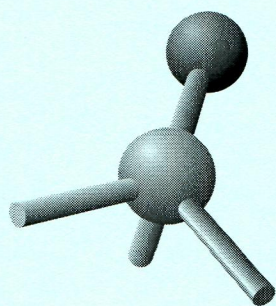


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

Том 55
июль
август
2014

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 4

НОВОСИБИРСК

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 55

Июль-август

№ 4, 2014

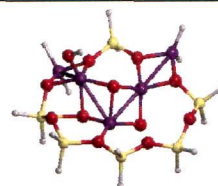
СО Д Е Р Ж А Н И Е

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Ларин А.В., Жидомиров Г.М.

Структура биядерных и трехъядерных кластеров ионов алюминия в катионных позициях морденита

Ключевые слова: кластеры алюминия, моделирование, морденит



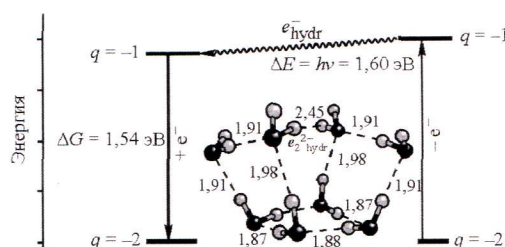
619

Захаров И.И.

Квантово-химические расчеты DFT локальной структуры гидратированного электрона и диэлектрона

Ключевые слова: квантово-химические DFT и PCM расчеты, молекулярные кластеры воды (H₂O)₈, (H₂O)₈⁻ и (H₂O)₈²⁻,

модели гидратированного электрона и диэлектрона, приближение супермолекула–континуум

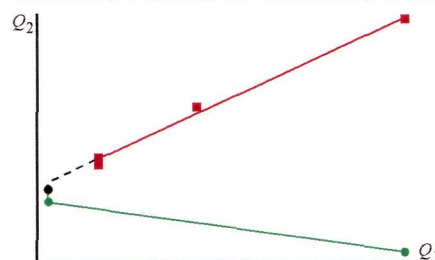


631

Аверьянов Е.М.

Структурные и термодинамические следствия взаимодействия конформационных степеней свободы азометинов в нематической фазе

Ключевые слова: азометины, бензилиденанилин, конформация, стерические эффекты заместителей, переход нематик – изотропная жидкость, конформационный полиморфизм

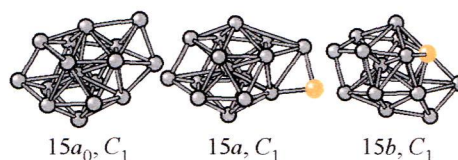


641

Li S.Y., Guo L., Zhang R.J., Zhang X.

**Structures, stabilities, and electronic properties for Al_nAu (n = 1–15) clusters:
A density functional study**

Keywords: Al_nAu bimetallic clusters, DFT calculations, relative stability, electronic structure



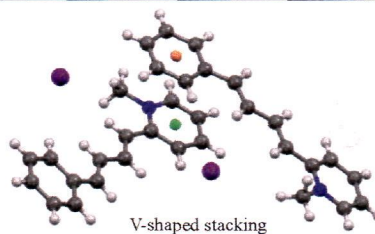
648

Chantrapromma S., Boonnak N., Kaewmanee N.,
Ruanwas P., Fun H.-K.

747

**1-methyl-2-((1*e*,3*e*)-4-phenylbuta-1,3-dienyl)pyridinium
iodide: synthesis, characterization and X-ray analysis**

Keywords: crystal structure, pyridinium,
quatery ammonium compound (QAC), π stacking,
 π - π interaction



СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Ma D.-Y., Guo H.-F., Qin L.

751

**Structure and characterization of a 2D cobalt(II)
complex [Co(L)₂]_n (L = 3-nitro-5-(pyridin-4-yl)benzoate)**

Keywords: cobalt(II) coordination polymer,
hydrothermal synthesis, crystal structure, thermal behavior



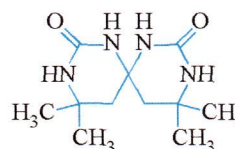
СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Нетреба Е.Е., Папаянина Е.С.

756

**Исследование новых молекулярно-кристаллических
структур 4,4,10,10-тетраметил-1,3,7,9-
тетраазаспиро[5.5]ундекан-2,8-диона и его солей:
моноклорида, мононитрата, тетраиодотеллурата**

Ключевые слова: спирибисмочевина, спирокарбон,
моногидрат, моноклорид, мононитрат, тетраиодотеллурат,
ЯМР ¹H, ИК, структура, РСА, РФА



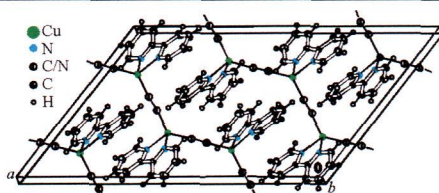
КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Ермолаев А.В., Смоленцев А.И., Миронов Ю.В.

765

**Кристаллическая структура новой модификации
циано-мостикового координационного комплекса
меди(I) [CuCN(bpy)]_n**

Ключевые слова: цианидный комплекс, медь(I),
гидротермальный синтез, кристаллическая структура

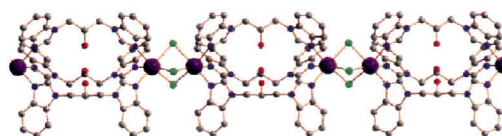


Du X., Wang Y.Y., Zhao Y.Q., Cui G.H.

768

**Crystal structure, thermal and fluorescent properties
of a 1D Cd(II) coordination polymer based
on the bis(benzimidazole) ligand**

Keywords: cadmium(II), bis(benzimidazole), hydrogen bond,
fluorescent property

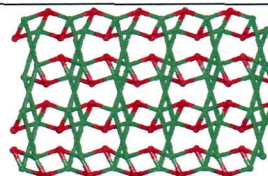


Du X., Wang Y.Y., Zhao Y.Q., Cui G.H.

773

**Crystal structure and fluorescent properties
of a 2D cadmium coordination polymer**

Keywords: Cd(II), 1,3,5-benzenetricarboxylic acid,
binodal(3,5)-connected, π - π stacking interactions



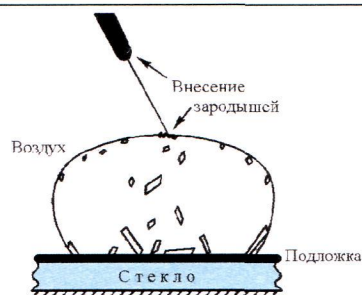
**МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ
«МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ СОСТАВА И СТРУКТУРЫ
ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ»,
НОВОСИБИРСК, 21–25 ОКТЯБРЯ 2013 г.**

Архипов С.Г., Болдырева Е.В.

778

Алгоритм обнаружения существования и воспроизводимого получения монокристаллов солей и смешанных кристаллов аминокислот, пригодных для рентгеноструктурных и КР спектроскопических экспериментов

Ключевые слова: аминокислоты, смешанные кристаллы, получение монокристаллов, «streak seeding», рентгеноструктурный анализ, КР спектроскопия



Ларичев Ю.В., Коскин А.П., Елецкий П.М.,
Полуянов С.А., Тузиков Ф.В., Ищенко А.В., Зюзин Д.А.

784

Изучение особенностей наноструктуры высокозольных углеродных материалов методом малоуглового рентгеновского рассеяния

Ключевые слова: углерод-кремнеземные композиты, просвечивающая электронная микроскопия, рентгеновская дифрактометрия, малоугловое рентгеновское рассеяние, контрастирование



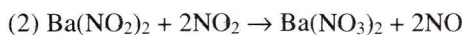
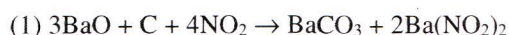
Смирнов М.Ю., Калинин А.В., Назимов Д.А.,
Бухтияров В.И., Вовк Е.И., Ozensoy E.

791

Исследование методом РФЭС взаимодействия модельных NSR катализаторов Ва/TiO₂ и Ва/ZrO₂ с NO₂

Ключевые слова: модельные NSR катализаторы, реакция с NO₂, нитрит бария, нитрат бария, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия

C/BaO/MO₂ (M = Ti, Zr) + NO₂:

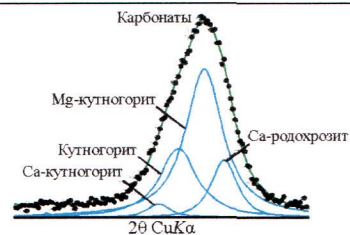


Пальчик Н.А., Мороз Т.Н, Григорьева Т.Н.

798

Особенности состава и структурных преобразований марганцевых минералов озера Большое Миассово (Южный Урал)

Ключевые слова: структура, химический состав, свойства, марганцевые минералы, воздействие температур, рентгенография, ИК спектроскопия

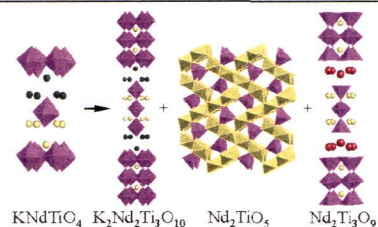


Санкович А.М., Зверева И.А.

805

Исследование термического распада слоистых перовскитоподобных оксидов ANdTiO₄ и A₂Nd₂Ti₃O₁₀ (A = Na, K)

Ключевые слова: перовскитоподобные слоистые титанаты, термическая стабильность, порошковая рентгеновская дифракция

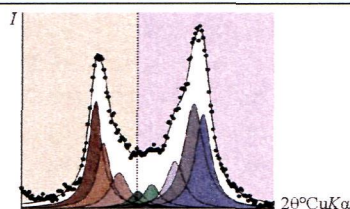


Солотчина Э.П., Солотчин П.А.

814

Состав и структура низкотемпературных природных карбонатов кальцит-доломитового ряда

Ключевые слова: кристаллохимия, карбонаты, ряд кальцит–доломит, рентгенография, ИК спектроскопия, озерные осадки, палеоклимат

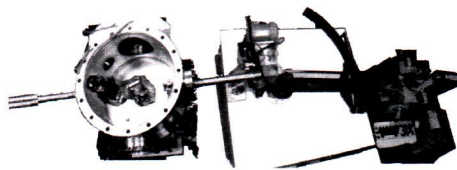


Шарков М.Д., Бойко М.Е., Бойко А.М., Бобыль А.В.,
Конников С.Г.

821

**Малоугловые рентгеновские исследования
твёрдого раствора $\text{GaAs}_{0,7}\text{Se}_{0,3}$
при энергиях вблизи краев поглощения As и Se**

Ключевые слова: малоугловое рассеяние рентгеновских
лучей (МУРР), край поглощения, арсенид галлия,
селенид галлия, мозаичная структура

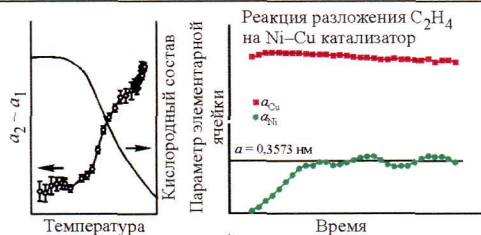


Шмаков А.Н., Подъячева О.Ю.

**Комплексная диагностика структуры
сложно-оксидных материалов и металлических
катализаторов рентгенодифракционными методами
на синхротронном излучении**

Ключевые слова: синхротронное излучение, дифракция,
кислородная проводимость, углеродные нановолокна

826



Содержание следующего номера — в конце журнала