РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

*Основан в 1960 г.* *Выходит 12 раз в год*

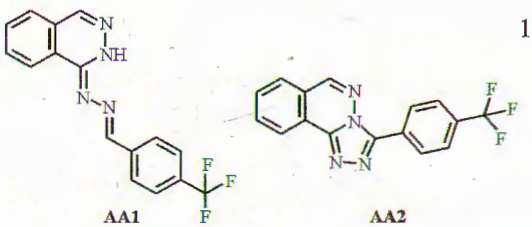
ТОМ 66 Декабрь № 12, 2025

## СОДЕРЖАНИЕ

Dağ A.K., Köse A. 156697

**Hydralazine Schiff base and Fe(II) induced triazolophthalazine compounds: Crystal structure and spectroscopic properties**

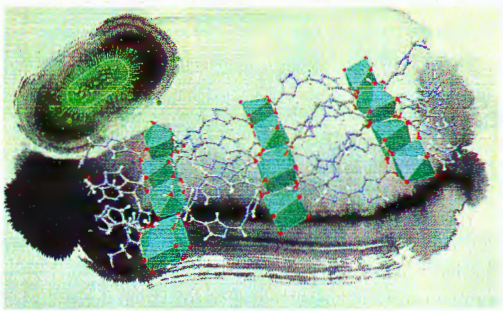
**Keywords:** hydralazine-hydrazone, cyclic analog triazopthalazine, crystal structure, absorption/emission




Нестерова А.И., Рядун А.А., Павлов Д.И., Потапов А.С. 156860

**Синтез слоистого металл-органического координационного полимера тербия(III) с бис(пиразол-1-ил)метан-4,4'-дикарбоновой кислотой и его сенсорные свойства на биомаркер спорообразующих бактерий**

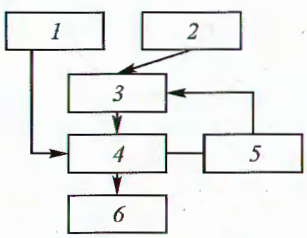
**Ключевые слова:** металл-органические координационные полимеры, тербий, 2,6-пиридиндикарбоновая кислота, люминесценция, биомаркеры



Воронов В.К. 156864

**«Томографическое» изображение молекул на основе спин-спиновых взаимодействий входящих в их состав резонирующих ядер атомов**

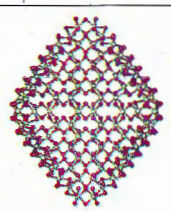
**Ключевые слова:** ядерный магнитный резонанс, спин-спиновое взаимодействие, обратные задачи, квантово-химические расчеты, томографическое изображение молекул




Еняшин А.Н. 156886

**Квантово-химическое моделирование структуры и электронных свойств неорганических фуллеренов $BiI_3$**

**Ключевые слова:** иодид висмута, фуллерены, квантово-химическое моделирование



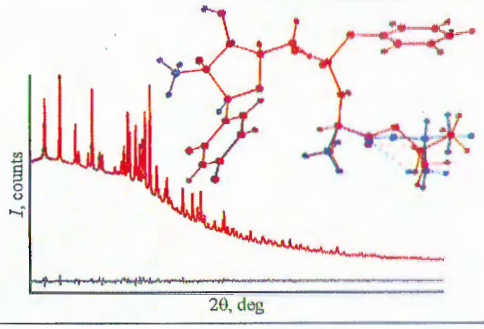
ИНХ СО РАН
НОВОСИБИРСК
2025

Головешкин А.С., Куликова Е.С.

156903

**Точность кристаллической структуры полиморфов софосбувира, определяемой по данным порошковой рентгеновской дифракции**

**Ключевые слова:** активный фармацевтический ингредиент, кристаллическая структура, порошковая рентгеновская дифракция, синхротронный источник, ритвельдовское уточнение, квантово-химические расчеты

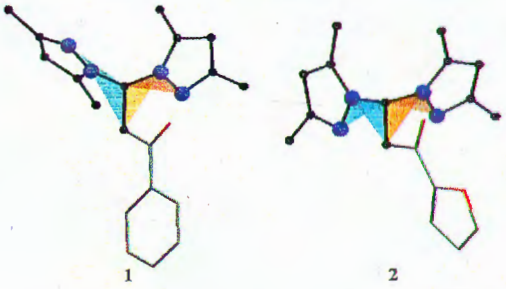



Опанасюк С.С., Соколов М.Н., Сухих Т.С., Салий И.В., Новиков А.С., Адонин С.А., Гоцко М.Д.

157021

**Кристаллические структуры и конформационный анализ производных бис(пиразолил)пропанона**

**Ключевые слова:** скорпионатные лиганды, квантово-химические расчеты, конформационный анализ, кристаллическая структура

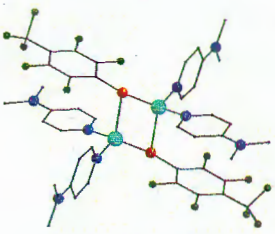



Петров П.А., Филиппова Е.А., Сухих Т.С., Корольков И.В., Максимов А.М., Абрамов П.А., Соколов М.Н.

157122

**Полиморфизм кристаллических структур комплекса $[Cu_2(S\text{-}C_6F_4\text{-}CF_3)_2(dmap)_4]$**

**Ключевые слова:** медь(I), тиоляты, полиморфизм, кристаллическая структура

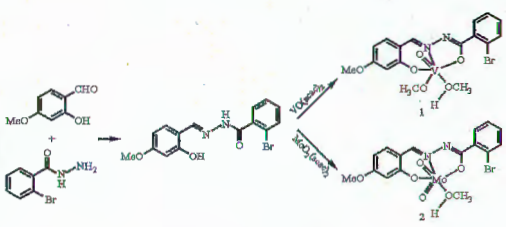


You Z., Song N., Qiao Z., Xiang W., Feng X.

157202

**Synthesis, X-ray crystal structures and biological activity of oxidovanadium(V) and dioxidomolybdenum complexes derived from 2-bromo-*N*'-(2-hydroxy-4-methoxybenzylidene)-benzohydrazide**

**Keywords:** vanadium complex, molybdenum complex, aroylhydrazone, antimicrobial activity, X-ray crystal structure

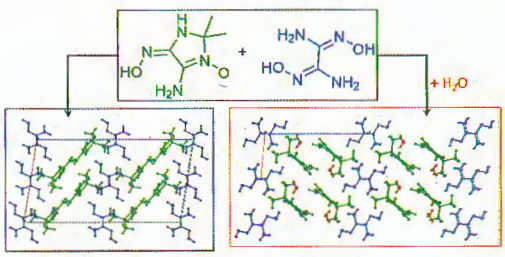


Самигуллина А.И., Проничева В., Афанасьева К.А., Шувалова Е.В., Глухов Л.М., Степанов А.В., Гусейнов Ф.И.

157214

**Две кристаллические модификации сокристалла 5-(гидроксиимино)-1*H*-имидазол-3-оксида с 3,4-диаминоглиоксимом**

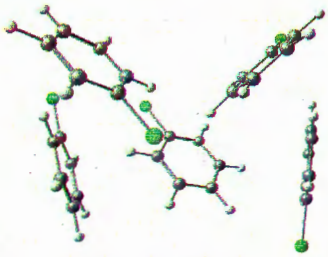
**Ключевые слова:** сокристалл, ацетон, 3,4-диаминоглиоксим, 1*H*-имидазол-3-оксид, водородное связывание, поверхность Хиршфельда, кристаллическая структура



Богдан Т.В., Мисатюк Ф.С., Фирсов Д.А., Абрамович А.И.

**Расчет строения кластеров в жидком хлорбензоле $(PhCl)_n$ ($n$ = 2–6) методом теории функционала плотности**

**Ключевые слова:** хлорбензол, кластеры, метод теории функционала плотности B3LYP/cc-pvdz с дисперсионной поправкой D3

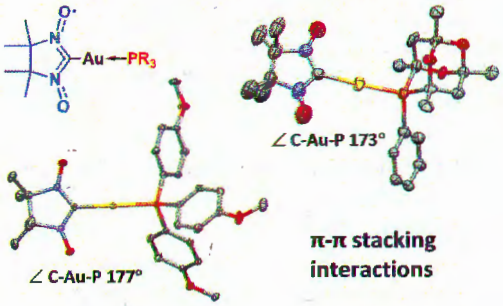


158008

Заякин И.А., Насырова Д.И., Корлюков А.А., Багрянская И.Ю., Миняев М.Е., Шангин П.Г., Сыроешкин М.А., Третьяков Е.В.

**Синтез и структура золотоорганических производных 4,4,5,5-тетраметил-4,5-дигидроимидазол-3-оксид-1-оксила, стабилизированных фосфиновыми лигандами**

**Ключевые слова:** нитронилнитроксилы, стабильные радикалы, комплексы золота(I), золотоорганические производные

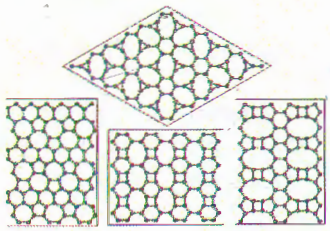



158343

Созыкин С.А., Бескачко В.П.

**Углеродные поверхности с негексагональной структурой: стабильность и сорбционная способность**

**Ключевые слова:** адсорбция, литий, цинк, двумерные углеродные аллотропы, бифенилен, ирида-графен, ψ-графен, TPDH-графен, моделирование

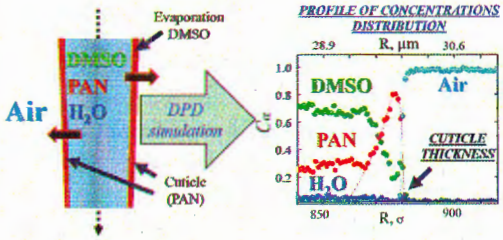


158348

Комаров П.В., Малышев М.Д., Бабуркин П.О.

**Мезомасштабное моделирование процесса испарения растворителя с поверхности струи прядильного раствора полиакрилонитрила в диметилсульфоксиде**

**Ключевые слова:** химические волокна, полиакрилонитрил, мезомасштабная модель, диссипативная динамика частиц, уравнения диффузии

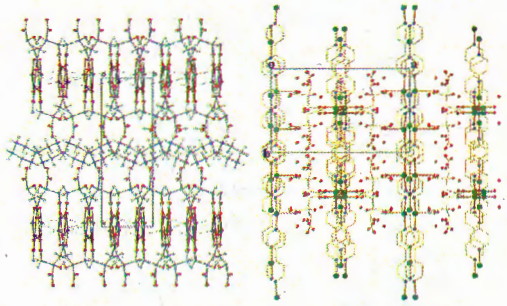



158451

Кошенскова К.А., Разворотнева Л.С., Самойленко Е.А., Лосева В.С., Гоголева Н.В., Долгушин Ф.М., Еременко И.Л., Луценко И.А.

**Цитраткарбоксилатные координационные полимеры серебра(I): синтез, кристаллическая структура и термическое поведение**

**Ключевые слова:** цитраты серебра(I), пиперазин, 4,4'-бипиридин, кристаллическая структура, координационный полимер, синхронный термический анализ

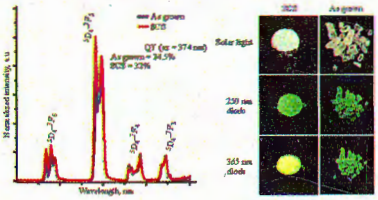


158553

Kokh A.E., Rakhmanova M.I., Kuznetsov A.B., Simonova E.A., Kokh K.A.

**Thermal quenching in $TbAl_3(BO_3)_4$: Influence of synthesis method and non-stoichiometry**

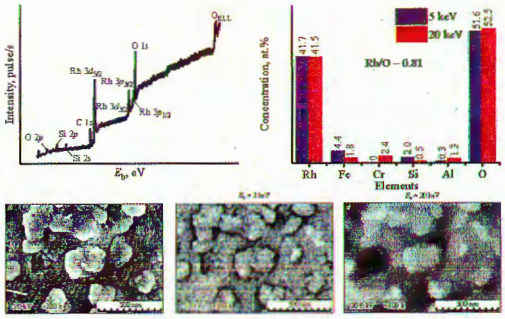
**Keywords:** huntite, SCS, single crystal, luminescence



Саланов А.Н., Серкова А.Н., Жирнова А.С., Калинкин А.В., Смирнов М.Ю., Исупова Л.А.

**Морфология, микроструктура и химический состав оксидных фаз на поликристаллическом родии в атмосфере кислорода при 1 100 K**

**Ключевые слова:** поликристаллический родий, окисление и коррозия родия, морфология и микроструктура оксидных фаз, оксид $Rh_2O_3$, растровая электронная микроскопия, энергодисперсионная рентгеновская спектроскопия




157278

Свинцицкий Д.А., Квасова Е.С., Кардаш Т.Ю., Боронин А.И.

**Модификация медь-марганцевого катализатора добавками Fe, Cr, Ni и Ga для низкотемпературного окисления CO**

**Ключевые слова:** гопкалит, низкотемпературное окисление, шпинель, креднерит, гетерогенный катализ, медь, марганец

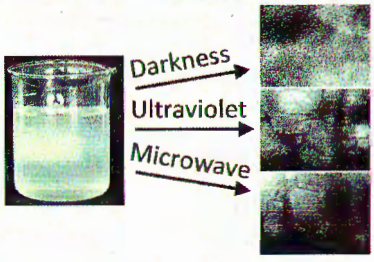



157689

Авдин В.В., Куваева А.О., Жеребцов Д.А., Даровских С.Н., Прокопов И.И.

**Влияние УФ и СВЧ излучения на формирование оксигидроксида циркония**

**Ключевые слова:** оксигидроксид циркония, структурообразование, влияние УФ и СВЧ излучения на структуру, длительность гидролиза, кристаллиты диоксида циркония

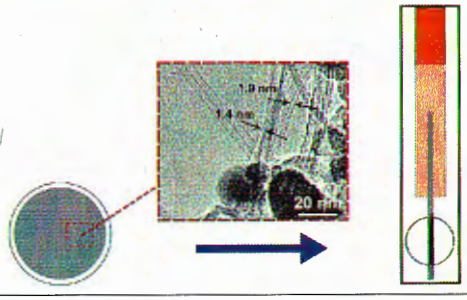



157812

Вершинина А.И., Гордая О.Р., Иванова Н.В., Ломакин М.В., Рыбаков М.С., Шандаков С.Д.

**Оптимизация методики подготовки пленок и волокон из ОУНТ для использования в электрохимических приложениях**

**Ключевые слова:** однослойные углеродные нанотрубки, мокрое вытягивание, волокна, волоконный электрод, циклическая вольтамперометрия, электрохимия

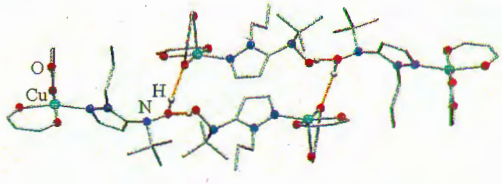



157843

Голомолзина И.В., Толстиков С.Е., Летягин Г.А., Богомяков А.С., Акыева А.Я., Сыроешкин М.А., Романенко Г.В.

**Комплексы Cu(hfac)$_2$ с *N-трет*-бутил-*N*-(1-алкил-1*H*-пиразол-5-ил)гидроксиламинами**

**Ключевые слова:** гидроксиламины, комплексы меди, кристаллическая структура, ЦВА, водородные связи

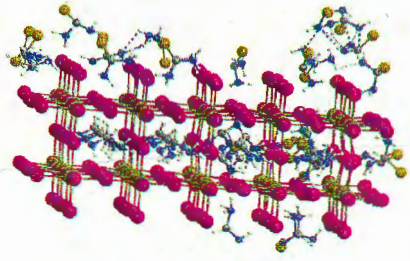



157921

Нургалиев И.Н., Марасулов М.Б., Жуллиев З.Н., Облакулов А.О., Н.Р. Ашуров Н.Р.

**Молекулярные механизмы действия тиомочевины в FAPbI$_3$-перовскитах: фазовая стабилизация и пассивация дефектов**

**Ключевые слова:** перовскиты $FAPbI_3$, тиомочевина, фазовая стабилизация, пассивация поверхности, теория функционала плотности, молекулярная динамика

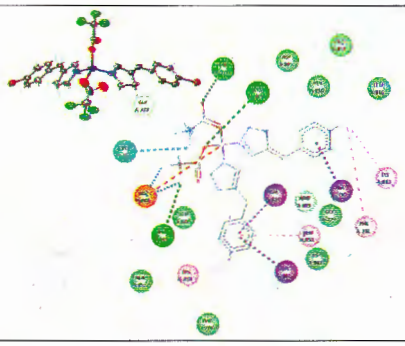


158003

Зверева О.В., Ризбаева Т.С., Блинов Д.О., Зорина-Тихонова Е.Н., Чистяков А.С., Шмелев М.А., Воронина Ю.К., Еременко И.Л.

**Синтез, структурные особенности и молекулярный докинг комплексов цинка с производными 3-арилиден-1-пирролинов**

**Ключевые слова:** комплексы цинка, 3-арилиден-1-пирролины, рентгеноструктурный анализ, молекулярная структура, электронная структура, нековалентные взаимодействия, молекулярный докинг



**Содержание следующего номера — в конце журнала**

© Сибирское отделение РАН, 2025
© Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 2025
© Новосибирский государственный университет, 2025

## CONTENTS

**Dağ A.K., Köse A.** Hydralazine Schiff base and Fe(II) induced triazolophthalazine compounds: Crystal structure and spectroscopic properties ..... 156697

**Nesterova A.I., Ryadun A.A., Pavlov D.I., Potapov A.S.** Synthesis of layered terbium(III) metal-organic framework with bis(pyrazol-1-yl)methane-4,4′-dicarboxylic acid and its sensory properties as a for biomarker spore-forming bacteria ..... 156860

**Voronov V.K.** «Tomographic» imaging of molecules based on spin-spin coupling between resonating nuclei of their atoms ..... 156864

**Enyashin A.N.** Quantum-chemical similation of the structure and electronic properties of inorganic fullerenes $BiI_3$ ..... 156886

**Goloveshkin A.S., Kulikova E.S.** Accuracy of the crystal structure of sofosbuvir polymorphs obtained by powder X-ray diffraction ..... 156903

**Opanasyuk S.S., Sokolov M.N., Sukhikh T.S., Saliy I.V., Novikov A.S., Adonin S.A., Gotsko M.D.** Crystal structures and conformational analysis of the bis(pyrazolyl)propanone derivatives ..... 157021

**Petrov P.A., Filippova E.A., Sukhikh T.S., Korolkov I.V., Maksimov A.M., Abramov P.A., Sokolov M.N.** Polymorphism of crystal structures of the $[Cu_2(S–C_6F_4–CF_3)_2(dmap)_4]$ complex ..... 157122

**You Z., Song N., Qiao Z., Xiang W., Feng X.** Synthesis, X-ray crystal structures and biological activity of oxidovanadium(V) and dioxidomolybdenum complexes derived from 2-bromo-*N*′-(2-hydroxy-4-methoxybenzylidene)benzohydrazide ..... 157202

**Samigullina A.I., Pronina V.M., Afanaseva K.A., Shuvalova E.V., Glukhov L.M., Stepanov A.V., Guseinov F.I.** Two crystal modifications of the cocrystal of 5-(hydroxyimino)-1*H*-imidazole-3-oxide with 3,4-diaminoglyoxime ..... 157214

**Salanov A.N., Serkova A.N., Zhirnova A.S., Kalinkin A.V., Smirnov M.Yu., Isupova L.A.** Morphology, microstructure and chemical composition of oxide phases on polycrystalline rhodium in oxygen atmosphere at 1100 K ..... 157278

**Svintsitskiy D.A., Kvasova E.S., Kardash T.Yu., Boronin A.I.** Modification of copper-manganese catalyst with Fe, Cr, Ni and Ga for low-temperature CO oxidation ..... 157689

**Avdin V.V., Kuvaeva A.O., Zherebtsov D.A., Darovskikh S.N., Prokopov I.I.** Influence of UV and microwave radiation on the formation of zirconium oxyhydroxide ..... 157812

**Vershinina A.I., Gordaya O.R., Ivanova N.V., Lomakin M.V., Rybakov M.S., Shandakov S.D.** Optimization of the preparation procedure of SWCNT films and fibers for electrochemical applications ..... 157843

**Golomolzina I.V., Tolstikov S.E., Letyagin G.A., Bogomyakov A.S., Akyeva A.Ya., Syroeshkin M.A., Romanenko G.V.** $Cu(hfac)_2$ Complexes with *N*-*tert*-butyl-*N*-(1-alkyl-1*H*-pyrazol-5-yl)hydroxylamines ..... 157921

**Nurgaliev I.N., Marasulov M.B., Julliev Z.N., Oblakulov A.O., Ashurov N.R.** Molecular mechanisms of thiourea in $FAPbI_3$ perovskites: Phase stabilization and defect passivation ..... 158003

**Bogdan T.V., Misatyuk F.S., Firsov D.A., Abramovich A.I.** Density functional theory computation of the structures of $(PhCl)_n$ ($n$ = 2–6) clusters in liquid chlorobenzene ..... 158008

**Zayakin I.A., Nasyrova D.I., Korlyukov A.A., Bagryanskaya I.Yu., Minyaev M.E., Shangin P.G., Syroeshkin M.A., Tretyakov E.V.** Synthesis and structures of organogold 4,4,5,5-tetramethyl-4,5-dihydroimidazole-3-oxide-1-oxyl derivatives stabilized by phosphine ligands ..... 158343

**Sozykin S.A., Beskachko V.P.** Carbon surfaces with non-hexagonal structure: Stability and sorption ability ..... 158348

**Komarov P.V., Malyshev M.D., Baburkin P.O.** Mesoscale modeling of solvent evaporation from the surface of a jet of spinning solution of polyacrylonitrile in dimethyl sulfoxide ..... 158451

**Koshenskova K.A., Razvorotneva L.S., Samoilenko E.A., Loseva V.S., Gogoleva N.V., Dolgushin F.M., Eremenko I.L., Lutsenko I.A.** Silver(I) citrate carboxylate coordination polymers: Synthesis, crystal structures, and thermale behavior ..... 158553

**Kokh A.E., Rakhmanova M.I., Kuznetsov A.B., Simonova E.A., Kokh K.A.** Thermal quenching in $TbAl_3(BO_3)_4$: Influence of synthesis method and non-stoichiometry ..... 158835

**Zvereva O.V., Rizbaeva T.S., Blinov D.O., Zorina-Tikhonova E.N., Chistyakov A.S., Shmelev M.A., Voronina J.K., Eremenko I.L.** Synthesis, structural features, and molecular docking of zinc complexes with derivatives of 3-arylidene-1-pyrrolines ..... 159600

ERRATUM TO: **Romanenko A.R., Korlyukov A.A.** Structure and energy of the crystal lattice of two benzyloxyme derivatives ..... 162346