

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 66

Декабрь

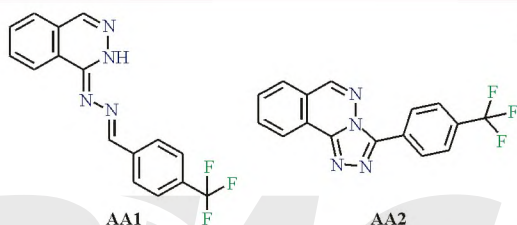
№ 12, 2025

СОДЕРЖАНИЕ

Dağ A.K., Köse A.

Hydralazine Schiff base and Fe(II) induced triazolophthalazine compounds: Crystal structure and spectroscopic properties

Keywords: hydralazine-hydrazone, cyclic analog triazolophthalazine, crystal structure, absorption/emission

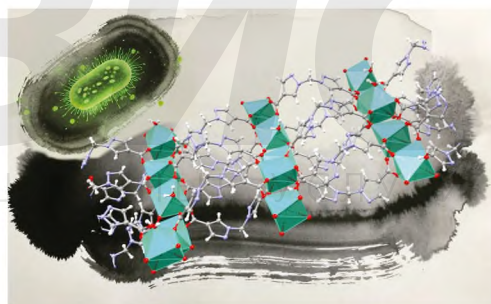


156697

Нестерова А.И., Рядун А.А., Павлов Д.И.,
Потапов А.С.

Синтез слоистого металл-органического координационного полимера тербия(III) с бис(пиразол-1-ил)метан-4,4'-дикарбоновой кислотой и его сенсорные свойства на биомаркер спорообразующих бактерий

Ключевые слова: металл-органические координационные полимеры, тербий, 2,6-пиридиндикарбоновая кислота, люминесценция, биомаркеры

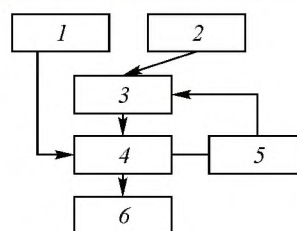


156860

Воронов В.К.

«Томографическое» изображение молекул на основе спин-спиновых взаимодействий входящих в их состав резонирующих ядер атомов

Ключевые слова: ядерный магнитный резонанс, спин-спиновое взаимодействие, обратные задачи, квантово-химические расчеты, томографическое изображение молекул

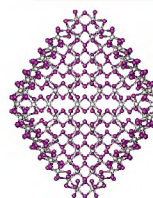


156864

Еняшин А.Н.

Квантово-химическое моделирование структуры и электронных свойств неорганических фуллеренов BiI₃

Ключевые слова: иодид висмута, фуллерены, квантово-химическое моделирование

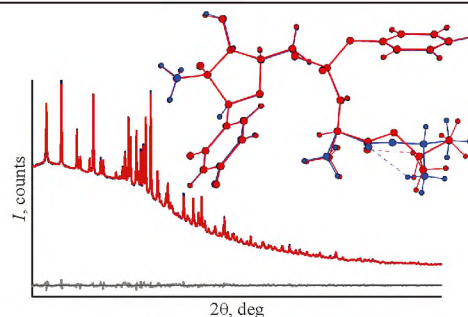


156886

Головешкин А.С., Куликова Е.С.

**Точность кристаллической структуры
полиморфов софосбувира, определяемой
по данным порошковой рентгеновской
дифракции**

Ключевые слова: активный фармацевтический ингредиент, кристаллическая структура, порошковая рентгеновская дифракция, синхротронный источник, ритвельдовское уточнение, квантово-химические расчеты

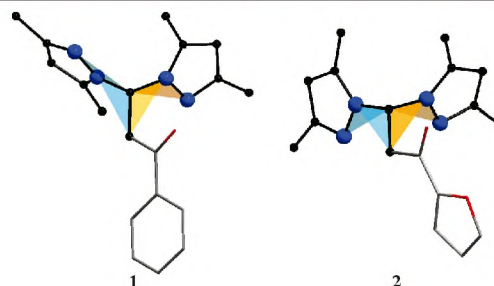


156903

Опанасюк С.С., Соколов М.Н., Сухих Т.С.,
Салий И.В., Новиков А.С., Адонин С.А.,
Гоцко М.Д.

**Кристаллические структуры
и конформационный анализ производных
бис(пиразолил)пропанона**

Ключевые слова: скорпионатные лиганды, квантово-химические расчеты, конформационный анализ, кристаллическая структура

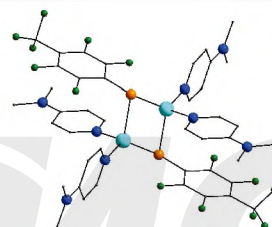


157021

Петров П.А., Филиппова Е.А., Сухих Т.С.,
Корольков И.В., Максимов А.М., Абрамов П.А.,
Соколов М.Н.

**Полиморфизм кристаллических структур
комплекса $[\text{Cu}_2(\text{S-C}_6\text{F}_4\text{-CF}_3)_2(\text{dmap})_4]$**

Ключевые слова: медь(II), тиоляты, полиморфизм, кристаллическая структура

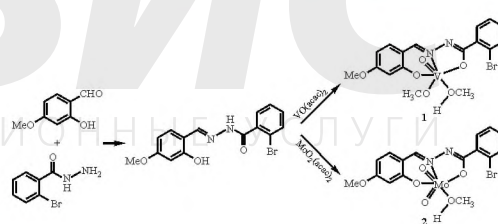


157122

You Z., Song N., Qiao Z., Xiang W., Feng X.

**Synthesis, X-ray crystal structures and biological
activity of oxidovanadium(V)
and dioxidomolybdenum complexes derived from
2-bromo-*N*-(2-hydroxy-4-methoxybenzylidene)-
benzohydrazide**

Keywords: vanadium complex, molybdenum complex, aroylhydrazone, antimicrobial activity, X-ray crystal structure

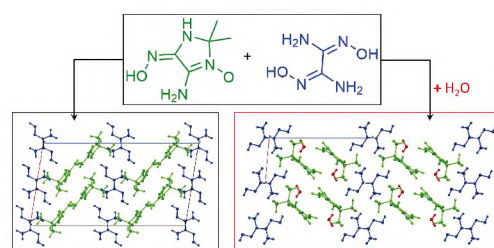


157202

Самигуллина А.И., Проничева В., Афанасьева К.А.,
Шувалова Е.В., Глухов Л.М., Степанов А.В.,
Гусейнов Ф.И.

**Две кристаллические модификации
сокристалла 5-(гидроксиимино)-1*H*-имидазол-3-
оксида с 3,4-диаминоглиоксимом**

Ключевые слова: сокристалл, ацетон, 3,4-диаминоглиоксим, 1*H*-имидазол-3-оксид, водородное связывание, поверхность Хиршфельда, кристаллическая структура

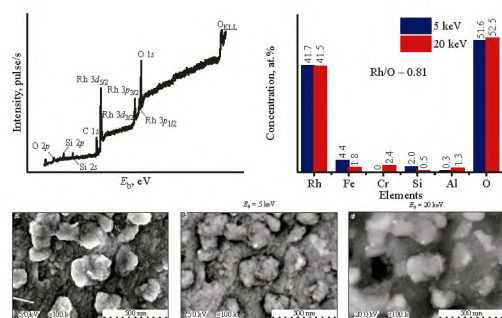


157214

Саланов А.Н., Серкова А.Н., Жирнова А.С.,
Калинкин А.В., Смирнов М.Ю., Исупова Л.А.

Морфология, микроструктура и химический состав оксидных фаз на поликристаллическом родии в атмосфере кислорода при 1100 К

Ключевые слова: поликристаллический родий,
окисление и коррозия родия,
морфология и микроструктура оксидных фаз,
оксид Rh_2O_3 , растровая электронная микроскопия,
энергодисперсионная рентгеновская спектроскопия



157278

Свинцицкий Д.А., Квасова Е.С., Кардаш Т.Ю.,
Боронин А.И.

Модификация медь-марганцевого катализатора добавками Fe, Cr, Ni и Ga для низкотемпературного окисления CO

Ключевые слова: гошкелит, низкотемпературное
окисление, шпинель, крестерит, гетерогенный катализ,
медь, марганец

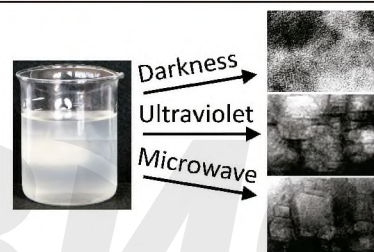


157689

Авдин В.В., Куваева А.О., Жеребцов Д.А.,
Даровских С.Н., Прокопов И.И.

Влияние УФ и СВЧ излучения на формирование оксигидроксида циркония

Ключевые слова: оксигидроксид циркония,
структурообразование, влияние УФ и СВЧ
излучения на структуру, длительность гидролиза,
кристаллиты диоксида циркония

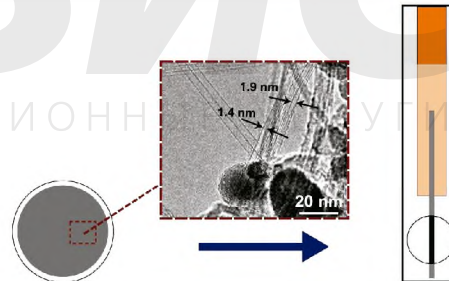


157812

Вершинина А.И., Гордая О.Р., Иванова Н.В.,
Ломакин М.В., Рыбаков М.С., Шандаков С.Д.

Оптимизация методики подготовки пленок и волокон из ОУНТ для использования в электрохимических приложениях

Ключевые слова: однослойные углеродные нанотрубки,
мокрое вытягивание, волокна,
волоконный электрод, циклическая вольтамперометрия,
электрохимия

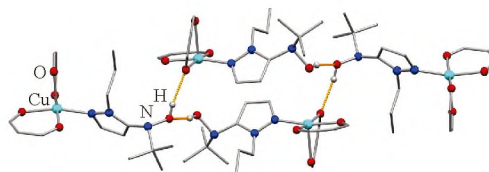


157843

Голомолзина И.В., Толстиков С.Е., Летагин Г.А.,
Богомяков А.С., Акыева А.Я., Сыроешкин М.А.,
Романенко Г.В.

Комплексы $Cu(hfac)_2$ с *N*-трет-бутил-*N*-(1- алкил-1*H*-пиразол-5-ил)гидроксиламинами

Ключевые слова: гидроксилamines, комплексы меди,
кристаллическая структура, ЦВА, водородные связи

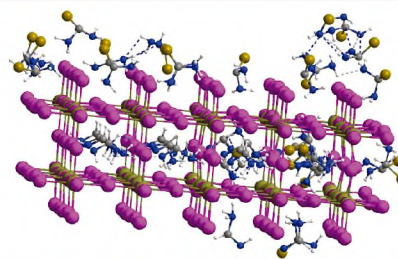


157921

Нургалиев И.Н., Марасулов М.Б., Жуллиев З.Н.,
Облакулов А.О., Н.Р. Ашуров Н.Р.

Молекулярные механизмы действия тиомочевина в $FAPbI_3$ -перовскитах: фазовая стабилизация и пассивация дефектов

Ключевые слова: перовскиты $FAPbI_3$, тиомочевина,
фазовая стабилизация, пассивация поверхности,
теория функционала плотности, молекулярная динамика

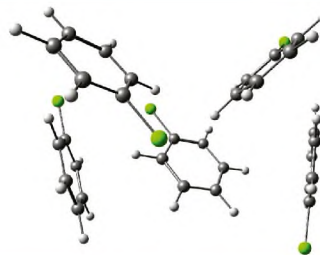


158003

Богдан Т.В., Мисатюк Ф.С., Фирсов Д.А.,
Абрамович А.И.

**Расчет строения кластеров
в жидком хлорбензоле (PhCl)_n ($n = 2-6$)
методом теории функционала плотности**

Ключевые слова: хлорбензол, кластеры,
метод теории функционала плотности B3LYP/cc-pvdz
с дисперсионной поправкой D3

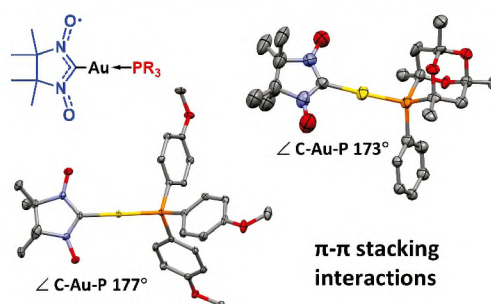


158008

Заякин И.А., Насырова Д.И., Корлюков А.А.,
Багрянская И.Ю., Миняев М.Е., Шангин П.Г.,
Сыроешкин М.А., Третьяков Е.В.

**Синтез и структура золотоорганических
производных 4,4,5,5-тетраметил-4,5-
дигидроимидазол-3-оксид-1-оксида,
стабилизированных фосфиновыми лигандами**

Ключевые слова: нитронилнитроксилы,
стабильные радикалы, комплексы золота(I),
золотоорганические производные

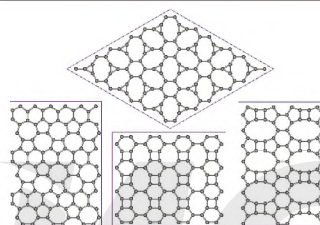


158343

Созыкин С.А., Бескачко В.П.

**Углеродные поверхности
с негексагональной структурой: стабильность
и сорбционная способность**

Ключевые слова: адсорбция, литий, цинк,
двумерные углеродные аллотропы, бифенилен,
ирида-графен, ψ-графен, TPDH-графен, моделирование

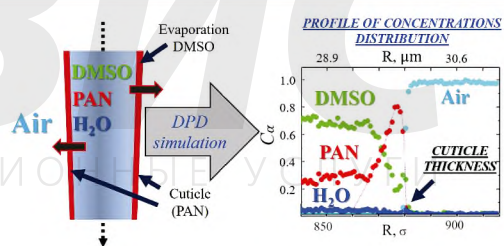


158348

Комаров П.В., Малышев М.Д., Бабуркин П.О.

**Мезомасштабное моделирование процесса
испарения растворителя с поверхности струи
пряильного раствора полиакрилонитрила
в диметилсульфоксиде**

Ключевые слова: химические волокна,
полиакрилонитрил, мезомасштабная модель,
диссипативная динамика частиц, уравнения диффузии

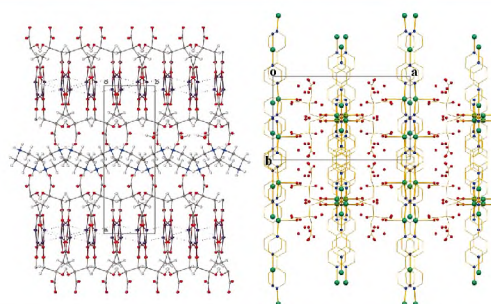


158451

Кошенкова К.А., Разворотнева Л.С.,
Самойленко Е.А., Лосева В.С., Гоголева Н.В.,
Долгушин Ф.М., Еременко И.Л., Луценко И.А.

**Цитраткарбоксилатные координационные
полимеры серебра(I): синтез, кристаллическая
структура и термическое поведение**

Ключевые слова: цитраты серебра(I), пиперазин,
4,4'-бипиридин, кристаллическая структура,
координационный полимер,
синхронный термический анализ

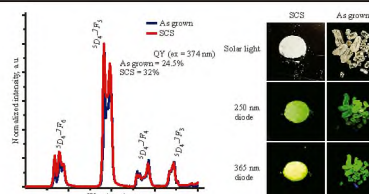


158553

Kokh A.E., Rakhmanova M.I., Kuznetsov A.B.,
Simonova E.A., Kokh K.A.

**Thermal quenching in $\text{TbAl}_3(\text{BO}_3)_4$: Influence
of synthesis method and non-stoichiometry**

Keywords: huntite, SCS, single crystal,
luminescence



Зверева О.В., Ризбаева Т.С., Блинов Д.О.,
Зорина-Тихонова Е.Н., Чистяков А.С.,
Шмелев М.А., Воронина Ю.К., Еременко И.Л.

**Синтез, структурные особенности
и молекулярный докинг комплексов цинка
с производными 3-арилиден-1-пирролинов**

Ключевые слова: комплексы цинка, 3-арилиден-1-
пирролины, рентгеноструктурный анализ,
молекулярная структура, электронная структура,
нековалентные взаимодействия, молекулярный докинг

