

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

ТОМ 58

Ноябрь-декабрь

№ 8, 2017

СОДЕРЖАНИЕ

К юбилею академика Ф.А. Кузнецова

1525

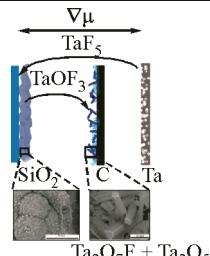
КУЗНЕЦОВСКИЕ ЧТЕНИЯ – 2017
ЧЕТВЕРТЫЙ СЕМИНАР ПО ПРОБЛЕМАМ
ХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ
ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ
1–3 февраля 2017, ИНХ СО РАН, Новосибирск

Лозанов В.В., Бакланова Н.И., Пирязев Д.А.

1527

Термодинамическое моделирование и экспериментальное исследование реакционного химического осаждения из газовой фазы в системе Ta—C—Si—O—F

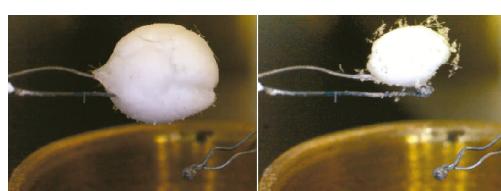
Ключевые слова: термодинамическое моделирование, осаждение из газовой фазы, карбид тантала, оксифторид тантала, монокристалл



Лукашов В.В., Макаров М.С., Макарова С.Н.,
Игуменов И.К.

1534

Молекулярно-кинетические аспекты процессов парообразования летучих координационных соединений с органическими лигандами

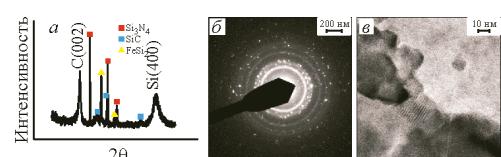


Ключевые слова: химическое осаждение из газовой фазы, кинетика сублимации, тепломассоперенос, β-дикетонаты металлов

Файнер Н.И., Пушкарёв Р.В., Шестаков В.А.,
Гутаковский А.К.

1543

Влияние условий синтеза на структуру и свойства новых материалов $\text{SiC}_x\text{N}_y\text{Me}_z$ для спинtronики



Ключевые слова: термодинамическое моделирование, 1,1,1,3,3-гексаметилдисилазан, ферроцен, николоцен, кобальтоцен, химическое осаждение пленок из газовой фазы при пониженном давлении, нанокомпозитные пленки $\text{SiC}_x\text{N}_y\text{Fe}_z$

ИНХ СО РАН
НОВОСИБИРСК
2017

Дёмин В.Н., Смирнова Т.П., Борисов В.О., Грачёв Г.Н.,
Смирнов А.Л., Хомяков М.Н.

1553

Новый лазерно-плазменный процесс получения твердых покрытий и их структурные характеристики

Ключевые слова: лазерная плазма мощного оптического разряда, нитрид углерода, твердые покрытия

Э.М. Мороз

Возможности рентгенографических методов в определении структурных характеристик углеродных материалов

Ключевые слова: рентгенографические методы, углеродные материалы, структура наноматериалов

Шаяпов В.Р., Яковкина Л.В., Булина Н.В.,
Черникова Н.А.

Температурные зависимости оптических свойств и фазового состава пленок диоксида ванадия, полученных химическим осаждением из газовой фазы

Ключевые слова: диоксид ванадия, пленки, химическое осаждение из газовой фазы, рентгенофазовый анализ, фазовый переход, оптические свойства

Крисюк В., Уркасым кызы С., Байдина И.А.,
Романенко Г.В., Корольков И.В., Корецкая Т.П.,
Петрова Н.И., Тургамбаева А.Е.

Структура и термические свойства гетерометаллических комплексов для газофазного осаждения Cu—Pd пленок

Ключевые слова: медь, палладий, β -дикетонаты, кристаллическая структура, летучий гетерометаллический комплекс, термические свойства, биметаллические пленки, MOCVD прекурсор

Тургамбаева А.Е., Крисюк В.В., Байдина И.А.,
Корольков И.В., Ильин И.Ю., Уркасым кызы С.,
Игуменов И.К.

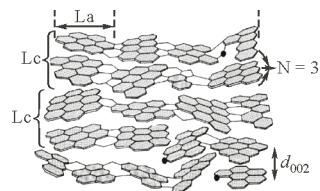
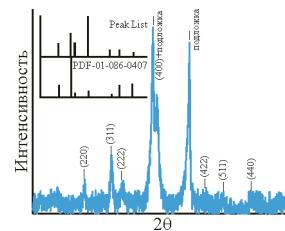
Летучие комплексы циркония со стерически затрудненными β -дикетонатами: структура и термические свойства

Ключевые слова: цирконий, дикетонаты, кристаллическая структура, летучий металлорганический комплекс, термические свойства, термолиз, MOCVD прекурсор

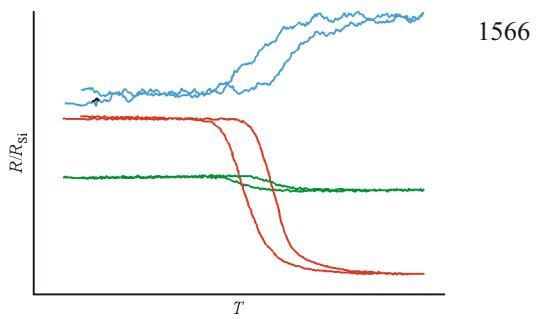
Васильев В.Ю.

Структура, состав и электрическое сопротивление тонких слоев металлического рутения, полученных импульсным осаждением из газовой фазы

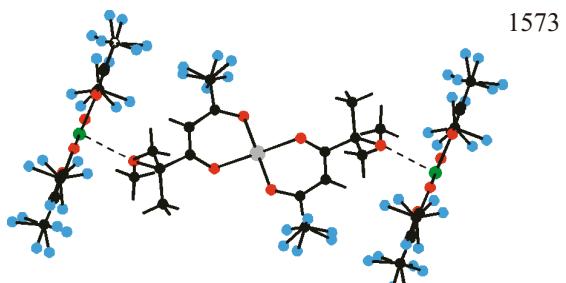
Ключевые слова: слои рутения, карбонил-диеновый предшественник, импульсное осаждение из газовой фазы, плотность, структура, состав и электрическое сопротивление слоев рутения



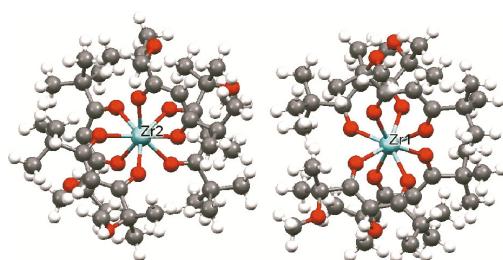
1560



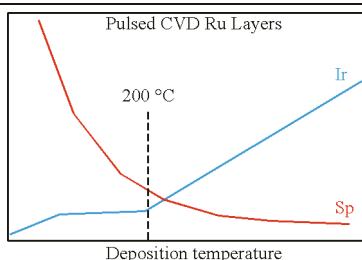
1566



1573



1581



1589

Мосягина С.А., Куратьева Н.В., Жерикова К.В.

1597

**Кристаллическая структура
трис-(дипивалоилметанато)(этилендиамин)-
иттрия(III)**

Ключевые слова: иттрий, дипивалоилметан, этилендиамин, синтез, рентгеноструктурный анализ

Малахов В.Б.

Стехиография в исследовании пространственной неоднородности химического состава и структуры тонких пленок и наноструктурированных систем

Ключевые слова: стехиографический метод дифференцирующего растворения, фазовый состав тонких пленок

Gao E.-J., Meng B., Su J.-Q., Peng T.-T., Qi Z.-Z., Jia B., Feng Y.-H., Zhu M.-C.

**Structure, DNA bonding and biological activity
of a novel Pb(II) complex
of 1,1-bis(5-(pyrazin-2-yl)-1,2,4-triazol-3-yl) methane**

Keywords □ Pb complex, DNA binding, biological activity

Юданова Е.С., Дуда Т.А., Терещенко О.Е., Семёнова О.И.

**Свойства монокристаллов
трийодидоплюмбата(II) метиламмония**

Ключевые слова: синтез, рост кристаллов, фотолюминесценция, фотоэлектронная спектроскопия, солнечный элемент

Смирнова Т.П., Яковкина Л.В., Борисов В.О., Лебедев М.С.

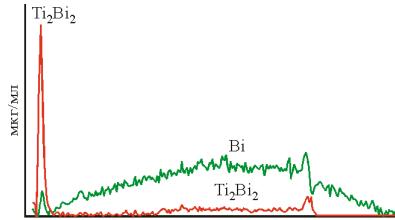
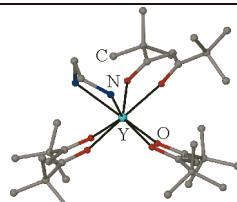
Фазовый состав наноразмерных оксидных пленочных структур на основе HfO₂, легированного лантаном и скандием

Ключевые слова: пленки, легирование, твердые растворы в наносистемах La—Hf—O и Sc—Hf—O, микроструктура

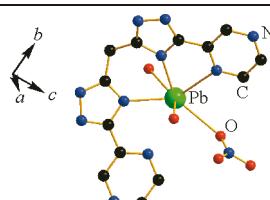
Старинский С.В., Суляева В.С., Шухов Ю.Г., Черков А.Г., Тимошенко Н.И., Булгаков А.В., Сафонов А.И.

**Сравнение структур золотых наночастиц,
синтезированных методами лазерного
и магнетронного напыления**

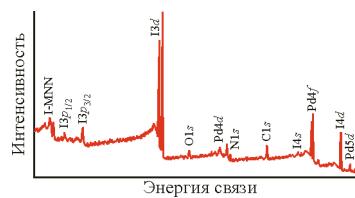
Ключевые слова: наночастицы золота, импульсная лазерная аблация, магнетронное напыление, отжиг тонких пленок



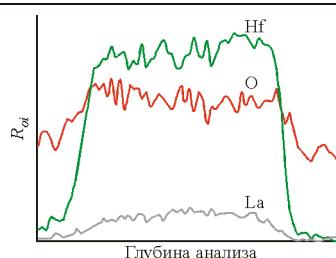
1602



1610



1617



1623



1631

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Басалаев Ю.М., Копытов А.В., Поплавной А.С., Рябчиков И.С.

1638

Первопринципное и феноменологическое моделирование фононных спектров кристаллов BeMN₂ (M = C, Si, Ge, Sn)



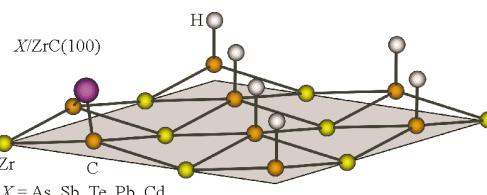
Ключевые слова: халькопирит, BeCN₂, BeSiN₂, BeGeN₂, BeSnN₂, модель Китинга, химическая связь, колебательный спектр

Малыхин С.Е., Бурылин М.Ю.

1648

Квантово-химическая оценка силы связывания атомов As, Cd, Pb, Sb, Se, Te поверхностью ZrC(100)

Ключевые слова: атомно-абсорбционная спектрометрия, генерация гидридов, сорбент-модификатор, карбид циркония, энергия адсорбции, теория функционала плотности, квантовая химия

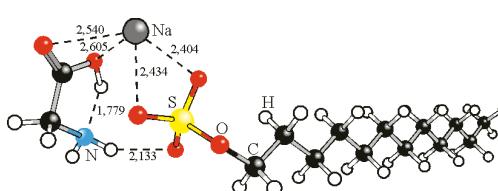


Гиричева Н.И., Курбатова М.С., Тюнина Е.Ю.,
Баделин В.Г.

1654

Квантово-химическое исследование молекулярного строения комплексов додецилсульфата натрия с глицином и цистеином

Ключевые слова: аминокислоты, глицин, цистеин, додецилсульфат натрия, комплексы, квантово-химические расчеты, метод DFT, молекулярная структура, геометрические характеристики



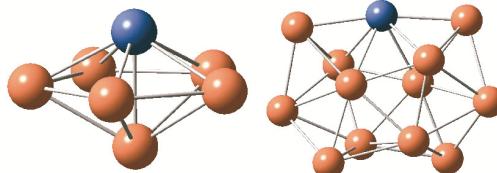
Liu N., Guo L., Wen C., Cao Z.

1661

Reaction mechanism of the preferential oxidation of the CO reaction in an H₂ stream over Cu—Ni bimetallic catalysts:

A computational study

Keywords: CO-PROX in H₂ stream, mechanism, Cu_nNi ($n = 3$ —12) clusters catalyzed, density functional theory



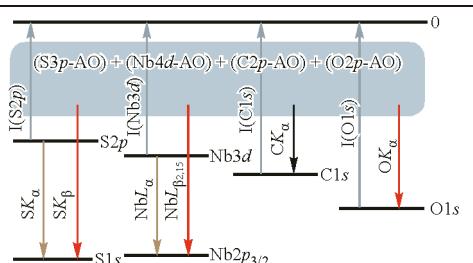
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Мазалов Л.Н., Федоренко А.Д., Парыгина Г.К.,
Гущин А.Л., Соколов М.Н., Далматова С.А.

1675

Рентгеноспектральное исследование электронного строения биядерных комплексов ниobia с дисульфидными мостиковыми лигандами (S₂)²⁻

Ключевые слова: рентгеновская эмиссионная спектроскопия, биядерные комплексы ниobia, дисульфидные мостиковые лиганды

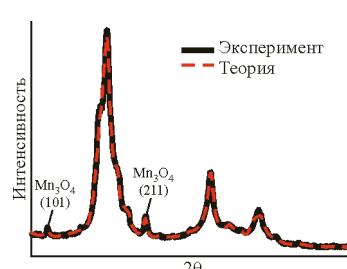


Панкин И.А., Кравцова А.Н., Положенцев О.Е.,
Будник А.П., Цатуриян А.А., Бугаев А.Л., Тригуб А.Л.,
Солдатов А.В.

1683

Рентгеноспектральная диагностика структуры квантовых точек на основе сульфидов и оксидов цинка и марганца

Ключевые слова: квантовые точки, сульфид цинка, дапирование, микроволновой синтез, локальная атомная и электронная структура, синхротронное излучение, спектроскопия XANES



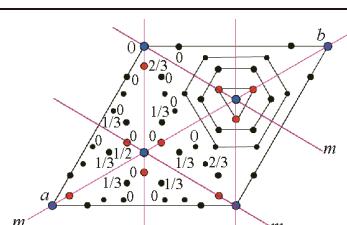
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

1691

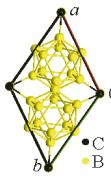
Кристаллографический анализ структурных типов апатита и турмалина: правила максимальной симметризации и когерентной сборки

Ключевые слова: кристаллографический анализ, катионные подрешетки, когерентная сборка, механизм кристаллизации, принцип максимальной симметризации



Коновалихин С.В., Пономарев В.И., Шилов Г.В.,
Ковалев И.Д.

1699



Моноклинные кристаллы карбida бора

Ключевые слова: карбид бора, рентгеноструктурный анализ, структурное моделирование

Liu Y., Zhou Y.-H., Liao X.-L., Man L.-M., Wang B.-W., Zhou J.-R., Ni C.-L.

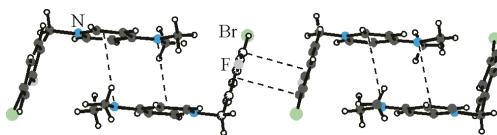
1706

Crystal structure and magnetic properties of a hybrid compound disubstituted benzyl dimethylaminopyridinium bis(maleonitriledithiolate)cuprate(II)

Keywords: substituted benzyl dimethylaminopyridinium, bis(maleonitriledithiolate) copper(II) anion, weak interactions, magnetic properties

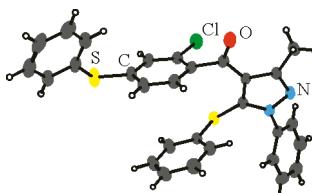
Sun G.-X., Zhai Z.-W., Sun Z.-H., Tan C.-X., Weng J.-Q., Liu X.-H.

1713



Crystal structure of (2-chloro-4-(phenylthio)phenyl)(3-methyl-1-phenyl-5-(phenylthio)-1*H*-pyrazol-4-yl)methanone

Keywords: aryl sulfide, synthesis, crystal structure



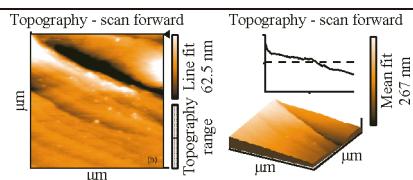
КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Supriya S., Fernández-Martinez F.

1718

Thermal, dielectric and surface analysis of NaDP doped glycine phosphite single crystals

Keywords: atomic force microscopy, characterization, surfaces, growth from solutions, single crystal growth, dielectric materials

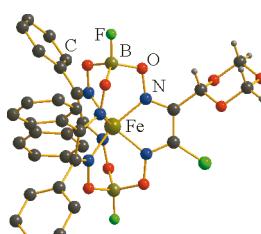


Вершинин М.А., Бурдуков А.Б., Первухина Н.В., Куратьева Н.В., Ельцов И.В.

1722

Строение продукта свободно-радикального замещения атома хлора в клатрохелате железа(II) на фрагмент 1,3,5-триоксана

Ключевые слова: клатрохелаты, железо(II), реакционная способность координированных лигандов, гомолитическое замещение

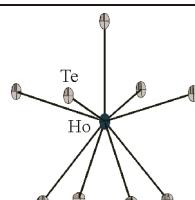


Муравьёва В.К., Помелова Т.А., Тарасенко М.С., Куратьева Н.В., Наумов Н.Г.

1726

Кристаллическая структура LnTe₃, где Ln=La, Ho

Ключевые слова: РЗЭ, халькогениды, теллуриды, кристаллическая структура

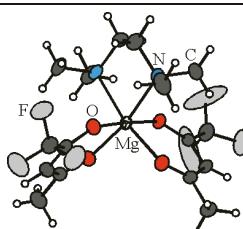


Викулова Е.С., Жерикова К.В., Пирязев Д.А., Корольков И.В., Морозова Н.Б., Игуменов И.К.

1731

Строение двух полиморфных модификаций бис-трифторацетилацетонато-(N,N,N',N'-тетраметилэтилендиамин)магния

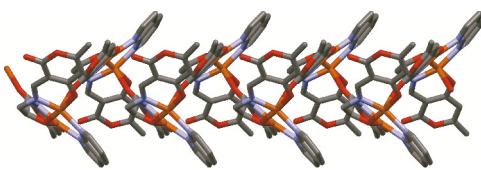
Ключевые слова: магний, β -дикетонаты, диамины, MOCVD прекурсор, рентгеноструктурный анализ



Попов Л.Д., Щербаков И.Н., Власенко В.Г.,
Левченков С.И., Луков В.В., Александров Г.Г.

1735

Кристаллическая структура и магнитные свойства нового полимерного биядерного хелата меди(II) с основанием Шиффа на основе 3-формилпирона и 1,3-диаминпропанола-2

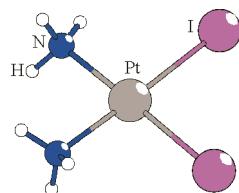


Ключевые слова: хелат меди(II), основание Шиффа, рентгеноструктурный анализ, магнитные свойства

Васильченко Д.Б., Задесенец А.В., Байдина И.А.,
Пирязев Д.А., Романенко Г.В.

1739

**Кристаллические структуры
цис-диодиамминплатины
и *транс*-диазидодиамминплатины**

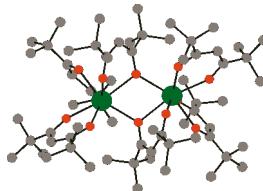


Ключевые слова: платина, иодид, азид, амиак

Стабников П.А., Мосягина С.А., Жерикова К.В.,
Корольков И.В., Первухина Н.В., Морозова Н.Б.

1743

**Структуры двух комплексов неодима(III)
и гольмия(III) с дипивалоилметаном**

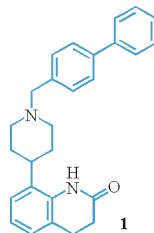


Ключевые слова: дипивалоилметаны Ln(III),
кристаллическая структура, термогравиметрия

Ullah N., Altaf M., Mansha M.

1747

**Crystal structures
of 1-aryl-4-(biaryl)methylene)piperazine
and piperidine, structurally related to adoprazine**



Keywords: 1-aryl-4-(biaryl)methylene)piperazine,
1-aryl-4-(biaryl)methylene)-piperidine, 5-HT_{1A} receptor,
D₂ receptor, schizophrenia

Указатель статей. Том 58..... 1752
Авторский указатель. Том 58..... 1763

Содержание следующего номера — в конце журнала