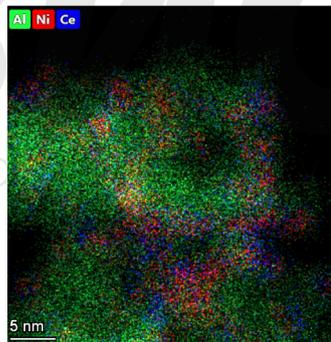


Матус Е.В., Коваленко Е.Н., Капишников А.В.,
Леонова А.А., Никитин А.П., Стожков О.А.,
Ушаков В.А., Яшник С.А., Сухова О.Б.,
Керженцев М.А.

131836

**Сравнительное исследование структурных
свойств массивных и нанесенных на оксид
алюминия оксидов $Ce_{1-x}Ni_xO_y$**

Ключевые слова: наноматериалы, сложные оксиды,
твердые растворы, рентгенофазовый анализ,
спектроскопия комбинационного рассеяния,
электронная микроскопия

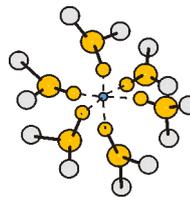


Смирнов П.Р.

131885

**Структурные параметры
сольватного окружения ионов металлов
в диметилсульфоксиде**

Ключевые слова: растворы электролитов,
структура, координационное число

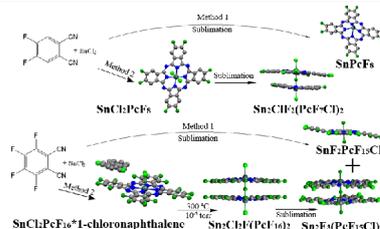


Klyamer D.D., Sukhikh A.S., Bonegardt D.V.,
Asanov I.P., Basova T.V.

131991

**Structural diversity of octa-
and hexadecafluorinated tin(II)
and tin(IV) phthalocyanines**

Keywords: tin phthalocyanine, fluorinated phthalocyanines,
crystal structure, X-ray diffraction



Kuznetsov A.B., Jamous A.Y., Svetlichnyi V.A.,
Kokh K.A.

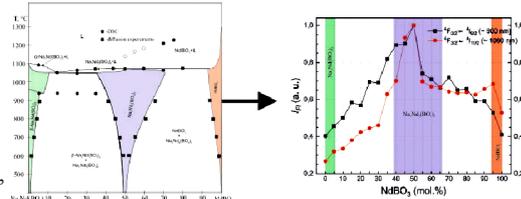
**Phase relations between $\text{Na}_3\text{Nd}(\text{BO}_3)_2$,
 $\text{Na}_3\text{Nd}_2(\text{BO}_3)_3$, NdBO_3
and their luminescence properties**

Keywords: rare earth elements, borates,
solution crystal growth, solid-state synthesis, crystal structure,
phase transitions, thermal expansion, DSC, luminescence

$\text{Na}_3\text{Nd}_2(\text{BO}_3)_2$ - NdBO_3

Luminescence

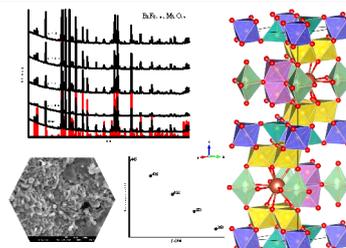
131995



Гафарова К.П., Живулин В.Е., Гудкова С.А.,
Вяткин Г.П., Песин Л.А., Шерстюк Д.П.,
Винник Д.А.

**Синтез и исследование замещенного марганцем
гексаферрита бария $\text{BaFe}_{12-x}\text{Mn}_x\text{O}_{19}$**

Ключевые слова: гексаферрит бария,
замещенный марганцем гексаферрит бария, точка Кюри,
магнитные материалы

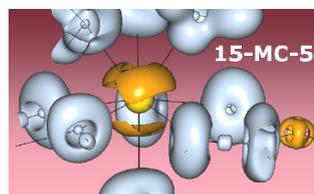


132001

Жигулин Г.Ю.

**Электронное строение аланингидроксиматных
15-металлакраунов-5 на основе ионов
лантана(III), церия(III) и празеодима(III)**

Ключевые слова: аланингидроксимат, металакраун,
медь, лантаноиды, DFT, QTAIM

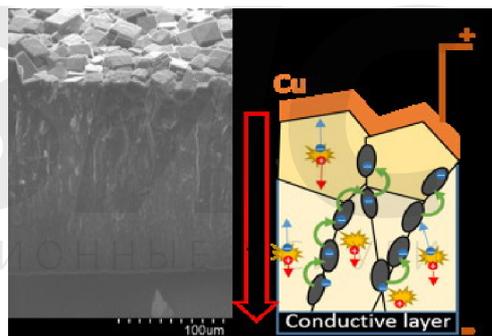


132052

Седельникова О.В., Городецкий Д.В.,
Федоренко А.Д., Баскакова К.И., Поддубская О.Г.,
Королик О.В., Вольнец Н.И., Николенко А.Д.,
Окотруб А.В.

**Влияние sp^2 -гибридизированных углеродных
включений в алмазной пленке
на сенсорные свойства по отношению
к синхротронному излучению**

Ключевые слова: поликристаллическая алмазная пленка,
 sp^2 -углерод, КРС, фотопроводимость,
синхротронное излучение

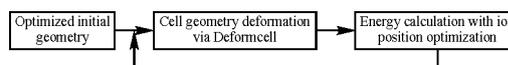


132222

Dubok A.S., Rychkov D.A.

**Deformcell: A python script to simplify
and fasten mechanical properties calculations
of molecular crystals in VASP package
for research and teaching purposes**

Keywords: deformcell, mechanical properties,
equation of state, elastic moduli, computational chemistry,
python script, DFT, VASP

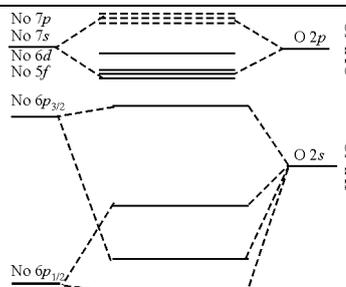


132571

Тетерин Ю.А., Рьжков М.В., Путков А.Е.,
Маслаков К.И., Тетерин А.Ю., Иванов К.Е.,
Калмыков С.Н., Петров В.Г.

Электронное строение NoO_2

Ключевые слова: диоксиды актиноидов,
 NoO_2 , электронное строение, внешние валентные
и внутренние валентные молекулярные орбитали,
метод РДВ, структура спектров РФЭС валентных
электронов



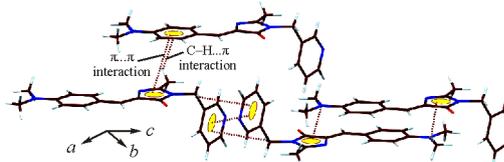
132594

Abdullah S., Deka S., Abid F., Sharma S., Nath J.K., Rajbongshi B.K.

132598

Synthesis, structural investigation and Hirshfeld surface analyses of two Imidazolinone based heterocyclic compounds

Keywords: imidazolinones, green fluorescent protein chromophore, supramolecular, C—H...O interaction, Hirshfeld surface analysis

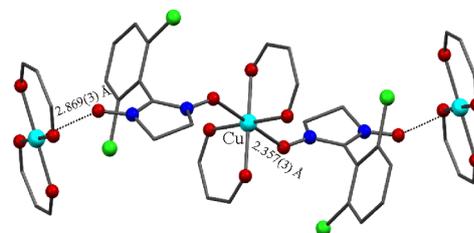


Артюхова Н.А., Третьяков Е.В., Смирнова К.А., Летягин Г.А., Романенко Г.В., Богомяков А.С.

132641

Синтез, строение и магнитные свойства комплекса Cu(hfac)₂ с дихлорфенилзамещенным нитронилнитроксидом

Ключевые слова: комплексы Cu(II), нитронилнитроксильные радикалы, магнитно-структурные корреляции



Ильичев В.А., Силантьева Л.И., Рогожин А.Ф., Бочкарев М.Н.

132865

Координационные соединения лантаноидов с бензотиазольными лигандами.

Синтез, строение и люминесцентные свойства

Ключевые слова: лантаноид, фотолюминесценция, электролюминесценция, 2-меркаптобензотиазол, координационные соединения



Москалев М.В., Базякина Н.Л., Баранов Е.В., Федюшкин И.Л.

133424

Дигалогенидные комплексы алюминия на основе 1,2-бис[(2,6-дибензгидрил-4-метилфенил)имино]аценафтоенового лиганда

Ключевые слова: редокс-активные лиганды, 1,2-бис(арилимино)аценафтены, молекулярная структура, алюминий, галогениды

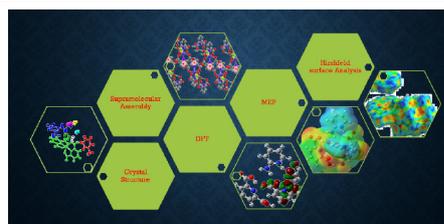


Guin M., Afzal M., Jana B., Halder S., Chatterjee S., Konar S.

134968

Co(II) coordination compound: Structural and computational insights *via* crystal structure, DFT, MEP, NBO and Hirshfeld surface analyses

Keywords: cobalt complex, crystal structure, DFT, Hirshfeld surface



Содержание следующего номера — в конце журнала