

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 65

Декабрь

№ 12, 2024

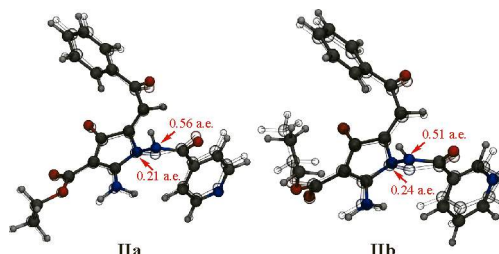
СОДЕРЖАНИЕ

Ильина М.Г., Шустов М.В., Игидов Н.М.,
Хамитов Э.М., Борисевич С.С., Зыкова С.С.

136041

Синтез этил-2-амино-1-(гетариламидо)-4-оксо-5-(2-оксо-2-фенилэтилиден)-4,5-дигидро-1H-пиррол-3-карбоксилатов, исследование их антиоксидантной активности и оценка электронных параметров методами квантовой химии

Ключевые слова: HIF-1 α , DPPH-тест, антиоксиданты, квантово-химические расчеты, конформационный анализ

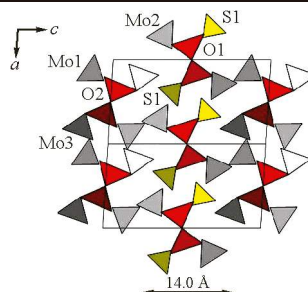


Борисов А.С., Сийдра О.И., Чаркин Д.О.,
Николаевич Г.В., Байкина А.С., Назарчук Е.В.,
Хольцхайд А.

136344

Синтез и кристаллическая структура $\text{Cu}_6\text{O}_2(\text{MoO}_4)_3(\text{SO}_4)$, нового оксосульфат-молибдата меди, структурно родственного вергасоваиту и гликиниту

Ключевые слова: сульфаты, молибдаты, медь, оксоцентрированные комплексы, гликинит, вергасоваит

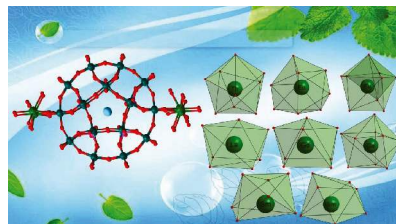


Zhu Q., Fedin V.P., Yao W., Qin C.

136356

Synthesis and properties of Preyssler-type polyoxotungstates formed by the interaction between polyoxometalate and lanthanide metals

Keywords: Preyssler-type polyoxometalate, lanthanide metals, hydrothermal synthesis, coordination chemistry

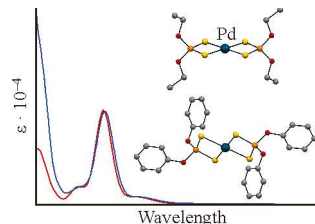


Брылева Ю.А., Михейлис А.В., Глинская Л.А.

136532

Кристаллические структуры и оптические свойства дитиофосфатных комплексов $[\text{Pd}\{(\text{RO})_2\text{PS}_2\}_2]$ ($\text{R} = \text{Et}, \text{Ph}$)

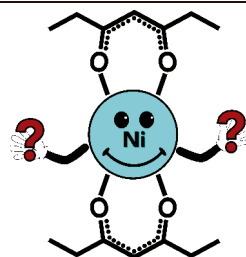
Ключевые слова: комплекс, палладий, дитиофосфат, структура, оптические свойства, электронные спектры поглощения



Жежера М., Кочелаков Д.В., Стабников П.А.,
Викулова Е.С.

Структура и свойства комплексов Ni(II) с гептандионом-3,5

Ключевые слова: никель(II),
нефторированные β -дикетонаты, летучие прекурсоры,
разнолигандные комплексы, олигоядерные комплексы,
рентгеноструктурный анализ

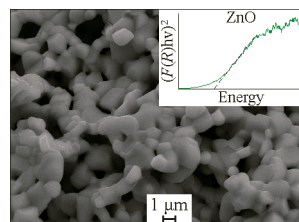


136644

Солизода И.А., Созыкин С.А., Зирник Г.М.,
Чернуха А.С., Гудкова С.А., Винник Д.А.

Изучение влияния параметров синтеза на условия фазообразования оксидов индия, галлия и цинка

Ключевые слова: оксид индия, оксид галлия,
оксид цинка, структура, золь-гель метод

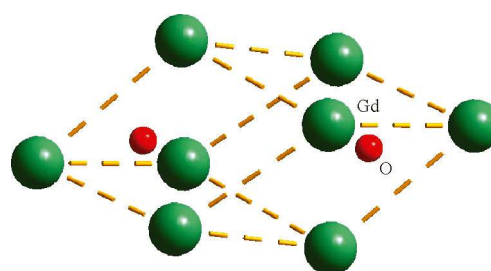


136668

Серебренникова П.С., Кудрявцев А.Л., Наумов Н.Г.,
Громилов С.А.

Gd₂O₃: синтез и рентгеноструктурное исследование монокристаллов, тепловое расширение в интервале 90–490 К

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ
монокристаллов, схема Бонда, внешний эталон,
оксид гадолиния, параметры элементарной ячейки,
тепловое расширение

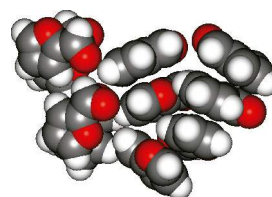


136866

Теплухин А.В.

Структурные и теплофизические характеристики жидкого фурфурола при температуре 298 К и атмосферном давлении

Ключевые слова: фурфурол, структура,
компьютерное моделирование, метод Монте-Карло

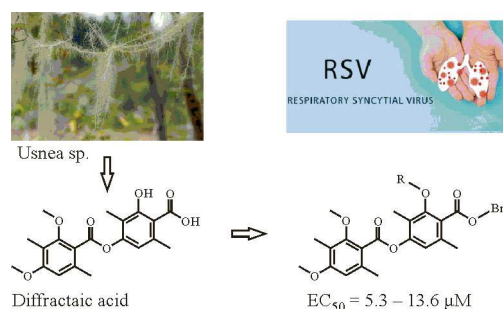


136894

Филимонов А.С., Дивейкина А.А., Лузина О.А.,
Штро А.А., Галочкина А.В., Клабуков А.М.,
Разгуляева Д.Н., Салахутдинов Н.Ф.

Синтез новых производных диффрактаевой кислоты и изучение их активности в отношении РСВ штамма A2

Ключевые слова: диффрактаева кислота,
бензидиффрактаат, эфиры бензидиффрактата,
респираторно-синцитиальный вирус,
противовирусная активность

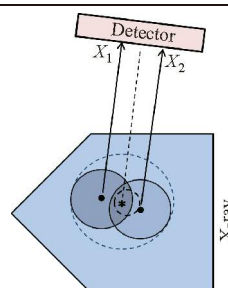


137039

Кудрявцев А.Л., Громилов С.А.

Учет эксцентриситета образца при измерении параметров элементарной ячейки малых монокристаллов в схеме Бонда на современных дифрактометрах

Ключевые слова: рентгеновская дифрактометрия
монокристаллов, схема Бонда, малые кристаллы,
параметры элементарной ячейки, точность, эталон,
эксцентриситет, двумерный детектор

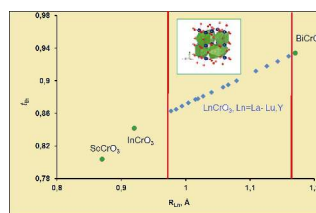


137338

Журавлев В.Д., Шерстобитова Е.А.

Анализ формирования твердых растворов ортохромитов РЗЭ

Ключевые слова: ортохромиты РЗЭ, изоморфные взаимозаменения, параметры кристаллической решетки, фактор толерантности

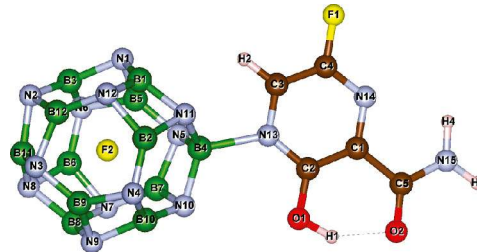


137678

Зубков Л.С., Калика Е.Б., Гришаков К.С., Маслов М.М., Катин К.П.

Теоретическое исследование взаимодействия фавипиравира с фторированным бор-нитридным фуллереном

Ключевые слова: фуллерен $B_{12}N_{12}$, фавипиравир, COVID-19, фторирование, доставка лекарств

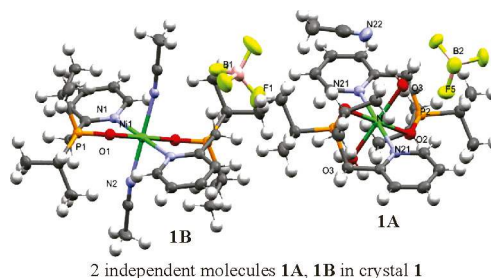


137854

Еникеева К.Р., Литвинов И.А., Любина А.П., Волошина А.Д., Мусина Э.И., Карасик А.А.

Комплексы никеля(II) на основе пиридил- и хинолилсодержащих диалкилфосфиноксидов

Ключевые слова: третичные фосфиноксиды, пиридилсодержащие фосфиноксиды, хинолилсодержащие фосфиноксиды, Ni^{II} комплексы, N,O -лиганды, цитотоксичность, рентгеноструктурный анализ

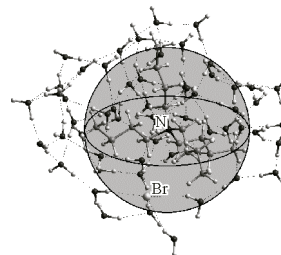


137940

Солдатов В.С., Безъязычная Т.В.

Геометрические параметры и форма иона тетра-*n*-бутиламмония и молекулы тетрабутилметана в вакууме и воде по данным ab initio расчета

Ключевые слова: тетрабутиламин, тетрабутилметан, форма ионов и молекул, ионы с плотной и неплотной структурой, гидратация ионов

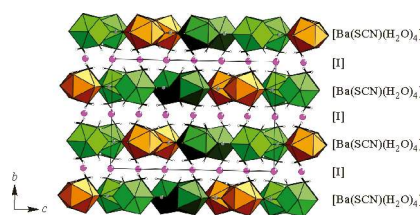


138103

Киреев В.Е., Хасанов К.А., Чаркин Д.О., Аксенов С.М.

Синтез и кристаллическая структура нового нецентросимметричного слоистого тетрагидрата иодид-тиоцианата бария $Ba(SCN)I \cdot 4H_2O$

Ключевые слова: синтез из раствора, барий, тиоцианат, иодид, смешанные анионы, слоистые структуры

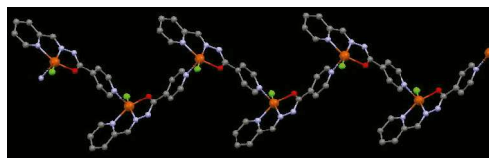


138190

Фоменко Я.С., Бакаев И.В., Седых Е.С., Абрамов П.А., Махмуди Г., Гущин А.Л.

Координационное соединение меди(II) с производным изоникотинида

Ключевые слова: медь, гидразиды, координационные полимеры, синтез, PCA, DFT расчеты

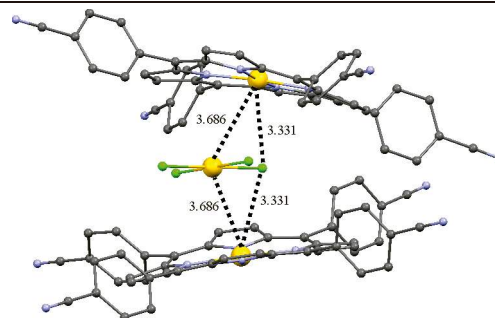


138232

Бардина Е.Э., Макотченко Е.В., Бирин К.П.,
Шремзер Е.С., Байдина И.А., Сухих Т.С.,
Новиков А.С., Горбунова Ю.Г., Гушин А.Л.

**Кристаллическая структура комплекса
золота(III) с тетракис-(4-цианофенил)
порфирином**

Ключевые слова: золото(III), порфирин, комплексы,
рентгеноструктурный анализ,
квантово-химические расчеты,
нековалентные взаимодействия

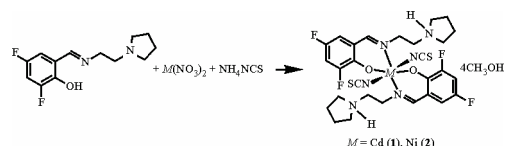


138414

Liu J.-X., Wang H.-L., Li W., You Z.

**Synthesis, characterization and X-ray crystal
structures of Schiff base cadmium(II) and nickel(II)
complexes with antibacterial activity**

Keywords: Schiff base, cadmium complex, nickel complex,
X-ray crystal structure, antibacterial activity

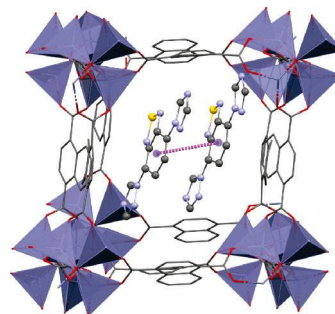


138833

Павлов Д.И., Рядун А.А., Федин В.П., Потапов А.С.

**Металл-органический координационный
полимер цинка с 4,7-ди(1,2,4-триазол-1-ил)-2,1,3-
бензотиадиазолом и 1,4-нафталиндикарбоновой
кислотой: люминесцентные свойства
и перенос заряда гость–хозяин**

Ключевые слова: цинк,
металл-органические координационные полимеры,
рентгеноструктурный анализ, фотолюминесценция,
2,1,3-бензотиадиазол



140469

Содержание следующего номера — в конце журнала