**Мещерякова, Екатерина Сергеевна.**

## Молекулярная и кристаллическая структура ряда α,ω-алкан-дитиолов, 1,5,3-дитиазепанов и 1,2-бензо-1,5,3-дитиазепинов : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04 / Мещерякова Екатерина Сергеевна; [Место защиты: Уфим. федер. исслед. центр РАН]. - Уфа, 2019. - 117 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат наук Мещерякова Екатерина Сергеевна

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ

ВВЕДЕНИЕ

ГЛАВА 1. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

1.1 Молекулярное и кристаллическое строение производных а,ю-алкан-дитиолов

1.2 Пространственное строение 1,4-дитиепанов

1.3 Конформация производных 3,4-дигидро-2Н-1,5-бензодитиепинов в кристаллическом состоянии

1.4 Практическая ценность производных а,ю-алкан-дитиолов, 1,4-дитиепанов и 3,4-дигидро-2Н-1,5-бензодитиепинов

1.5 Заключение из литературного обзора

ГЛАВА 2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

2.1 Структуры а,ю-бис-сульфанилалканов, 1,4-дитиепанов и 3,4-дигидро-2Н-1,5-бензодитиепинов из КБСД

2.2 Методика и результаты дифрактометрического исследования монокристаллов 1-3, 5, 7,

2.3 Методика ЯМР-экспериментов

2.4 Схемы синтеза

2.5 Квантово-химические расчеты

2.6 Теоретические расчеты в рамках теории Р. Бэйдера «Атомы в молекулах»

2.7 Расчёт энергии межмолекулярных взаимодействий по методу PIXEL

ГЛАВА 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1 Молекулярная и кристаллическая структура новых а,ю-бис-сульфанилалканов

3.2 Молекулярная и кристаллическая структура новых аминокислотных производных 1,5,3-дитиазепана

3.3 Молекулярная и кристаллическая структура новых галогенфенильных

производных бензо-1,5,3-дитиазепинов

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

ВЫВОДЫ

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

Приложение А (справочное) Структуры исследованных соединений

Приложение Б (справочное) Диаграммы отображающие процентное

содержание конформеров в рядах а,ю-бис-

сульфанилалканов

Приложение В (справочное) Энергия и топологические параметры внутри-и межмолекулярных взаимодействий в ряду а,ю-бис-

сульфанилалканов 1-3, 5 и

Приложение Г (справочное) ЯМР спектры соединений

Приложение Д (справочное) Проекции Ньюмена соединений

Приложение Е (справочное) Энергия межмолекулярных взаимодействий.... 114 Приложение Ж (справочное) Проекции Ньюмена соединений

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ

КБСД - Кембриджская база структурных данных ЯМР - ядерный магнитный резонанс АМ - теория Бейдера «Атомы в молекулах» НЭП - неподеленная электронная пара А - Ангстрем (1 10-10 м)