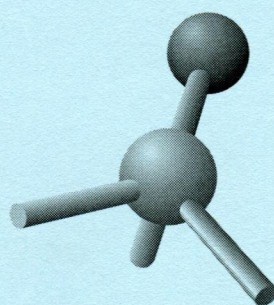


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 57
январь
февраль
2016

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 1

НОВОСИБИРСК

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

ТОМ 57

Январь-февраль

№ 1, 2016

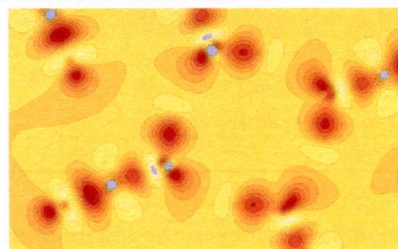
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Фёдоров И.А., Журавлёв Ю.Н., Киселёва Е.А.

Первопринципное исследование влияния давления на структурные и электронные свойства кристаллического азида водорода

Ключевые слова: органические азиды, дисперсионные силы, теория функционала плотности, уравнение состояния, давление, электронное строение, химическая связь, скорость детонации

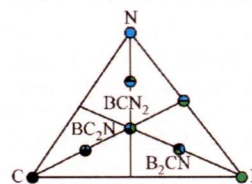


7

Басалаев Ю.М.

Влияние подрешеток на формирование зонной структуры кристаллов с решеткой халькопирита: B_2CN , BC_2N , BCN_2

Ключевые слова: халькопирит, антихалькопирит, подрешетка, B_2CN , BC_2N , BCN_2

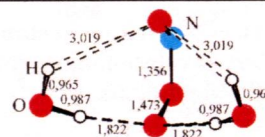


15

Симон К.В., Тулуб А.В.

Пероксинитрид в составе гемма

Ключевые слова: структура гемма, неэмпирические расчеты, O_2/NO химия

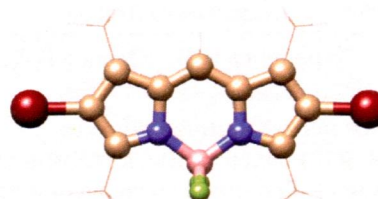


21

Гусева Г.Б., Антина Е.В., Ксенофонов А.А.,
Нуранеева Е.Н.

Квантово-химическое исследование молекулярного строения комплексов цинка(II) и бора(III) с моноод- и дибромзамещенными дипирринами

Ключевые слова: дипирринаты, комплексы, молекулярная структура, геометрические характеристики, теория функционала электронной плотности



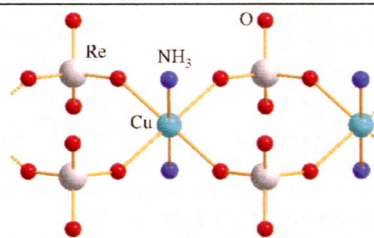
32

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Громилов С.А., Тютюнник А.П., Пирязев Д.А.,
Плюснин П.Е., Корнев С.В.

Рентгенографическое исследование превращения [Cu(NH₃)₄](ReO₄)₂ в [Cu(NH₃)₂(μ-ReO₄)₂]_n

Ключевые слова: медь, перренат, термолиз,
рентгенофазовый анализ, рентгеноструктурный анализ,
кристаллохимия

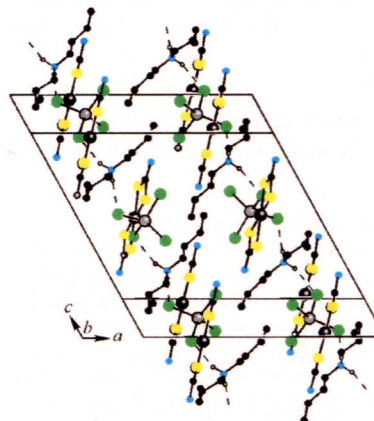


145

Родина Т.А., Лосева О.В., Смоленцев А.И.,
Иванов А.В.

Получение, структурная организация и термическое поведение ионно-полимерного комплекса золота(III)–цинка–дибутиламмония состава ([NH₂(C₄H₉)₂][Au{S₂CN(C₄H₉)₂}]₂[ZnCl₄])_n

Ключевые слова: диалкилдитиокарбаматы цинка
со свойствами хемосорбентов,
формы связывания золота из растворов,
гетероядерные комплексы золота(III)–цинка,
кристаллическая и молекулярная структура, РСА,
синхронный термический анализ,
электронная растровая микроскопия
и рентгеноспектральный микроанализ

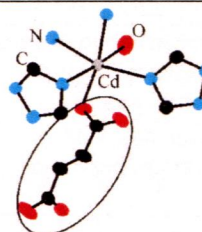


151

Lin C.-J., Zhou L.-X., Niu Q.-J., Zheng Y.-Q.,
Zhu H.-L., Zhang B.-B.

Three metal-organic polymers assembled from Cd(II)–fluconazole: syntheses, crystal structures, and characterization

Keywords: Cd(II) complexes, fluconazole, crystal structures,
topology

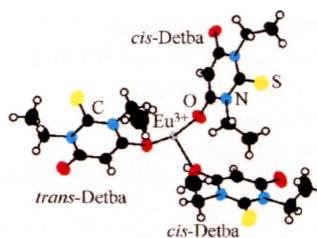


160

Головнёв Н.Н., Молокеев М.С., Верещагин С.Н.

Кристаллическая структура и некоторые свойства катена-{трис(1,3-диэтил-2-тиобарбитурата) европия(III)}

Ключевые слова: кристаллическая структура, комплекс,
европий(III), 1,3-диэтил-2-тиобарбитуровая кислота,
термография, ИК спектроскопия, фотолуминесценция



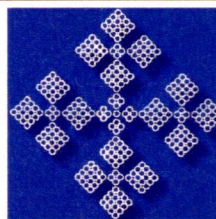
171

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

Микитаев А.К., Козлов Г.В.

Физические основы катализа реакции сшивания эпоксиполимеров с углеродными нанотрубками

Ключевые слова: эпоксиполимер,
углеродные нанотрубки, сшивание, микрогель,
фрактальная размерность



179

Khanfekr A., Tamizifar M., Naghizadeh R.

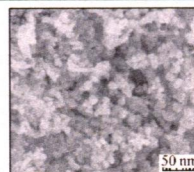
Effects of donor concentration on structure of Nb-doped nano-sized BaTiO₃ powders prepared by microwave-hydrothermal synthesis methods

Keywords: barium titanate, perovskites, niobium doping,
chemical synthesis, microwave sintering, microstructure



185

Bagheri ghomi A.

ZnO and MgO nanoparticles: synthesis and comparative study on their properties**Keywords:** nanoparticle, ZnO, MgO, photocatalyst, bond gap

192

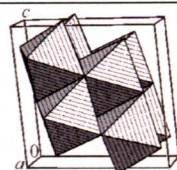
Huang Q.-W., Wang S.-X., Liu S.-G., Su W.-Y., Li G.-B., He Y.-M.

Crystal structure and antitumor activities of dinuclear cobalt(II) complex based on *meso*-1, 2, 3, 4-tetra(1H-benzo[d]imidazol-2-yl)butane**Keywords:** benzimidazole, cobalt complex, crystal structure, antitumor activities

198

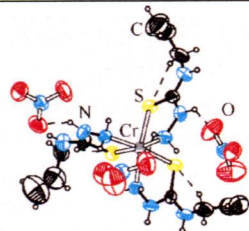
КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

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

Кристаллическая структура W₄**Ключевые слова:** иод, вольфрам, кристаллическая структура

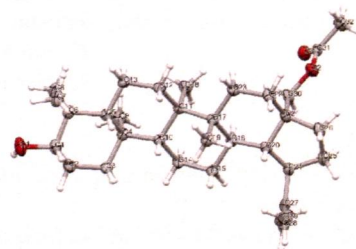
203

Чумаков Ю.М., Петренко П.А., Граур В.О., Цапков В.И., Гуля А.П.

Кристаллическая структура нитрата трис(4-аллилтиосемикарбазид)хрома(III) гидрата**Ключевые слова:** рентгеноструктурный анализ, координационные соединения хрома, 4-аллилтиосемикарбазид

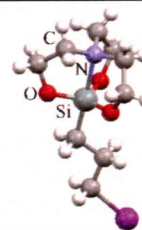
206

Сулеймен Е.М., К. Van Hecke

Кристаллическая структура и абсолютная конфигурация 28-O-ацетилбетулина**Ключевые слова:** тритерпеноид, бетулин, 28-O-ацетилбетулин, ЯМР спектроскопия, рентгеноструктурный анализ

210

Стерхова И.В., Смирнов В.И., Кузнецова Г.А., Зельбст Э.А.

Кристаллическая и молекулярная структура 1-(иодметил)- и 1-(иодпропил)силатранов**Ключевые слова:** 1-(иодметил)силатран, 1-(иодпропил)силатран, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ

213

Содержание следующего номера — в конце журнала