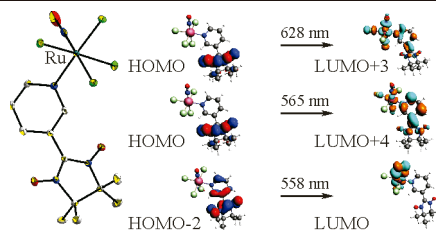


СОДЕРЖАНИЕ

Костин Г.А., Толстиков С.Е., Куратьева Н.В.,
Надолинный В.А., Овчаренко В.И.

**Первый пример комплексов нитрозорутения
с нитроксильным радикалом
в качестве лиганда**

Ключевые слова: комплексы рутения,
нитроксильные радикалы, нитрозокомплексы

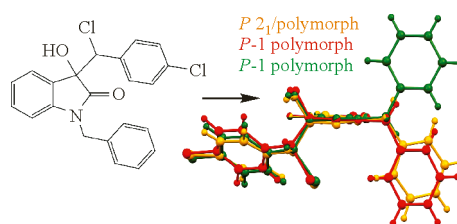


105395

Самигуллина А.И., Галимуллина В.Р.,
Кадырова С.Ф., Криволапов Д.Б., Мамедов В.А.,
Губайдуллин А.Т.

**Особенности кристаллического строения
трех полиморфов (*RS*, *SR*)-1-бензил-3-
(α ,4-дихлорбензил)-3-гидроксииндолин-2-она**

Ключевые слова: индол-2-он,
супрамолекулярный синтон,
полиморфизм молекулярных кристаллов,
рентгеноструктурный анализ, поверхность Хиршфельда

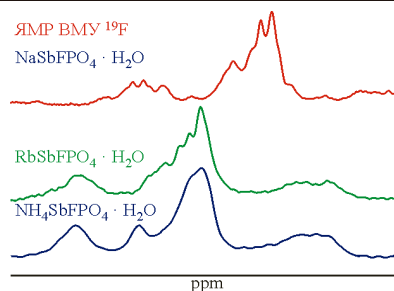


105403

Слободюк А.Б., Макаренко Н.В., Полянцев М.М.,
Кавун В.Я., Земнухова Л.А.

**Структурная разупорядоченность
и ионная подвижность
в фосфатофторидных комплексах сурьмы(III)
 $MSbF(PO_4) \cdot H_2O$ ($M = Na, Rb, NH_4$)
по данным ЯМР и ЯМР ВМУ ^{19}F , ^{31}P и 1H**

Ключевые слова: фториды, фосфаты, антимониты,
ЯМР, кристаллическое строение, ионная подвижность

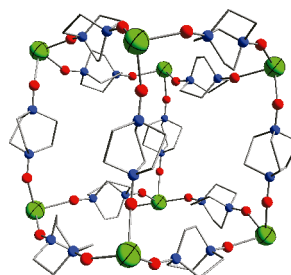


105513

Демаков П.А., Овчинникова А.А., Федин В.П.

**Синтез, строение и оптические свойства
катионного координационного полимера
лантана(III) с N,N' -диоксидом
1,4-диазацикло[2.2.2]октана**

Ключевые слова: металл-органические
координационные полимеры, синтез,
рентгеноструктурный анализ, комплексы лантана(III),
N-оксиды, оптические свойства

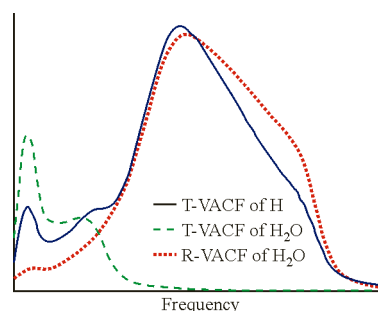


105634

Волошин В.П., Наберухин Ю.И.

Автокорреляционные функции поступательной и вращательной скорости в молекулярно-динамических моделях воды и их спектры

Ключевые слова: молекулярная динамика, модели воды, автокорреляционная функция скорости, поступательные и вращательные скорости молекул воды, поступательные скорости атомов водорода, спектры автокорреляционных функций

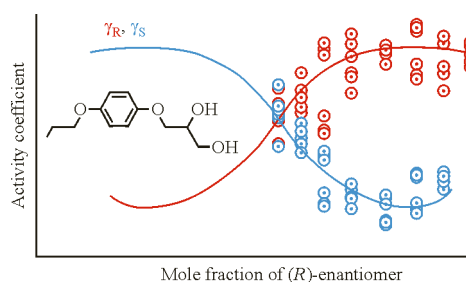


105637

Захарычев Д.В., Герасимова Д.П., Файзуллин Р.Р.

Энергетические аспекты хиральной дискриминации в неограниченном твердом растворе энантиомеров: *n*-пропоксифениловый эфир глицерина

Ключевые слова: твердые растворы энантиомеров, смешанные кристаллы, хиральность, кристаллизация, растворимость, плавление, термодинамическая активность, эфиры глицерина

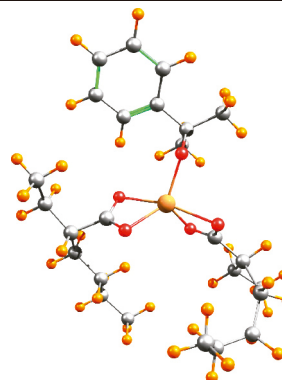


105811

Улитин Н.В., Анисимова В.И., Хурсан С.Л., Балдинов А.А., Суворова И.А., Нуруллина Н.М., Шиян Д.А., Терещенко К.А., Бадртдинова А.И., Денисова М.Н., Харлампики Х.Э., Гржегоржевский К.В., Абрамов П.А.

Строение и термодинамические характеристики промежуточных каталитических аддуктов в окислении кумола в присутствии 2-этилгексаноата металла 2-ой группы

Ключевые слова: гидропероксид кумола, квантово-химическое моделирование, окисление кумола, промежуточный каталитический аддукт

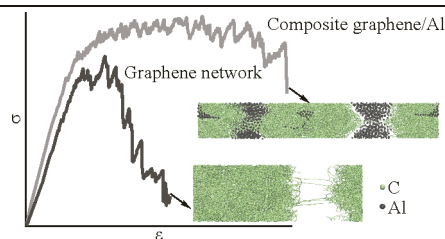


105891

Сафина Л.Р., Рожнова Е.А.

Молекулярно-динамическое моделирование деформационного поведения композита графен/Al

Ключевые слова: скомканный графен, наночастицы Al, композит графен/Al, деформационное поведение, молекулярная динамика

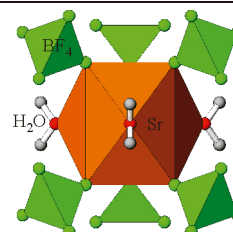


105903

Чаркин Д.О., Волков С.Н., Манелис Л.С., Гостева А.Н., Аксенов С.М., Долгих В.А.

Синтез и кристаллическая структура двух новых кристаллогидратов тетрафтороборатов $M(\text{BF}_4)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, $M = \text{Sr}, \text{Ba}$

Ключевые слова: тетрафторобораты, кристаллическое строение, двойникование

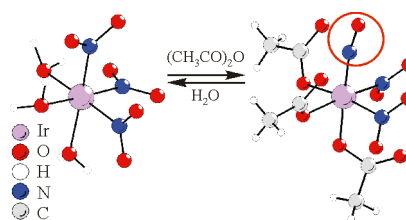


106035

Топчийн П.А., Комаров В.Ю., Васильченко Д.Б.

Синтез, структура и свойства нового нитрозокомплекса иридия(III) – $[\text{Ir}(\text{NO})(\text{AcOH})(\text{AcO})_2(\text{NO}_2)_2]$

Ключевые слова: иридий, нитрокомплексы, нитрозокомплексы, аквакомплексы, уксусный ангидрид, рентгеноструктурный анализ

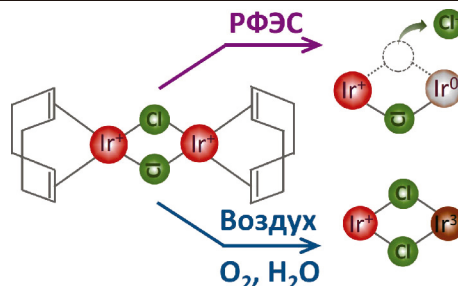


106060

Квон Р.И., Нартова А.В., Ковтунова Л.М.,
Бухтияров В.И.

Сравнительное РФЭС исследование состава и электронного состояния иридия в свободном и закрепленном биядерном комплексе $[\text{Ir}(\text{COD})\text{Cl}]_2$

Ключевые слова: рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, металлоорганический комплекс иридия, одноцентровый катализатор

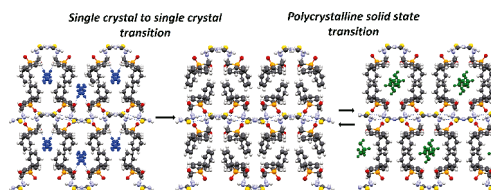


106142

Самигуллина А.И., Исаева А.О., Крутов И.А.,
Бурангулова Р.Н., Гаврилова Е.Л., Захарычев Д.В.,
Губайдуллин А.Т.

Лабильная кристаллическая структура N1-(дифенилфосфорил)ацетил-тиосемикарбазида

Ключевые слова: дифенилфосфорилацетил тиосемикарбазид, монокристалл, конформация, кристаллосольват, супрамолекулярный мотив, межмолекулярное взаимодействие

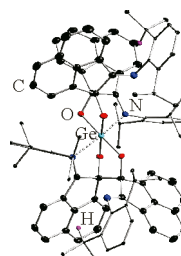


106195

Лукоянов А.Н., Зверева Ю.В., Жигулин Г.Ю.,
Разборов Д.А., Баранов Е.В., Кетков С.Ю.

Восстановительные свойства дихлорида германия по отношению к редокс-активному моноиминоаценафтенону dpp-Mian

Ключевые слова: германий, редокс-активные лиганды, N,O-лиганды, одноэлектронное восстановление

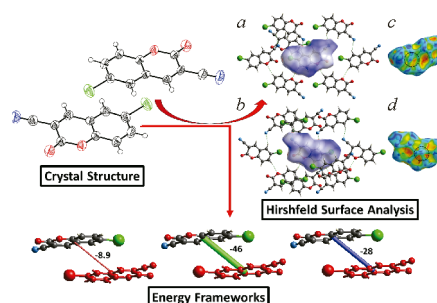


106292

Kurbanova M., Ashfaq M., Tahir M.N.,
Maharramov A., Dege N., Koroglu A.

Synthesis, crystal structure, supramolecular assembly exploration by Hirshfeld surface analysis and computational study of 6-bromo-2-oxo-2h-chromene-3-carbonitrile (BOCC)

Keywords: 6-bromo-2-oxo-2h-chromene-3-carbonitrile, single crystal X-rays diffraction, supramolecular assembly, Hirshfeld surface analysis, interaction energy between molecular pairs

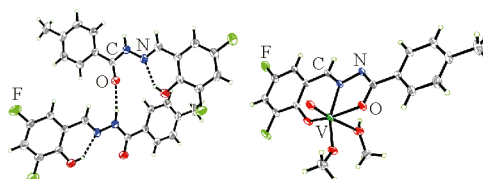


106486

Li M., Qiu X.-Y., Zheng Z.-X., Wu Y.-J.

Synthesis, characterization and X-ray crystal structures of N' -(3,5-difluoro-2-hydroxybenzylidene)-4-methylbenzohydrazide and its oxidovanadium(V) complex with antibacterial activity

Keywords: hydrazone, oxidovanadium complex, crystal structure, antibacterial activity

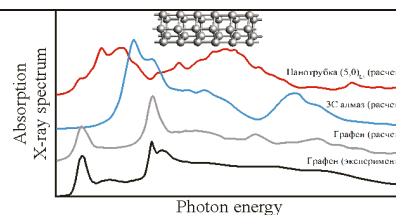


106492

Грешняков В.А.

Первопринципное исследование L_{4-} , L_{3-6-} и L_{3-4-6-} алмазоподобных трубчатых наноструктур

Ключевые слова: моделирование, углеродные наноструктуры, алмаз, полиморфизм, атомная структура, термическая стабильность



106790

Содержание следующего номера — в конце журнала

© Сибирское отделение РАН, 2023
© Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН, 2023
© Новосибирский государственный
университет, 2023