

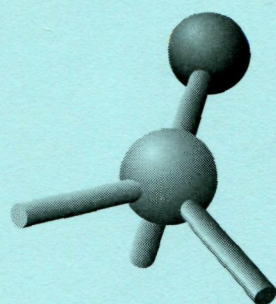


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

Том 55  
ноябрь  
декабрь  
**2014**

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



**№ 6**

НОВОСИБИРСК



ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

ТОМ 55

Ноябрь-декабрь

№ 6, 2014

СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Плахутин Б.Н.

1055

**Общая форма полного одноэлектронного гамильтониана в ограниченном методе Хартри–Фока для открытых оболочек**

$$\hat{R} = \hat{R}_{(1)} + \hat{R}_{(2)} + \hat{R}_{(3)}; \hat{R}_{(3)} = ?$$

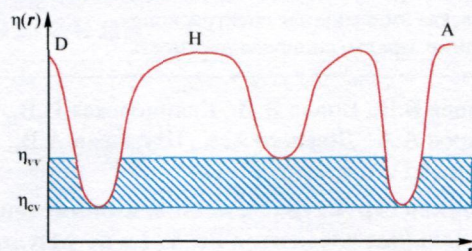
**Ключевые слова:** ограниченный метод Хартри–Фока, вариационный принцип, теоремы Купманса и Бриллюэна, общее выражение для хартри-фовского гамильтониана

Ващенко А.В., Афонин А.В.

1064

**Изучение внутримолекулярных водородных связей C–H...X (X = N, O) в рамках теории функции локализации электронов**

**Ключевые слова:** внутримолекулярная водородная связь, функция локализации электронов, индекс бифуркации внутренних и валентных электронов, квантовая теория «Атомы в молекулах»

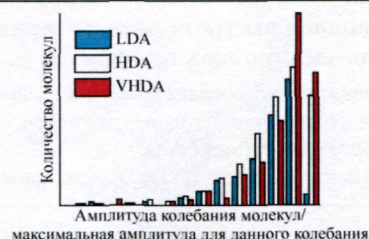


Гец К.В., Белослудов В.Р.

1073

**Теоретическое исследование свойств низкочастотных колебаний аморфных льдов низкой, высокой и сверхвысокой плотности**

**Ключевые слова:** межмолекулярные взаимодействия, молекулярная динамика, решеточная динамика, аморфные льды, коллективные колебания, фазовые переходы

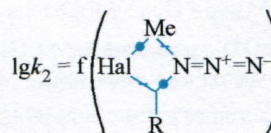


Нугманов Р.И., Маджидов Т.И., Халиуллина Г.Р., Баскин И.И., Антипин И.С., Варнек А.А.

1080

**Разработка моделей «структура–свойство» в реакциях нуклеофильного замещения с участием азидов**

**Ключевые слова:** хемоинформатика, молекулярное моделирование, нуклеофильное замещение, константа скорости, конденсированный граф реакции

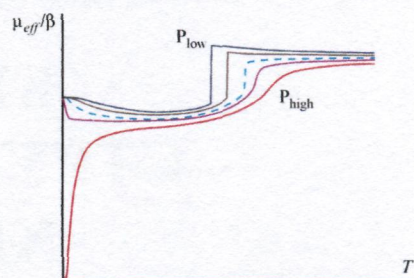




Морозов В.А.

**Качественное описание трансформации термических магнитоструктурных переходов в цепочке обменных кластеров под действием внешнего давления**

**Ключевые слова:** молекулярные магнетики, обменный кластер, спин-кроссовер, магнитоструктурные переходы, эффективный магнитный момент

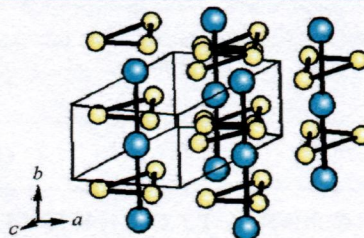


1088

Шкварин А.С., Ярмошенко Ю.М., Яблонских М.В., Меренцов А.И., Титов А.Н.

**Исследование электронной структуры TiS<sub>2</sub> методами рентгеновской спектроскопии**

**Ключевые слова:** резонансная фотоэмиссия, фотоэлектронная и абсорбционная спектроскопия, трисульфид титана

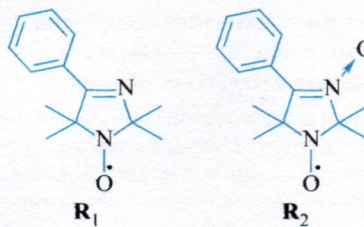


1095

Мазалов Л.Н., Федоренко А.Д., Крючкова Н.А., Диков Ю.П., Полиенко Ю.Ф., Григорьев И.А.

**Рентгеноспектральное и рентгеноэлектронное изучение электронного строения парамагнитных и диамагнитных производных 3-имидазолина**

**Ключевые слова:** свободные нитрокислые радикалы, производные 3-имидазолина, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, рентгеновская эмиссионная спектроскопия, эффективные заряды, спиновая плотность

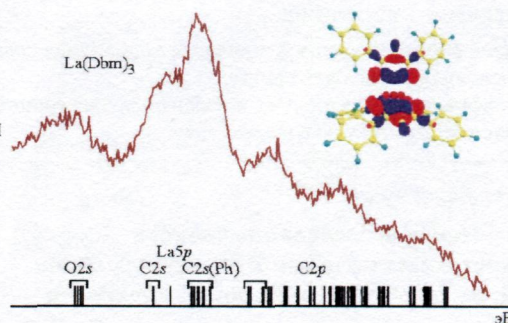


1100

Короченцев В.В., Вовна В.И., Калиновская И.В., Комиссаров А.А., Доценко А.А., Шурыгин А.В., Мирочник А.Г., Сергиенко В.И.

**Электронная структура трис-дibenzoилметанатов редкоземельных элементов Sc, Y, La по результатам исследований методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и теории функционала электронной плотности**

**Ключевые слова:** рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, теория функционала плотности, трис-дibenzoилметанаты металлов, редкоземельные элементы Sc, Y, La, электронное строение



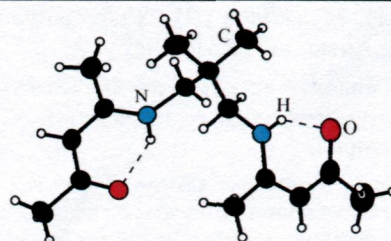
1114

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Доровских С.И., Куратьева Н.В., Ткачѳв С.В., Трубин С.В., Стабников П.А., Морозова Н.Б.

**Комплексы меди(II) с основаниями Шиффа: структуры и термическое поведение**

**Ключевые слова:** лиганды с основаниями Шиффа, комплексы меди(II), рентгеноструктурный анализ, термогравиметрия



1124

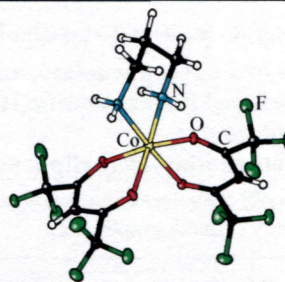


Доровских С.И., Пирыжев Д.А., Плюснина О.А.,  
Зеленина Л.Н., Морозова Н.Б.

1132

**Новые  $\beta$ -дикетонатные комплексы кобальта(II)  
с 1,3-диаминопропаном: синтез, структуры и  
термическое поведение**

**Ключевые слова:** аддукты кобальта(II),  $\beta$ -дикетонат,  
рентгеноструктурный анализ, ДСК, МОСVD,  
Со-содержащие пленки

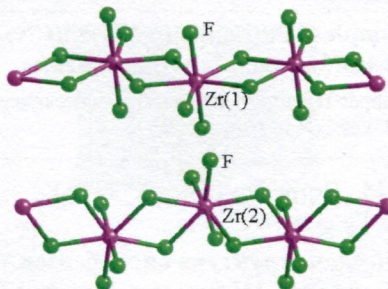


Давидович Р.Л., Ткачѳв В.В., Логвинова В.Б.,  
Ставила В.

1140

**Новые типы строения полимерных цепочечных  
анионов в кристаллических структурах  
комплексных фторидов циркония**

**Ключевые слова:** комплексный фторид циркония,  
4-амино-1,2,4-триазол, гидроксоний, тетраэтиламмоний,  
кристаллическая структура, полимерная цепь,  
пентагональная бипирамида, тетраэдрный фрагмент

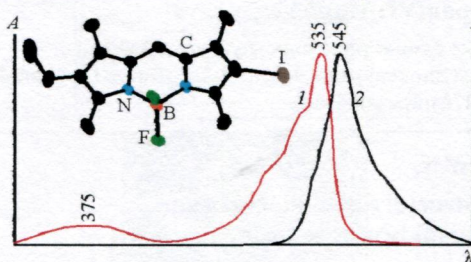


Гусева Г.Б., Антина Е.В., Нуранеева Е.Н., Березин М.Б.,  
Вьюгин А.И.

1149

**Кристаллическая структура и спектрально-  
люминесцентные свойства моноидзамещенного  
борфторидного комплекса дипирролилметена**

**Ключевые слова:** моноидзамещенный дипирролилметенат  
бора(III), BODIPY, кристаллическая структура,  
спектрально-люминесцентные свойства



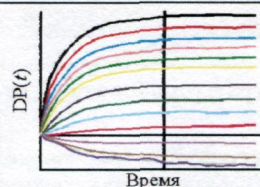
**КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ**

Волошин В.П., Маленков Г.Г., Наберухин Ю.И.

1155

**Долговременные корреляции в диффузионном  
движении атомов жидкого аргона**

**Ключевые слова:** жидкий аргон, диффузионное движение,  
коллективные эффекты, крупномасштабные корреляции

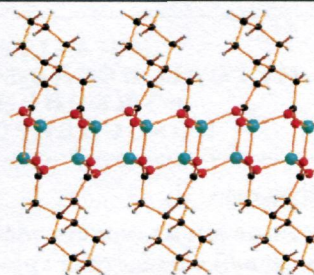


Алиев С.Б., Самсоненко Д.Г., Дыбцев Д.Н.,  
Арджент С.П., Блэйк А.Дж., Шродер М., Федин В.П.

1158

**Циклогександиацетат лития – слоистый  
координационный полимер с невалентными  
гидрофобными контактами**

**Ключевые слова:** литий, кристаллическая структура,  
слоистые координационные полимеры,  
невалентные взаимодействия

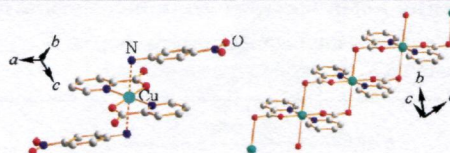


Niu J., Yuan L.-F., Li J., Guo H., Zhang F.-X.

1160

**Crystal structures of two new Cu(II) complexes**

**Keywords:** copper complex, crystal structure, 2-picolinic acid,  
4-nitrophenylamine, synthesis



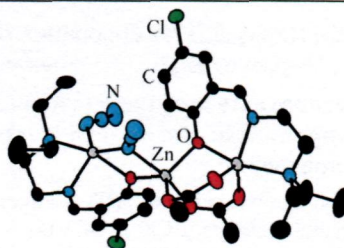


Sheng G.-H., Cheng X.-S., You Z.-L., Zhu H.-L.

1165

**Crystal structure of a novel phenolato, azido, and acetato Co-bridged trinuclear zinc(II) complex derived from 4-chloro-2-[(2-diethylaminoethylimino)methyl]phenol**

**Keywords:** Schiff base, trinuclear complex, zinc complex, crystal structure, X-ray crystallography

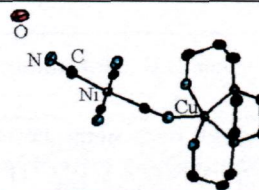


Smékal Z., Adams H.

1170

**Binuclear complex [Cu(bappz)(μ-NC)Ni(CN)<sub>3</sub>]-H<sub>2</sub>O (bappz = 1,4-bis(3-aminopropyl)piperazine)**

**Keywords:** copper(II) complexes, tetracyanonickelates(II), cyano-bridged complexes, X-ray structure analysis

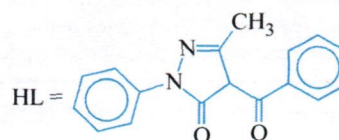


Чумаков Ю.М., Петренко П.А., Жуля Ф.Г., Цапков В.И., Гуля А.П.

1174

**Кристаллическая структура бис(4-бензоил-3-метил-1-фенил-4,5-дигидро-1H-пиразол-5-онато)-(этанол)-диоксоуран(VI) этанол сольвата**

**Ключевые слова:** рентгеноструктурный анализ, комплексы диоксоурана, 4-бензоил-3-метил-1-фенил-4,5-дигидро-1H-пиразол-5-он

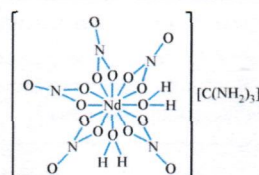


William W.N.

1178

**Crystal structure of diguanidinium diaquapentakis(nitrato)neodymium(III)**

**Keywords:** crystal structure, neodymium nitrate complex, guanidinium cation, hydrogen bonding

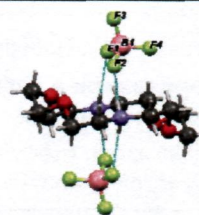


Гельмбольдт В.О., Ганин Э.В., Липковский Я., Фонарь М.С.

1182

**Строение бис(тетрафторобората) 1,10-дiazоний-18-краун-6**

**Ключевые слова:** краун-эфир, комплекс хозяин-гость, водородные связи, кристаллическая структура



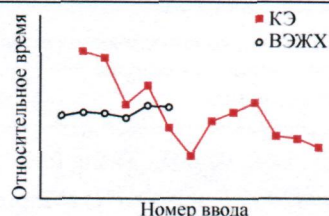
**МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ  
«МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ СОСТАВА И СТРУКТУРЫ  
ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ»,  
НОВОСИБИРСК, 21 – 25 ОКТЯБРЯ 2013 г.**

Жданов А.А., Шуваева О.В.

1184

**Применение методов капиллярного электрофореза и высокоэффективной жидкостной хроматографии для изучения комплексных полиоксометалатов**

**Ключевые слова:** капиллярный электрофорез, ион-парная ВЭЖХ, гетерополиосоединения



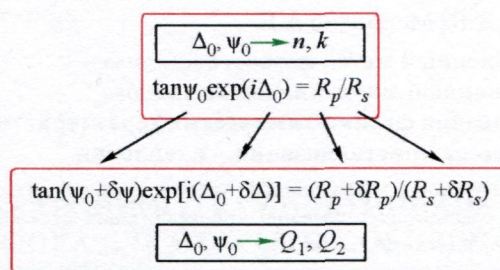


Максимова О.А., Косырев Н.Н., Варнаков С.Н.,  
Лященко С.А., Овчинников С.Г.

1190

### Особенности анализа эллипсометрических данных для магнитных наноструктур

**Ключевые слова:** магнитоэллипсометрия, эллипсометрические измерения, магнитооптический эффект Керра, тонкие пленки, модель полубесконечной среды, коэффициент преломления, коэффициент поглощения, магнитооптический параметр

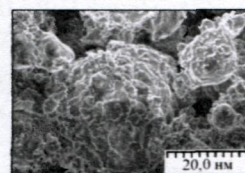


Габрук Н.Г., Олейникова И.И., Шутеева Т.А.

1198

### Углеродный фитосорбент – получение, структура

**Ключевые слова:** скорлупа грецкого ореха, карбонизация, углеродный фитосорбент, электронная микроскопия, флавоноиды, зверобой, биологически активные соединения

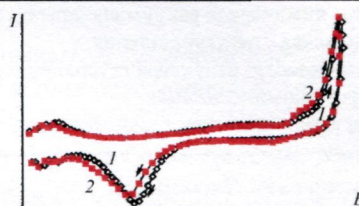


Ахмедов М.А., Хидиров Ш.Ш.

1204

### Определение состава и свойств метансульфокислоты методом вольтамперометрии

**Ключевые слова:** вольтамперометрия, адсорбция, электрод, поляризация, потенциал, платина, метансульфокислота, серная кислота

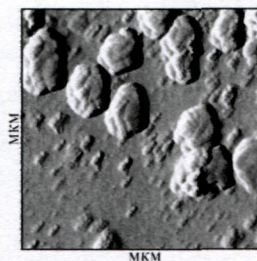


Дягилев Д.В., Ларичев Т.А., Пугачёв В.М.,  
Владимиров А.А., Сотникова Л.В., Манина Т.С.,  
Степанов А.Ю., Дудникова Ю.Н.

1208

### Исследование дисперсности и структуры нанокристаллических порошков фотоактивного диоксида титана

**Ключевые слова:** диоксид титана, анатаз, рутил, фотокатализатор, синтез, золь-гель метод, адсорбция

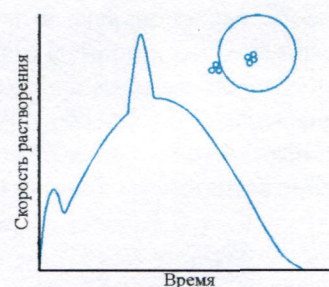


Почтарь А.А., Васильева И.Г., Малахов В.В.

1216

### Определение проявлений пространственной неоднородности химического состава функциональных материалов методами стехиографии

**Ключевые слова:** фазовый анализ, метод дифференцирующего растворения, неоднородность состава и структуры твердых фаз, математическое моделирование динамических процессов растворения

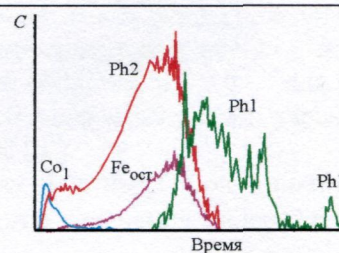


Довлитова Л.С., Почтарь А.А., Малахов В.В.

1222

### Определение фазового состава предшественников катализаторов многослойных углеродных нанотрубок стехиографическим методом дифференцирующего растворения

**Ключевые слова:** катализаторы синтеза МУНТ, дифференцирующее растворение, стехиографический метод



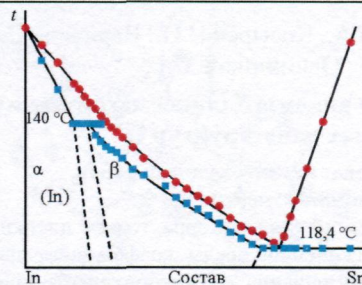


Каплун А.Б., Мешалкин А.Б.

1229

**Вибрационный метод фазового анализа –  
прецизионный метод для комплексного  
исследования физико-химических характеристик  
и процессов кристаллизации – плавления**

**Ключевые слова:** вибрационные методы, расплав, вязкость, фазовые равновесия, плавление, кристаллизация, стеклование, ликвидус, эвтектика

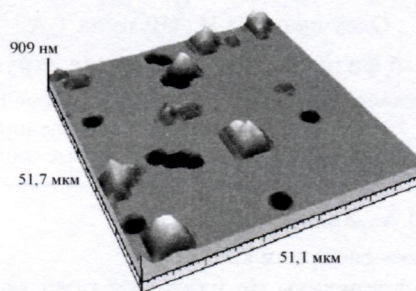


Орлов Л.К., Вдовин В.И., Ивина Н.Л., Штейнман Э.А., Орлов М.Л., Дроздов Ю.Н., Петрова В.Ф.

а 1237

**Структура и электронные свойства гетероперехода  
3С-SiC/SiGeC/Si(100), формируемого методами  
вакуумной химической эпитаксии**

**Ключевые слова:** кремний, карбиды кремния, германий, гетероструктуры, химическая вакуумная эпитаксия, кристаллографическая структура пленок, морфология поверхности, структура гетероперехода, инфракрасная фотолюминесценция, вольт-амперные характеристики



Указатель статей. Том 55.....1248

Авторский указатель. Том 55.....1259

Содержание следующего номера — в конце журнала