

ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 65

Июнь

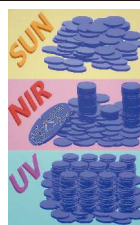
№ 6, 2024

СОДЕРЖАНИЕ

Травкин В.В., Коптяев А.И., Юнин П.А.,  
Гордеев К.М., Пахомов Г.Л.

**Изменения в пленках пигмента  $\text{PcVO}$   
при освещении**

**Ключевые слова:** тонкие пленки, фталоцианины,  
вакуумный рост, полиморфизм, морфология,  
оптическая спектроскопия

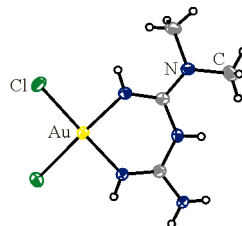


127457

Макотченко Е.В., Байдина И.А., Корольков И.В.,  
Гущин А.Л.

**Синтез и исследование структуры  
новых комплексов золота(III)  
с 1,1-диметилбигуанидом**

**Ключевые слова:** комплексы золота,  
1,1-диметилбигуанид, рентгеноструктурный анализ

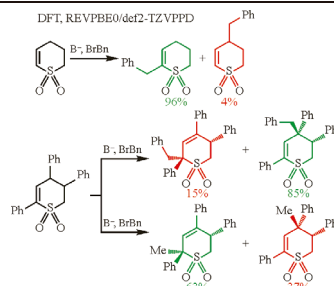


127487

Старостин М.В., Долбнев Н.Е., Баширов Р.Л.,  
Овчинников К.Л.

**Квантово-химическое исследование реакции  
алкилирования 3,4-дигидро-2H-тиопиран-1,1-  
диоксидов**

**Ключевые слова:** 3,4-дигидро-2H-тиопиран-1,1-  
диоксиды, нуклеофильное замещение в алкилбромиде,  
квантово-химическое моделирование, метод DFT,  
функционал REVPBE0



127559

Lozanov V.V., Utkin A.V., Letyagin G.A.,  
Romanenko G.V., Polyukhov D.M., Kozlova S.G.,  
Titov A.T., Baklanova N.I.

**Crystal structure, microhardness  
and thermal expansion of ternary  $\text{TaIr}_2\text{B}_2$  boride**

**Keywords:** ternary boride, iridium, crystal structure,  
thermal expansion, microhardness

$\text{TaIr}_2\text{B}_{2-x}$  crystal structure

	$P\bar{1}$	$C2/c$	$Cc$
XRD	✓	✓	✓
DFT	✓	✓	✗
NMR	✓	✗	✗

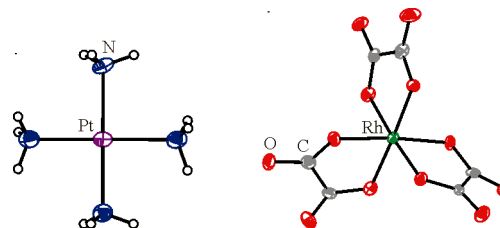


127626

Воробьева С.Н., Байдина И.А., Сухих Т.С.,  
Филатов Е.Ю., Плюсин П.Е.

**Разнообразие кристаллических структур  
в системе, содержащей комплексные ионы:  
[Pt(NH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>]<sup>2+</sup> и [Rh(C<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)<sub>3</sub>]<sup>3-</sup>**

**Ключевые слова:** родий, платина, двойные комплексные  
соли, кристаллическая структура, термические свойства

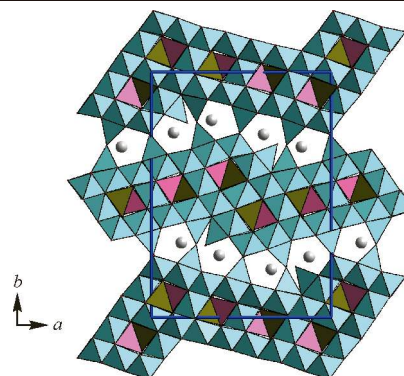


127687

Зарубина Е.С., Расцветаева Р.К., Русаков В.С.,  
Николаев А.Г., Вагизов Ф.Г., Бахтин А.И.,  
Варламов Д.А., Чуканов Н.В., Ананьев С.А.,  
Аксенов С.М.

**Кристаллохимия минералов со шпинелевыми  
модулями и новые данные о симметрии,  
структуре и особенностях распределения  
катионов в ташелгите CaMgFe<sup>2+</sup>Al<sub>9</sub>O<sub>16</sub>(OH)**

**Ключевые слова:** ташелгит,  
мессбауэровская спектроскопия,  
оптическая спектроскопия, шпинель, кристаллохимия,  
рентгеноструктурный анализ

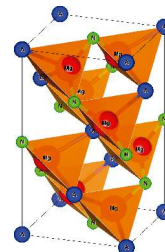


127721

Тимофеев В.С., Гордиенко А.Б.

**Первопринципное исследование структуры  
и химической связи группы гипотетических  
соединений Mg<sub>2</sub>N<sub>4</sub> (A = F, Cl, Br, I)  
с решеткой антихалькопирита**

**Ключевые слова:** антихалькопирит,  
кристаллическая структура, электронная структура,  
химическая связь

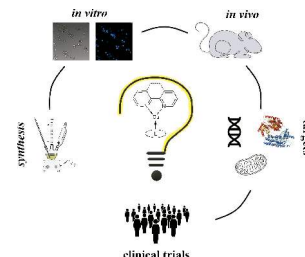


127724

Голубева Ю.А., Лидер Е.В.

**Комплексы меди(II) на основе 2,2'-бипиридина  
и 1,10-фенантролина как потенциальные  
объекты для разработки противоопухолевых  
препаратов**

**Ключевые слова:** комплексы меди, 1,10-фенантролин,  
2,2'-бипиридин, цитотоксическая активность,  
*in vivo* исследования

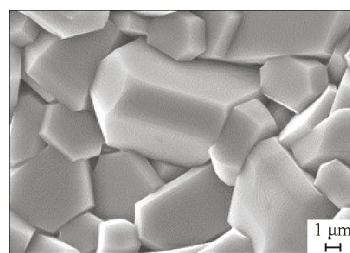


127778

Солизода И.А., Живулин В.Е., Гудкова С.А.,  
Таскаев С.В., Забейворота Н.С., Песин Л.А.,  
Винник Д.А.

**Влияние замещения железа алюминием  
и титаном на структуру  
и свойства гексаферрита бария**

**Ключевые слова:** гексаферрит бария, твердые растворы,  
магнитные свойства

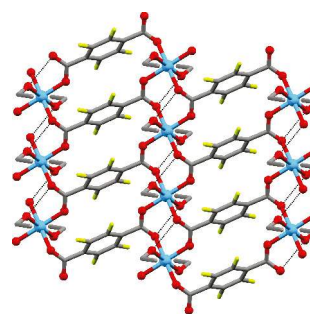


127997

Чеплакова А.М., Елисеев Е.А., Самсоненко Д.Г.,  
Федин В.П.

**Кристаллическая структура  
металл-органических координационных  
полимеров на основе катионов магния  
и изомерных тетрафторбензолдикарбоксилатных  
лигандов**

**Ключевые слова:** тетрафторбензолдикарбоксилатные  
комплексы, комплексы магния, металл-органический  
координационный полимер, кристаллическая структура

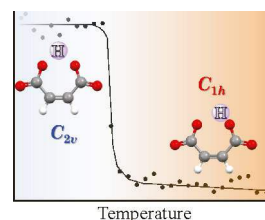


128049

Vershinin M.A., Vinogradova K.A., Pritchina E.A., Kolesov B.A.

**Raman spectroscopic study of centered OHO hydrogen bonding in the hydrogen maleate anion**

**Keywords:** maleic acid salts, intramolecular hydrogen bonding, Raman spectroscopy, isotope effects, quantum-chemical calculation

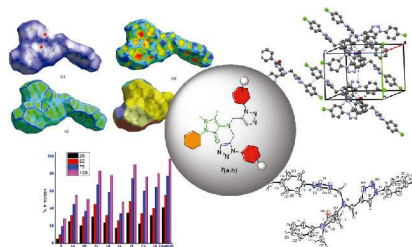


128053

Lakshmana B., Anil Kumar G.N., Tajuddin A.M., Javarappa R., Kumaraswamy M., Basavaraju Y.B.

**Synthesis, crystal structure, anticancer evaluation and Hirshfeld surface analysis of novel antipyrine gathered bis-triazoles as breast adenocarcinoma inhibitors**

**Keywords:** antipyrine, click chemistry, X-ray crystallography, anticancer activity, Hirshfeld surface analysis

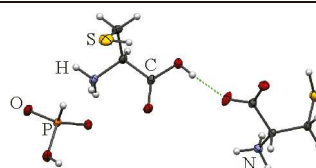


128089

Ghazaryan V.V., Giester G., Minkov V.S., Boldyreva E.V., Petrosyan A.M.

**L-Cysteinium...L-cysteine phosphite**

**Keywords:** phosphite, L-cysteine, crystal structure, dimeric cation, infrared spectra

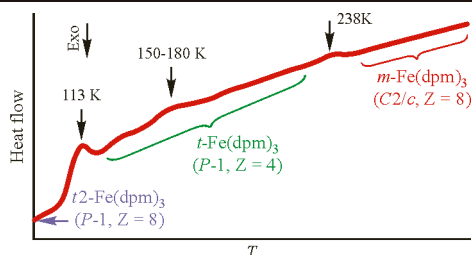


128209

Кочелаков Д.В., Стабников П.А., Сухих А.С., Пищур Д.П., Громилов С.А.

**Новые данные о строении трис-дипивалоилметаната Fe(III) в интервале 90–365 К**

**Ключевые слова:** дипивалоилметанат железа(III), летучие соединения, фазовый переход, рентгеноструктурный анализ, сублимация, PVD слон



128526

Содержание следующего номера — в конце журнала