

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

ТОМ 64

Апрель

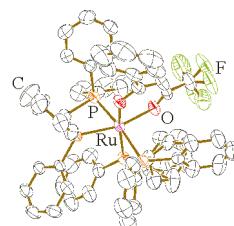
№ 4, 2023

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

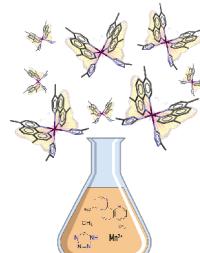


108210

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

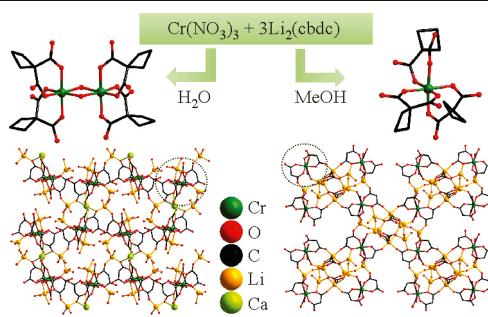


108300

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

Особенности кристаллизации
координационных соединений
 $\text{Li}^{\text{I}}\text{-Cr}^{\text{III}}$ с анионами
цикlobутан-1,1-дикарбоновой кислоты

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

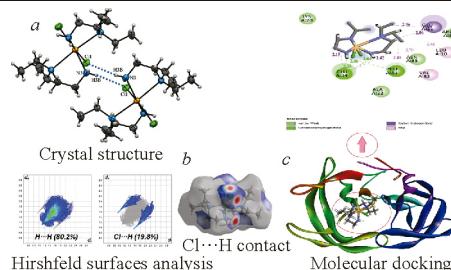


108431

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

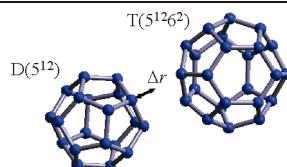


108702

Юнусов М.Б., Хуснутдинов Р.М.

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

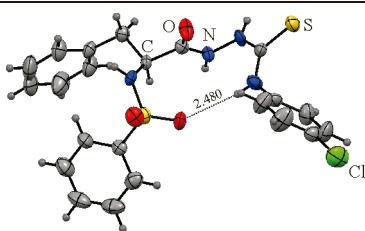
Ключевые слова: газовые гидраты, ab initio, энергия связи, плотность электронных состояний



108770

Kanmazalp S.D., Başaran E., Karaküçük-Iyidoğan A.
Molecular description and Hirshfeld analysis of the (−)-(S)-1-[2-(benzenesulfonamido)-3-phenylpropanoyl]-4-[(4-chlorophenyl)-thiosemicarbazide

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

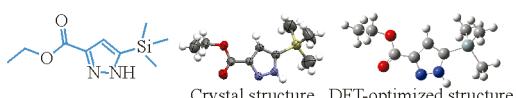


108988

Wang Y., Zhao C.-S.

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

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

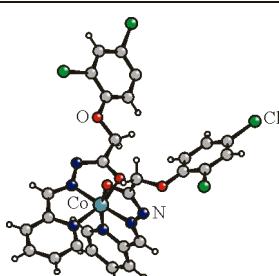


108996

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.

Энталпия сублимации органических и металлоорганических соединений: влияние поляризационного эффекта

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

Сублимация
Твердое вещество → газ

Энталпия сублимации ΔH
14 серий органических и металлоорганических соединений

$$\Delta H = \Delta H_0 + a\sigma_I + b\sigma_R(\sigma_R^+) + c\sigma_a$$

$$Ind(\%) = a\sigma_I \quad Res(\%) = b\sigma_R(\sigma_R^+) \quad Pol(\%) = c\sigma_a$$

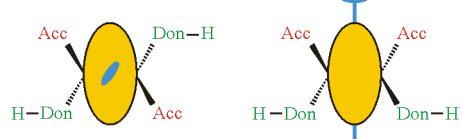
σ_I , σ_R , σ_R^+ , σ_R^- , σ_a – константы заместителей X

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

$Fdd2$, $Z = 8(2)$ (CK DMSO₄) $P4_12_12$, $Z = 4(2)$ (CK PhCN) 109136

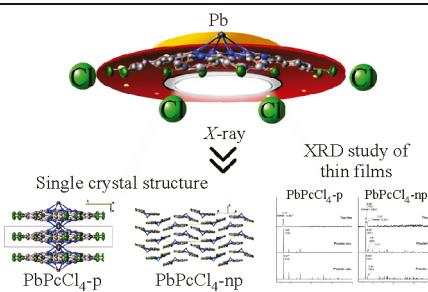


109378

Клямер Д.Д., Сухих А.С., Бонегардт Д.В.,
Басова Т.В.

**Тетрахлорзамещенные фталоцианины свинца:
влияние положения заместителей на структуру
моноокристаллов и тонких пленок**

Ключевые слова: хлорзамещенные фталоцианины
свинца, тонкие пленки, рентгенофазовый анализ,
рентгеноструктурный анализ,
электронная спектроскопия поглощения

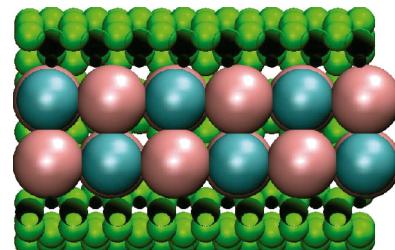


109409

Анучин Н.М., Еняшин А.Н.

**Электронные и механические свойства
эндоэдральных композитов углеродных
нанотрубок с иодидом калия:
DFT моделирование**

Ключевые слова: нанотрубки, иодид калия,
углеродные композиты, продольная упругость,
квантово-химическое моделирование

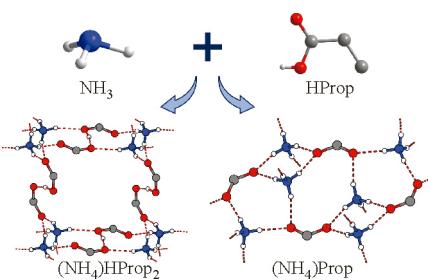


109492

Кендин М.П., Цымбаренко Д.М.

**Кристаллические структуры пропионатов
аммония:
(NH4)[HProp2] и (NH4)Prop (Prop- = C2H5COO-)**

Ключевые слова: кристаллическая структура,
рентгеновская дифракция, карбоксилаты,
пропионаты, аммоний, термический анализ,
квантово-химические расчеты,
метод максимальной энтропии

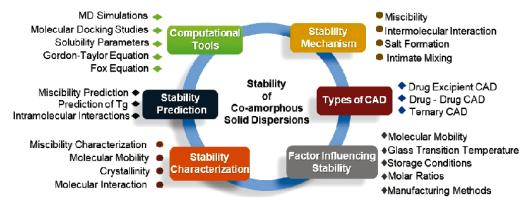


109501

Aher A.A., Shaikh K.S., Chaudhari P.D.

**Stability of Co-amorphous solid dispersions:
Physical and chemical aspects**

Keywords: poorly water-soluble drugs,
Co-amorphous dispersions, amorphous solid dispersions,
Co-formers, stability



109666

Содержание следующего номера — в конце журнала