

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 66

Февраль

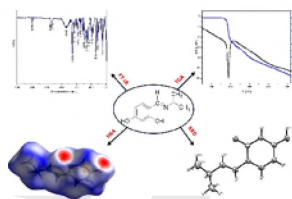
№ 2, 2025

СОДЕРЖАНИЕ

Айуяппан А., Арокьясамы С.

Synthesis, crystal structure, and Hirshfeld analysis of a novel Schiff base compound 5-hydroxy-2-[(propan-2-yl)iminio]methylphenolate

Keywords: synthesis, Schiff base, single crystal XRD, hydrogen bonding, Hirshfeld analysis, thermal analysis

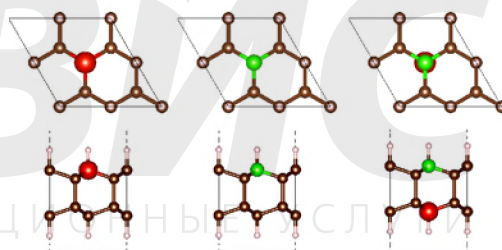


140014

Грекова А.А., Гришаков К.С., Катин К.П., Маслов М.М.

Влияние заместительного допирования атомами бора и азота на электронные и оптические характеристики алмазов

Ключевые слова: допированный алмаз, электронная зонная структура, полупроводниковая щель, постоянная решетки, ИК спектры, спектры комбинационного рассеяния

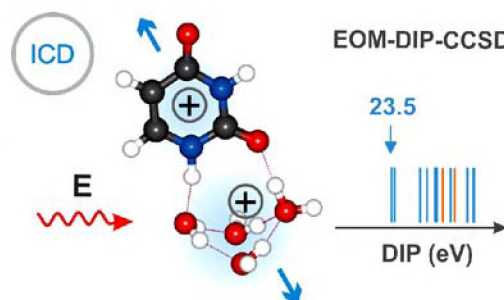


140016

Гришкова В.М., Крицкий О.Р., Трофимов А.Б., Скитневская А.Д.

Теоретическое исследование влияния межмолекулярных взаимодействий на спектр двукратно ионизированных состояний в системах урацил – $n\text{H}_2\text{O}$ ($n = 1-4$)

Ключевые слова: двукратная ионизация, межмолекулярный кулоновский распад, ICD, Оже, метод связанных кластеров, EOM-DIP-CCSD, урацил, вода, межмолекулярные взаимодействия, РНК

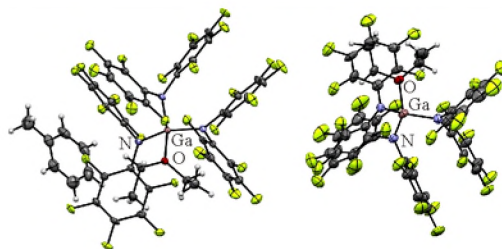


140030

Завгородний А.С., Крюкова М.А., Тимошкин А.Ю.

Донорно-акцепторные комплексы кислоты Льюиса $\text{Ga}[\text{N}(\text{C}_6\text{F}_5)_2]_3$ с пиридином и диэтиловым эфиром

Ключевые слова: кислоты Льюиса, донорно-акцепторное взаимодействие, рентгеноструктурный анализ, декафтордифениламид галлия, пиридин, ацетонитрил

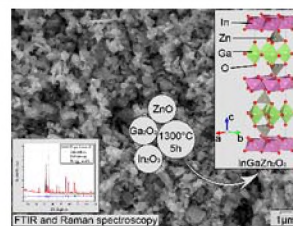


140068

Винник Д.А., Ковалев А.И., Шерстюк Д.П.,
Живулин Д.Е., Зирник Г.М., Батманова Т.В.

Синтез и анализ структуры полупроводникового оксида индия–галлия–цинка

Ключевые слова: IGZO, оксид индия–галлия–цинка, твердофазный синтез, SEM, EDX, XRD, ИК спектроскопия, рамановская спектроскопия

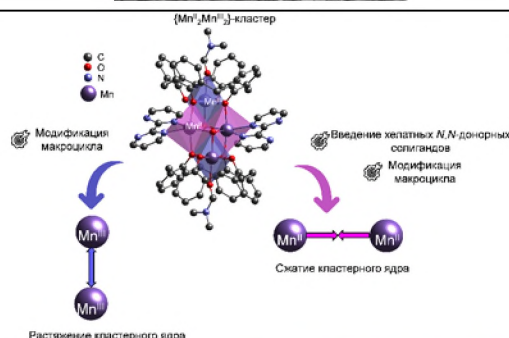


140143

Стрельникова Ю.В., Овсянников А.С., Иова А.А.,
Исламов Д.Р., Самигуллина А.И.,
Дороватовский П.В., Соловьева С.Е., Антипин И.С.

Влияние адамантовых групп на «верхнем ободу» макроцикла на кристаллическую структуру гетеровалентных марганцевых $\{Mn^{II}_2Mn^{III}_2\}$ комплексов на основе каликс[4]арена и 2,2'-бипиримидина

Ключевые слова: каликс[4]арен, 2,2'-бипиримидин, $Mn(II)$, $Mn(III)$, кристаллическая структура, кластеры

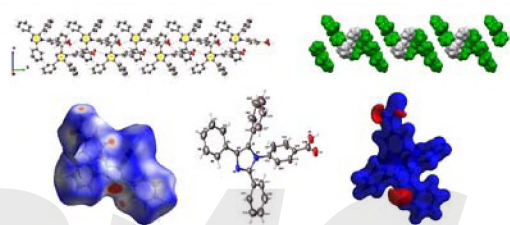


140223

Abdulsamad L.A., Kanmazalp S.D., Jasim S.S.,
Abdelhamid A.A.

Crystal structure and solid state assembly inspection by Hirshfeld surface analysis of the imidazole-based ligand

Keywords: imidazole, SC-XRD, Hirshfeld surface analysis, fingerprint

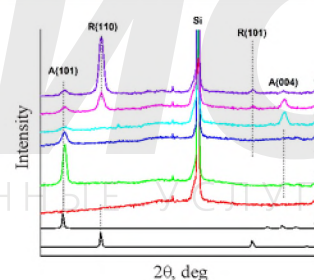


140355

Хижняк Е.А., Шаяпов В.Р., Корольков И.В.,
Дудкина С.П., Гейдт П.В., Лебедев М.С.

Влияние температур осаждения и отжига на фазовый состав пленок TiO_2 , полученных методом атомно-слоевого осаждения из тетрахлорида титана и воды

Ключевые слова: диоксид титана, атомно-слоевое осаждение, тонкие пленки, отжиг, анатаз, рутил

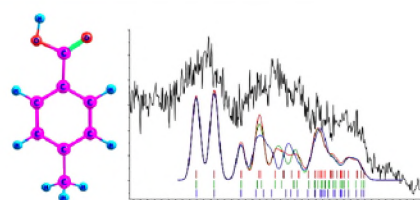


140578

Шурыгин А.В., Курбатов И.А., Ривас Веласкес Д.А.,
Мазейка А.Н., Короченцев В.В., Немтинов В.И.,
Писарев С.М.

Электронная структура изомеров толуиловой кислоты

Ключевые слова: электронная структура, РФЭС, ИК, лиганды, толуиловая кислота, ТФП

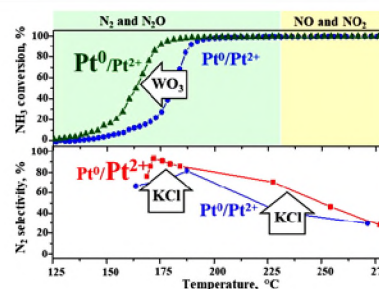


140581

Кибис Л.С., Свиницкий Д.А., Овсяк И.Ю.,
Романенко А.В., Кардаш Т.Ю., Стонкус О.А.,
Славинская Е.М., Боронин А.И.

Состояние активного компонента и каталитические свойства модифицированных платино-титановых катализаторов селективного окисления аммиака

Ключевые слова: платина, оксид титана, селективное окисление аммиака, NH_3 -СКО, РФЭС

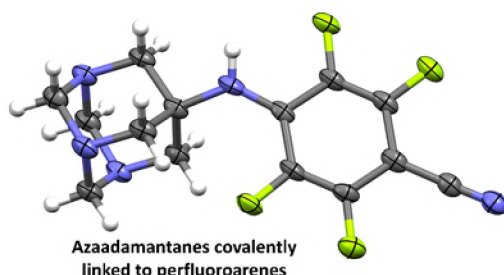


140584

Кудрявцева Е.Н., Медведько А.В., Арутюнян А.Д., Геворкян К.А., Галстян М.В., Гаспарян С.П., Вацадзе С.З., Романенко Г.В., Корлюков А.А., Третьяков Е.В.

Синтез, молекулярная и кристаллическая структура полифторарилзамещенных аминодиаза- и аминотриазаадамантанов

Ключевые слова: полифторарены, ароматическое нуклеофильное замещение, анилины, азаадамантаны

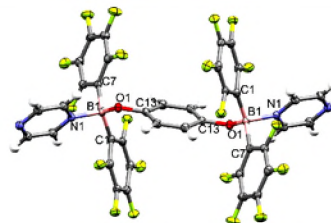


140604

Кудина П.И., Крюкова М.А., Казаков И.В.

Синтез и структура комплексов бидентатных кислот Льюиса $R[OB(C_6F_5)_2]_2$ ($R = C_2H_4, p-C_6H_4$) с пиразином

Ключевые слова: донорно-акцепторные комплексы, бидентатные кислоты Льюиса, пиразин, кристаллическая структура

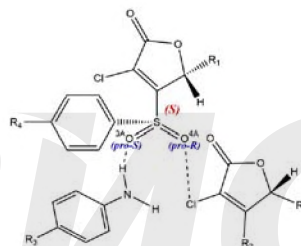


140658

Герасимова Д.П., Французова Л.В., Сайфина А.Ф., Хабибрахманова А.М., Хабибуллина А.М., Раббаниева Э.С., Курбангалиева А.Р., Лодочникова О.А.

Кристаллическая структура оптически активных сульфов на основе 4-аминотиофенола и 5-ментилокси- и 5-борнилокси-2(5H)-фуранонов: стереохимические особенности

Ключевые слова: псевдосимметрия, супрамолекулярный ассоциат, межмолекулярные взаимодействия, поверхность Хиршфельда, фураноны, сульфоны

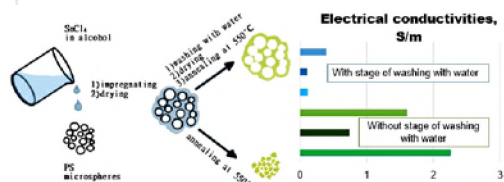


140717

Чикунова Ю.О., Воробьева Е.Е., Моссенков С.И., Пархомчук Е.В., Грибов Е.Н., Шапаренко Н.О., Козлов Д.В.

Приготовление макropористого оксида олова (IV) темплатным методом для применения в качестве носителя электрокатализаторов

Ключевые слова: SnO_2 , темплатный синтез, электропроводность, полистирольные микросферы

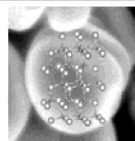


140721

Shestakov M.V., Gippius A.A., Baranov A.N.

Structural research of Li doped ZnO powders

Keywords: zinc oxide, lithium, doping, structure, photoluminescence

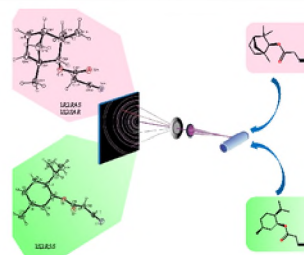


140797

Mohamed F.S., Bąkiewicz J., Dziuk B., Nawwar G.A.M.

Synthesis, crystal structure and spectral characterization of 5-methyl-2-(propan-2-yl)cyclohexyl cyanoacetate and 1,3,3-trimethylbicyclo[2.2.1]heptan-2-yl cyanoacetate

Keyword: cyanoacetylation, menthol, fenchol, menthyl cyanoacetate, fenchyl cyanoacetate, crystal structure, X-ray study

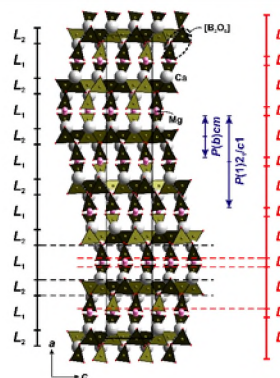


140800

Аксенов С.М., Банару Д.А., Банару А.М.,
Антонов А.А., Кабанова Н.А., Кузнецов А.Н.,
Белоконев Е.Л., Ямнова Н.А., Дейнеко Д.В.,
Червонная Н.А., Чуканов Н.В., Блатов В.А.

**Структурное семейство курчатовита
 $\text{CaMg}[\text{B}_2\text{O}_5]$: особенности строения,
сложность политипов, DFT-анализ
и сравнительная кристаллохимия пироборатов
двухвалентных катионов**

Ключевые слова: курчатовит, клинокурчатовит,
пиробораты, ОД-структуры, политипия,
ИК спектроскопия, топология, сложность



140948

Содержание следующего номера — в конце журнала

