

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 57

Февраль-март

№ 2, 2016

## СОДЕРЖАНИЕ

Бузник В.М.  
Профессор С.П. Габуда



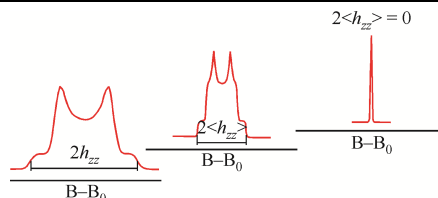
227

## ОБЗОРЫ

Козлова С.Г., Сергеев Н.А., Бузник В.М.

**Модель С.П. Габуды усреднения локальных магнитных полей в ЯМР твердого тела. Подвижность атомов и молекул**

**Ключевые слова:** ЯМР, подвижность атомов и молекул, твердое тело

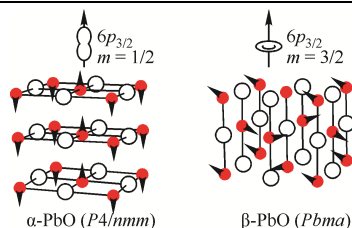


230

Козлова С.Г., Рыжиков М.Р., Слепков В.А.

**Релятивистские эффекты в оксидах и галогенидах переходных и постпереходных металлов**

**Ключевые слова:** релятивистские эффекты, электронное строение, полиморфизм, магнетизм, стереохимически активные неподеленные электронные пары



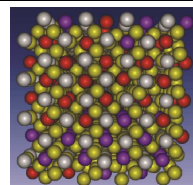
255

## ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Tealdi C., Lavrentiev M.Yu., Mohn C.E., Allan N.L.

**Perovskite solid solutions — a Monte Carlo study of the deep earth analogue (K, Na)MgF<sub>3</sub>**

**Keywords:** Perovskite, structural phase transitions, Monte Carlo, neighborite, parascandolaite



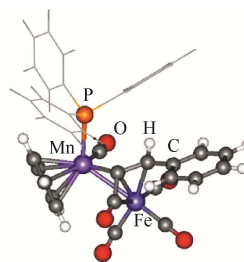
274

Иванова-Шор Е.А., Шор А.М., Наслузов В.А.,  
Рубайло А.И.

283

**Квантово-химическое исследование влияния  
фосфинового лиганда на структуру  
винилиденового биядерного комплекса Mn и Fe**

**Ключевые слова:** метод функционала плотности,  
биядерные комплексы марганца и железа,  
винилиденовые комплексы, трифенилфосфин, карбонил

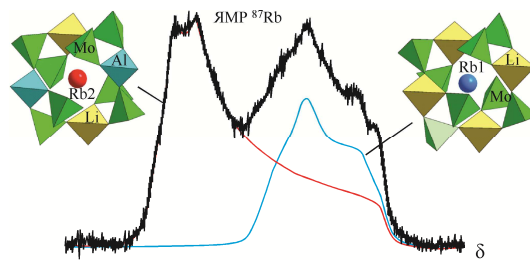


Селезнев В.Н., Медведева Н.И., Денисова Т.А.,  
Невмывако Р.Д., Бузлуков А.Л., Кадырова Ю.М.,  
Солодовников С.Ф.

292

**Электронная структура и квадрупольные  
взаимодействия в тройных молибдатах  
 $\text{Li}_2\text{M}_3\text{Al}(\text{MoO}_4)_4$ ,  $\text{M} = \text{Cs, Rb}$**

**Ключевые слова:** тройные молибдаты,  
электронная структура, квадрупольные взаимодействия,  
ЯМР  $^7\text{Li}$ ,  $^{27}\text{Al}$ ,  $^{87}\text{Rb}$ ,  $^{133}\text{Cs}$

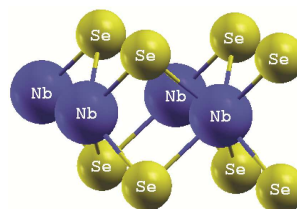


Шейн И.Р., Банников В.В., Еняшин А.Н.

298

**Электронная структура и переход  
диэлектрик–металл в нестехиометрических  
дихалькогенидах  $\text{M}_x\text{X}_{2-y}$  ( $\text{M} = \text{Nb, Mo, W}$ ;  
 $\text{X} = \text{Se, Te}$ )**

**Ключевые слова:** дихалькогениды переходных металлов,  
электронная структура, энергия образования дефектов

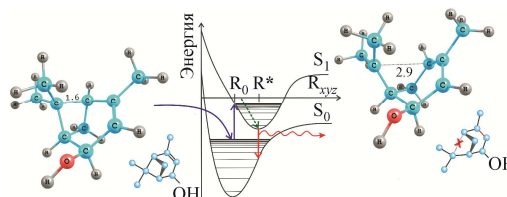


Артюшенко П.В., Томилин Ф.Н., Кузубов А.А.,  
Овчинников С.Г., Цикалова П.Е., Овчинникова Т.М.,  
Суховольский В.Г.

304

**Влияние атомной и электронной структуры  
молекул феромонов на эффективность  
коммуникации насекомых-ксилофагов**

**Ключевые слова:** атомная и электронная структура,  
методы функционала плотности, спектры поглощения,  
возбужденные состояния, ксилофаги, феромоны

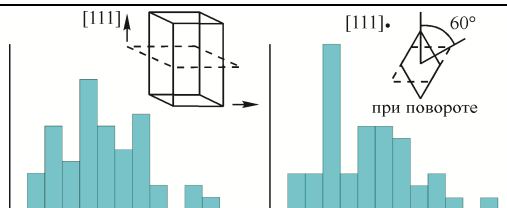


Папуловский Е.С., Шубин А.А., Лапина О.Б.

311

**Расчет стыковки нанокристаллических блоков  
по грани (111) в низкотемпературных  
метастабильных оксидах алюминия**

**Ключевые слова:** удельная поверхностная энергия,  
ЯМР  $^{27}\text{Al}$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$



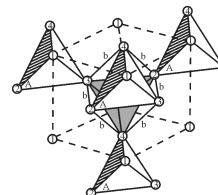
**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Sullivan N.S., Hamida J.A., Pilla S., Muttalib K.A.,  
Genio E.

318

**Molecular glasses: NMR and dielectric susceptibility  
measurements**

**Keywords:** quadrupolar glass, orientational glass,  
susceptibility, fluctuation-dissipation

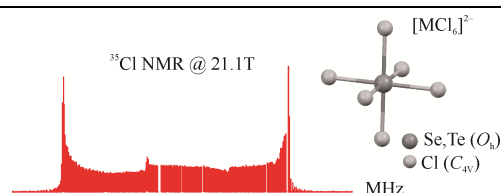


Tersikh V.V., Pawsey S., Ripmeester J.A.

325

**High-field solid-state  $^{35}\text{Cl}$  NMR in selenium(IV)  
and tellurium(IV) hexachlorides**

**Keywords:**  $^{35}\text{Cl}$  NMR,  $^{35}\text{Cl}$  NQR, selenium, tellurium,  
hexachloride, DFT calculations, CASTEP NMR

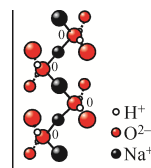


Paczwa M., Sapiga A.A., Olszewski M., Sergeev N.A., Sapiga A.V.

335

# **Spin-lattice relaxations study of water mobility in natural natrolite**

**Keywords:** zeolite, NMR, natrolite, water mobility

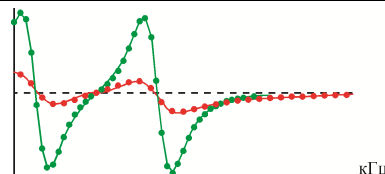


Сабылинский А.В., Мороз Н.К., Габуда С.П.

341

# **Кинетика самодиффузии молекул воды в натролите [Na<sub>2</sub>Al<sub>2</sub>Si<sub>3</sub>O<sub>10</sub>] · 2H<sub>2</sub>O**

**Ключевые слова:** природные цеолиты, натролит, ЯМР <sup>1</sup>H, кинетика самодиффузии H<sub>2</sub>O, механизм диффузии

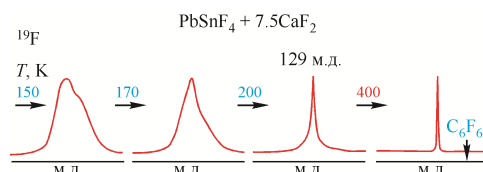


Кавун В.Я., Уваров Н.Ф., Телин И.А., Полянцев М.М., Подгорбунский А.Б., Бровкина О.В., Гончарук В.К.

346

# **Ионная подвижность и проводимость в PbSnF<sub>4</sub>, допированного CaF<sub>2</sub>, по данным ЯМР и импедансной спектроскопии**

**Ключевые слова:** кристаллические фазы в системе PbSnF<sub>4</sub>-CaF<sub>2</sub>, спектры ЯМР <sup>19</sup>F, ионная подвижность, ионная проводимость

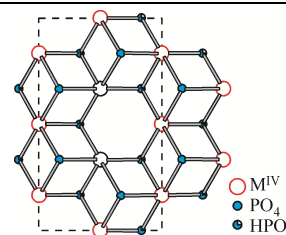


Слободюк А.Б., Кавун В.Я., Годнева М.М.

353

# **Особенности строения кислых фторофосфатоцирконатов (гафнатов) по данным ЯМР <sup>19</sup>F, <sup>31</sup>P, <sup>1</sup>H**

**Ключевые слова:** фторофосфатоцирконаты, фторофосфатогфнаты, спектры ЯМР, протонная подвижность, кристаллическое строение

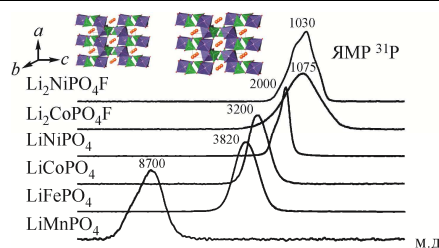


Косова Н.В., Слободюк А.Б., Подгорнова О.А.

359

# **Сравнительный структурный анализ LiMPO<sub>4</sub> и Li<sub>2</sub>MPO<sub>4</sub>F (M=Mn, Fe, Co, Ni) по данным РФА, ИК и ЯМР спектроскопии**

**Ключевые слова:** электродные материалы для литий-ионных аккумуляторов, ортофосфаты и фторофосфаты лития и переходных металлов, структура

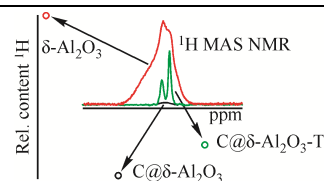


Хабибулин Д.Ф., Володин А.М., Лапина О.Б.

368

# **Строение C@Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> по данным многоядерной ЯМР спектроскопии в твердом теле**

**Ключевые слова:** γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, δ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, графеновое покрытие, наночастицы оксида алюминия, ЯМР <sup>1</sup>H <sup>27</sup>Al, OH-группы

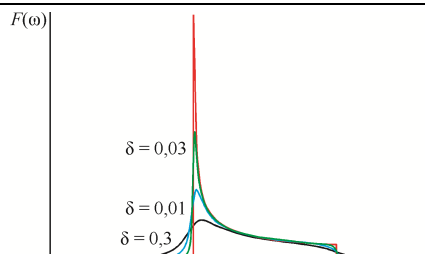


Фалалеев О.В., Кондратов А.С.

375

# **Анализ экспериментальных полос поглощения ЯМР поликристаллов с использованием λ-функции Хеймана**

**Ключевые слова:** Формула Бломбергера-Роуланда, λ-функция Хеймана, поликристаллы, частотные распределения, свертки с лоренцевой и гауссовой линиями

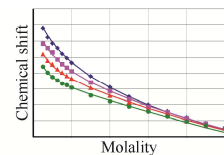
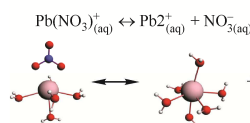


## СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Alkan F., Small T., Bai S., Dominowski A., Dybowski C.

**Ion pairing in H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O solutions of lead nitrate, as determined with <sup>207</sup>Pb NMR spectroscopy**

**Keywords:** lead nitrate, contact-ion pair, equilibrium, exchange, NMR spectroscopy

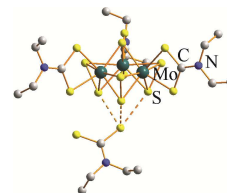


382

Гущин А.Л., Рыжиков М.Р., Компаньков Н.Б., Мороз Н.К., Соколов М.Н.

**Катион-анионные взаимодействия в растворах [Mo<sub>3</sub>S<sub>7</sub>(Et<sub>2</sub>dtc)<sub>3</sub>](Et<sub>2</sub>dtc)**

**Ключевые слова:** кластерный комплекс, молибден, дитиокарбамат, квантово-химические расчеты, DOSY ЯМР

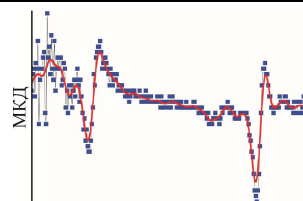


389

Эдельман И.С., Соколов А.Э., Заблуда В.Н., Шубин А.А., Мартыанов О.Н.

**Исследование природной нефти с помощью спектроскопии магнитного кругового дихроизма**

**Ключевые слова:** магнитный круговой дихроизм (МКД), МКД спектроскопия, абсорбционная спектроскопия нефти



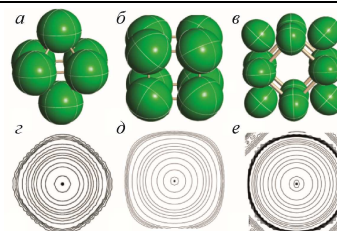
394

## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Лапташ Н.М., Удовенко А.А.

**Об идентификации атомов кислорода и фтора в разупорядоченных неорганических оксофторидных соединениях**

**Ключевые слова:** оксофторидные соединения, кристаллическая структура, ориентационный беспорядок, статика и динамика, фазовые переходы

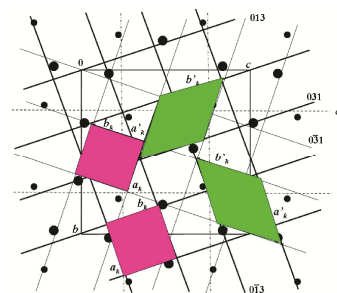


402

Борисов С.В., Магарилл С.А., Первухина Н.В.

**Кристаллообразующие функции плоскостей скользящего отражения в организации строения ряда (Pb, Bi)-содержащих сульфидов**

**Ключевые слова:** (Pb, Bi)-сульфиды, зальцбургит, эльдрагонит, изоклакеит, викингит, кристаллографический анализ, катионные и анионные подрешетки, плоскости скользящего отражения, эффект "биения" подрешеток

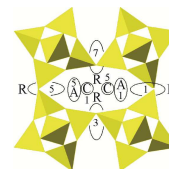


411

Серёткин Ю.В., Бакакин В.В., Пеков И.В.

**Влияние состава цеолита паранатролита на строение его водно-катионной подсистемы**

**Ключевые слова:** цеолиты, паранатролит, кристаллическая структура, водно-катионные ассоциаты



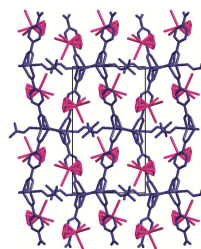
419

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Хан И.С., Самсоненко Д.Г., Пахомова В.М.,  
Федин В.П.

### Кристаллическая структура соединения включения пористого металл-органического полимера с цимантреном

**Ключевые слова:** кристаллическая структура,  
пористые координационные полимеры,  
соединение включения, цимантрен, цинк

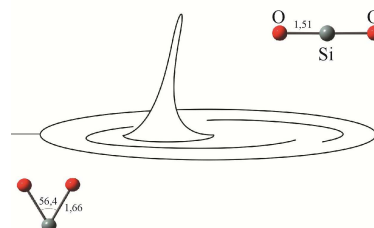


426

Хлебопрос Р.Г., Захватаев В.Е., Слепков В.А.,  
Кузьмин М.И.

### О возможности фазовых переходов с образованием пероксидных форм $\text{SiO}_2$ в мантии Земли и их влиянии на мантийную конвекцию

**Ключевые слова:** фазовые переходы,  
пероксидные формы, мантийная конвекция

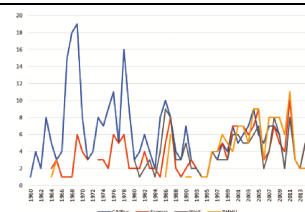


430

Бузник В.М., Зибарева И.В.

### Библиометрический и тематический анализ научного наследия профессора С.П. Габуды

**Ключевые слова:** С.П. Габуда,  
библиометрический анализ, тематический анализ,  
базы данных, история науки



435

Содержание следующего номера — в конце журнала