

# Журнал структурной химии

## Правила для авторов

### 1. Общие положения

1. Журнал структурной химии публикует оригинальные статьи и обзоры на русском и английском языках теоретического и экспериментального характера, содержащие структурно-химические результаты, по разделам: теория строения молекул и химической связи; исследование строения молекул физическими методами; структура жидкостей и растворов; кристаллохимия; супрамолекулярные соединения и наноразмерные системы; структура биологически активных систем; структурные аспекты функциональных материалов.

Журнал не публикует материалы дискуссионного характера.

Отправляя рукопись в журнал, автор гарантирует, что соответствующий материал (в оригинале или в переводе на другие языки или с других языков) ранее нигде не публиковался и не находится на рассмотрении для публикации в других журналах. Журнал поддерживает стандарты публикационной этики, основу которой составляют положения, принятые на 2-ой Всемирной конференции по вопросам соблюдения добросовестности научных исследований (Сингапур, 22-24 июля 2010 г.); положения, разработанные Комитетом по этике научных публикаций (The Committee on Publication Ethics - COPE) и нормы главы 70 «Авторское право» Гражданского кодекса Российской Федерации.

2. Рукопись должна быть представлена в редакцию журнала в электронном виде через веб-интерфейс по адресу <http://jsc.niic.nsc.ru/personal/>.
3. Для всех авторов необходимо указать место работы, полный почтовый адрес, электронный адрес и, по возможности, уникальный идентификатор ORCID. Для автора, ответственного за переписку, необходимо указать номер ORCID.
4. Журнал публикует работы независимо от гражданства и ведомственной принадлежности авторов.
5. Для публикации статьи авторы представляют в редакцию следующие материалы:
  - сопроводительное письмо;
  - экспертное заключение (для работ, выполненных в РФ);
  - договор на передачу авторских прав (лицензионный договор).
6. Вместе с рукописью необходимо представить название статьи, имена авторов, адреса научных учреждений, краткую аннотацию и ключевые слова *на английском языке*.
7. Рукопись проходит анонимное рецензирование на предмет её актуальности и научной ценности, соответствия профилю журнала и настоящим требованиям. По рекомендации рецензентов редколлегия принимает решение о возможности и условиях опубликования статьи (без изменений; необходимы исправления; необходима серьезная переработка, срок которой не может превышать 1 месяца; публикация невозможна). При переработке статьи в соответствии с замечаниями рецензента вместе с переработанным вариантом необходимо представить ответ рецензенту.
8. Редакция оставляет за собой право вносить небольшие сокращения и изменения, не искажающие смысл статьи.
9. Корректурa статьи высылается автору, ответственному за переписку, по указанному электронному адресу. В корректуру следует внести необходимые исправления в соответствии с авторским оригиналом и в течение 2 рабочих дней переслать в редакцию.
10. После опубликования авторы получают статью в электронном виде (pdf-файл).

## 2. Структура публикации

Рукописи могут быть двух видов: статья, обзор.

Рукопись начинается с заглавия, затем следует перечисление инициалов и фамилий авторов с указанием развёрнутых названий научных учреждений с почтовым индексом, адресом и адресом электронной почты автора, ответственного за переписку. Далее приводятся краткая аннотация (не более 20 строк) с указанием конкретных результатов работы и вытекающих из них выводов, а также до 10 ключевых слов, наиболее полно отражающих область исследования и полученные в работе результаты.

В конце рукописи приводится список цитированных источников в порядке их упоминания в тексте.

При необходимости авторы могут выразить благодарность отдельным абзацем перед списком литературы.

Авторы могут представить дополнительные материалы, которые будут опубликованы в авторской редакции в электронном виде на сайте журнала по адресу <http://jsc.niic.nsc.ru> и на сайте издательства Springer по адресу <https://link.springer.com/journal/10947>.

### **Обзоры**

Обзор должен давать представление о состоянии исследований в одной из областей структурной химии и включать объективный критический анализ имеющейся по данной теме литературы.

### **Статьи**

Статья должна четко описывать результаты исследований, направленных на решение актуальной фундаментальной научной задачи, и должна содержать научную новизну.

В статье желательно выделить следующие подразделы: введение, экспериментальная часть, результаты и их обсуждение, выводы.

Во введении целесообразно упомянуть близкие работы других авторов, включая опубликованные в отечественных журналах, и работы, появившиеся в последние два-три года, сформулировать цель работы и обосновать актуальность и фундаментальное значение предпринятых исследований. В экспериментальной части нужно описать объекты исследования, используемые приборы, программы, методы и методики измерения. При описании результатов и их обсуждении необходимо четко разделить, какие результаты получены в данной работе, какие факты заимствованы из работ, опубликованных ранее (привести ссылки).

Информация, представленная на рисунках или в таблицах, не должна дублироваться.

## 3. Подготовка рукописи

Данный раздел описывает общие требования к оформлению статей. Текст статьи набирается стандартными шрифтами Times и Symbol.

Ссылки на литературу приводятся в квадратных скобках. Например: синтез соединения 2 был проведён в соответствии с опубликованной методикой [1].

При подаче электронной версии статьи авторы прикладывают оригинальный Word-файл (или rtf-файл) и pdf-файл.

### **Единицы измерения, химическая номенклатура, аббревиатуры**

Авторы должны придерживаться международной системы единиц (СИ) и правил, рекомендованных IUPAC. Все сокращения и аббревиатуры (кроме общепринятых) расшифровываются при первом появлении в тексте. В случае использования большого числа сокращений их расшифровка приводится отдельным списком после ключевых слов. Для

отделения десятичных символов авторы должны использовать точку (например, 3.14).

## **Таблицы**

Каждую таблицу числовых данных необходимо снабдить порядковым номером и заголовком. Отсутствие данных обозначается прочерком. Число значащих цифр в таблицах должно соответствовать реальной погрешности измерений или вычислений. Таблица может сопровождаться сносками и примечаниями.

## **Рисунки**

Иллюстративный материал направляется в редакцию отдельными файлами:

- Фотографии в растровых (BMP, TIFF, PNG, JPG) форматах. Разрешение должно быть не ниже 300 dpi (желательно не менее 600 dpi).
- Графики, рисунки, химические структуры в векторном формате (WMF, EMF, EPS, CDR версии не выше 13) и в формате программы, в которой они были сделаны. Формат EPS должен быть подготовлен с конвертацией шрифтов в кривые. Надписи на рисунках должны быть выполнены в Times New Roman, кегль 9; толщина линий не менее 0,18 мм (0.5 pt). Для создания химических структур рекомендуем использовать программу ChemDraw.

Цветные рисунки публикуются только в электронной версии журнала. Авторам необходимо убедиться, что при черно-белой печати иллюстрации не содержат дополнительный фон и сохраняют информативность: линии остаются четкими, цифры и символы – легко читаемыми. Следует учесть, что в опубликованном цветном рисунке оттенки могут отличаться от оригинала.

Ширина рисунка должна составлять не более 16 см; высота – не более 23 см. Не рекомендуется загромождать рисунки ненужными деталями и надписями: последние желательно заменить цифровыми или буквенными обозначениями и вынести в подрисуночную подпись. Следует учесть, что рисунки и схемы могут быть уменьшены при верстке, поэтому они не должны быть перегружены информацией и иметь части, сильно различные по масштабу.

Надписи в рисунках выполняются на английском языке. Использовать русские слова или обозначения не разрешается.

При необходимости редакция может запросить у авторов рисунок более высокого качества или в другом формате.

В Word-файле статьи рисунки и таблицы вставляются в конце текста, с обозначением их нумерации. При наличии нескольких частей одной иллюстрации они должны располагаться последовательно. Каждый рисунок или таблица должны быть упомянуты в тексте, а предположительное место их размещения обозначены отдельной строкой. Химические структуры могут быть вставлены непосредственно в текст рукописи. Подписи к рисункам прилагаются на отдельной странице.

В PDF-файле статьи иллюстрации вставляются в текст на предположительное место их размещения.

## **Математические формулы**

Математические формулы могут набираться непосредственно в тексте рукописи, если они достаточно простые, например,  $D = \varepsilon Cl$ , или выноситься на отдельные строки с нумерацией и без. Необходимо избегать громоздких математических обозначений. Например, рекомендуется использовать дробные показатели степени вместо корней, символ «exp» для обозначения экспоненциальной зависимости, косую черту для дробей и т.п. Уравнения печатаются на отдельной строке, номер уравнения ставится у правого поля. Нумеровать следует лишь те формулы и уравнения, на которые даются ссылки в тексте. Пример:

$$\Delta E = E(A; B) + E(A + 1; A) - E(A + 1; B), \quad (1)$$

## Список литературы

Список литературы готовится на английском языке.

Список литературы составляется в порядке упоминания в статье и приводится в конце статьи с указанием ссылки в тексте порядковым номером в прямых скобках. Допускаются ссылки на опубликованные или принятые в печать научные статьи из журналов, реферируемых известными базами данных (WoS, Scopus, РИНЦ), монографии, книги, программное обеспечение, известные базы данных. Необходимо указывать всех авторов, использование *et al.* вместо фамилий авторов не допускается. Сокращения названий как русских, так и иностранных журналов должны соответствовать аббревиатурам, используемым *Chemical Abstracts Service Source Index*. При наличии у русского журнала переводной версии надо ссылаться на англоязычный вариант. Желательно указывать DOI всех публикаций — в виде ссылки. Для упрощения поиска DOI рекомендуем пользоваться сервисом Crossref <https://apps.crossref.org/SimpleTextQuery>. В ссылках на статьи и патенты указываются их названия.

**Авторы несут ответственность за точность и полноту списка литературы, поэтому редакция рекомендует авторам всегда перепроверять ссылки по первичным источникам.**

Примеры оформления ссылок:

Статья: S. Mochizuki, T. Kitao, T. Uemura. Controlled polymerizations using metal–organic frameworks. *Chem. Commun.*, **2018**, 54, 11843. <https://doi.org/10.1039/C8CC06415F>

Статья, принятая в печать: A. Gal, R. Wirth, Z. Barkay, N. Eliaz, A. Scheffel, D. Faivre. Templated and self-limiting calcite formation directed by coccolith organic macromolecules. *Chem. Commun.*, accepted. <https://doi.org/10.1039/C7CC03639F>

Монография: D.D. Perrin, W.L.F. Armarego, D.R. Perrin. Purification of Laboratory Chemicals. Oxford, UK: Pergamon, **1980**.

A.A. Appen. *Khimiya stekla* (Chemistry of Glass). Leningrad: Khimiya, **1970**. (In Russ.)

Сборник: Reviews in Computational Chemistry / Eds. K.B. Lipkowitz, D.B. Boyd. New York: VCH, **1996**.

Глава в книге (статья в сборнике): M.N. Sokolov, N.G. Naumov, P.P. Samoylov, V.P. Fedin. Clusters and Cluster Assemblies. In: Comprehensive Inorganic Chemistry II / Eds. K.P. Jan Reedijk, K. Poeppelmeier. Oxford: Elsevier, **2013**, Ch. 2.11. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-097774-4.00212-6>

Или: M.N. Sokolov, N.G. Naumov, P.P. Samoylov, V.P. Fedin. Clusters and Cluster Assemblies. In: Comprehensive Inorganic Chemistry II / Eds. J. Reedijk, K. Poeppelmeier. Oxford: Elsevier, **2013**, Vol. 2, 271–310. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-097774-4.00212-6>

J. Puls, B. Saake. Industrially Isolated Hemicelluloses. In: Hemicelluloses: Science and Technology / Eds. P. Gatenholm, M. Tenkanen: ACS Symposium Series, Vol. 864. Washington, DC: American Chemical Society, **2004**, 24–37. <https://doi.org/10.1021/bk-2004-0864.ch002>

Конференция, симпозиум: D. Jayatilaka, D.J. Grimwood. Tonto: A Fortran Based Object-Oriented System for Quantum Chemistry and Crystallography. In: Proceedings, Part 4: Int. Conf. Computational Science (ICCS 2003), Melbourne, Australia and St. Petersburg, Russia, June 2–4, 2003 / Eds. P.M.A. Sloot, D. Abramson, A.V. Bogdanov, Y.E. Gorbachev, J.J. Dongarra, A.Y. Zomaya: Lecture Notes in Computer Science, Vol. 2660. Berlin, Heidelberg: Springer, **2003**, 142. [https://doi.org/10.1007/3-540-44864-0\\_15](https://doi.org/10.1007/3-540-44864-0_15)

E.Sh. Saigibatalova, K.R. Ramazanova, I.D. Shutilov, T.A. Gazizov, D.R. Islamov, A.R. Kurbanalieva. Materialy Mezhdunarodnoi nauchnoi konferentsii studentov, aspirantov i molodykh uchenykh «Lomonosov-2021» (Abstracts of the International Scientific Conference for Undergraduate and Graduate Students and Young Scientists "Lomonosov-2021"), Moscow, Russia, April 12–23. Moscow: Pero, **2021**, 702. (In Russ.)

J. Jones, K. Oferdahl. *Natl. Meet. – Am. Chem. Soc., Div. Environ. Chem.*, **1989**, 29(2), ENVR 22.

Диссертация: Ch.N. Cow. *Orchestration of Reaction on Glycoluril Templates*: Ph.D. (Chem.) Dissertation. Hamilton, Ontario, Canada: McMaster University, **1997**.

S. Allen. *Thermoresponsive Behavior of AM<sub>2</sub>O<sub>8</sub> Materials*: PhD Thesis. University Of Durham, **2003**.

A.N. Kravchenko. *Biciklicheskie bismocheviny, ih predshestvenniki i analogi (Bicyclic Bisureas, Their Precursors and Analogues)*: Doctoral/Cand. (Chem.) Dissertation. Moscow: Zelinsky Institute of Organic Chemistry, **2007**. (In Russ.)

Программа: G.M. Sheldrick. *A short history of SHELX. Acta Crystallogr., Sect. A: Found. Adv.*, **2008**, 64(1), 112–122. <https://doi.org/10.1107/S0108767307043930>

CrysAlisPro, 1.171.38.46. The Woodlands, TX, USA: Rigaku Oxford Diffraction, **2015**.

База данных: Cambridge Structural Database, Ver. 5.26. UK: University of Cambridge, **2002**.

The Sadtler Standard Spectra: 300 MHz Proton NMR Standards. Philadelphia, PA: Bio-Rad, Sadtler Division, **1994**, No. 7640 (1-Chloropentane).

Патент: S.K. Sheem. *Low-Cost Fiber Optic Pressure Sensor*. US Patent 6738537, **2004**.

Онлайн издание: M. Zloh, D. Esposito, W.A. Gibbons. *Helical Net Plots and Lipid Favourable Surface Mapping of Transmembrane Helices of Integral Membrane Proteins: Aids to Structure Determination of Integral Membrane Proteins. Internet J. Chem.*, **2003**, 6, Article 2, <http://www.ijc.com/articles/2003v6/2/> (accessed Oct 13, 2004).

Список правильных сокращений названий некоторых журналов.

## **Графический реферат**

Для размещения в иллюстрированном содержании выпуска авторы предоставляют информативную цветную иллюстрацию размером не более 65\*40 мм и разрешением не менее 300 dpi, которая отражает суть статьи в графическом виде. Текст в графическом реферате допускается только в случае крайней необходимости (формулы, уравнения и пр.), при этом следует избегать дублирования названия статьи и текста аннотации.

## **Структурные формулы**

Структурные формулы должны создаваться с использованием специального программного обеспечения, например, ChemDraw, ISISDraw или ChemWindows, и могут быть вставлены в Word-файл статьи как рисунок. При использовании других программных продуктов структуры должны быть предварительно сохранены в один из допустимых графических форматов, а затем уже вставлены в Word-файл.

## **Описание новых соединений**

Результаты монокристалльного рентгеноструктурного анализа не являются приемлемыми как единственное средство описания новых соединений. Соединения также должны характеризоваться спектроскопическими и аналитическими методами, подходящими для конкретного образца или соединения. Методы могут включать элементный анализ для демонстрации объёмного состава, ЯМР-спектроскопию, масс-спектрометрию, инфракрасную и электронную спектроскопию.

## **Описание кристаллической структуры**

Необходимо приложить все усилия, чтобы свести к минимуму количество табличного материала. Краткое описание эксперимента может быть дано с помощью таблицы, содержащей кристаллографические параметры и информацию для сбора и уточнения данных.

До подачи рукописи авторы должны проверить качество своих CIF-файлов через веб-сайт checkCIF Международного союза кристаллографов (<http://checkcif.iucr.org>) и загрузить вывод checkCIF (объединенные в один pdf-файл) в качестве вспомогательной информации для рецензентов. Любые предупреждения уровня А и/или В должны быть рассмотрены до подачи

рукописи и разъяснены в pdf-файле checkCIF.

CIF- и FCF-файлы, таблицы структурных факторов и отчёты CheckCIF должны быть отправлены либо в Кембриджский центр кристаллографических данных (CCDC), или для чисто неорганических веществ в FIZ Karlsruhe (<https://icsd.fiz-karlsruhe.de>) (CSD) до подачи рукописи. Номер(а) CCDC или CSD следует указать в рукописи.

### **Дополнение: формат статей, содержащих описание кристаллических и молекулярных структур**

В связи с растущим объемом и стандартизацией структурных данных, а также возрастающей ролью электронных ресурсов статьи, посвященные рентгеноструктурному анализу кристаллов и поликристаллов, должны быть оформлены с учетом следующих правил.

Для целей рецензирования структурных данных необходимо представить в редакцию вместе с рукописью CIF-файлы исследованных структур. Для составления CIF-файлов можно воспользоваться редактором *enCIFer*, доступным в Интернете по адресу <http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/encifer/index.html>. Представляемый файл нужно предварительно проверить на отсутствие «предупреждений типа А, В и С» по программе *checkCIF*, доступной по адресу <http://journals.iucr.org/services/cif/checking/checkfull.html>. Рецензент может проверить представленный CIF-файл и в случае обнаружения предупреждений типа А возвращает статью авторам для исправления структурной информации или объяснения имеющихся ошибок. Наличие предупреждений типов В и С требует соответствующих комментариев в тексте статьи.

В Экспериментальной части должны быть компактно собраны в виде таблицы или в текстовой форме основные кристаллоструктурные данные (состав, молекулярная масса, сингония кристалла, пространственная группа, параметры элементарной ячейки, количество формульных единиц в ячейке, расчетное значение плотности) и основные параметры РСА эксперимента (температура эксперимента, размеры, цвет и форма кристалла, коэффициент поглощения, число измеренных и независимых использованных отражений, *R*-фактор для эквивалентных рефлексов, число уточнявшихся параметров, конечное значение *R*-фактора с указанием его типа, добротность подгонки и величины остаточных экстремумов на карте электронной плотности, а также параметр абсолютной структуры для оптически активных кристаллов). В Экспериментальной части также необходимо указать условия отбора кристаллов, тип использованного прибора и излучения, область съемки, полноту сбора данных, введение поправок на поглощение и любые нестандартные детали эксперимента. Далее необходимо отметить, с использованием каких методов и программ проводили расшифровку и уточнение структуры, каким образом уточняли позиционные и тепловые параметры атомов водорода, налагали ли дополнительные условия на величины уточняемых параметров (например, для фрагментов разупорядоченных структур), использовали ли модель жесткого тела и применяли ли какие-либо нестандартные решения при определении структуры. Результаты рентгенографического исследования поликристаллов должны содержать структурные данные (параметры элементарной ячейки, координаты атомов, заселенность позиций, основные межатомные расстояния, количественные соотношения фаз, размеры областей когерентного рассеяния и др.) и сопровождаться независимо полученными данными о химическом составе образца.