

ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 65

Ноябрь

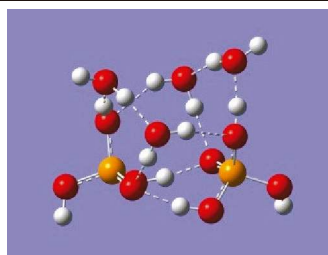
№ 11, 2024

СОДЕРЖАНИЕ

Тараканова Е.Г., Майоров В.Д., Кислина И.С.

**Строение гидратов ортофосфорной кислоты  
и равновесный состав системы  $\text{H}_3\text{PO}_4\text{--H}_2\text{O}$   
по данным ИК спектроскопии  
и квантово-химических расчетов**

**Ключевые слова:** водный раствор  $\text{H}_3\text{PO}_4$ ,  
водородная связь, строение гидратов, ИК спектроскопия,  
квантово-химические расчеты

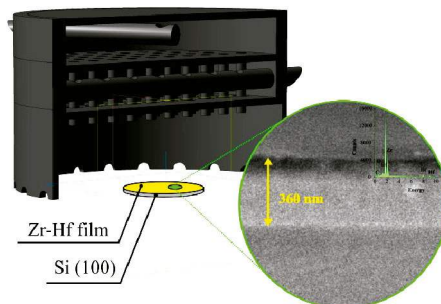


134400

Шутилов Р.А., Максимовский Е.А.,  
Поповецкий П.С., Корольков И.В.,  
Гисматулин А.А., Игуменов И.К.

**Процессы формирования покрытий методом  
импульсного МOCVD в системе  $\text{ZrO}_2\text{--HfO}_2$**

**Ключевые слова:** импульсное МOCVD,  
оксиды циркония, гафния, пленочные покрытия,  
морфология, шероховатость,  
вольт-амперные характеристики,  
вольт-фарадные характеристики

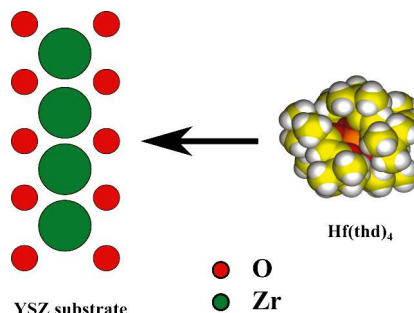


134521

Игуменов И.К., Лукашов В.В., Коваленко К.А.,  
Сыроквашин М.М., Плюснин П.Е., Ищенко А.В.,  
Шутилов Р.А.

**Новый тип прекурсоров для осаждения  
наноструктурированных покрытий  
из газовой фазы**

**Ключевые слова:** композитные прекурсоры,  
наночастицы YSZ, дипивалоилметанат гафния,  
термическая устойчивость, иммобилизация наночастиц,  
РФЭС

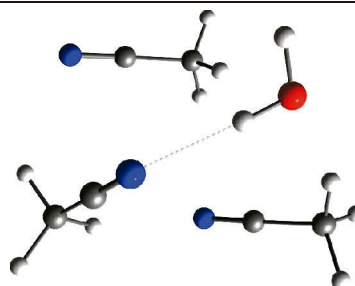


134645

Богдан Т.В., Фирсов Д.А., Черткова В.П.,  
Абрамович А.И.

**Расчет строения кластеров  $(\text{CH}_3\text{CN})_n$   
и  $(\text{CH}_3\text{CN})_m \cdot \text{H}_2\text{O}$  методом теории  
функционала плотности**

**Ключевые слова:** ацетонитрил, кластеры  $(\text{CH}_3\text{CN})_n$ ,  
 $n = 2-8$ , моногидратные кластеры ацетонитрила  
 $(\text{CH}_3\text{CN})_m$ ,  $m = 4-7$ , водородные связи,  
метод ТФП-G3/B3LYP/cc-pvdz

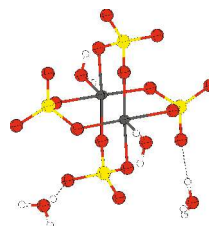


134865

Ткаченко П.А., Байдина И.А., Комаров В.Ю.,  
Бердюгин С.Н., Ткачев С.В., Васильченко Д.Б.

**Образование биядерных сульфатов платины(III)  
в серно-кислых растворах  
соединений платины(IV)**

**Ключевые слова:** платина, сульфаток комплексы,  
серная кислота

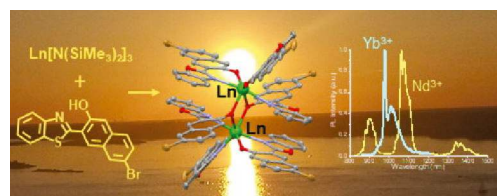


134878

Kuzyaev D.M., Balashova T.V., Polyakova S.K.,  
Ilichev V.A., Yablonskiy A.N., Baranov E.V.,  
Fukin G.K., Bochkarev M.N.

**Complexes of rare earth metals  
with bromine-substituted (benzoxazolyl)naphtholate  
ligands as emissive materials**

**Keywords:** lanthanide complexes,  
substituted 2-(2-benzoxazol-2-yl)-3-naphtholate ligands,  
X-ray structure, luminescence

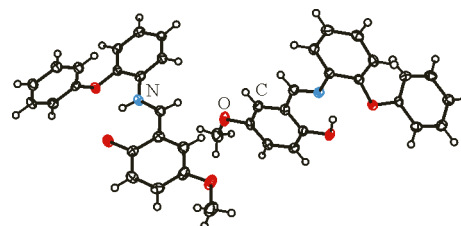


135092

Güzel E., Coruh U., Duteanu N., Cicek C., Agar E.,  
Vazquez-Lopez E.M., Yavuz M.

**Experimental studies of Schiff base  
(*E*)-4-methoxy-2-(((2-phenoxyphenyl)imino)methyl)  
phenol compound with various  
spectroscopic methods**

**Keywords:** X-ray diffraction, UV-Vis, NMR, Schiff base

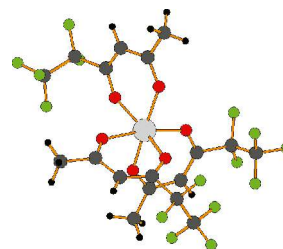


135169

Сартакова А.В., Макаренко А.М., Куратьева Н.В.,  
Жерикова К.В.

**Кристаллохимическое исследование  
двух фторированных комплексов скандия(III)**

**Ключевые слова:** скандий, 1,1-дифторацетилацетон,  
5,5,6,6,6-пентафторгексан-2,4-дион,  
рентгеноструктурный анализ, термические свойства,  
межмолекулярные контакты

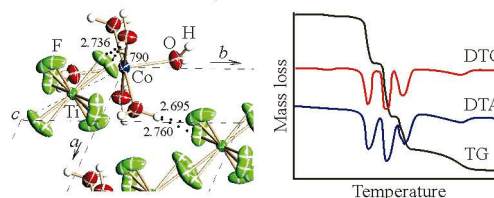


135172

Удовенко А.А., Меркулов Е.Б., Шлык Д.Х.,  
Лапташ Н.М.

**Водородные связи  $\text{O}-\text{H}\cdots\text{F}$  в кристаллах  
 $M\text{TiF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  ( $M = \text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Zn}$ )**

**Ключевые слова:** гексагидраты фторидотитанатов  
двухвалентных металлов, кристаллическая структура,  
фазовые переходы, водородная  $\text{O}-\text{H}\cdots\text{F}$  связь,  
термические свойства

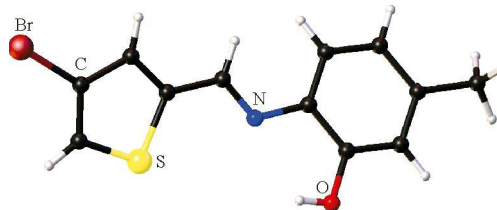


135370

Kalem E., Aşkar Ş., Kınaytürk N.K., Yeşilkaynak T., Açar E., Emen F.M.

**Synthesis, characterization, molecular modeling and investigation of biological activity of the novel Schiff base (*E*)-2-(((4-bromothiophen-2-yl)methylene)amino)-5-methylphenol**

**Keywords:** Schiff bases, X-ray diffraction, density functional calculations, biological activity



135383

Новосадов Б.К.

**Свойства функционалов волновой плотности молекул**

**Ключевые слова:** функционал электронной плотности молекулы, потенциал Кона, орбитальная модель электронной оболочки молекулы, малый параметр при производной

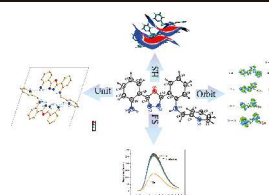
$$E_0 = \frac{(\lambda - 1)}{4\pi} \int dr \Delta U(\mathbf{r}) \sum_{k=1}^N \frac{-Z_k}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_k|}$$

135410

Zhou. Y., Feng S.-Y., Zhang D.-H.

**A probe molecule based on 1,3,4-oxadiazole was constructed for crystal structure analysis and Sn<sup>4+</sup> identification**

**Keywords:** 1,3,4-oxadiazole, Sn<sup>4+</sup>, crystal structure, Hirshfeld surface analysis, fluorescence properties

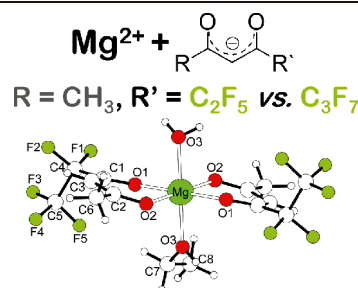


135435

Крутских С.С., Кочелаков Д.В., Назарова А.А., Корольков И.В., Зеленина Л.Н., Викулова Е.С.

**Синтез, строение и свойства асимметричных фторированных β-дикетонатных комплексов магния**

**Ключевые слова:** магний, β-дикетонат, комплексы фторированных β-дикетонатов, рентгеноструктурный анализ, водородные связи, летучесть

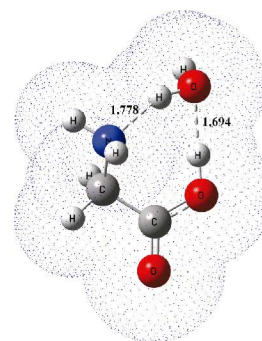


135527

Алексеева В.А., Крауклис И.В., Чижов Ю.В., Тулуб А.В.

**Образование цвиттер-ионной структуры глицина и аланина в рамках дискретно-континуальной модели водного растворителя: внутримолекулярный перенос протона**

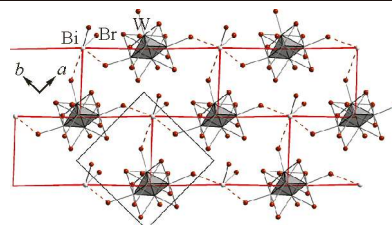
**Ключевые слова:** α-аминокислоты, нейтральные и цвиттер-ионные конформеры, внутримолекулярный перенос протона, активационный барьер, дискретно-континуальная модель воды, теория функционала плотности



136009

Михайлов М.А., Сухих Т.С., Гусельникова Т.Я., Цыганкова А.Р., Клейман Е.Е., Соколов М.Н.

**Кластерные фазы состава W<sub>5</sub>Br<sub>12</sub> · BiBr<sub>3</sub> с различными кристаллическими структурами**

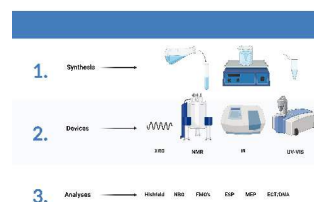


136015

Suhta A., Meral S., Alaman Açar A., Sütay B., Vazquez-Lopez E.M., Çoruh U.

### Application of a novel symmetric benzophenone derivative Schiff base in lyotropic media and spectroscopic properties

**Keywords:** Schiff base, Hirshfeld surface, XRD, DFT calculations, NBO, lyotropic liquid crystal

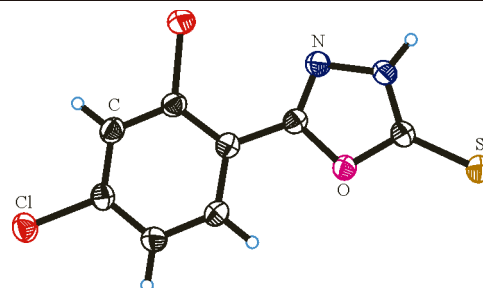


136026

Окманов Р.Я., Махмудов У.С., Зияев А.А., Тошмуродов Т.Т., Ташходжаев Б., Ешимбетов А.Г., Ходжаниязов Х.У.

### Синтез и структура алкилпроизводных 5-(2,4-дихлорфенил)-1,3,4-оксадиазол-2-тиона и оценка ароматичности оксадиазольного кольца

**Ключевые слова:** 5-(2,4-дихлорфенил)-1,3,4-оксадиазол-2-тион, *S*- и *N*-алкилпроизводные, ароматичность, кристаллическая структура, PCA, ТФП

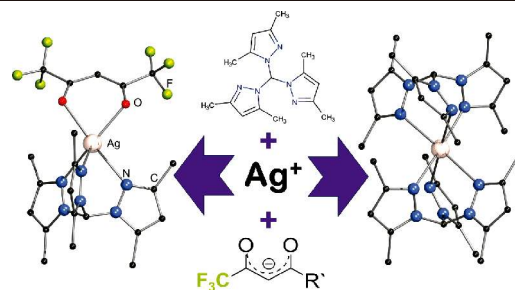


136029

Викулова Е.С., Сухих Т.С., Барышева А.С., Варваринская С.Е., Ильин И.Ю., Шакирова О.Г., Морозова Н.Б.

### Синтез и строение комплексов Ag(I) с трис(3,5-диметилпиразол-1-ил)метаном и β-дикетонами

**Ключевые слова:** серебро, трис(3,5-диметилпиразол-1-ил)метан, β-дикетонат, рентгеноструктурный анализ

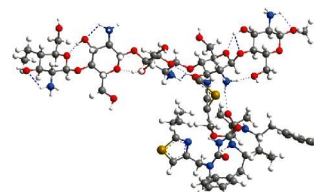


136279

Нургалиев И.Н., Бурханова Н.Ж.

### DFT исследование возможности доставки антивирусных препаратов с использованием хитозана

**Ключевые слова:** система доставки лекарств, теория функционала плотности, хитозан



137469

Содержание следующего номера — в конце журнала