

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

ТОМ 66

Февраль

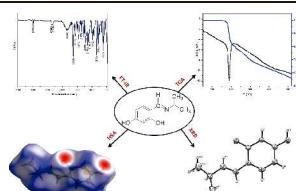
№ 2, 2025

СОДЕРЖАНИЕ

Ayyappan A., Arockiasamy S.

**Synthesis, crystal structure, and Hirshfeld analysis of a novel Schiff base compound 5-hydroxy-2-{{(propan-2-yl)iminio}methyl}phenolate**

**Ключевые слова:** синтез, Schiff база, кристаллическая структура, XRD, водородная связь, анализ Хиршфельда, термальный анализ

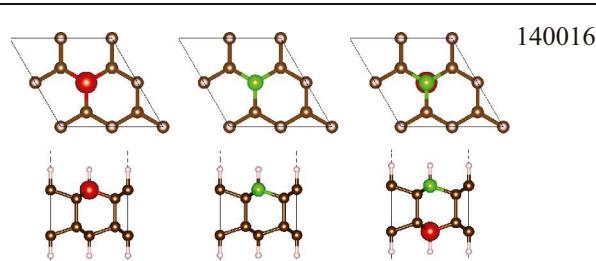


140014

Грекова А.А., Гришаков К.С., Катин К.П.,  
Маслов М.М.

**Влияние заместительного допирования атомами бора и азота на электронные и оптические характеристики диаманов**

**Ключевые слова:** допированный диаман, электронная зонная структура, полупроводниковая щель, постоянная решетки, ИК спектры, спектры комбинационного рассеяния

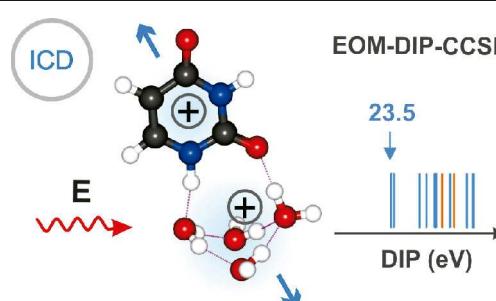


140016

Гришкова В.М., Крицкий О.Р., Трофимов А.Б.,  
Скитневская А.Д.

**Теоретическое исследование влияния межмолекулярных взаимодействий на спектр двукратно ионизированных состояний в системах урацил – *n*H<sub>2</sub>O (*n* = 1–4)**

**Ключевые слова:** двукратная ионизация, межмолекулярный кулоновский распад, ICD, Оже, метод связанных кластеров, EOM-DIP-CCSD, урацил, вода, межмолекулярные взаимодействия, РНК

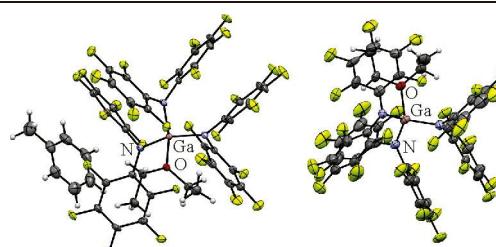


EOM-DIP-CCSD<sup>140030</sup>

Завгородний А.С., Крюкова М.А., Тимошкин А.Ю.

**Донорно-акцепторные комплексы кислоты Льюиса Ga[N(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>2</sub>]<sub>3</sub> с пиридином и диэтиловым эфиrom**

**Ключевые слова:** кислоты Льюиса, донорно-акцепторное взаимодействие, рентгеноструктурный анализ, декафтодифениламид галлия, пиридин, ацетонитрил

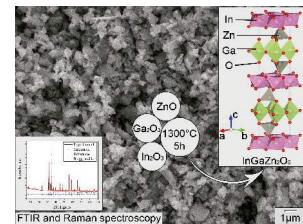


140068

Винник Д.А., Ковалев А.И., Шерстюк Д.П.,  
Жибулин Д.Е., Зирник Г.М., Батманова Т.В.

**Синтез и анализ структуры полупроводникового  
оксида индия–галлия–цинка**

**Ключевые слова:** IGZO, оксид индия–галия–цинка,  
твердофазный синтез, SEM, EDX, XRD,  
ИК спектроскопия, рамановская спектроскопия

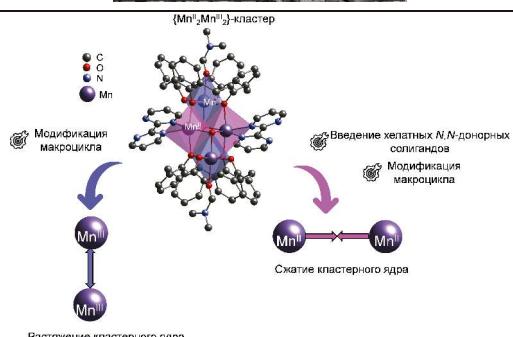


140143

Стрельникова Ю.В., Овсянников А.С., Иова А.А.,  
Исламов Д.Р., Самигуллина А.И.,  
Дороватовский П.В., Соловьева С.Е., Антипин И.С.

**Влияние адамантильных групп на «верхнем  
ободе» макроцикла на кристаллическую  
структуре гетеровалентных марганцевых  
{Mn<sup>II</sup><sub>2</sub>Mn<sup>III</sup><sub>2</sub>} комплексов на основе  
каликс[4]арена и 2,2'-бипиридина**

**Ключевые слова:** каликс[4]арен, 2,2'-бипиридин,  
Mn(II), Mn(III), кристаллическая структура, кластеры

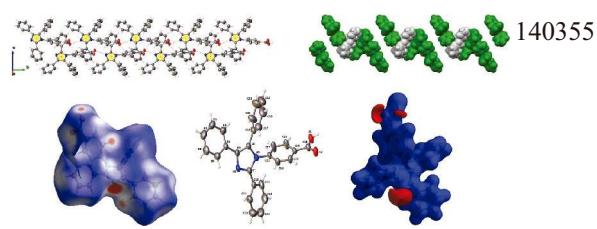


140223

Abdulsamad L.A., Kanmazalp S.D., Jasim S.S.,  
Abdelhamid A.A.

**Crystal structure and solid state assembly inspection  
by Hirshfeld surface analysis of the imidazole-based  
ligand**

**Keywords:** imidazole, SC-XRD, Hirshfeld surface analysis,  
fingerprint

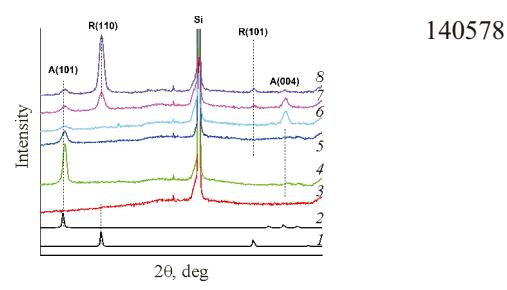


140355

Хижняк Е.А., Шаяпов В.Р., Корольков И.В.,  
Дудкина С.П., Гейдт П.В., Лебедев М.С.

**Влияние температур осаждения  
и отжига на фазовый состав пленок TiO<sub>2</sub>,  
полученных методом атомно-слоевого  
осаждения из тетрахлорида титана и воды**

**Ключевые слова:** диоксид титана,  
атомно-слоевое осаждение, тонкие пленки, отжиг,  
анатаз, рутил

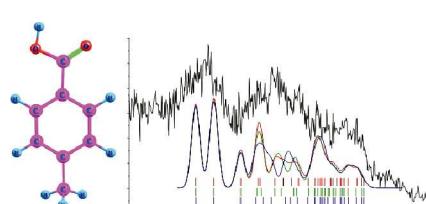


140578

Шурыгин А.В., Курбатов И.А., Ривас Веласкес Д.А.,  
Мазейка А.Н., Короченцев В.В., Немtinov В.И.,  
Писарев С.М.

**Электронная структура изомеров  
толуиловой кислоты**

**Ключевые слова:** электронная структура, РФЭС, ИК,  
лиганды, толуиловая кислота, ТФП

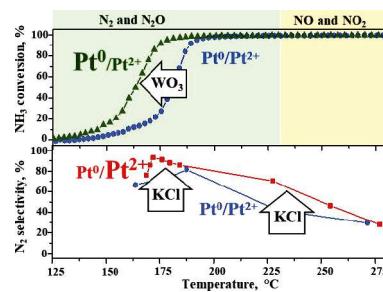


140581

Кибис Л.С., Свинцицкий Д.А., Овсяюк И.Ю.,  
Романенко А.В., Кардаш Т.Ю., Стонкус О.А.,  
Славинская Е.М., Боронин А.И.

**Состояние активного компонента  
и катализитические свойства модифицированных  
платино-титановых катализаторов селективного  
окисления аммиака**

**Ключевые слова:** платина, оксид титана,  
селективное окисление аммиака, NH<sub>3</sub>-СКО, РФЭС

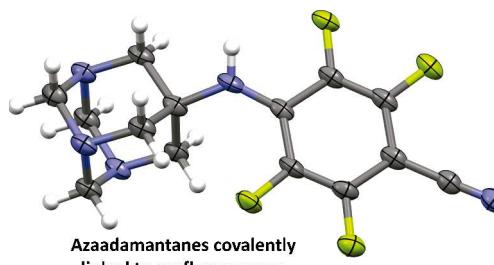


140584

Кудрявцева Е.Н., Медведько А.В., Арутюнян А.Д.,  
Геворкян К.А., Галстян М.В., Гаспарян С.П.,  
Вацадзе С.З., Романенко Г.В., Корлюков А.А.,  
Третьяков Е.В.

**Синтез, молекулярная и кристаллическая структура полифторарилзамещенных аминодиаза- и аминотриазаадамантанов**

**Ключевые слова:** полифторарены, ароматическое нуклеофильное замещение, анилины, азаадамантаны

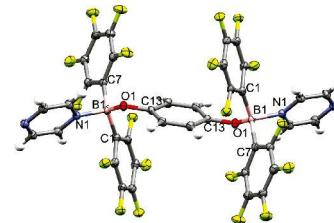


140604

Кудина П.И., Крюкова М.А., Казаков И.В.

**Синтез и структура комплексов бидентатных кислот Льюиса  $R[OB(C_6F_5)_2]_2$  ( $R = C_2H_4, p\text{-}C_6H_4$ ) с пиразином**

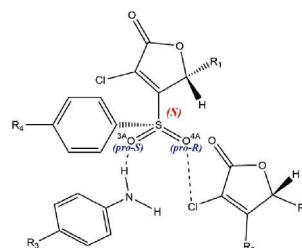
**Ключевые слова:** донорно-акцепторные комплексы, бидентатные кислоты Льюиса, пиразин, кристаллическая структура



140658

Герасимова Д.П., Французова Л.В., Сайфина А.Ф.,  
Хабибрахманова А.М., Хабибуллина А.М.,  
Раббаниева Э.С., Курбангалиева А.Р.,  
Лодочникова О.А.

**Кристаллическая структура оптически активных сульфонов на основе 4-аминотиофенола и 5-ментилокси- и 5-борнилокси-2(5*H*)-фуранонов: стереохимические особенности**



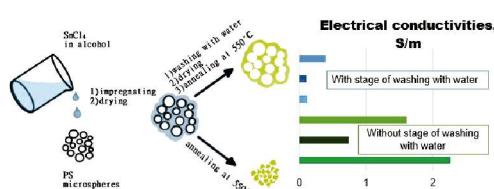
140717

**Ключевые слова:** псевдосимметрия, супрамолекулярный ассоциат, межмолекулярные взаимодействия, поверхность Хиршфельда, фураноны, сульфоны

Чикунова Ю.О., Воробьева Е.Е., Мосеенков С.И.,  
Пархомчук Е.В., Грибов Е.Н., Шапаренко Н.О.,  
Козлов Д.В.

**Приготовление макропористого оксида олова (IV) темплатным методом для применения в качестве носителя электрокатализаторов**

**Ключевые слова:**  $SnO_2$ , темплатный синтез, электропроводность, полистирольные микросфера

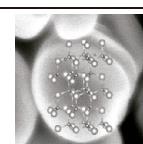


140721

Shestakov M.V., Gippius A.A., Baranov A.N.

**Structural research of Li doped ZnO powders**

**Keywords:** zinc oxide, lithium, doping, structure, photoluminescence

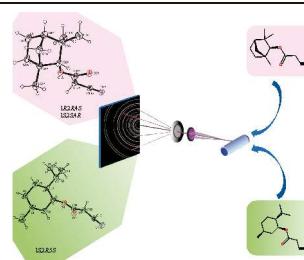


140797

Mohamed F.S., Bąkowicz J., Dziuk B., Nawwar G.A.M.

**Synthesis, crystal structure and spectral characterization of 5-methyl-2-(propan-2-yl)cyclohexyl cyanoacetate and 1,3,3-trimethylbicyclo[2.2.1]heptan-2-yl cyanoacetate**

**Keyword:** cyanoacetylation, menthol, fenchol, menthol cyanoacetate, fenchyl cyanoacetate, crystal structure, X-ray study

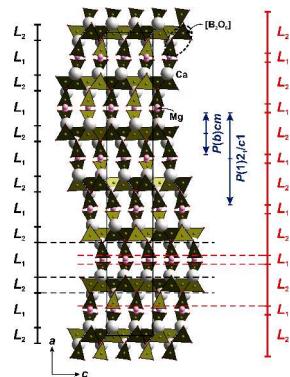


140800

Аксенов С.М., Банару Д.А., Банару А.М.,  
Антонов А.А., Кабанова Н.А., Кузнецов А.Н.,  
Белоконева Е.Л., Ямнова Н.А., Дейнеко Д.В.,  
Червонная Н.А., Чуканов Н.В., Блатов В.А.

**Структурное семейство курчатовита  
CaMg[B<sub>2</sub>O<sub>5</sub>]: особенности строения,  
сложность политипов, DFT-анализ  
и сравнительная кристаллохимия пироборатов  
двухвалентных катионов**

**Ключевые слова:** курчатовит, клинокурчатовит,  
пиробораты, OD-структуры, политипия,  
ИК спектроскопия, топология, сложность



140948

**Содержание следующего номера — в конце журнала**