

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

ТОМ 58

Июнь-июль

№ 5, 2017

**60 ЛЕТ ИНСТИТУТУ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ
ИМ. А.В. НИКОЛАЕВА СО РАН**

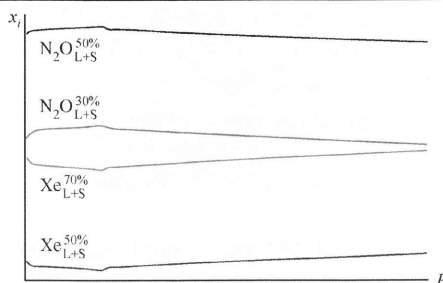
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Божко Ю.Ю., Субботин О.С., Гец К.В.,
Жданов Р.К., Белослудов В.Р.

**Моделирование термобарических условий
образования, состава и структуры
для смешанных гидратов,
содержащих ксенон и закись азота**

Ключевые слова: решеточная динамика,
термодинамические свойства, фазовые равновесия,
двойные клатратные гидраты, закись азота, ксенон

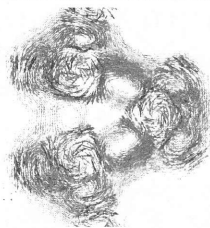


891

Рыжиков М.Р., Козлова С.Г.

**Индукцируемые токи и химические сдвиги
ЯМР ¹H в кластерах переходных металлов
(μ-H)₂Fe₃(μ₃-Q)(CO)₉ (Q=S, Se, Te)**

Ключевые слова: кластерные трехъядерные соединения
железа, индуцируемые токи, химические сдвиги ЯМР ¹H,
теория функционала плотности

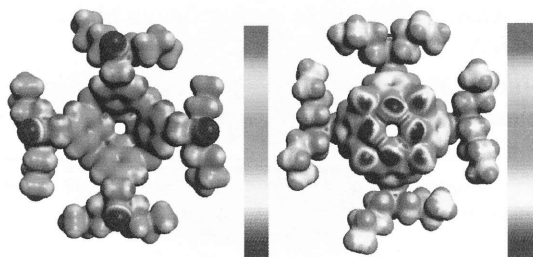


899

Мазалов Л.Н., Лаврухина С.А., Федоренко А.Д.,
Семушкина Г.И., Калинин А.В.

**Электронное строение функционализированных
тиа- и каликс[4]аренов**

Ключевые слова: рентгеновская эмиссионная
спектроскопия, рентгеновская фотоэлектронная
спектроскопия, квантово-химические расчеты,
метод DFT, каликс[4]аренфосфиноксиды,
тиакаликс[4]аренфосфиноксиды, экстрагент



904

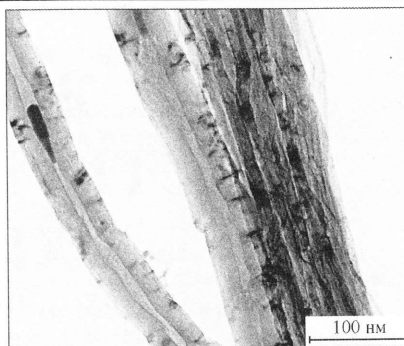
ИЗДАТЕЛЬСТВО СО РАН
НОВОСИБИРСК
2017

УЧРЕЖДЕНИЕ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
БИБЛИОТЕКА
ПО ЕСТЕСТВЕННЫМ НАУКАМ РАН
Адрес: 119991, г. Москва, ГСП-1,
ул. Знаменка, 11/11

Федосеева Ю.В., Дуда Т.А., Куреня А.Г.,
Гусельников А.В., Журавлёв К.С., Вилков О.Ю.,
Булушева Л.Г., Окотруб А.В.

Рентгеноспектральное исследование наночастиц CdS, сформированных на поверхности массивов углеродных нанотрубок методом Ленгмюра–Блоджетт

Ключевые слова: наночастицы CdS, углеродные нанотрубки, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, рентгеновская спектроскопия поглощения, электронное строение

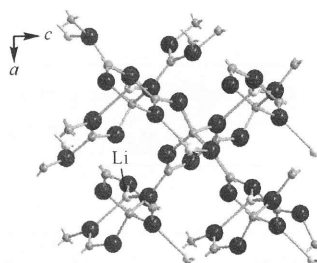


915

Рядун А.А., Надолинный В.А., Антонова О.В.,
Рахманова М.И.

Примесные и радиационные дефекты в кристаллах LiV_3O_5 . Природа центров в кристаллах LiV_3O_5 , ответственных за появление окраски в процессе длительной эксплуатации оптических элементов

Ключевые слова: люминесценция, ЭПР спектроскопия, кристаллы трибората лития, катионные вакансии

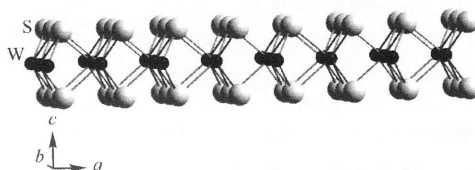


924

Романенко А.И., Яковлева Г.Е., Фёдоров В.Е.,
Леднева А.Ю., Кузнецов В.А., Сотников А.В.,
Цыганкова А.Р., Кучумов Б.М.

Электронные транспортные свойства термоэлектриков на основе слоистых дихалькогенидов переходных металлов с замещениями

Ключевые слова: слоистые халькогениды переходных металлов, электропроводность, термоэле

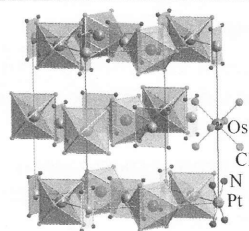


932

Асанова Т.И., Асанов И.П., Ким М.-Г., Корнев С.В.

***In situ* рентгеноспектральное исследование термического разложения двойной комплексной соли $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4][\text{OsCl}_6]$**

Ключевые слова: наносплав PtOs, биметаллические наночастицы, $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4][\text{OsCl}_6]$, механизм термического разложения, XAFS, РФЭС, размерный эффект

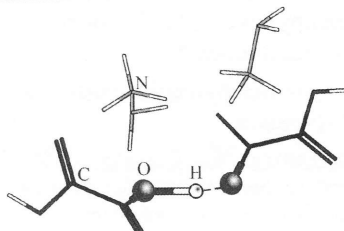


940

Галкина Ю.А., Крючкова Н.А., Вершинин М.А.,
Колесов Б.А.

Особенности проявления сильных водородных связей $\text{O} \cdots \text{H} \cdots \text{O}$ и $\text{N} \cdots \text{H} \cdots \text{O}$ в колебательных спектрах

Ключевые слова: спектры КР, сильные водородные связи, квантово-химический расчет, изотопозамещение



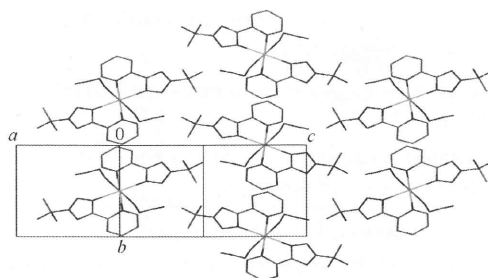
950

Шакирова О.Г., Лавренова Л.Г., Куратьева Н.В.,
Богомяков А.С., Шелудякова Л.А., Мосалкова А.П.,
Григорьев Ю.В.

958

**Исследование комплексов дицианамидов
и роданида железа(II)
с 2-(2-трет-бутилтетразол-5-ил)пиридином**

Ключевые слова: синтез, координационные соединения,
железо(II), 2-(2-трет-бутилтетразол-5-ил)пиридин,
структура, магнитные свойства



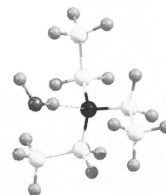
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Габуда С.П., Козлова С.Г., Компаньков Н.Б.,
Редькина К.С.

965

**Распределение молекул на границе раздела фаз
в водном растворе триэтиламина. ЯМР ¹H**

Ключевые слова: водный раствор триэтиламина,
фазовый переход, ЯМР ¹H



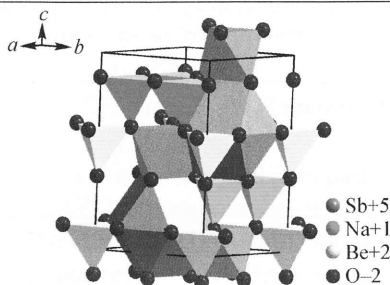
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Подберезская Н.В., Комаров В.Ю., Каменева М.Ю.,
Козеева Л.П., Лавров А.Н.

969

**Исследование структурной реализации
нестехиометрии по кислороду
в монокристаллах RВaСо4О7+x**

Ключевые слова: кобальтаты, монокристаллы,
нестехиометрия по кислороду, структурный анализ,
обработка рентгенодифракционных данных,
структурные модели

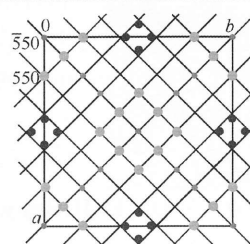


Борисов С.В., Первухина Н.В., Магарилл С.А.

979

**Кристаллографический анализ атомных
структур в исследовании механизмов
кристаллизации**

Ключевые слова: кристаллографический анализ,
катионные подрешетки, механико-волновая концепция
кристаллического состояния, когерентная сборка,
механизм кристаллизации

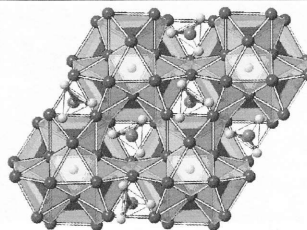


Бакакин В.В.

986

**О двойственной функции анионов
в кристаллогенезисе соединений –
структуро-направляющей и стабилизирующей**

Ключевые слова: катионные каркасы, темплаты,
ортобораты, фторидобораты бария,
фторидобораты свинца, антицеолиты

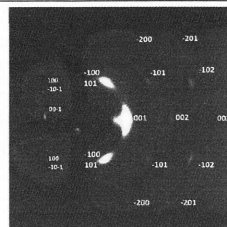


Сухих А.С., Басова Т.В., Громиллов С.А.

992

**Использование данных 2D дифрактометрии
ориентированных образцов при выборе
элементарной ячейки**

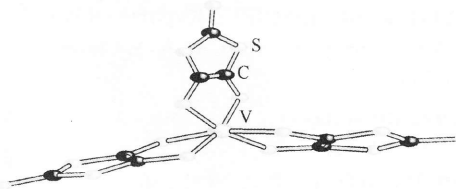
Ключевые слова: рентгеновская дифрактометрия
поликристаллов, ориентированные образцы,
тонкие пленки, индиферирование, фталоцианины палладия



Фоменко Я.С., Гушин А.Л., Надолинный В.А.,
Абрамов П.А., Соколов М.Н.

**Кристаллическая структура и спектры ЭПР
(Vu_4N)₂[V(dmit)₃]**

Ключевые слова: ванадий, дитиолатные комплексы,
кристаллическая структура, спектры ЭПР

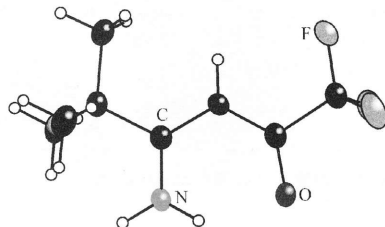


1003

Жаркова Г.И., Байдина И.А., Смоленцев А.И.,
Стабников П.А., Морозова Н.Б.

**Структура и термические свойства нового
летучего бис(1,1,1-трифтор-5,5-диметил-3-гексен-
4-имино-2-оната) платины(II)**

Ключевые слова: β-иминокетонаты Pt(II), структура,
летучесть, прекурсор для МОСVD

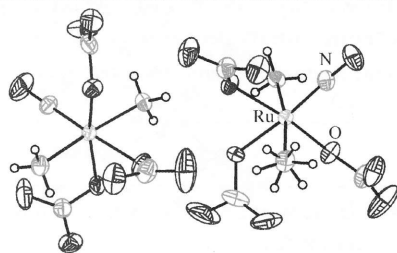


1009

Воробьев В.А., Емельянов В.А., Байдина И.А.,
Пиразев Д.А.

**Первый пример кристаллической структуры
тринитратокомплекса нитрозорутения(II)**

Ключевые слова: рутений, нитрозокомплексы,
нитратокомплексы, амминокомплексы, отработанное
ядерное топливо, рентгеноструктурный анализ,
расчеты DFT

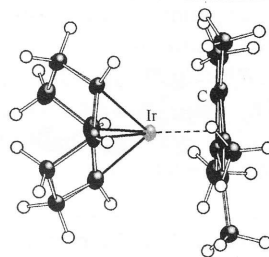


1014

Бонегардт Д.В., Ильин И.Ю., Сухих Т.С.,
Морозова Н.Б.

**Кристаллическая структура и свойства
(1,5-циклооктадиен)(η⁵-пентаметил-
циклопентадиенил) иридия(I) [Ir(cod)Cp*]**

Ключевые слова: иридий(I), 1,5-циклооктадиен,
пентаметилциклопентадиен, рентгеноструктурный анализ,
термогравиметрия

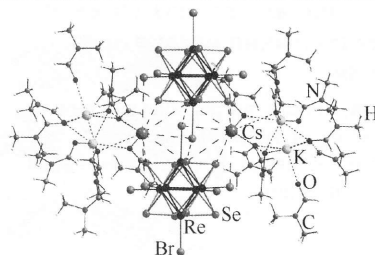


1022

Иванов А.А., Куратьева Н.В., Шестопалов М.А.,
Миронов Ю.В.

**Кристаллическая структура
кластерного комплекса
[CsK₂(μ₃-DMF)₂(μ-DMF)₃(DMF)₄]{[Re₆(μ₃-Se)₈]Br₆}**

Ключевые слова: синтез, рений,
кристаллическая структура,
октаэдрические халькогенидные кластеры

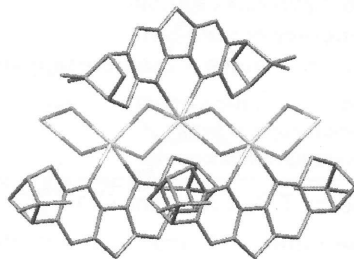


1027

Кокина Т.Е., Глинская Л.А., Васильев Е.С.,
Рахманова М.И., Макарова С.В., Пиразев Д.А.,
Корольков И.В., Ткачев А.В., Ларионов С.В.

**Структура и фотолюминесценция комплексов
Zn(II) и Cd(II) с хиральным бис-пиридином,
содержащим фрагменты природного (-)-α-пинена**

Ключевые слова: терпены, бис-пиридин, комплексы
Zn(II) и Cd(II), структура, фотолюминесценция

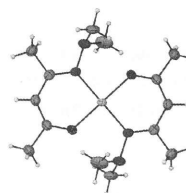


1032

Куратьева Н.В., Викулова Е.С., Шушанян А.Д.,
Николаева Н.С., Доровских С.И., Михалёва Н.С.,
Морозова Н.Б.

**Строение комплексов Cu(II) и Pd(II)
с 2-(2,2-диметилгидразино)пентаноном-4)**

Ключевые слова: палладий(II), медь(II), β-кетоиминат,
рентгеноструктурный анализ

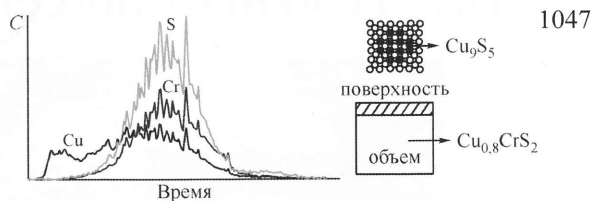


1042

Васильева И.Г.

**Химический аспект
структурного разупорядочения CuCrS_2
и твердых растворов $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$**

Ключевые слова: четверной сульфид медь-хром-ванадия, химическая неоднородность, разупорядочение, фазовые переходы



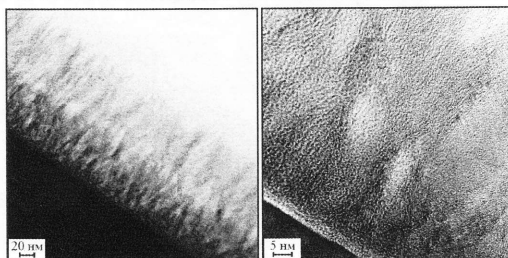
1047

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Меренков И.С., Касаткин И.А., Максимовский Е.А.,
Алфёрова Н.И., Косинова М.Л.

**Вертикально ориентированные слои
гексагонального нитрида бора:
PECVD синтез из триэтиламинборана
и структурные особенности**

Ключевые слова: гексагональный нитрид бора, наностенки, PECVD, триэтиламинборан

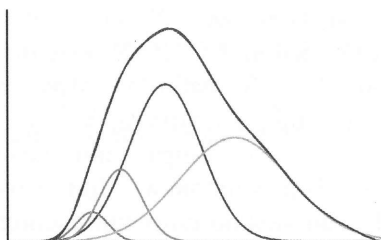


1056

Подлипская Т.Ю., Булавченко А.И.

**Исследование структуры водных полостей
смешанных мицелл методом ИК-Фурье
спектроскопии при экстракции анионных
комплексов золота и платины**

Ключевые слова: смешанные обратные мицеллы, Triton N-42, AOT, экстракция, гидратная (связанная) вода, объемная (свободная) вода, ИК-Фурье спектроскопия

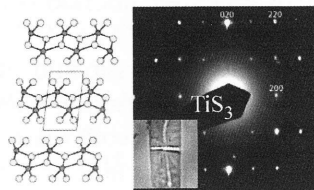


1064

Полтарак П.А., Полтарак А.А., Артемкина С.Б.,
Подлипская Т.Ю., Фёдоров В.Е.

**Получение и свойства наночастиц
трисульфида титана**

Ключевые слова: слоистые соединения, трисульфид титана, коллоидная дисперсия, ультразвуковое диспергирование, наночастицы трисульфида титана, фотон-корреляционная спектроскопия, гидродинамический диаметр, просвечивающая электронная микроскопия

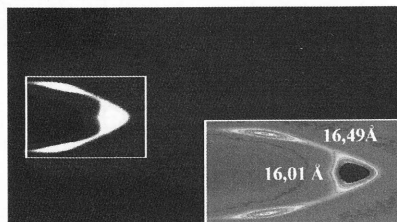


1072

Сухих А.С., Поляков М.С., Клямер Д.Д.,
Громилов С.А., Басова Т.В.

**Исследование структурных особенностей
и сенсорных свойств пленок
2,9,16,23-тетра-*трет*-бутилфталоцианина цинка**

Ключевые слова: фталоцианины металлов, молекулярные пленки, РФА, химические сенсоры

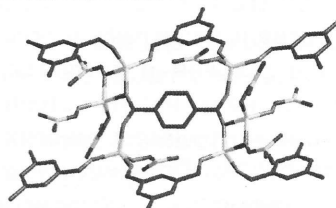


1078

Колтунова Т.К., Самсоненко Д.Г., Дыбцев Д.Н.,
Федин В.П.

**Литий-карбоксилатные координационные
полимеры на основе тримезиновой кислоты**

Ключевые слова: координационные полимеры, каркасные структуры, комплексы лития(I), рентгеноструктурный анализ



1087

Содержание следующего номера — в конце журнала