

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 66

Май

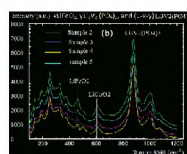
№ 5, 2025

СОДЕРЖАНИЕ

Monajjemi M., Mollaamin F.

Synthesis and structural characterization of a novel ternary composite, containing $x\text{LiFeO}_2$, $y\text{Li}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$, and $(1-x-y)\text{LiCoO}_2$, composites for Lithium Ion Batteries (LIBs)

Keywords: Lithium-Ion Batteries, cathode materials, $\text{Li}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$, LiFeO_2 , LiCoO_2 , ternary composites

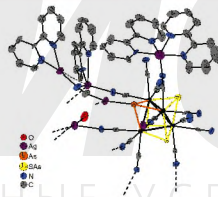


1	$\text{Li}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$	143910
2	$\text{Li}_{0.5}\text{V}_{1.5}\text{Fe}_{0.5}(\text{PO}_4)_3$	
3	$\text{Li}_{1.5}\text{V}_{1.5}\text{Co}_{0.5}(\text{PO}_4)_3$	
4	$\text{Li}_{1.5}\text{V}_{0.5}\text{Fe}_{1.5}(\text{PO}_4)_3$	
5	$\text{Li}_{1.5}\text{V}_{0.5}\text{Co}_{1.5}(\text{PO}_4)_3$	
6	$\text{Li}_{1.5}\text{V}_{0.5}\text{Co}_{0.5}(\text{PO}_4)_3$	
7	LiFeO_2	
8	$\text{LiFe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{O}_2$	
9	$\text{LiFe}_{0.5}\text{Co}_{1.5}\text{O}_2$	
10	LiCoO_2	

Ермолаев А.В., Ли Х.-Я., Ан Б.-Г., Миронов Ю.В.

Первый пример координационного полимера на основе тетраэдрического кластерного цианокомплекса рения, $\text{Ag}(\text{I})$ и bpy

Ключевые слова: рений, кластерный комплекс, одновалентное серебро, амины, цианиды

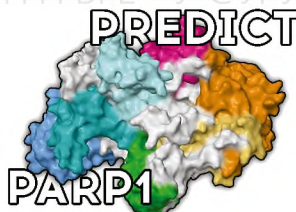


143988

Мустаев Е.А., Хамитов Э.М.

Предсказание третичной структуры PARP1 методами молекулярного моделирования

Ключевые слова: прогнозирование трехмерных структур белков, поли(АДФ-рибоза)-полимераза 1, PARP1, AlphaFold2, RoseTTAFold, I-TASSER, IntFOLD5, молекулярная динамика, гомологичное конструирование

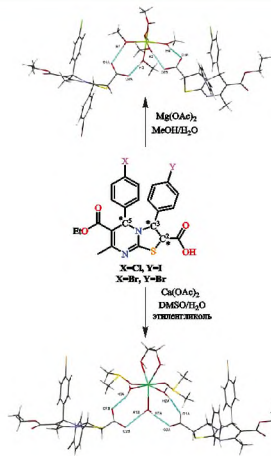


144161

Кожихов А.А., Агарков А.С., Маилян М., Французова Л.В., Лодочникова О.А., Соловьева С.Е., Антипин И.С.

Индуктированное СО-растворителем гомохиральное распознавание карбоновых кислот на основе 3,5-биарил-2,3-дигидро-5H-тиазоло[3,2-a]пиримидинов в кристаллах комплексов Mg^{+2} и Ca^{+2}

Ключевые слова: тиазоло[3,2-a]пиримидины, 2-арилметилиденовые производные тиазоло[3,2-a]пиримидинов, 3,5-диарил-2,3-дигидротиазоло[3,2-a]пиримидин-2,6-дикарбоксилаты, микроволновый синтез, гомохиральное распознавание, карбоновые кислоты гетероциклического ряда, комплексы магния(II) и кальция(II)

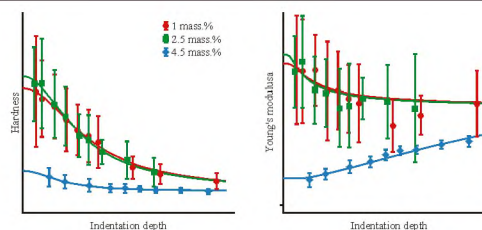


144268

Демин В.Н., Асанов И.П., Смирнов А.Л.,
Хомяков М.Н., Пинаев П.А., Багаев С.Н.

**Лазерное плазмохимическое осаждение
твердых покрытий карбонитрида кремния,
легированных оксидом гафния**

Ключевые слова: лазерная плазма,
карбонитрид кремния, оксид гафния, твердые покрытия

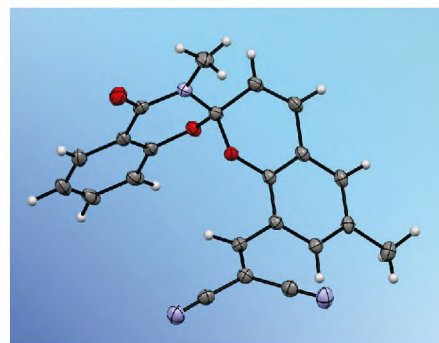


144513

Дмитриев В.С., Пугачев А.Д., Ткачев В.В.,
Утешин А.Н., Побединская Д.Ю., Станкевич Н.В.,
Чепурной П.Б., Алдошин С.М., Метелица А.В.,
Ожогин И.В.

**Изучение структуры продукта реакции
формилзамещенного спиропирана
1,3-бензоксазин-4-онового ряда
с малондинитрилом**

Ключевые слова: спиропиран, 1,3-бензоксазин,
малондинитрил, конденсация, реакция Кневенагеля,
рентгеноструктурный анализ

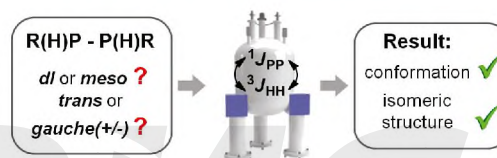


144516

Кондрашова С.А., Латыпов Ш.К.

**ЯМР в структурном анализе R(H)P–P(H)R
дифосфанов: возможности и ограничения**

Ключевые слова: дифосфаны, изомерная структура,
конформационная структура, расчет ЯМР параметров,
GIAO, химический сдвиг,
константа спин-спиновой взаимодействия, DFT

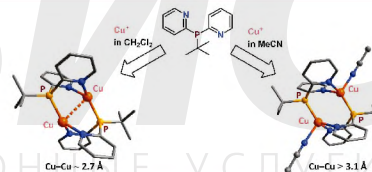


144520

Baranov A.Yu., Bagryanskaya I.Yu., Artem'ev A.V.

**Copper(I) tetrafluoroborate complexes
with bis(2-pyridyl)-*t*-butylphosphine**

Keywords: pyridylphosphines, Cu(I) complexes, synthesis,
ligands, crystal structure

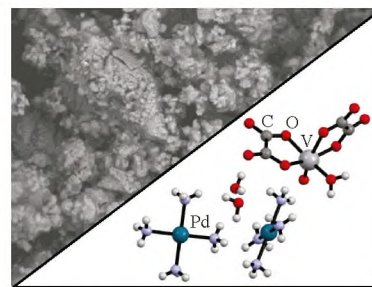


144623

Рудзис З.В., Воробьева С.Н., Сухих Т.С.,
Филатов Е.Ю., Надолинный В.А., Бердюгин С.Н.,
Корнев С.В.

**Двойная комплексная соль
[Pd(NH3)4][VO(H2O)(C2O4)2]·2H2O:
строение и термические свойства**

Ключевые слова: палладий, ванадий,
двойные комплексные соли, структура,
термические превращения, сплавы

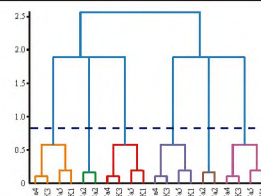


144627

Ращенко С.В.

**Выделение плотных атомных сеток
в кристаллических структурах
с помощью кластерного анализа**

Ключевые слова: атомные сетки, кластерный анализ,
катионная подрешетка, Python, «Crystchemlib»

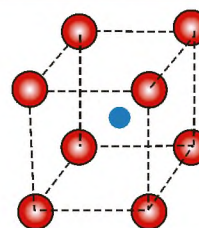


144752

Смирнов П.Р., Гречин О.В.

**Структурное описание гидратных комплексов
ионов в системе нитрат лутетия – вода
из результатов метода дифракции
рентгеновских лучей**

Ключевые слова: электролитные системы,
метод дифракции рентгеновских лучей

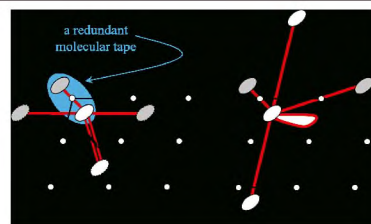


144771

Банару А.М., Киреев В.Е., Батаев В.А.,
Кононович Д.С., Воскобойников А.З., Аксенов С.М.

Кристаллическая структура и иерархическая сложность двух производных индена

Ключевые слова: структурный класс, полиэдр Вороного–Дирихле, межмолекулярный контакт, кристаллографическая сеть

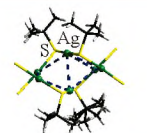


145061

Абрамов П.А., Соколов М.Н.

Кристаллическая структура [Ag(SiBu)]

Ключевые слова: серебро, трет-бутилтиолят, пиридин, кристаллическая структура

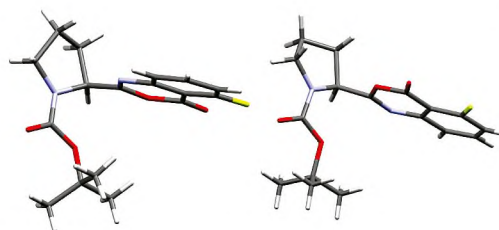


145063

Patel K., Karmakar S., Chauhan P., Shah S.K.H.,
Prabhakaran P.

Supramolecular insight and Hirshfeld surface analysis of (*S*)-*tert*-butyl 2-(5-fluoro-4-oxo-4*H*-benzo[d][1,3]oxazin-2-yl)pyrrolidine-1-carboxylate in the crystal state stabilized by weak C–H $\cdots$ O interactions

Keywords: benzoxazinone, C–H $\cdots$ O interactions, Hirshfeld, X-ray diffraction

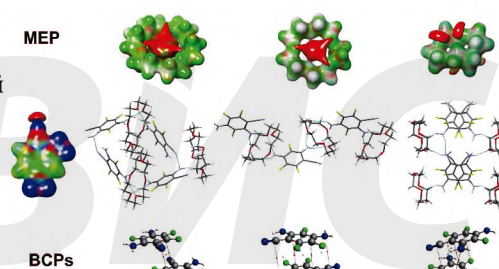


145066

Ваганова Т.А., Гатиллов Ю.В., Крючкова Н.А.,
Пищур Д.П., Малыхин Е.В.

Конкуренция межмолекулярных взаимодействий при самосборке сокристаллов полифторированных арилендиаминов с краун-эфирами: влияние цианогруппы

Ключевые слова: молекулярные кристаллы, межмолекулярные взаимодействия, водородные связи, π -стэкинг, полифторароматические амины, краун-эфир, DFT расчеты

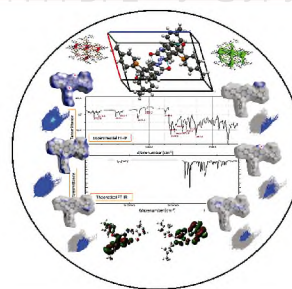


145082

Karataş H., Md. Faizi S.H., Poyraz E.B., Kökbudak Z.,
Dege N.

Synthesis, structural study, spectral investigations, Hirshfeld surface analysis, and DFT calculations of (*E*)-1-(2-bromobenzylideneamino)-5-(4-methylbenzoyl)-4-*p*-tolylpyrimidin-2(1*H*)-one (BAMTP)

Keywords: pyrimidin-2(1*H*)-one, spectral, crystal structure, energy framework, DFT

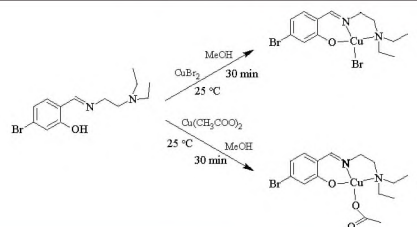


145342

Liu Y., Yang Q., Wang S., Liu R., Chen Y., Li S.

Synthesis, crystal structures and catalytic oxidation property of copper(II) complexes derived from 5-bromo-2-((2-diethylaminoethoxyimino)-methyl)phenol

Keywords: copper(II) complexes, Schiff base, crystal structure, catalytic property

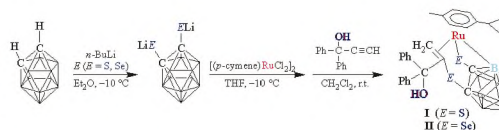


145345

Hu J.R., Wang J.H., Liu J.S.

Synthesis and characterization of ruthenium complexes assembled with 1,1-diphenyl-2-propyn-1-ol and *ortho*-carborane dichalcogenolato ligands

Keywords: ruthenium complexes, *ortho*-carborane, 1,1-diphenyl-2-propyn-1-ol, synthesis, structure



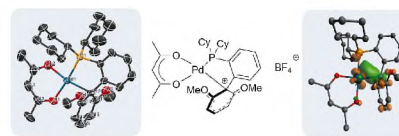
145404

Suslov D.S., Bykov M.V., Abramov Z.D.,
Pakhomova M.V., Orlov T.S., Suchkova A.V.,
Ushakov I.A., Borodina T.N., Smirnov V.I.

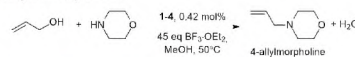
Structural features of cationic palladium(II) acetylacetonate complexes with dialkylbiarylphosphine ligands

Keywords: palladium complexes, buchwald ligands,
QTAIM, ETS-NOCV

Structural Studies:



Catalytic Properties:

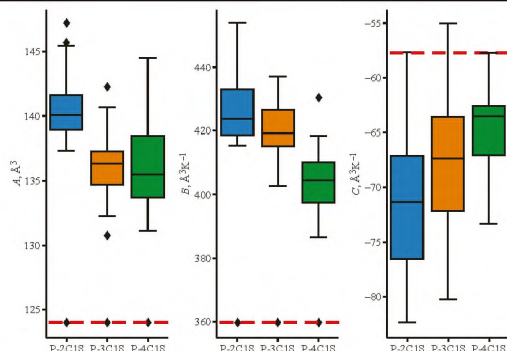


145533

Улитин Н.В., Шадрина Г.Р., Анисимова В.И.,
Родионов И.С., Балдинов А.А., Люлинская Я.Л.,
Терещенко К.А., Шиян Д.А.

Интерпретация закономерности «структура – температура стеклования» для органических гомополимеров с использованием методов инкрементов и случайного леса и теории функционала плотности

Ключевые слова: моделирование «структура –
свойство», органические гомополимеры,
температура структурного стеклования полимеров



147275

Содержание следующего номера — в конце журнала

