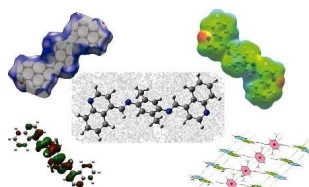


СОДЕРЖАНИЕ

Halder S., Mandal P.C., Guin M., Konar S.
Structural elucidation, Hirshfeld surface, FMO, molecular electrostatic potential (MEP) and fukui function analyses of a quinoline based Schiff base compound

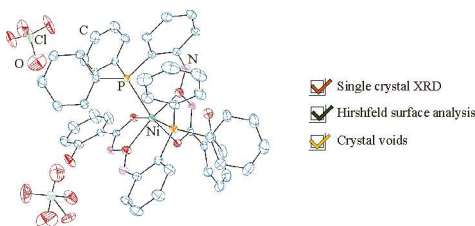
Keywords: crystal structure, DFT, Hirshfeld surface



119220

Göktürk T., Topkaya C.G., Hökelek T., Güp R.
Serendipitous synthesis of an octahedral Ni(II) complex: single crystal structure, Hirshfeld surface and voids analysis

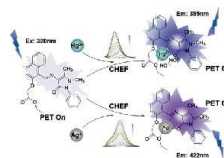
Keywords: octahedral nickel(II) complex, crystal structure, Hirshfeld surface analysis, crystal voids



119753

Zhou Y., Cao J.-W., Zhang D.-H.
An antipyrine based fluorescent probe and selective detection of Hg²⁺ and Ag⁺

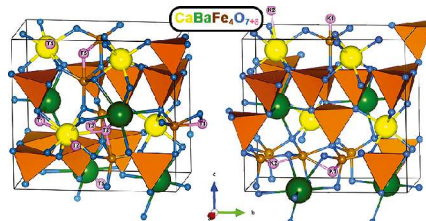
Keywords: antipyrine, fluorescent probe, Hg²⁺, Ag⁺



120025

Сунцов А.Ю., Жуков В.П., Кожевников В.Л.
Сверхстехиометрический кислород и структурная неустойчивость феррита CaBaFe₄O₇: подход «из первых принципов»

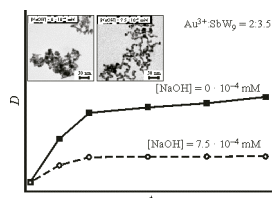
Ключевые слова: феррит, сведенборгит, структурная неустойчивость, мультиферроик, ab initio PAW метод



120093

Tan R., Li Y., Wang Q., Guo Y., Wang J.
Convenient and green synthesis of POM-coated gold nanostructures and photocatalytic activity under visible light

Keywords: polyoxometalate (POM), Au, nanostructure, synthesis, photocatalysis

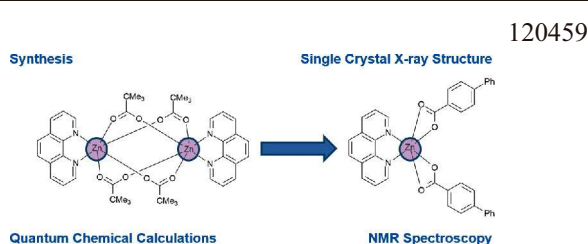


120099

Самулионис А.С., Мельников С.Н., Павлов А.А.,
Старикова А.А., Гоголева Н.В., Николаевский С.А.,
Кискин М.А., Еременко И.Л.

Синтез и строение моноядерного комплекса цинка с 4-бифенилкарбоксилат-анионами и 1.10-фенантролином

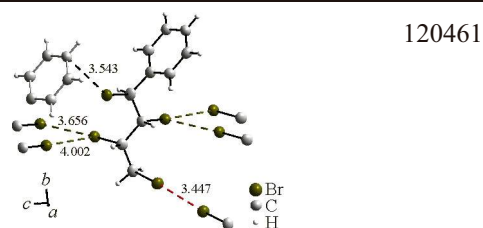
Ключевые слова: комплексы цинка(II), карбоксилаты, молекулярная структура, квантово-химические расчеты, теория функционала плотности (DFT)



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

Галогенные связи в структуре тетрабромфенилбутана

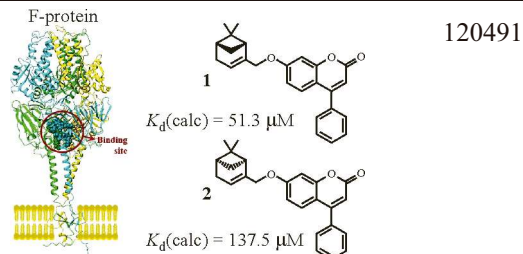
Ключевые слова: кристаллическая структура, галогенная связь, термический анализ



Борисевич С.С., Волчо К.П., Салахутдинов Н.Ф.

Могут ли методы молекулярной динамики объяснить различную активность стереоизомеров в отношении респираторно-синцитиального вируса?

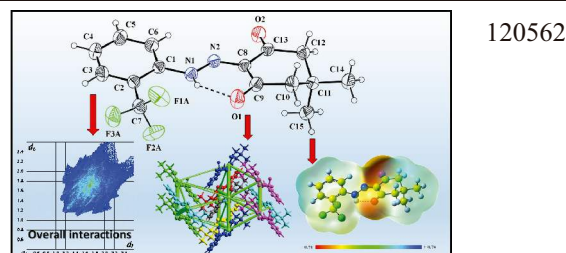
Ключевые слова: F-белок, респираторно-синцитиальный вирус, монотерпен-арилкумариновые конъюгаты, молекулярный докинг, метадинамика



Kurbanova M., Ashfaq M., Sadigova A.,
Feizi-Dehnaeyebi M., Maharramov A., Tahir M.N.

A hydrazone derivative: synthesis, crystal structure, supramolecular assembly exploration by Hirshfeld surface analysis and computational study

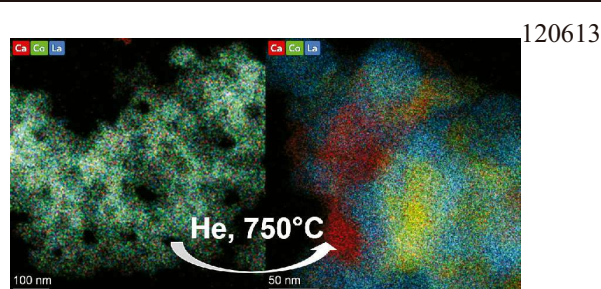
Keywords: 5,5-dimethylcyclohexane-1,3-dione, XRD, crystal packing, intermolecular interactions, Hirshfeld surface analysis, computational study



Капишников А.В., Беспалко Ю.Н.,
Шуваракова Е.И., Цыбуля С.В.,
Исупова Л.А., Герасимов Е.Ю.

Влияние кислородной нестехиометрии на структурную стабильность в сложных оксидах $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Mn}_{0.5}\text{CO}_{0.5}\text{O}_3$ ($x = 0.2-0.6$) в условиях нагрева в атмосфере He

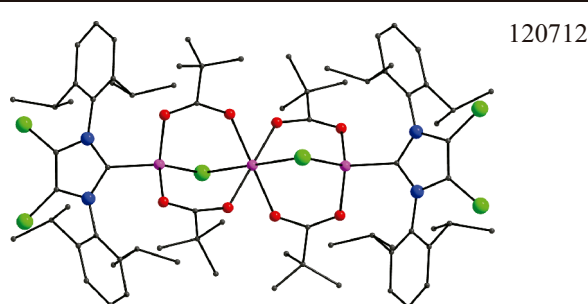
Ключевые слова: перовскитоподобные оксиды, нестехиометрия, твердые растворы, манганит лантана, фазовые переходы



Петров П.А., Николаевский С.А., Филиппова Е.А.,
Компаньков Н.Б., Сухих Т.С., Кискин М.А.,
Соколов М.Н., Еременко И.Л.

Новая полиморфная модификация 1,3-бис(2,6-ди-изопропилфенил)-4,5-дихлоримидазол-2-илидена и комплекс кобальта с ним

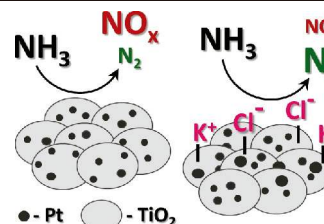
Ключевые слова: кобальт, карбоксилаты, N-гетероциклические карбены, рентгеноструктурный анализ



Кибис Л.С., Свиницкий Д.А., Овсяк И.Ю.,
Кардаш Т.Ю., Романенко А.В., Боронин А.И.

**Модификация физико-химических свойств
платино-титановых катализаторов
нейтрализации остаточного аммиака**

Ключевые слова: платина, оксид титана,
селективное окисление аммиака, кислотные свойства



120714

Захарова А.С., Александров А.А., Поминова Д.В.,
Федоров П.П., Кузнецов С.В., Иванов В.К.

**Синтез люминофоров $\text{KGd}_2\text{F}_7\text{:Yb:Er}$
методом соосаждения из водных растворов**

Ключевые слова: метод соосаждения,
неорганические фториды,
ап-конверсионная люминесценция, система KF-GdF_3 ,
фторид калия, нитрат гадолиния

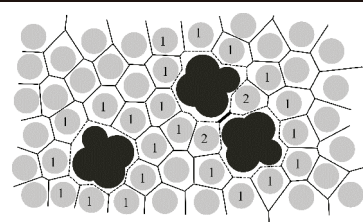


120730

Ничипоренко В.А., Кадцын Е.Д., Медведев Н.Н.

**Взаимное соседство молекул компонентов
в водных растворах ТБС и ТМАО**

Ключевые слова: молекулярно-динамическое
моделирование, ассоциация в растворах,
разбиение Вороного, водные растворы неэлектролитов,
трет-бутиловый спирт, триметиламиноксид

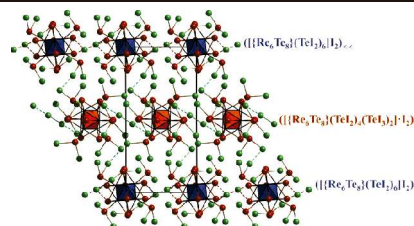


120787

Новикова Е.Д., Коновалов Д.И., Иванов А.А.,
Куратьева Н.В., Шестопалов М.А.

**Новая фаза октаэдрического теллуриодиодного
кластерного комплекса рения**

Ключевые слова: рений, теллур,
октаэдрические кластеры, кластерные комплексы,
рентгенофазовый анализ, кристаллическая структура



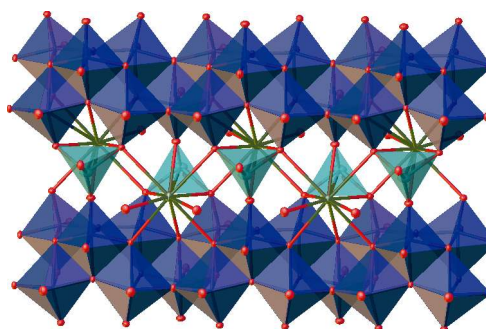
121167

Серебренникова П.С., Комаров В.Ю.,
Трифонов В.А., Панченко А.В., Громилов С.А.

**Комбинированный подход к калибровке
монокристалльного дифрактометра.**

**Изучение структуры $\text{CsLiMo}_3\text{O}_{10}$
в интервале 90–450 К**

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ,
монокристалльный дифрактометр,
калибровка 2D детектора, обработка дифракционных
данных, калибровка гониометра,
точность измерения параметров элементарной ячейки,
высокотемпературная рентгенография

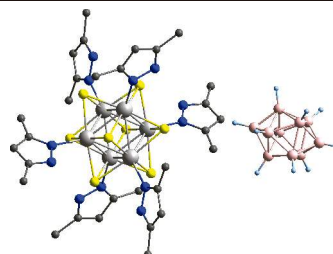


121273

Давыдова М.П., Сухих Т.С., Рахманова М.И.,
Брылев К.А., Артемьев А.В.

**Кластерные комплексы рения
с полиборгидридными анионами
 $[\text{Re}_6\text{S}_8(\text{Me}_2\text{PzH})_6]\text{X}$ ($\text{X} = \text{B}_{10}\text{H}_{10}, \text{B}_{12}\text{H}_{12}$)**

Ключевые слова: кластеры рения,
полигидридные кластеры бора, синтез,
кристаллическая структура, фосфоресценция



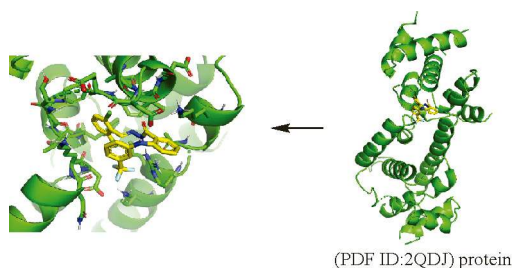
121365

Suhta A., Saral S., Çoruh U., Karakuş S.,
Vazquez-Lopez E.M.

121415

Synthesis, single crystal X-ray, Hirshfeld surface analysis and DFT calculation based NBO, HOMO-LUMO, MEP, ECT and molecular docking analysis of *N'*-[2,6-dichlorophenyl)methylidene]-2-[[3-(trifluoromethyl)phenyl]amino}benzohydrazide

Keywords: hydrazone, DFT calculations, X-ray diffraction, Hirshfeld surfaces, DNA/ECT charge transfer method, molecular docking



Содержание следующего номера — в конце журнала

© Сибирское отделение РАН, 2024
© Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН, 2024
© Новосибирский государственный
университет, 2024