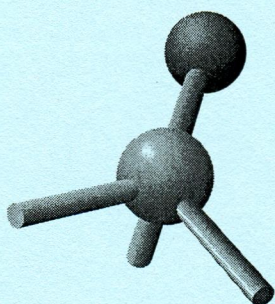


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 56  
май  
июнь  
2015

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 3

НОВОСИБИРСК



ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 56

Май-июнь

№ 3, 2015

СОДЕРЖАНИЕ

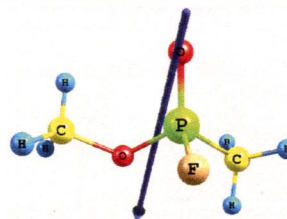
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Лебедев А.В.

429

**Квантовохимический расчет строения, дипольного момента и поляризуемости О-метилметилфторфосфоната в газовой фазе**

**Ключевые слова:** О-метилметилфторфосфонат, квантовохимический расчет, геометрические параметры, конформер, дипольный момент, поляризуемость

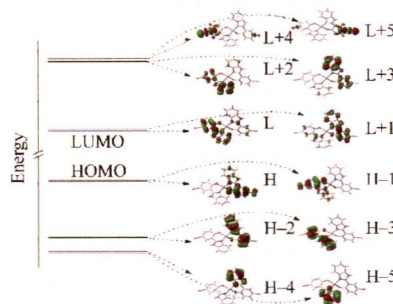


Tong Y.-P., Jin Z., Lin Y.-W.

436

**Electronic structure, charge transfer character and spectroscopic property of electroluminescent/photoluminescent [ZnL<sub>2</sub>] (HL = 2-(1H-benzo[D]imidazol-2-yl)-4-bromophenol) studied by density functional theory**

**Keywords:** Zn(II) chelate complex, 2-(1H-benzo[d]imidazol-2-yl)-4-bromophenol, theoretical calculation; electronic structure, LLCT, TDDFT, DOS/PDOS

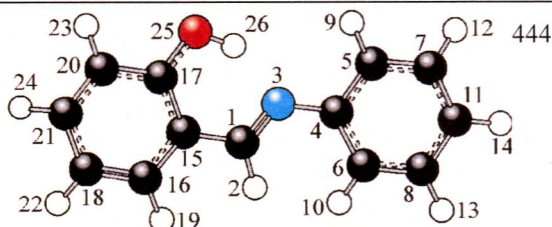


ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Elroby S.A., Aboud S., Aziz S.G., Hilal R.

**Substituent effects on absorption and vibrational spectra of some 2-hydroxy Schiff bases: DFT/TDDFT, natural bond orbital and experimental study**

**Keywords:** electronic spectra, vibrational spectra, DFT/TDDFT, solvent and substituent effects, NBO analysis, 2-hydroxy Schiff bases

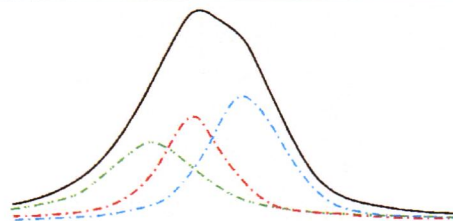


Гафуров М.М., Рабаданов К.Ш., Атаев М.Б., Алиев А.Р., Амиров А.М., Кубатаев З.Ю.

457

**Спектры комбинационного рассеяния и строение систем (1 - x)RbNO<sub>3</sub> + xAl<sub>2</sub>O<sub>3</sub>**

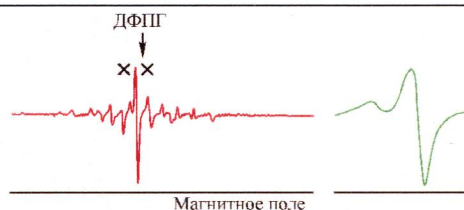
**Ключевые слова:** нитрат рубидия, оксид алюминия, спектры комбинационного рассеяния, автокорреляционная функция



Гилинская Л.Г., Борисова Л.С., Костырева Е.А.

### Структурные разновидности хелатов $VO^{2+}$ в органическом веществе нефтей и битумоидов по спектрам ЭПР

**Ключевые слова:** комплексы ванадил-иона, спектры ЭПР, симуляция наложенных спектров

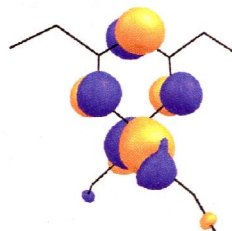


466

Тихонов С.А., Вовна В.И.

### Фотоэлектронные спектры и электронная структура имидоламидинатов дипропила бора

**Ключевые слова:** электронная структура, фотоэлектронная спектроскопия, теория функционала плотности, теорема Купманса, азотосодержащие комплексы бора, имидоламидинаты,  $\beta$ -дикетонаты



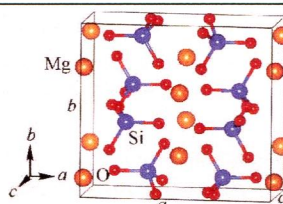
476

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Чибисов А.Н.

### Компьютерное моделирование образования точечных дефектов в керамических материалах $MgSiO_3$

**Ключевые слова:** *ab initio* расчеты, образование дефектов, структурные свойства

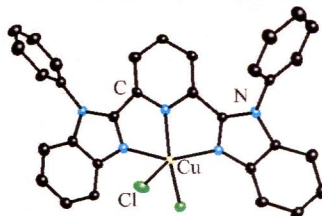


484

Huang Q.-W., Liu S.-G., Li G.B., Wang S.-X., Su W.-Y., Liang D.-M., Mao S.-Q.

### Crystal structure and antitumor activities of dichloride 2, 6-bis(1-phenylbenzimidazol-2-yl)pyridine copper(II) complex

**Keywords:** benzimidazole, copper complex, crystal structure, antitumor activities

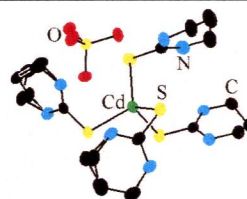


487

Mahmood R., Hussain S.G., Isab A.A., Fettouhi M., Fazal A., Ahmad S.

### Structural characterization of tetrakis (1,3-diazinane-2-thione)cadmium(II) sulfate

**Keywords:** cadmium sulfate, 1,3-diazinane-2-thione, crystal structure

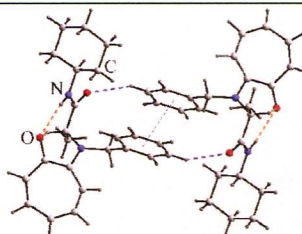


492

Ramazani A., Joo S.W., Amini I., Ślepokura K., Lis T., Souldozi A.

### Crystal structure of 2-[benzyl-(7-oxo-cyclohepta-1,3,5-trienyl)-amino]-N-cyclohexylpropanamide

**Keywords:** single crystal X-ray structure, smiles rearrangement, Ugi-type coupling, tropolone, cyclohexylisocyanide, benzyl amine, acetaldehyde, Ugi-Smiles-type reaction

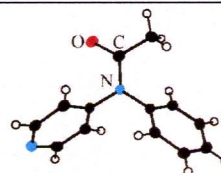


498

Umezono S., Okuno T.

### Crystal structure and DFT study of N-phenyl-N-(pyridin-4-yl)acetamide

**Keywords:** crystal structure, DFT calculation, acetamide, pyridine, hydrogen bond



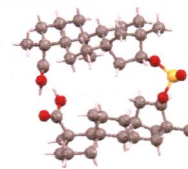
502



Добрынин А.Б., Андреева О.В., Литвинов И.А.

**Молекулярная и кристаллическая структура  
сульфита изостевиола**

**Ключевые слова:** изостевиол, сульфит,  
рентгеноструктурный анализ, водородная связь



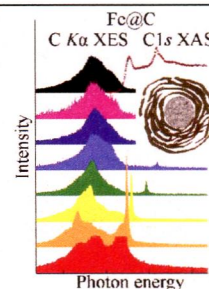
505

**МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ  
«РЕНТГЕНОВСКИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ  
И ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ» (РЭСХС-21)  
НОВОСИБИРСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР,  
7-11 ОКТЯБРЯ 2013 ГОДА**

Галахов В.Р., Шамин С.Н., Уймин М.А., Ермаков А.Е.,  
Бухвалов Д.В.

**Рентгеновская спектроскопия капсулированных  
в углерод наночастиц железа**

**Ключевые слова:** рентгеновские абсорбционные спектры,  
фотоэлектронные спектры,  
резонансное неупругое рентгеновское рассеяние,  
капсулированные в углерод наночастицы,  
дефекты Стоуна-Уэлса

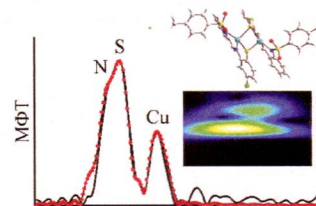


508

Максимова А.В., Власенко В.Г., Козинкин А.В.,  
Куликова О.В., Подсухина С.С., Уваров В.Н.

**Электронная структура комплексов кобальта  
[Co(CO)<sub>4</sub>GeCl<sub>3</sub>] и [Co[Ge(C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>)<sub>3</sub>](CO)<sub>3</sub>[P(C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>)<sub>3</sub>]**

**Ключевые слова:** рентгеновские спектры эмиссии,  
метод теории функционала плотности, электронное строение,  
гетероядерные карбонильные комплексы кобальта

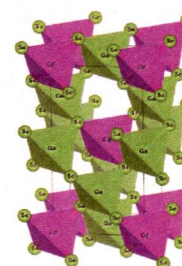


516

Лаврентьев А.А., Габрельян Б.В., Шкумат П.Н.,  
Никифоров И.Я., Парасюк О.В., Хижун О.Ю.

**Электронная структура дефектного халькопирита  
CdGa<sub>2</sub>Se<sub>4</sub> по данным теоретического расчета  
«из первых принципов» и рентгеноспектральных  
исследований**

**Ключевые слова:** электронная структура,  
дефектный халькопирит, плотности электронных состояний,  
рентгеновские спектры

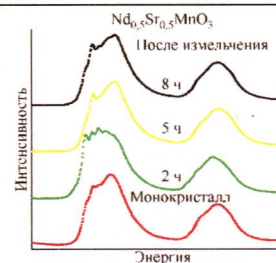


523

Месилов В.В., Галахов В.Р., Шамин С.Н.,  
Гижевский Б.А., Наумов С.В.

**Рентгеновские спектры и зарядовые состояния  
катионов в наноструктурированных манганитах  
La<sub>0.5</sub>Ca<sub>0.5</sub>MnO<sub>3</sub> и Nd<sub>0.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>MnO<sub>3</sub>**

**Ключевые слова:** рентгеновская спектроскопия,  
наноструктурированные манганиты, размол в вибромельнице,  
расчеты атомных мультиплетов

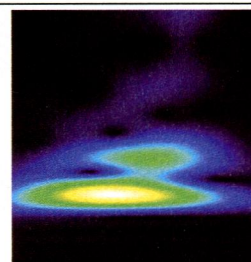


527

Бурлов А.С., Власенко В.Г., Машенко С.А.,  
Гарновский Д.А., Ураев А.И., Левченков С.И.,  
Зубавичус Я.В., Лифинцева Т.В.

**Локальное атомное строение комплексов меди  
с 2-тозиламинобензаль-2'-амино-5'-хлортиофенолом**

**Ключевые слова:** азометины, металлохелаты, XANES,  
EXAFS, вейвлет-преобразование,  
локальная атомная структура



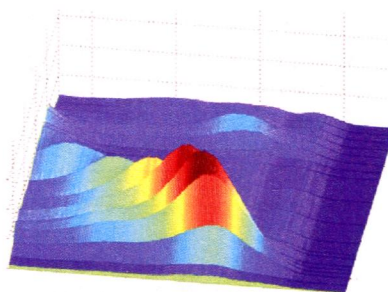
535

Гребенников В.И., Булинг А., Нойманн М.,  
Марченков В.В., Кузнецова Т.В.

543

### Структура основного и возбужденных состояний в сплаве гейслера $\text{Co}_2\text{FeSi}$ по данным резонансной фотоэмиссии

**Ключевые слова:** полуметаллический ферромагнетик,  
резонансная фотоэмиссия,  
селективное возбуждение элементов,  
рентгеновская спектроскопия, эффекты фотодырки,  
многочастичные возбуждения, спиновая поляризация

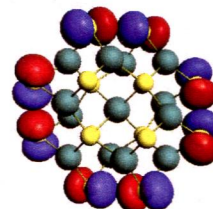


Кравцова А.Н., Солдатов М.А., Сучкова С.А.,  
Бутова В.В., Бугаев А.Л., Солдатов А.В.

549

### Атомная и электронная структура квантовых точек на основе $\text{CdS}$

**Ключевые слова:** квантовые точки, сульфид кадмия,  
атомная и электронная структура,  
компьютерное моделирование, XANES спектроскопия

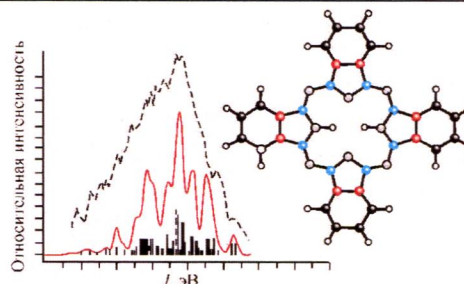


Семущкина Г.И., Мазалов Л.Н., Лаврухина С.А.,  
Басова Т.В., Гуляев Р.В.

556

### Моделирование рентгеновских эмиссионных и фотоэлектронных спектров $\text{H}_2\text{Pc}$ с помощью метода функционала плотности

**Ключевые слова:** фталоцианин,  
рентгеновская эмиссионная спектроскопия,  
фотоэлектронная спектроскопия,  
метод функционала плотности

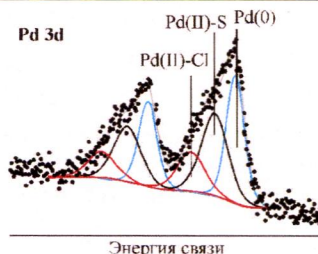


Романченко А.С., Михлин Ю.Л.

565

### Изучение методом РФЭС продуктов, образующихся на пирите и пирротине при взаимодействии с хлоридными растворами палладия(II)

**Ключевые слова:** рентгеновская фотоэлектронная  
спектроскопия, сульфидные минералы, пирит, пирротин,  
сульфиды палладия, хлоридные комплексы палладия

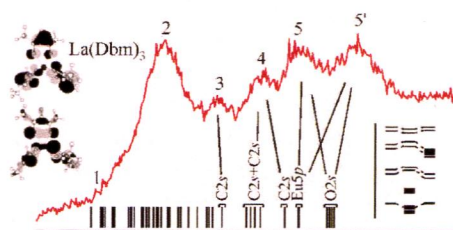


Шурыгин А.В., Короченцев В.В., Осьмушко И.С.,  
Чередниченко А.И., Яшин В.А., Вовна В.И.

572

### Ультрафиолетые, рентгеновские фотоэлектронные спектры и электронная структура $\beta$ -дикетонатных комплексов $\text{Eu(III)}$ и $\text{Lu(III)}$

**Ключевые слова:** фотоэлектронная спектроскопия,  
теория функционала плотности,  
хелаты редкоземельных элементов, La, Eu, Lu,  
электронное строение

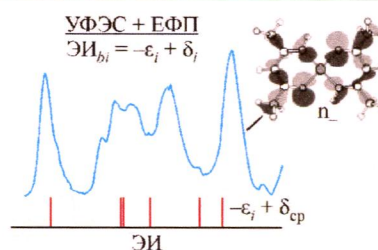


Комиссаров А.А., Короченцев В.В., Вовна В.И.

582

### Электронное строение на основании ультрафиолетовых фотоэлектронных спектров и теории функционала плотности азотсодержащих внутрикомплексных соединений никеля(II)

**Ключевые слова:** ацетилацетоиминат никеля,  
фотоэлектронные спектры, теория функционала плотности,  
электронная структура, дефект Купманса

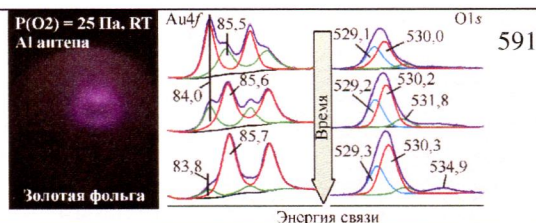




Стадниченко А.И., Кошеев С.В., Боронин А.И.

**Исследование методами РФЭС и ТПД пленок оксида золота, полученных при воздействии кислорода, активированного ВЧ-разрядом**

**Ключевые слова:** оксид золота, адсорбированный кислород, золото, поверхность, РФЭС, ТПД, плазма, оксидная пленка

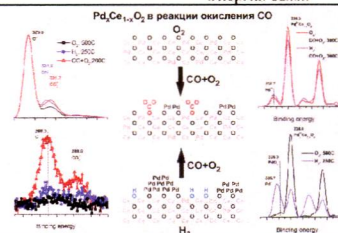


591

Гуляев Р.В., Осадчий Д.Ю., Кошеев С.В., Боронин А.И.

**Пленки твердого раствора  $Pd_xCe_{1-x}O_2$  как модельный объект для изучения химии поверхности катализаторов Pd/CeO<sub>2</sub> методом РФЭС**

**Ключевые слова:** палладий, оксид церия, твердый раствор, катализаторы, низкотемпературное окисление CO, фотоэлектронная спектроскопия, пленки, деконволюция

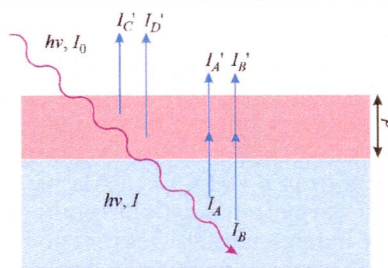


601

Калажиков З.Х., Карамурзов Б.С., Кочур А. Г., Мисакова Л.Б., Карданова З.В., Калажиков Х.Х.

**Расчет состава чистой поверхности бинарного сплава по данным РФЭС, полученным после контакта поверхности сплава с воздушной средой**

**Ключевые слова:** поверхность, электронный спектрометр, длина свободного пробега, элементный состав, сплав, загрязнения, поверхностный слой, фотоэмиссия, адсорбционная пленка

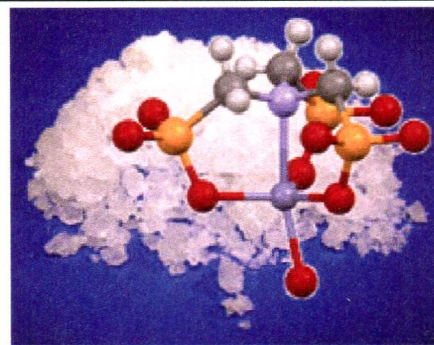


612

Чаусов Ф.Ф., Наймушина Е.А., Шабанова И.Н., Сомов Н.В.

**Синтез и структура ингибитора коррозии – тетраэтрий нитрилотрисметилефосфатаоцинката тридекагидрата  $Na_4 [Zn N(CH_2PO_3)_3] \cdot 13H_2O$**

**Ключевые слова:** ингибитор коррозии, координационные соединения, цинк, органофосфонатный комплекс, нитрилотрисметилефосфонат, внутримолекулярная координация, хелатные комплексы

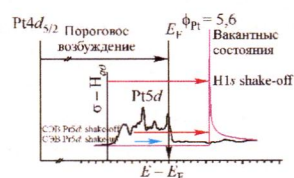


619

Чолач А.Р., Тапилин В.М.

**Механизм сопряженных электронных переходов на поверхности твердого тела**

**Ключевые слова:** электронная спектроскопия, пороговое возбуждение, сопряженные электронные переходы, платина

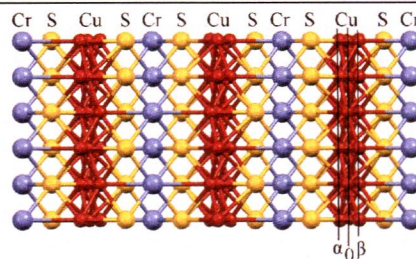


626

Коротаев Е.В., Сыровкашин М.М., Перегудова Н.Н., Канажевский В.В., Мазалов Л.Н., Соколов В.В.

**Влияние ближнего локального окружения атомов меди на XANES-структуру спектров поглощения слоистых дисульфидов хрома-меди**

**Ключевые слова:** слоистые дисульфиды хрома-меди, кристаллы, XANES, метод конечных разностей, метод многократного рассеяния



633

Содержание следующего номера — в конце журнала