

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 57

Май-июнь

№ 4, 2016

СОДЕРЖАНИЕ

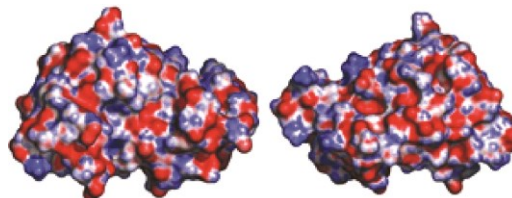
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Митин А.В.

675

**Атомная структура
верхних молекулярных орбиталей
малого тетра-гема цитохрома с 1M1P**

Ключевые слова: неэмпирический расчет,
приближение ЛКАО, метод Хартри–Фока,
молекулярные орбитали, анализ заселенности

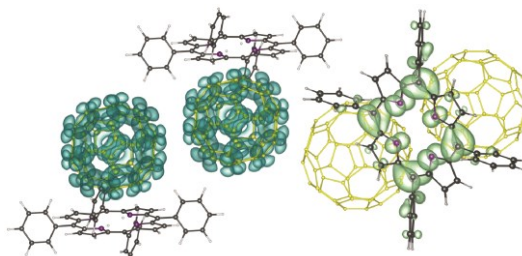


Краснов П.О., Кузубов А.А., Холтобина А.С.,
Ковалёва Е.А., Кузубова М.В.

681

**Оптические переходы с переносом заряда
в супрамолекулярных соединениях
фуллеренов и порфиринов
в кристаллической форме**

Ключевые слова: фотогальванические элементы,
квантово-химические расчеты,
теория функционала плотности, DFPT,
дисперсионное взаимодействие

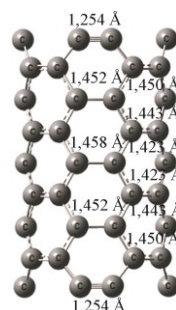


Бутырская Е.В., Запрягаев С.А., Нечаева Л.С.,
Карпушин А.А., Измайлова Е.А.

688

**Влияние метода и базиса расчета
на структуру и электрические свойства
углеродных нанотрубок (4,4)
различной длины с открытыми концами**

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование,
углеродные нанотрубки, размерные эффекты,
структура углеродных нанотрубок,
термодинамические характеристики,
электрические свойства



ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Кавун В.Я., Удовенко А.А., Макаренко Н.В.,
Земнухова Л.А., Подгорбунский А.Б.

697

Ионная подвижность и проводимость в соединении $\text{Li}(\text{NH}_3\text{CH}_2\text{COO})(\text{NO}_3)$

Ключевые слова: нитратоглицинат лития, кристаллическая структура, ЯМР (^7Li , ^1H) спектроскопия, ионная подвижность, ионная проводимость

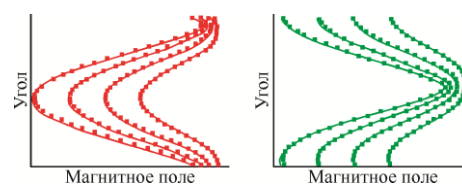


Надолинный В.А., Рядун А.А., Шлегель В.Н.,
Иванникова Н.В.

704

ЭПР ионов меди в кристаллах Pb_2MoO_5

Ключевые слова: ЭПР спектроскопия, кристаллы Pb_2MoO_5 , примесные ионы меди

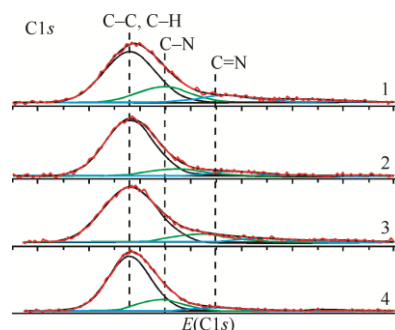


Ильинчик Е.А., Меренков И.С.

709

Рентгеноэлектронное исследование влияния состава исходной газовой фазы на изменения электронного строения пленок гексагонального нитрида бора, полученных методом PECVD из боразина

Ключевые слова: гексагональный нитрид бора, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, электронное строение, тонкие пленки, PECVD, боразин, наностенки

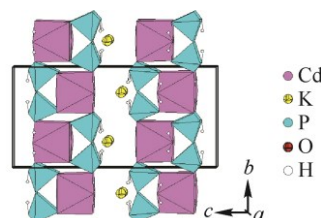


Kouass S., Selmi A., Chebbi H., Guesmi A.

717

Characterization and crystal structure of a new layered cadmium diphosphate: $\text{KCdHP}_2\text{O}_7 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

Keywords: synthesis, crystal structure, cadmium diphosphate, Bond-Valence-Sum, FT-IR, Raman



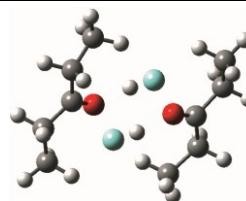
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В.

722

Строение комплексов фтористого водорода с диэтилкетон в растворе $\text{HF}-\text{Et}_2\text{CO}$

Ключевые слова: двойная жидкая система, ИК спектроскопия, водородная связь, комплексы фтористого водорода, HF, диэтилкетон

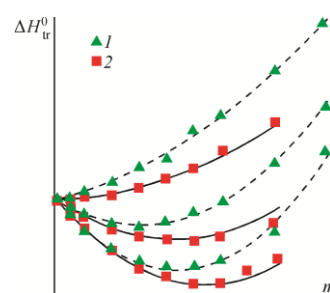


Королёв В.П., Антонова О.А., Серебрякова А.Л.

729

Взаимодействие функциональной группы и углеводородных радикалов аминокислот L-аланина и глицина в водных растворах NaCl, KCl и мочевины при различных температурах

Ключевые слова: калориметрия, теплота растворения, коэффициенты парного и тройного взаимодействия, вклады групп, водные растворы, L-α-аланин, хлорид натрия, хлорид калия, мочевины

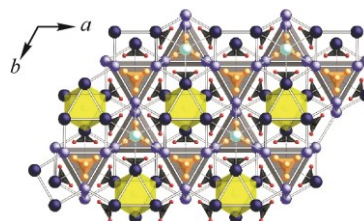


Бакакин В.В., Серёткин Ю.В.

736

**Кристаллогенетический анализ
фторидоборатов и аналогов
с катионным M_7 -каркасом**

Ключевые слова: катионные подрешетки,
катионные каркасы, темплаты, ортобораты,
фторидобораты

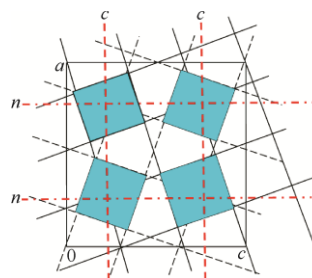


Борисов С.В., Магарилл С.А., Первухина Н.В.

742

**Кристаллографический анализ сульфидов,
родственных висмутиниту Bi_2S_3**

Ключевые слова: кристаллографический анализ,
сульфиды, псевдотетрагональный катионный каркас,
псевдогексагональный анионный каркас,
семейство висмутинит Bi_2S_3 – аикинит $CuPbBiS_3$,
катионные и анионные подрешетки,
связь симметрия–состав

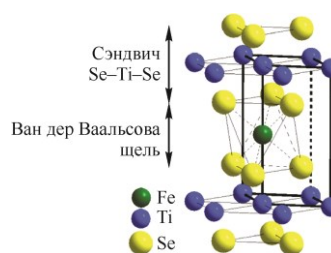


Шкварина Е.Г., Титов А.Н., Титова С.Г.,
Федорова О.М.

749

**Структурные особенности Fe_xTiSe_2
– материалов с ретроградной растворимостью
в твердом состоянии**

Ключевые слова: полнопрофильный рентгенофазовый
анализ, ЯГРС, ретроградная растворимость в твердом
состоянии, интеркалированный железом диселенид титана

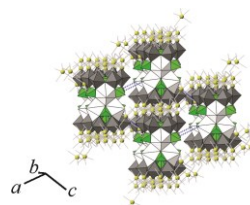


AlDamen M.A., Atta S.B., Haddad S.F.

756

**Inorganic architecture based on
 $\{[Ca(H_2O)]_6[P_4W_6O_{34}]_2\}^{12-}$ building block:
Counteraction effect on the lattice symmetry**

Keywords: sandwich polyoxometalates, calcium,
crystal structure, cation effect, 3D inorganic lattice

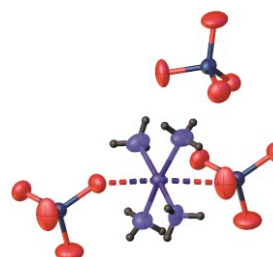


Громилов С.А., Храненко С.П., Пирязев Д.А.,
Куратьева Н.В.

764

**Рентгеноструктурное исследование
моноклинной модификации
 $[Cu(NH_3)_4](ReO_4)_2$ в интервале 100–410 К**

Ключевые слова: медь, перренат, термолиз,
рентгенофазовый анализ, рентгеноструктурный анализ,
кристаллохимия

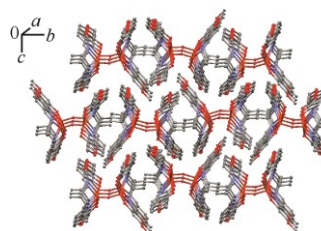


Karahan A., Kurtaran R., Yahsi Y., Gungor E., Kara H.

770

**A dinuclear oxygen-bridged Schiff base
iron(III) complex derived
from N,N' -bis(4-methoxy-2-hydroxybenzylidene)-
2,2,-dimethylpropane-1,3-diamine**

Keywords: Schiff-base ligand, iron(III) complex,
X-ray crystal structure analysis, oxo-bridged structure



Kassou S., Kaiba A., Guionneau P., Belaraj A.

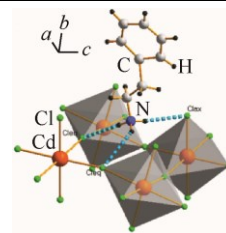
776

Organic-inorganic hybrid perovskite

$(\text{C}_6\text{H}_5(\text{CH}_2)_2\text{NH}_3)_2\text{CdCl}_4$

Synthesis, structural and thermal properties

Keywords: layered perovskite, organic-inorganic hybrid, structural phase transition, single crystal, differential scanning calorimetry (DSC)

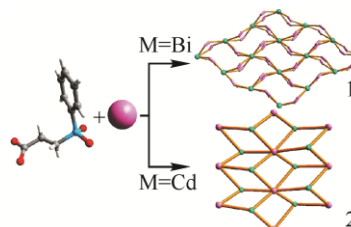


Liu B., Zhang Z.-H., Xu L., Jiao H.

782

Structures, properties and topologies of two layered compounds based on 2-carboxethyl(phenyl)phosphinic acid

Keywords: crystal structure, fluorescence, 2-carboxyethyl(phenyl)phosphinic acid, TGA, topology

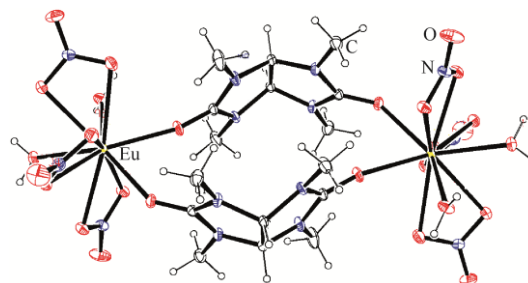


Нетреба Е.Е., Сарнит Е.А., Шабанов С.В., Великожон А.А., Сомов Н.В.

792

Кристаллическая структура нового биядерного комплекса бис(2,4,6,8-тетраметил-2,4,6,8-тетраазабицикло(3.3.0)октан-3,7-дион-О,О')-тетрааква-гексакис(нитрато-О,О')-диевропия(III)

Ключевые слова: синтез, бициклические бисмочевины, мебикар, европий(III), структура, десятивершинник, ИК, PCA

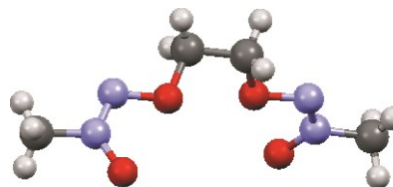


Алиев З.Г., Зюзин И.Н., Алдошин С.М.

798

Молекулярная и кристаллическая структура 1,2-бис(метил-ONN-азокси-окси)этана

Ключевые слова: алкокси-NNO-азоксисоединения, алкил-ONN-азокси-оксисоединения, 1,2-бис(метил-ONN-азокси-окси)этан, (2Z,8Z)-4,7-диокса-2,3,8,9-тетраазадека-2,8-диен-2,9-диоксид, кристаллическая структура, *gauche*-конформация

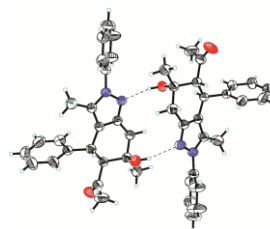


Магеррамов А.М., Исмиев А.И., Аллахвердиев М.А., Малеев А.В., Потехин К.А.

802

Кристаллическая структура продуктов реакции фенилгидразина с диацетилзамещенным кетоном циклогексанового ряда

Ключевые слова: конформация циклов, β-кетолы, N-фенилпиразолы



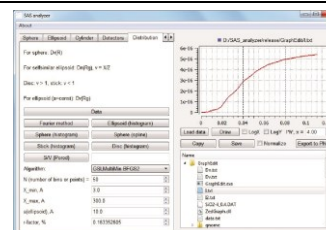
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Полуянов С.А., Тузиков Ф.В., Ларичев Ю.В., Цыбуля С.В.

809

Программное обеспечение SAS_ANALYZER для обработки данных малоуглового рентгеновского рассеяния

Ключевые слова: малоугловое рентгеновское рассеяние, обработка данных, минимизация, наноразмерные системы

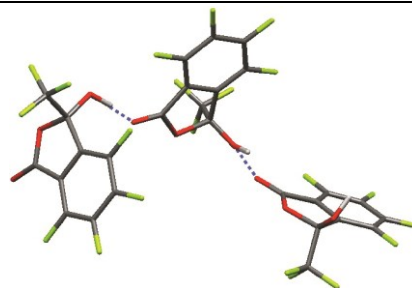


Рыбалова Т.В., Гатилов Ю.В., Зонов Я.В.,
Карпов В.М.

815

Супрамолекулярная архитектура кристаллов перфторированных 3-алкилфталидов

Ключевые слова: 3-гидрокси-перфтор-3-алкилфталиды, рентгеноструктурный анализ, межмолекулярные взаимодействия, квантово-химические расчеты, супрамолекулярная архитектура, полиморфы

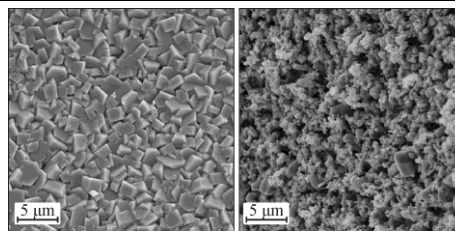


Jodaian V., Langeroodi N.S., Najafi E.

822

Structure and photoluminescence properties of TiO₂ nanoparticles synthesized from a novel luminescent nano-titanium complex

Keywords: titanium complex, photoluminescence, size effect, TiO₂, Raman vibration



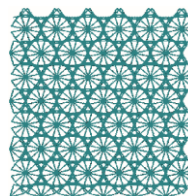
ОБЗОРЫ

Маленков Г.Г.

831

Структуры элементов IV группы и твердых фаз воды

Ключевые слова: полиморфизм, лед, углерод, кремний, германий, олово, кристаллические структуры, аморфные тела, клатратные соединения



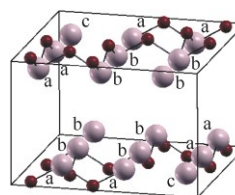
КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Банников В.В., Шеин И.Р.

843

Электронное строение нестехиометрических слоистых фаз LaZnAsO_{1-δ} со структурой ZrCuSiAs: FLAPW-GGA моделирование

Ключевые слова: 1111 фазы, нестехиометрия, *ab initio* моделирование

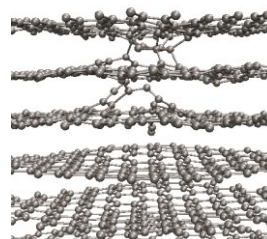


Шеин И.Р., Кузнецов М.В., Еняшин А.Н.

846

Молекулярнодинамическое моделирование образования дефектов в тонких пленках графита методом функционала электронной плотности в приближении сильной связи

Ключевые слова: графен, графит, точечные дефекты, метод функционала электронной плотности, молекулярная динамика

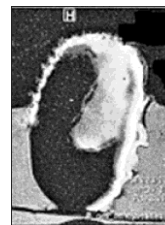


Виноградова И.С., Фалалеев О.В.

851

Свободная вода в семенах фасоли: процесс набухания по данным магнитно-резонансной микротомографии

Ключевые слова: ¹H магнитно-резонансная микротомография, семена фасоли, набухание семян, распределение воды

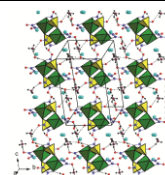


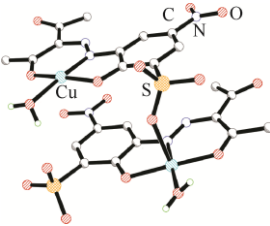
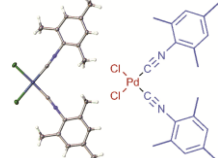
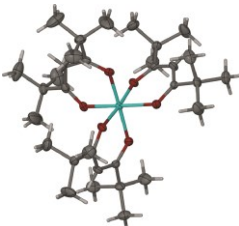
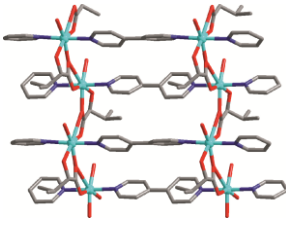
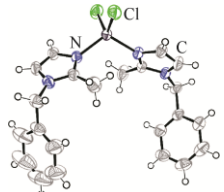
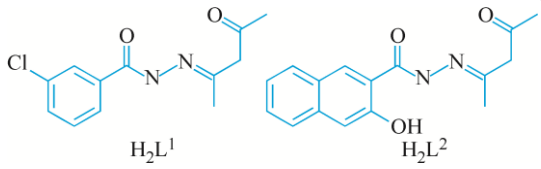
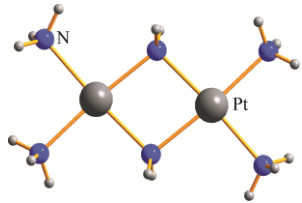
Ouerfelli N., Chebbi H., Faouzi Zid M.

854

Crystal structure of a novel layered iron arsenate-oxalate (NH₄)₃K₃[Fe₂(HAsO₄)₂(C₂O₄)₄] · 2H₂O

Keywords: synthesis, iron arsenate-oxalate, single crystal X-ray diffraction, crystal structure



Магеррамов А.М., Алиева Р.А., Назарова Г.Г., Бахманова Ф.Н., Аскеров Р.К., Чырагов Ф.М. Кристаллическая структура комплекса меди(II) с 3-(2-гидрокси-3-сульфо-5-нитрофенилазо)- пентадионом 2,4 Ключевые слова: синтез, комплекс, медь, монокристалл, β-дикетоны		858
Кинжалов М.А., Золотарев А.А., Боярский В.П. Кристаллическая структура комплекса <i>цис</i>-[PdCl₂(CNMes)₂] Ключевые слова: синтез, комплексы палладия, изоцианиды		861
Сысоев С.В., Наумов Д.Ю., Куратьева Н.В., Жерикова К.В., Громилов С.А., Морозова Н.Б., Кузин Т.М., Гельфонд Н.В. Кристаллохимическое исследование <i>трис</i>-дипивалоилметаната рутения(III) Ключевые слова: рутений, дипивалоилметан, рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия		865
Завахина М.С., Самсоненко Д.Г., Федин В.П. Кристаллическая структура двух гомохиральных металл-органических полимеров на основе <i>S</i>-3,3-диметилмолочной кислоты Ключевые слова: кристаллическая структура, координационные полимеры, хиральные комплексы, супрамолекулярные взаимодействия		868
Bouchouit M., Bouraiou A., Bouacida S., Belfaitah A., Merazig H. Structural characterization of a new cobalt(II) complex of 1-benzyl-5-methyl-1H-imidazole Keywords: X-ray crystallographic analysis, imidazole, cobalt complex, crystal structure		873
Cui Y.-M., Yang D., Guo W., Wang Q., Zhang P. Substituent group effects on the self-assembly of oxovanadium(V) complexes with hydrazone ligands bearing benzoic acid (1-methyl-3-oxobutylidene)hydrazone backbones Keywords: hydrazone ligands, oxovanadium(V) complex, self-assembly, substituent effects, crystal structure		877
Ye Q.-S., Xie M.-J., Li X.-N., Liu W.-P., Yu J., Chang Q.-W., Jiang J., Yan C.-X., Li J. Crystal structure of di-μ-amido- bis[diammineplatinum(II)] nitrate Keywords: synthesis, platinum, amide, ammine, crystal structure		882

Содержание следующего номера — в конце журнала