

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 56

Ноябрь-декабрь

№ 6, 2015

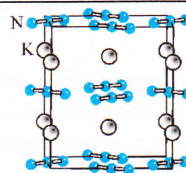
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Кравченко Н.Г., Поплавной А.С.

**Электронная структура и химическая связь
в кристаллах KN_3 и KSCN**

Ключевые слова: азид калия, тиоцианат калия,
зонные спектры, функционал плотности

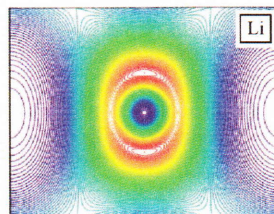


1081

Басалаев Ю.М., Стародубцева М.В.

**Особенности распределения заряда валентных
электронов в кристаллах $\text{LiB}^{\text{IV}}\text{X}^{\text{V}}$**

Ключевые слова: функционал плотности,
метод подрешеток, сфалерит,
полухейслеровское соединение, разностная плотность,
деформационная плотность

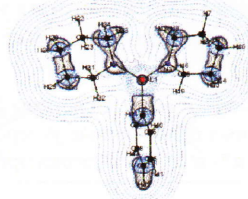


1088

Алексеев Н.В.

**Квантово-химическое исследование связей
алюминий – азот в соединениях
трехкоординированного алюминия**

Ключевые слова: квантовая химия,
метод NBO, метод AIM

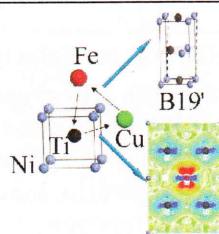


1095

Yin J.Y., Li G.F., Si Y.L., Ying G., Peng P.

**Micromechanism of Cu and Fe alloying process
on the martensitic phase transformation
of NiTi-based alloys: First-principles calculation**

Keywords: NiTi alloy, martensitic phase transformation,
micromechanism, first principles calculation

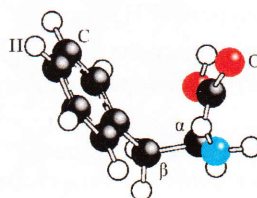


1103

Трунаева Е.С., Хохлова О.Н., Хохлов В.Ю.

**Квантово-химическое моделирование
гидратации и ассоциации фенилаланина
в растворе**

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование,
гидратация, фенилаланин



1111

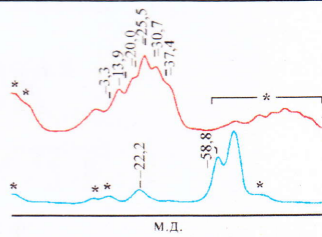
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Слободюк А.Б., Диденко Н.А., Годнева М.М.

1116

Исследование строения гидратированных фторофосфатоцирконатов (гафнатов) методом ЯМР

Ключевые слова: фторофосфатоцирконаты, фторофосфатогафнаты, ЯМР, диффузионная подвижность, кристаллическое строение

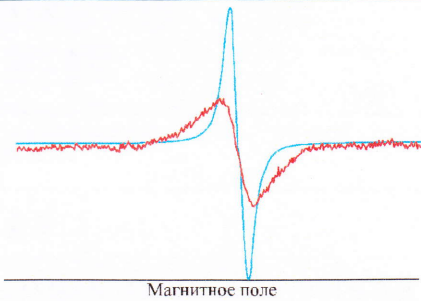


Шаяпов В.Р., Надолинный В.А., Кожемяченко С.И., Румянцев Ю.М., Файнер Н.И.

1123

Структурные дефекты в пленках SiC_xN_yH_z, полученных плазмохимическим осаждением из паров гексаметилдисилазана

Ключевые слова: PECVD, пленки, электронный парамагнитный резонанс, гексаметилдисилазан, оборванные связи, кластеры углерода

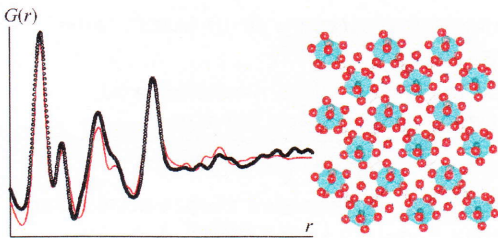


Анчарова У.В., Пахарукова В.П., Матвиенко А.А., Цыбуля С.В.

1129

Структурные исследования наноматериалов методом радиального распределения электронной плотности с использованием просвечивающей дифрактометрии на синхротронном излучении

Ключевые слова: синхротронное излучение, рентгеновская дифракция, радиальное распределение электронной плотности, нанокристаллические материалы, локальная структура

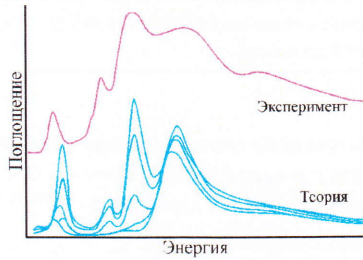


Шматко В.А., Яловега Г.Э.

1137

Особенности химической связи во фторированных и гидрированных углеродных нанотрубках: анализ поляризованных спектров NEXAFS

Ключевые слова: поляризованные спектры NEXAFS, функционализированные одностенные углеродные трубки, хиральность, π^* - и σ^* - симметрия орбиталей



СТРУКТУРА ЖДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Хахалин А.В., Градобоева О.Н., Хамидуллина Р.Ф.

1144

Быстрая методика анализа структурных свойств водных кластеров с примесями с количеством присутствующих в них молекул воды более 12

Ключевые слова: численные методы, водные кластеры, конфигурации, кодирование структуры

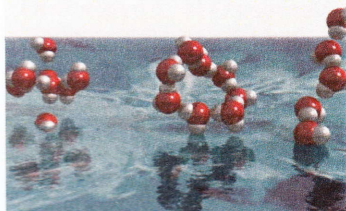


Коротких О.П., Кочурова Н.Н., Козлова Т.Н.

1149

Электропроводность водного раствора децилсульфата натрия и характер гидратации его аниона

Ключевые слова: децилсульфат натрия, водные растворы, электропроводность, гидратация, критическая концентрация мицеллообразования

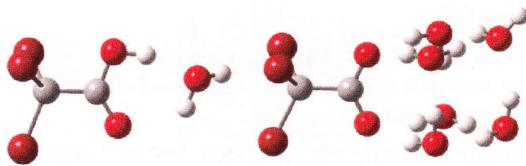


Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В.

1156

Гидратация молекул CBr_3COOH и анионов $\text{CBr}_3\text{CO}_2^-$ в водных растворах

Ключевые слова: трибромуксусная кислота, трибромацетат натрия, водные растворы, колебательный спектр, расчет методом ТФП, строение гидратов молекул CBr_3COOH , строение гидратов анионов $\text{CBr}_3\text{CO}_2^-$



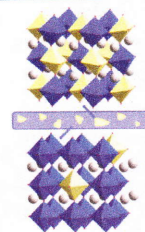
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Артимонова Е.В., Савинская О.А., Беленькая И.В., Немудрый А.П.

1165

Исследование структурных особенностей нестехиометрических $\text{SrCo}_{0,8-x}\text{Fe}_{0,2}\text{W}_x\text{O}_{3-\delta}$ ($0 < x < 0,1$) перовскитов

Ключевые слова: нестехиометрические перовскиты, наноструктурирование, керамические мембраны

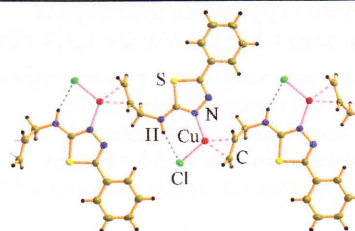


Слывка Ю.И.

1171

Особенности строения π -комплексов CuCl и Cu_2SiF_6 с 2-аллиламино-5-фенил-1,3,4-тиадиазолом состава $[\text{CuCl}(\text{C}_{11}\text{H}_{11}\text{N}_3\text{S})]$ и $[\text{Cu}(\text{C}_{11}\text{H}_{11}\text{N}_3\text{S})(\text{H}_2\text{O})(\text{CH}_3\text{CN})]_2\text{SiF}_6 \cdot 2\text{CH}_3\text{CN}$

Ключевые слова: медь(II), π -комплекс, 1,3,4-тиадиазол, кристаллическая структура

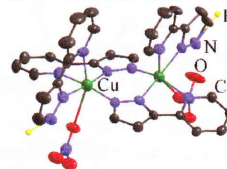


Liu X.B., Huan D.H., Cui G.H., Han L.H.

1177

Crystal structures of copper(II) and zinc(II) complexes derived from 3-(2-pyridyl)pyrazole

Keywords: copper(II), crystal structure, 3-(2-pyridyl)pyrazole, zinc(II)

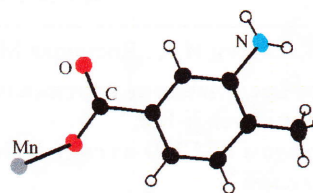


Khosa M.K., Wood P.T., Humphrey S.M., Harrison W.T.A.

1183

Crystal structures of a family of layered coordination polymers containing divalent metal ions (Mn^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} and Zn^{2+}) and the 3-amino 4-methyl benzoate ion

Keywords: coordination polymer, bridging ligand, layered structure

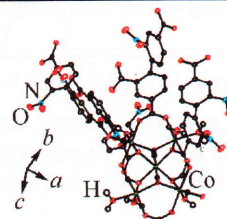


Wu R.-F., Shi H.-P., Zhang J.-R., Chang F.-F.

1189

A novel 3D energetic coordination polymer containing Co(II) atoms in a pentanuclear cluster

Keyword: coordination polymer, pentanuclear clusters, energetic materials

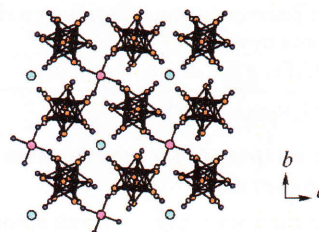


Тарасенко М.С., Наумов Н.Г., Куратьева Н.В.

1196

Строение координационных полимеров $\text{Cs}_5[\{\text{Ln}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{C}_2\text{H}_6\text{O})\}\{\text{Re}_6\text{Se}_8(\text{CN})_6\}_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ($\text{Ln} = \text{La}, \text{Nd}$)

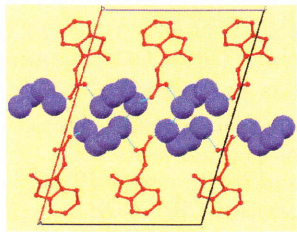
Ключевые слова: рений, октаэдрический кластер, РЗЭ, комплексные соединения, кристаллическая структура



Ашуров Ж.М., Мухамедов Н.С., Ташходжаев Б.,
Ибрагимов Б.Т.

**Кристаллическая структура гидрата,
сольвата и солей α -(N-бензоксазолин-2-он)-
уксусной кислоты**

Ключевые слова: производные бензоксазолин-2-она,
сольватополиморфизм, РСА

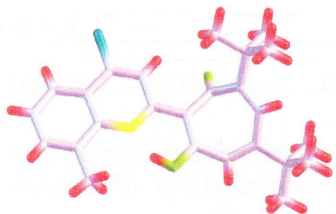


1201

Ткачев В.В., Саяпин Ю.А., Шилов Г.В.,
Утеньшев А.Н., Боженко К.В., Комиссаров В.Н.,
Алдошин С.М., Минкин В.И.

**Молекулярные структуры новых
2-(хиолин-2-ил)-1,3-трополонов**

Ключевые слова: 1,3-трополоны,
внутримолекулярная водородная связь,
рентгеноструктурный анализ

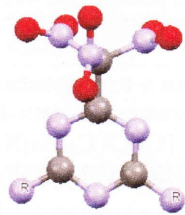


1208

Алиев З.Г., Шастин А.В., Алдошин С.М.

**Кристаллические структуры некоторых
тринитрометильных производных 1,3,5-триазина**

Ключевые слова: кристаллическая и молекулярная
структура, тринитрометильные производные,
2,4-диазидо-6-тринитрометил-1,3,5-триазин,
2,4-диметокси-6-тринитрометил-1,3,5-триазин,
2,4-бис(N,N-диметиламино)-6-тринитрометил-1,3,5-
триазин

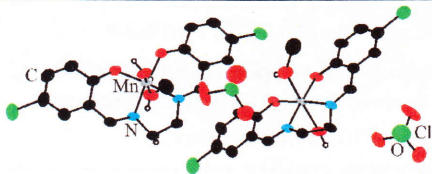


1214

Li G.-S., Zhang H.-L.

**Characterization and catalytic property
of manganese(III) complexes with Schiff bases**

Keywords: manganese complex, mononuclear complex,
Schiff base, crystal structure, catalytic oxidation of olefins



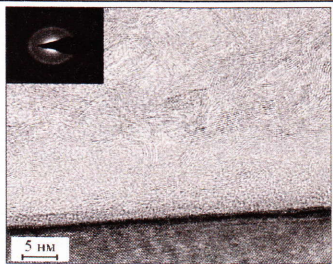
1220

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Меренков И.С., Касаткин И.А., Косинова М.Л.

**Рентгенофазовое исследование вертикально
ориентированных слоев h-BN,
полученных методом PECVD из смесей боразина
и аммиака или гелия**

Ключевые слова: гексагональный нитрид бора,
тонкие пленки, PECVD, боразин, наностенки,
фазовый состав

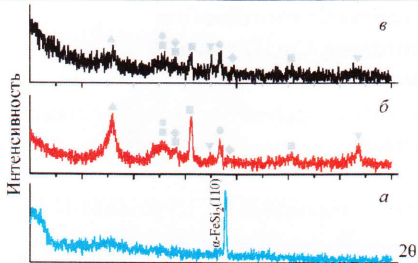


1227

Пушкарёв Р.В., Файнер Н.И., Маурия К.К.

**Изучение фазового состава тонких пленок
 SiC_xFe_y и $\text{SiC}_x\text{N}_y\text{Fe}_z$ с помощью рентгеновской
дифракции в геометрии скользящего падения
пучка (GIXRD)**

Ключевые слова: рентгеновская дифракция в геометрии
скользящего падения пучка,
пленки состава SiC_xFe_y и $\text{SiC}_x\text{N}_y\text{Fe}_z$, ферроцен

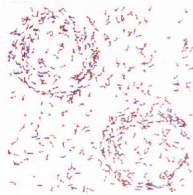


1230

Волошин В.П., Наберухин Ю.И.

**О возможности вихревых коллективных
движений в жидкостях**

Ключевые слова: жидкости, вода, жидкий аргон,
молекулярная динамика, коллективные эффекты,
вихревые движения

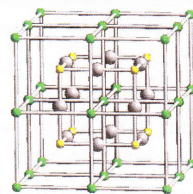


1233

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

Кристаллографический изоморфизм (S,Tl) в структуре $\text{TlHg}_6\text{S}_4\text{Br}_5$

Ключевые слова: кристаллографический анализ, халькогениды ртути, изоморфизм (S,Tl), анионная позиция Tl^+

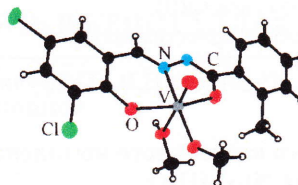


1237

Han S., Wang Y.

Crystal structure and insulin-like activity of vanadium complex derived from N' -(3,5-dichloro-2-hydroxybenzylidene)-2-methylbenzohydrazide

Keywords: hydrazone ligand, vanadium complex, crystal structure, insulin-like activity

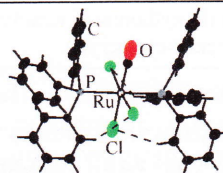


1243

Gowri M., Srinivasan T., Velmurugan D.

Crystal structure of carbonyl trichloro bis(triphenyl phosphine) ruthenium(III) complex

Keywords: Ru(III) complex, triphenyl phosphine (PPh_3), chloride, carbonyl, single crystal XRD

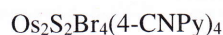


1248

Баранец С.А., Миронов Ю.В., Смоленцев А.И., Волков С.В., Харьковская Л.Б., Янко О.Г.

Структура комплекса $\text{Os}_2\text{S}_2\text{Br}_4(4\text{-CNPY})_4$

Ключевые слова: осмий, бинарный кластерный комплекс, кристаллическая структура

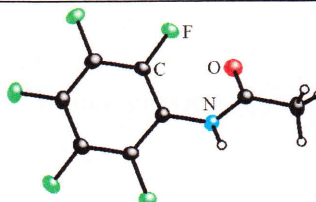


1253

Бабайлов С.П., Стабников П.А., Куратова Н.В., Никульшин П.А., Громилов С.А.

Кристаллическая структура пентафторацетанилида

Ключевые слова: пентафторацетанилид, кристаллическая структура, молекулярное строение, ЯМР

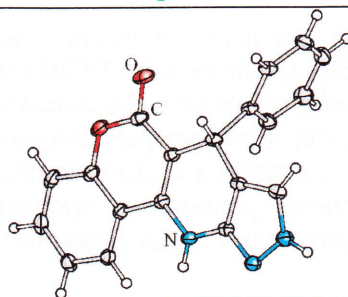


1256

Платонова А.Г., Мажукина О.А., Федотова О.В.

Кристаллическая структура 7-фенил-9,11-дигидрохромено(4,3-b)пиразоло(4,3-e)пиридин-6(7H)-она

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, кристаллическая структура, реакция Биджинелли, amino-иминная таутомерия, 7-фенил-9,11-дигидрохромено(4,3-b)пиразоло(4,3-e)пиридин-6(7H)-он

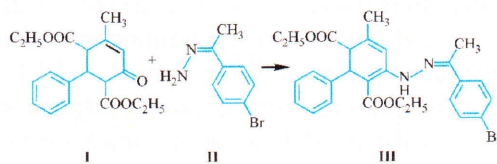


1260

Исмиев А.И., Магеррамов А.М., Аскеров Р.К., Потехин К.А.

Кристаллическая структура диэтил-5-(2-(1-(4-бромфенил)этилиден) гидразинил)-3-метил-1,2-дигидро-[1,1'-дифенил]-2,6-дикарбоксилата

Ключевые слова: β -циклокетолы, гидразоны, дигидродифенилы

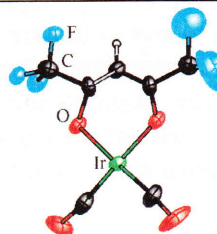


1264

Викулова Е.С., Ильин И.Ю., Караковская К.И., Пирязев Д.А., Морозова Н.Б.

Кристаллическая структура и термические свойства (1,1,1,5,5,5-гексафторпентагонато-4)-(дикарбонил)иридия(I)

Ключевые слова: иридий(I), β -дикетонаты, карбонил, рентгеноструктурный анализ, термогравиметрия

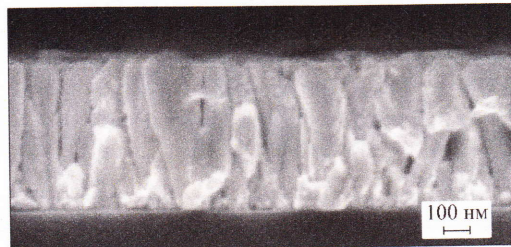


1267

Гельфонд Н.В., Крисюк В.В., Доровских С.И.,
Кальный Д.Б., Максимовский Е.А., Шубин Ю.В.,
Трубин С.В., Морозова Н.Б.

**Структура платиновых покрытий, полученных
методом химического осаждения из газовой фазы**

Ключевые слова: платиновые покрытия, MOCVD,
бис(ацетилацетонат) платины(II),
катоды и аноды электрокардиостимуляторов

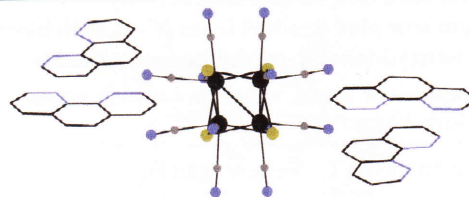


1270

Литвинова Ю.М., Куратьева Н.В., Гайфулин Я.М.,
Миронов Ю.В.

**Строение ионного кластерного комплекса
(PhenH)₄[Re₄Te₄(CN)₁₂]-4H₂O**

Ключевые слова: рений, кубановый кластерный
комплекс, кристаллическая структура



1276

Барташевич Е.В., Насибуллина С.Э., Цирельсон В.Г.

**Индексы делокализации электронов
как критерии идентификации сильных
галогенных связей иода**

Ключевые слова: индексы делокализации электронов,
галогенные связи, трииодид



1279

Содержание следующего номера — в конце журнала