

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 64

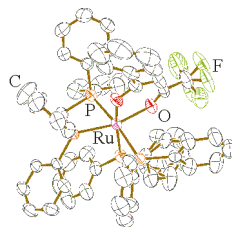
Апрель

№ 4, 2023

СОДЕРЖАНИЕ

Macêdo R.R., Maia P.I.S., Deflon V.M.,
Miguel G.F. de S., Machado A.E.H., Poelhsitz G.V.
**Synthesis and characterization
of *cis*-[Ru(dppm)₂(bta)]PF₆ (bta⁻ = 4,4,4-trifluoro-1-
phenyl-1,3-butanedionate)**

Keywords: ruthenium(II) complexes, dppm, β -diketonate,
X-ray structure, multinuclear NMR spectroscopy, TD-DFT



108210

Ермакова Е.А., Голубева Ю.А., Смирнова К.С.,
Клюшова Л.С., Лидер Е.В.

**Строение и цитотоксическая активность
комплекса марганца(II) с 5-метилтетразолом
и 4,7-диметил-1,10-фенантролином**

Ключевые слова: марганец, 5-метилтетразол,
кристаллическая структура, цитотоксичность,
индекс селективности

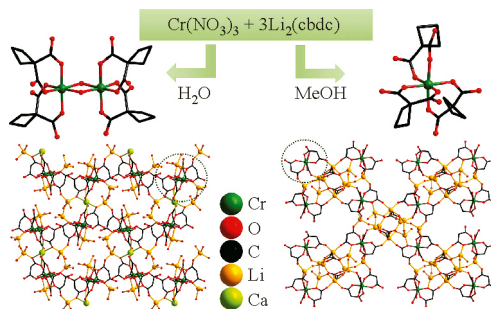


108300

Бажина Е.С., Шмелев М.А., Кискин М.А.,
Еременко И.Л.

**Особенности кристаллизации
координационных соединений
Li^I-Cr^{III} с анионами
циклобутан-1,1-дикарбоновой кислоты**

Ключевые слова: *s*-3*d* гетерометаллические соединения,
комплексы хрома(III), литий, кальций,
циклобутан-1,1-дикарбоновая кислота,
рентгеноструктурный анализ

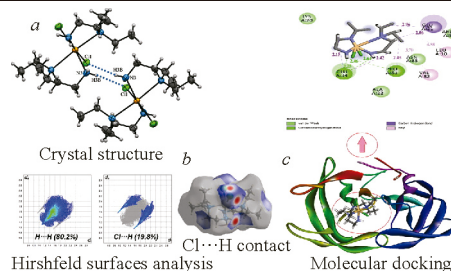


108431

Dege N.

**Synthesis, crystal structure, Hirshfeld surface
analysis of bis[(*N,N*-diethylenediamine)cadmium(II)]
dichloride**

Keywords: cadmium(II), crystal structure,
N,N-diethylenediamine, X-ray, Hirshfeld surface analysis

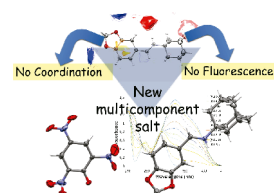


108562

Niquini F.M., Machado P.H., Montilla-Suárez J.M., Moura A.L.S., Corrêa R.S.

N–H...O and weak interactions stabilizing the Schiff base/picrate multicomponent salt

Keywords: Schiff base, picrate, UV-Vis experiments, infrared, X-ray diffraction

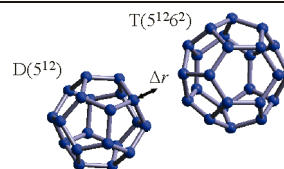


108702

Юнусов М.Б., Хуснутдинов Р.М.

Особенности структурной стабилизации D- и T-полостей Si-гидрата молекулами газов

Ключевые слова: газовые гидраты, ab initio, энергия связи, плотность электронных состояний

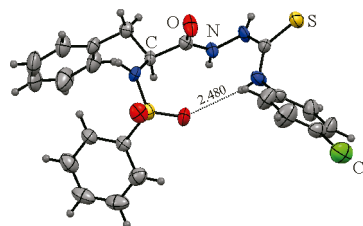


108770

Kanmazalp S.D., Başaran E., Karaküçük-Iyidoğan A.

Molecular description and Hirshfeld analysis of the (–)-(S)-1-[2-(benzenesulfonamido)-3-phenylpropanoyl]-4-[(4-chloro)phenyl]-thiosemicarbazide

Keywords: thiosemicarbazide, structural investigations, X-ray crystallography, Hirshfeld analysis

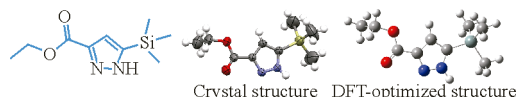


108988

Wang Y., Zhao C.-S.

Synthesis, crystal structure and DFT study of ethyl 5-(trimethylsilyl)-1H-pyrazole-3-carboxylate

Keywords: synthesis, X-ray diffraction, DFT, vibration analysis

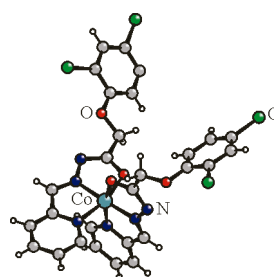


108996

Конник О.В., Кискин М.А., Шульгин В.Ф., Рюш И.О., Гусев А.Н.

Комплекс кобальта(III) с 2,4-дихлор-феноксиацетилгидразоном пиридин-2-карбальдегида

Ключевые слова: кобальт(III), 2,4-дихлорфеноксиацетилгидразон пиридин-2-карбальдегида, невалентные взаимодействия, рентгеноструктурный анализ



109065

Хамалетдинова Н.М., Кузнецова О.В., Егорочкин А.Н.

Энтальпия сублимации органических и металлоорганических соединений: влияние поляризационного эффекта

Ключевые слова: энтальпия сублимации, корреляционный анализ, классические электронные эффекты, поляризационный эффект

Сублимация
Твердое вещество → газ

Энтальпия сублимации ΔH
14 серий органических и металлоорганических соединений

$$\Delta H = \Delta H_0 + a\sigma_I + b\sigma_R(\sigma_R^+) + c\sigma_\alpha$$
$$Ind(\%) = a\sigma_I \quad Res(\%) = b\sigma_R(\sigma_R^+) \quad Pol(\%) = c\sigma_\alpha$$

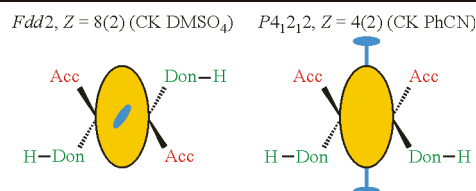
σ_I , σ_R , σ_R^+ , σ_α – константы заместителей X

109136

Банару А.М., Банару Д.А., Аксенов С.М.

Структурные классы диметилсульфата и бензонитрила

Ключевые слова: структурный класс, межмолекулярное взаимодействие, опорный контакт, кристаллографическая сеть, полиэдр Вороного–Дирихле



109378

