

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 66

Август

№ 8, 2025

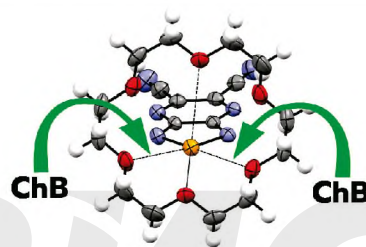
СОДЕРЖАНИЕ

Радюш Е.А., Семенов Н.А.

149150

**Новый молекулярный комплекс
5,6-дициано[1,2,5]селенадиазоло[3,4-*b*]пиразина
с 18-краун-6**

Ключевые слова: халькогенадиазолы,
краун-эфиры, халькогенная связь, вторичные
связывающие взаимодействия,
нековалентные взаимодействия

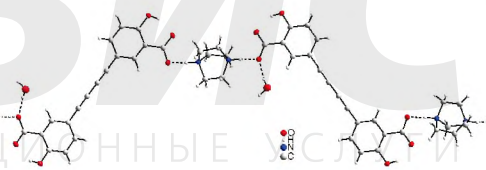


Осипов А.А., Ефремов А.Н., Найферт С.А.,
Раджакумар К., Дороватовский П.В.,
Спиридонова Д.В., Жеребцов Д.А.

149185

**Структуры диацетилендисалицилата
и нитрата 1,4-дизабицикло[2,2,2]октана**

Ключевые слова: структура, соли аминов,
диацетилендисалициловая кислота

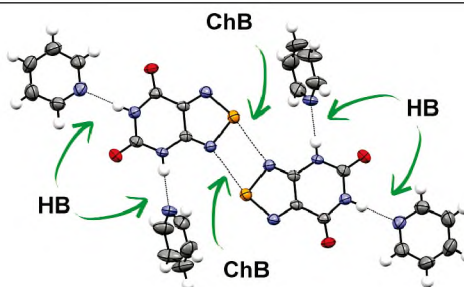


Радюш Е.А., Багрянская И.Ю., Семенов Н.А.

149250

**Кристаллические структуры
[1,2,5]селенадиазоло[3,4-*d*]пиримидин-7(6*H*)-она
и [1,2,5]селенадиазоло[3,4-*d*]пиримидин-
5,7(4*H*,6*H*)-диона**

Ключевые слова: халькогенадиазолы,
вторичные связывающие взаимодействия,
нековалентные взаимодействия, халькогенные связи,
водородные связи, сольваты

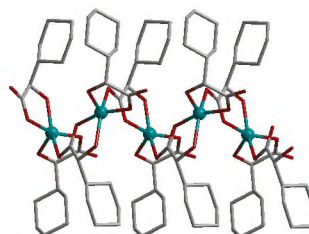


Завахина М.С., Самсоненко Д.Г.,
Дороватовский П.В., Лазаренко В.А.

149371

**Строение координационного полимера
на основе цинка
и *R*-гексагидроминдальной кислоты**

Ключевые слова: комплексы цинка,
координационные полимеры,
гексагидроминдальная кислота, хиральные комплексы,
рентгеноструктурный анализ

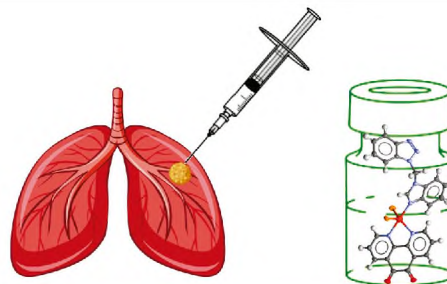


Голубева Ю.А., Ермакова Е.А., Смирнова К.С.,
Клюшова Л.С., Потапов А.С., Лидер Е.В.

149574

Синтез и строение цитотоксичного комплекса меди(II) с производными фенантролина и бензимидазола

Ключевые слова: комплексы меди(II),
1,10-фенантролин-5,6-дион,
1-(1*H*-бензимидазол-1-илметил)-1*H*-1,2,3-бензотриазол,
кристаллическая структура, цитотоксичность

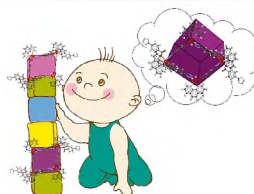


Ермакова Е.А., Смирнова К.С., Лидер Е.В.

149530

Нетривиальный гексаядерный комплекс меди(II) на основе 4-(1*H*-тетразол-5-ил)бензойной кислоты и 1,10-фенантролина

Ключевые слова: комплекс меди(II), тетразол,
фенантролин, кристаллическая структура

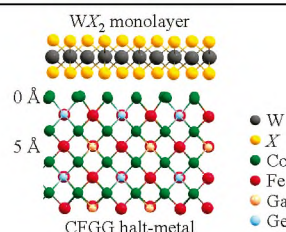


Ларионов К.В., Мочалова Е.А., Паис Переда Х.Х.,
Сорокин П.Б.

149532

Теоретическое исследование новых магнитных гетероструктур WX_2 /CFGG ($X = S, Se, Te$)

Ключевые слова: сплав Гейслера,
дихалькогениды переходных металлов, ферромагнетизм,
спиновая поляризация, гетероструктура

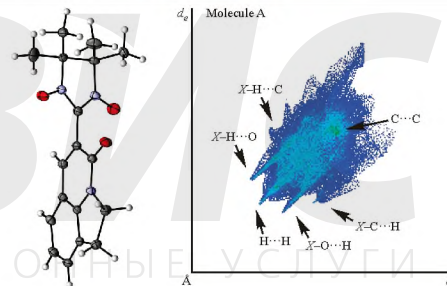


Бакулева Н.А., Личицкий Б.В., Самигуллина А.И.,
Третьяков Е.В.

149673

Синтез, молекулярная и кристаллическая структура 4-оксо-1,2-дигидро-4*H*-пирроло[3,2,1-*ij*]хинолин-5-ил)-замещенного нитронилнитроксила

Ключевые слова: органические радикалы,
нитронилнитроксила, рентгеноструктурный анализ,
поверхность Хиршфельда

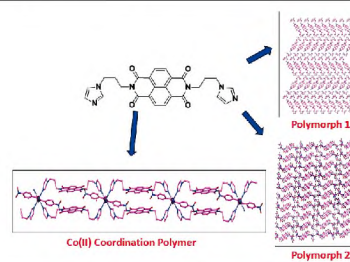


Nath J.Kr., Phukan N., Bania K.Kr.

149706

Synthesis, and crystal structures, Hirshfeld surface, and crystal void analysis of two and a 1D cobalt-coordination polymer based on of a flexible imidazole-linked naphthalenediimide ligand and its polymorphic forms

Keywords: naphthalenediimide, hydrogen bonding,
imidazole, polymorph, Co-coordination polymer, Hirshfeld

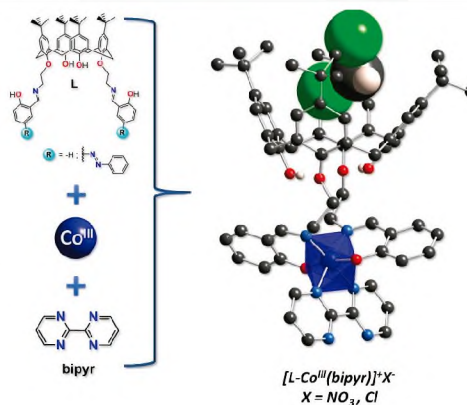


Стрельникова Ю.В., Иова А.А., Овсянников А.С.,
Исламов Д.Р., Дороватовский П.В., Бурилов В.А.,
Киямов А.Г., Литвинов И.А., Соловьева С.Е.,
Антипин И.С.

149732

Синтез и кристаллическая структура новых гетеролептических моноядерных комплексов кобальта(III) на основе 1,3-дизамещенных по нижнему ободу производных каликс[4]арена, содержащих салицилиденаминные фрагменты, и 2,2'-бипиридина

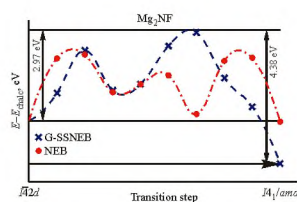
Ключевые слова: каликс[4]арен,
кристаллическая структура, Co(II), Co(III),
2,2'-бипиридин, основания Шиффа, азопроизводные



Тимофеев В.С., Гордиенко А.Б.

ТФП-исследование динамики решетки и фазовых переходов соединений Mg_2NA ($A = F, Cl, Br, I$) в структурах антихалькопирита и анти- $LiFeO_2$

Ключевые слова: антихалькопирит, анти- $LiFeO_2$, динамика решетки, фазовый переход

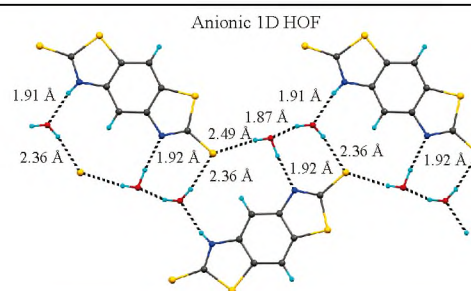


149776

Ильичев В.А., Рогожин А.Ф., Румянцев Р.В., Фукин Г.К., Бочкарев М.Н.

Особенности строения тетрабутиламмонийных солей бис-2-меркаптотиазолов – ионный комплекс и одномерный водородно-связанный органический каркас

Ключевые слова: водородно-связанный органический каркас, тетрабутиламмоний, 2-меркаптотиазол, гетероциклический лиганд

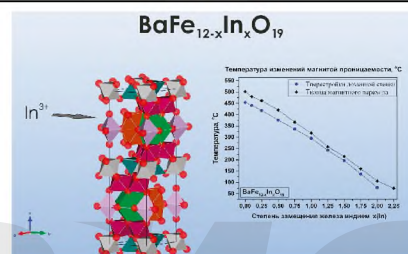


149828

Пунда А.Ю., Живулин В.Е., Гудкова С.А., Винник Д.А.

Изучение структуры и начальной магнитной проницаемости замещенного индием гексаферрита бария $BaFe_{12-x}In_xO_{19}$ ($x = 0-2.25$)

Ключевые слова: гексаферриты М-типа, твердофазный синтез, $BaFe_{12-x}In_xO_{19}$, температура Кюри, легирование индием



149837

Воробьева А.А., Троянов С.И., Байтемиров М.М., Чистяков Г.Д., Гончаренко В.Е., Крайнюков А.А., Захаров К.В., Болталин А.И., Лысенко К.А., Морозов И.В.

Синтез, кристаллическое строение и свойства нитратных комплексов РЗЭ с катионом нитрозония

Ключевые слова: нитратные комплексы редкоземельных элементов, кристаллическое строение, катион нитрозония, термическая устойчивость

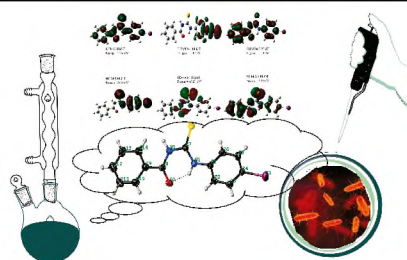


150038

Kalem E., Kaya Kinaytürk N., Aşkar Ş., Yeşilkaynak T., Ağar E., Emen F.M.

Novel benzoylthiourea derivative $N-((4\text{-iodophenyl})\text{carbamothioyl})\text{benzamide}$: Synthesis, characterization, molecular modeling and investigation of antibacterial activity

Keywords: thiourea, X-ray single crystal, DFT, antibacterial activity, AMR

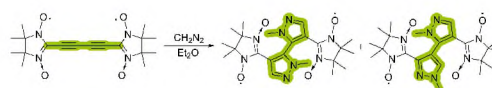


150057

Толстикова С.Е., Романенко Г.В., Третьяков Е.В., Богомяков А.С.

Синтез и структура биспиразолильных нитронилнитроксильных бирадикалов

Ключевые слова: пиразолы, диацетиленовые производные, нитронилнитроксильные радикалы, бирадикалы, рентгеноструктурный анализ



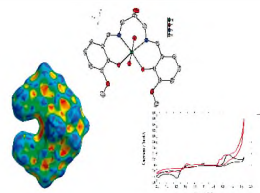
150118

Dar Kebira F., Chiboub Fellah F.Z., Nehar O.K.,
Sönmez Çelebi M., Boulefred S., Chiboub Fellah A.

150251

Electrochemical properties and Hirshfeld analysis of an octahedral Nickel Schiff base complex

Keywords: Nickel Schiff bases complex, crystal structure, Hirshfeld surface, redox behavior

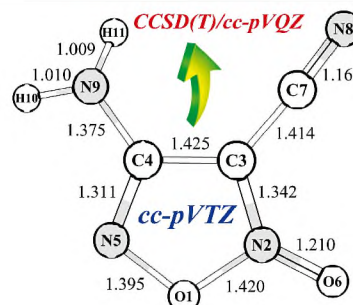


Ковтун Д.М., Бажанова З.Г., Шишков И.Ф.,
Тарасов Ю.И.

150703

Верификация экспериментальной равновесной структуры молекул 3,4-дицианофуроксана и 3-циано-4-аминофуроксана с помощью методов MP2 и CCSD(T)

Ключевые слова: 3-циано-4-аминофуроксан, 3,4-дицианофуроксан, ГЭ, молекулярная модель, r_e -структура, ОЗ, ДБА, комбинирование MP2 и CCSD(T), cc-pVXZ (X=T, Q), верификация эксперимента

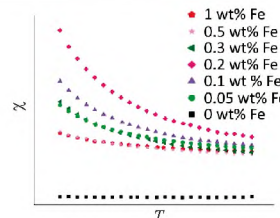


Коротаев Е.В., Беккер Т.Б., Давыдов А.В.,
Мирошниченко Л.В., Федоренко А.Д.

150779

Магнитные свойства легированного железом фторидобората $\text{LiBa}_{12}(\text{BO}_3)_7\text{F}_4$ (LBFF)

Ключевые слова: фторидоборат $\text{LiBa}_{12}(\text{BO}_3)_7\text{F}_4$, ионы Fe, метод Фарадея, удельная магнитная восприимчивость, статическая магнетохимия, РФЭС

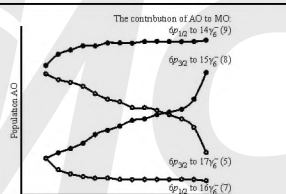


Тетерин Ю.А., Путков А.Е., Рыжков М.В.,
Маслаков К.И., Тетерин А.Ю., Иванов К.Е.,
Калмыков С.Н., Петров В.Г.

151003

Электронное строение диоксидов актиноидов

Ключевые слова: диоксиды актиноидов, внешние и внутренние валентные МО, спектры РФЭС



Содержание следующего номера — в конце журнала