

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 65

Ноябрь

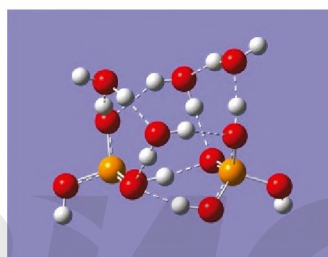
№ 11, 2024

СОДЕРЖАНИЕ

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

Строение гидратов ортофосфорной кислоты и равновесный состав системы $\text{H}_3\text{PO}_4\text{-H}_2\text{O}$ по данным ИК спектроскопии и квантово-химических расчетов

Ключевые слова: водный раствор H_3PO_4 , водородная связь, строение гидратов, ИК спектроскопия, квантово-химические расчеты

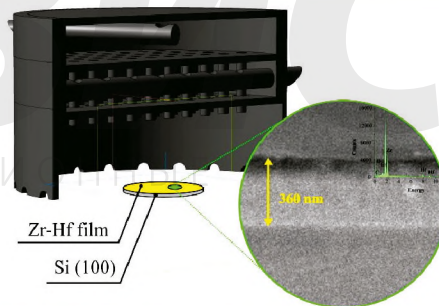


134400

Шутилов Р.А., Максимовский Е.А.,
Поповецкий П.С., Корольков И.В.,
Гисматулин А.А., Игуменов И.К.

Процессы формирования покрытий методом импульсного МOCVD в системе $\text{ZrO}_2\text{-HfO}_2$

Ключевые слова: импульсное МOCVD, оксиды циркония, гафния, пленочные покрытия, морфология, шероховатость, вольт-амперные характеристики, вольт-фарадные характеристики

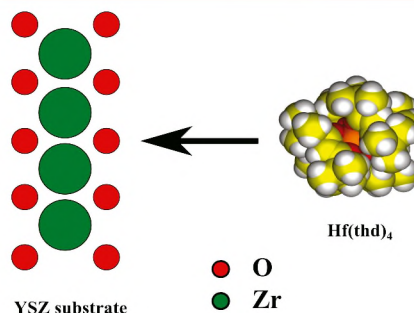


134521

Игуменов И.К., Лукашов В.В., Коваленко К.А.,
Сыроквашин М.М., Плюснин П.Е., Ищенко А.В.,
Шутилов Р.А.

Новый тип прекурсоров для осаждения наноструктурированных покрытий из газовой фазы

Ключевые слова: композитные прекурсоры, наночастицы YSZ, дивалоилметанат гафния, термическая устойчивость, иммобилизация наночастиц, РФЭС

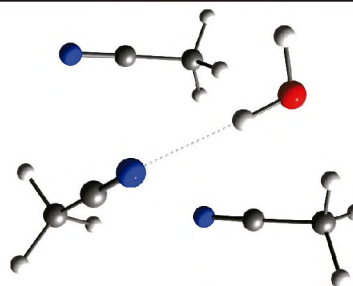


134645

Богдан Т.В., Фирсов Д.А., Черткова В.П.,
Абрамович А.И.

**Расчет строения кластеров $(\text{CH}_3\text{CN})_n$
и $(\text{CH}_3\text{CN})_m \cdot \text{H}_2\text{O}$ методом теории
функционала плотности**

Ключевые слова: ацетонитрил, кластеры $(\text{CH}_3\text{CN})_n$,
 $n = 2-8$, моногидратные кластеры ацетонитрила
 $(\text{CH}_3\text{CN})_m \cdot \text{H}_2\text{O}$, $m = 4-7$, водородные связи,
метод ТФИ-G3/B3LYP/cc-pvdz

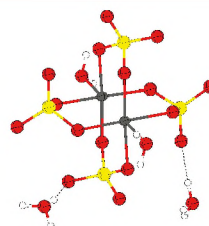


134865

Ткаченко П.А., Байдина И.А., Комаров В.Ю.,
Бердюгин С.Н., Ткачев С.В., Васильченко Д.Б.

**Образование биядерных сульфатов платины(III)
в серно-кислых растворах
соединений платины(IV)**

Ключевые слова: платина, сульфатоконплексы,
серная кислота

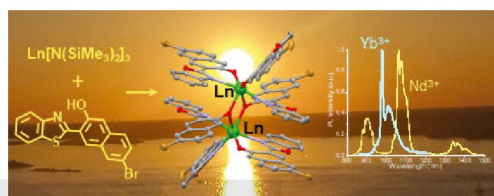


134878

Kuzyaev D.M., Balashova T.V., Polyakova S.K.,
Ilichev V.A., Yablonskiy A.N., Baranov E.V.,
Fukin G.K., Bochkarev M.N.

**Complexes of rare earth metals
with bromine-substituted (benzoxazolyl)naphtholate
ligands as emissive materials**

Keywords: lanthanide complexes,
substituted 2-(2-benzoxazol-2-yl)-3-naphtholate ligands,
X-ray structure, luminescence

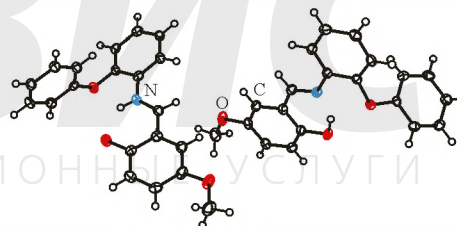


135092

Güzel E., Coruh U., Duteanu N., Cicek C., Agar E.,
Vazquez-Lopez E.M., Yavuz M.

**Experimental studies of Schiff base
(E)-4-methoxy-2-(((2-phenoxyphenyl)imino)methyl)
phenol compound with various
spectroscopic methods**

Keywords: X-ray diffraction, UV-Vis, NMR, Schiff base

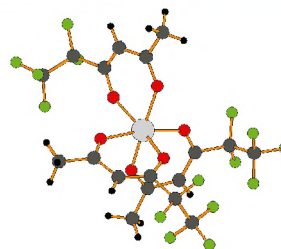


135169

Сартакова А.В., Макаренко А.М., Куратьева Н.В.,
Жерикова К.В.

**Кристаллохимическое исследование
двух фторированных комплексов скандия(III)**

Ключевые слова: скандий, 1,1-дифторацетилацетон,
5,5,6,6,6-пентафторгексан-2,4-дион,
рентгеноструктурный анализ, термические свойства,
межмолекулярные контакты

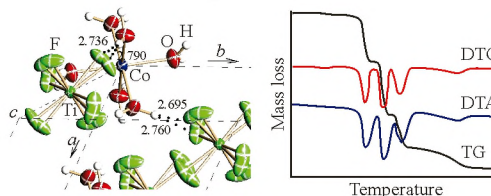


135172

Удовенко А.А., Меркулов Е.Б., Шлык Д.Х.,
Лапташ Н.М.

**Водородные связи O-H...F в кристаллах
 $M\text{TiF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ($M = \text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Zn}$)**

Ключевые слова: гексагидраты фторидотитанатов
двухвалентных металлов, кристаллическая структура,
фазовые переходы, водородная O-H...F связь,
термические свойства

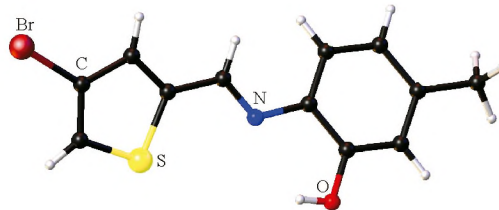


135370

Kalem E., Aşkar Ş., Kınaytürk N.K., Yeşilkaynak T., Açar E., Emen F.M.

Synthesis, characterization, molecular modeling and investigation of biological activity of the novel Schiff base (*E*)-2-(((4-bromothiophen-2-yl)methylene)amino)-5-methylphenol

Keywords: Schiff bases, X-ray diffraction, density functional calculations, biological activity



135383

Новосадов Б.К.

Свойства функционалов волновой плотности молекул

Ключевые слова: функционал электронной плотности молекулы, потенциал Кона, орбитальная модель электронной оболочки молекулы, малый параметр при производной

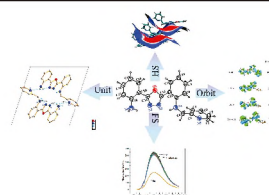
$$E_0 = \frac{(\lambda - 1)}{4\pi} \int dr \Delta U(\mathbf{r}) \sum_{k=1}^N \frac{-Z_k}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_k|}$$

135410

Zhou. Y., Feng S.-Y., Zhang D.-H.

A probe molecule based on 1,3,4-oxadiazole was constructed for crystal structure analysis and Sn⁴⁺ identification

Keywords: 1,3,4-oxadiazole, Sn⁴⁺, crystal structure, Hirshfeld surface analysis, fluorescence properties

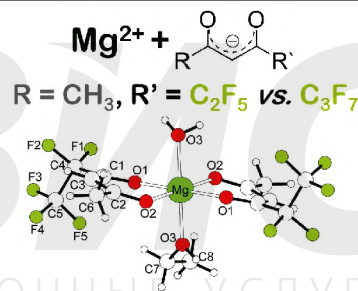


135435

Крутских С.С., Кочелаков Д.В., Назарова А.А., Корольков И.В., Зеленина Л.Н., Викулова Е.С.

Синтез, строение и свойства асимметричных фторированных β-дикетонатных комплексов магния

Ключевые слова: магний, β-дикетонат, комплексы фторированных β-дикетонатов, рентгеноструктурный анализ, водородные связи, летучесть

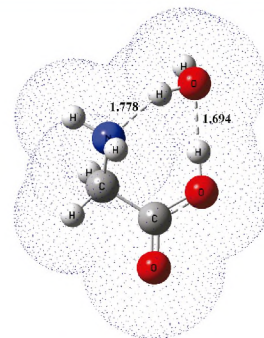


135527

Алексеева В.А., Крауклис И.В., Чижов Ю.В., Тулуб А.В.

Образование цвиттер-ионной структуры глицина и аланина в рамках дискретно-континуальной модели водного растворителя: внутримолекулярный перенос протона

Ключевые слова: α-аминокислоты, нейтральные и цвиттер-ионные конформеры, внутримолекулярный перенос протона, активационный барьер, дискретно-континуальная модель воды, теория функционала плотности

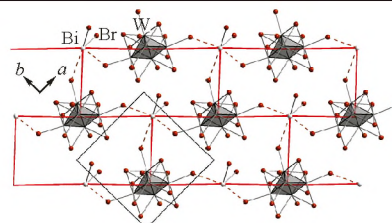


136009

Михайлов М.А., Сухих Т.С., Гусельникова Т.Я., Цыганкова А.Р., Клейман Е.Е., Соколов М.Н.

Кластерные фазы состава W₅Br₁₂ · ViBr₃ с различными кристаллическими структурами

Ключевые слова: вольфрам, висмут, бромиды, кластеры, полимерные соединения, рентгеноструктурный анализ, низкотемпературный синтез, АЭС ИСП

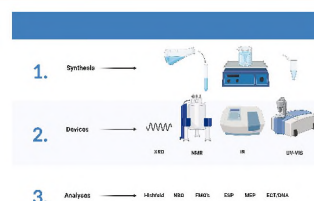


136015

Suhta A., Meral S., Alaman Ađar A., Sütay B.,
Vazquez-Lopez E.M., Çoruh U.

**Application of a novel symmetric benzophenone
derivative Schiff base in lyotropic media
and spectroscopic properties**

Keywords: Schiff base, Hirshfeld surface, XRD, DFT
calculations, NBO, lyotropic liquid crystal

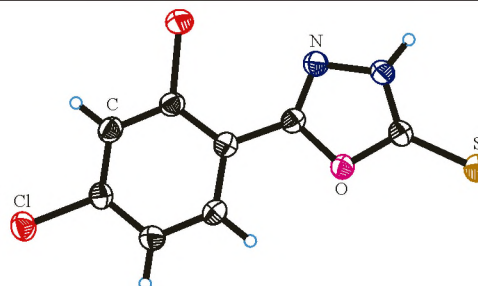


136026

Окманов Р.Я., Махмудов У.С., Зияев А.А.,
Тошмуродов Т.Т., Ташходжаев Б., Ешимбетов А.Г.,
Ходжаниязов Х.У.

**Синтез и структура алкилпроизводных
5-(2,4-дихлорфенил)-1,3,4-оксадиазол-2-тиона
и оценка ароматичности оксадиазольного кольца**

Ключевые слова: 5-(2,4-дихлорфенил)-1,3,4-оксадиазол-
2-тион, *S*- и *N*-алкилпроизводные, ароматичность,
кристаллическая структура, PCA, ТФП

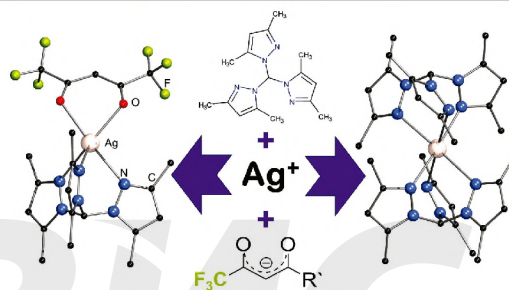


136029

Викулова Е.С., Сухих Т.С., Барышева А.С.,
Варваринская С.Е., Ильин И.Ю., Шакирова О.Г.,
Морозова Н.Б.

**Синтез и строение комплексов Ag(I)
с трис(3,5-диметилпиразол-1-ил)метаном
и β-дикетонами**

Ключевые слова: серебро,
трис(3,5-диметилпиразол-1-ил)метан, β-дикетонат,
рентгеноструктурный анализ

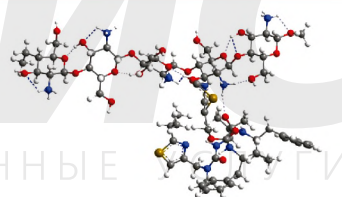


136279

Нургалиев И.Н., Бурханова Н.Ж.

**DFT исследование возможности доставки
антивирусных препаратов
с использованием хитозана**

Ключевые слова: система доставки лекарств,
теория функционала плотности, хитозан



137469

Содержание следующего номера — в конце журнала