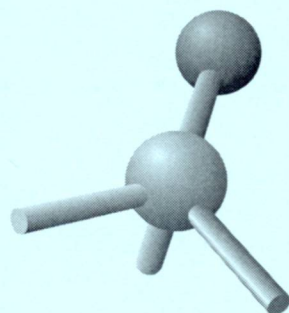


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 57
май
июнь
2016

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 4

НОВОСИБИРСК

ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

ТОМ 57

Май-июнь

№ 4, 2016

СОДЕРЖАНИЕ

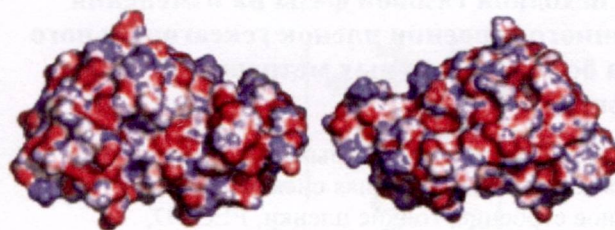
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Митин А.В.

675

**Атомная структура
верхних молекулярных орбиталей
малого тетра-гема цитохрома с 1M1P**

Ключевые слова: неэмпирический расчет,
приближение ЛКАО, метод Хартри–Фока,
молекулярные орбитали, анализ заселенности

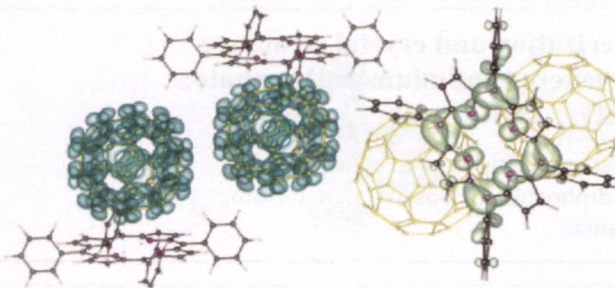


Краснов П.О., Кузубов А.А., Холтобина А.С.,
Ковалёва Е.А., Кузубова М.В.

681

**Оптические переходы с переносом заряда
в супрамолекулярных соединениях
фуллеренов и порфиринов
в кристаллической форме**

Ключевые слова: фотогальванические элементы,
квантово-химические расчеты,
теория функционала плотности, DFPT,
дисперсионное взаимодействие

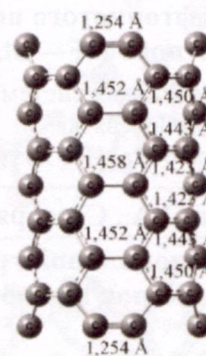


Бутырская Е.В., Запрягаев С.А., Нечаева Л.С.,
Карпушин А.А., Измайлова Е.А.

688

**Влияние метода и базиса расчета
на структуру и электрические свойства
углеродных нанотрубок (4,4)
различной длины с открытыми концами**

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование,
углеродные нанотрубки, размерные эффекты,
структура углеродных нанотрубок,
термодинамические характеристики,
электрические свойства

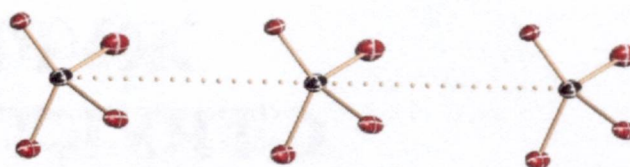


Кавун В.Я., Удовенко А.А., Макаренко Н.В.,
Земнухова Л.А., Подгорбунский А.Б.

697

Ионная подвижность и проводимость в соединении $\text{Li}(\text{NH}_3\text{CH}_2\text{COO})(\text{NO}_3)$

Ключевые слова: нитратоглицинат лития, кристаллическая структура, ЯМР (^7Li , ^1H) спектроскопия, ионная подвижность, ионная проводимость

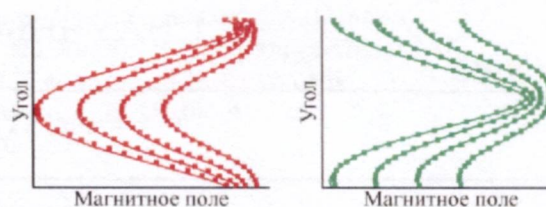


Надолинный В.А., Рядун А.А., Шлегель В.Н.,
Иванникова Н.В.

704

ЭПР ионов меди в кристаллах Pb_2MoO_5

Ключевые слова: ЭПР спектроскопия, кристаллы Pb_2MoO_5 , примесные ионы меди

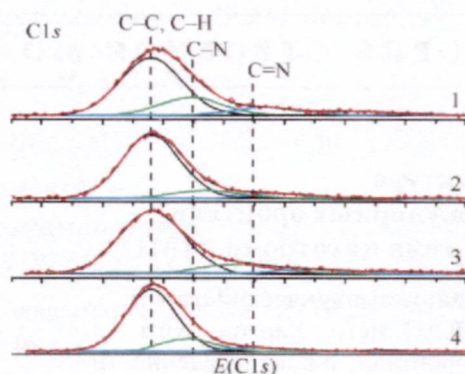


Ильинчик Е.А., Меренков И.С.

709

Рентгеноэлектронное исследование влияния состава исходной газовой фазы на изменения электронного строения пленок гексагонального нитрида бора, полученных методом PECVD из боразина

Ключевые слова: гексагональный нитрид бора, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, электронное строение, тонкие пленки, PECVD, боразин, наностенки

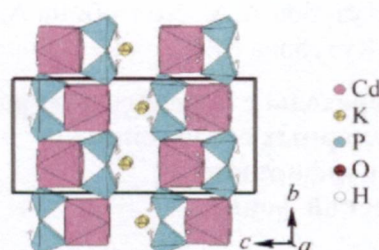


Kouass S., Selmi A., Chebbi H., Guesmi A.

717

Characterization and crystal structure of a new layered cadmium diphosphate: $\text{KCaHP}_2\text{O}_7 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

Keywords: synthesis, crystal structure, cadmium diphosphate, Bond-Valence-Sum, FT-IR, Raman



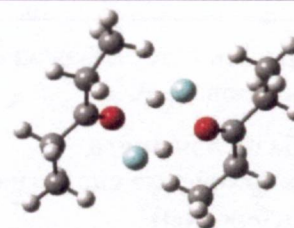
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В.

722

Строение комплексов фтористого водорода с диэтилкетон в растворе $\text{HF}-\text{Et}_2\text{CO}$

Ключевые слова: двойная жидкая система, ИК спектроскопия, водородная связь, комплексы фтористого водорода, HF, диэтилкетон

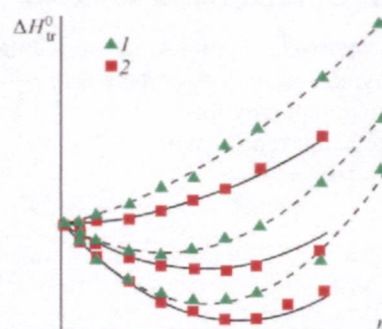


Королёв В.П., Антонова О.А., Серебрякова А.Л.

729

Взаимодействие функциональной группы и углеводородных радикалов аминокислот L-аланина и глицина в водных растворах NaCl, KCl и мочевины при различных температурах

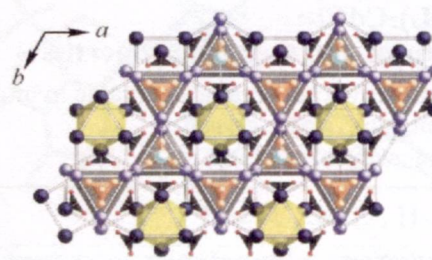
Ключевые слова: калориметрия, теплота растворения, коэффициенты парного и тройного взаимодействия, вклады групп, водные растворы, L-α-аланин, хлорид натрия, хлорид калия, мочевины



Бакакин В.В., Серёткин Ю.В.

Кристаллогенетический анализ фторидоборатов и аналогов с катионным M₇-каркасом

Ключевые слова: катионные подрешетки, катионные каркасы, темплаты, ортобораты, фторидобораты

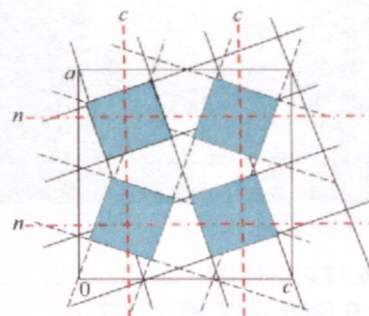


736

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

Кристаллографический анализ сульфидов, родственных висмутиниту Bi₂S₃

Ключевые слова: кристаллографический анализ, сульфиды, псевдотетрагональный катионный каркас, псевдогексагональный анионный каркас, семейство висмутинит Bi₂S₃– айкинит CuPbBiS₃, катионные и анионные подрешетки, связь симметрия–состав

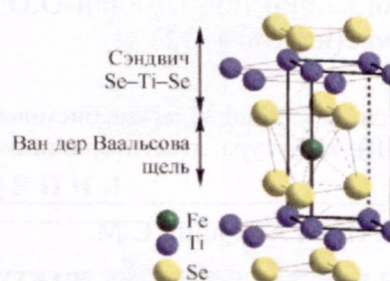


742

Шкварина Е.Г., Титов А.Н., Титова С.Г., Федорова О.М.

Структурные особенности Fe_xTiSe₂ – материалов с ретроградной растворимостью в твердом состоянии

Ключевые слова: полнопрофильный рентгенофазовый анализ, ЯГРС, ретроградная растворимость в твердом состоянии, интеркалированный железом диселенид титана

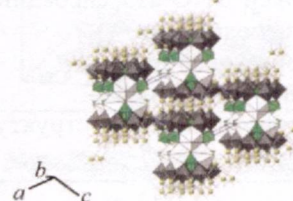


749

AlDamen M.A., Atta S.B., Haddad S.F.

Inorganic architecture based on {[Ca(H₂O)]₆[P₄W₆O₃₄]₂}¹²⁻ building block: Counteraction effect on the lattice symmetry

Keywords: sandwich polyoxometalates, calcium, crystal structure, cation effect, 3D inorganic lattice

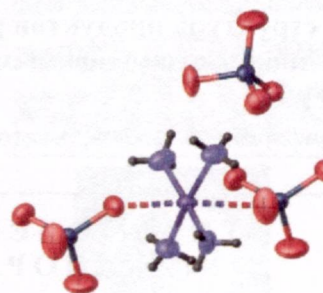


756

Громилов С.А., Храненко С.П., Пирязев Д.А., Куратьева Н.В.

Рентгеноструктурное исследование моноклинной модификации [Cu(NH₃)₄](ReO₄)₂ в интервале 100–410 К

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

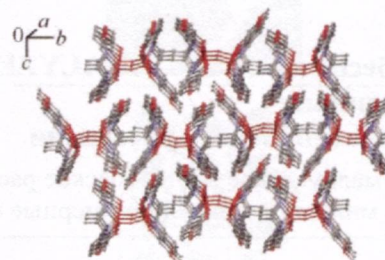


764

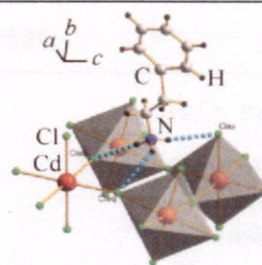
Karahan A., Kurtaran R., Yahsi Y., Gungor E., Kara H.

A dinuclear oxygen-bridged Schiff base iron(III) complex derived from N,N'-bis(4-methoxy-2-hydroxybenzylidene)-2,2,-dimethylpropane-1,3-diamine

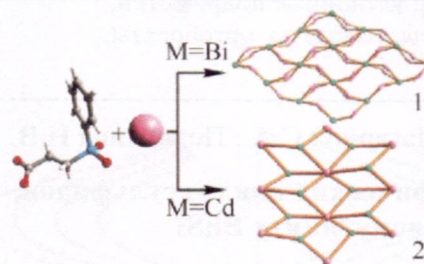
Keywords: Schiff-base ligand, iron(III) complex, X-ray crystal structure analysis, oxo-bridged structure



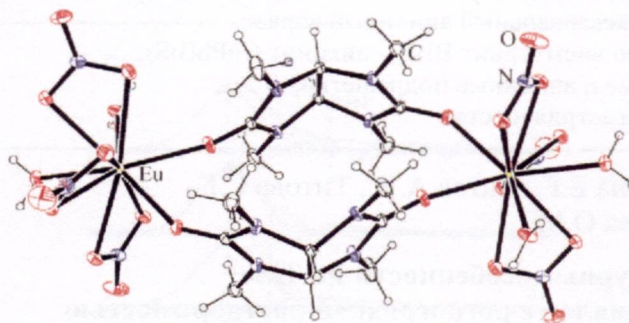
770

Organic-inorganic hybrid perovskite**(C₆H₅ (CH₂)₂NH₃)₂CdCl₄:****Synthesis, structural and thermal properties****Keywords:** layered perovskite, organic-inorganic hybrid, structural phase transition, single crystal, differential scanning calorimetry (DSC)

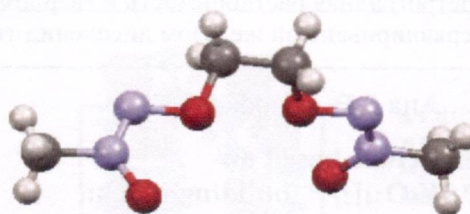
Liu B., Zhang Z.-H., Xu L., Jiao H.

Structures, properties and topologies of two layered compounds based on 2-carboxethyl(phenyl)phosphinic acid**Keywords:** crystal structure, fluorescence, 2-carboxyethyl(phenyl)phosphinic acid, TGA, topology

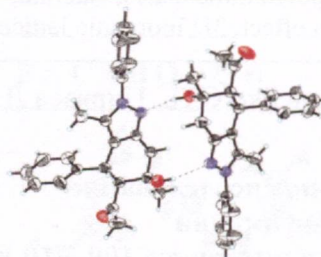
Нетреба Е.Е., Сарнит Е.А., Шабанов С.В., Великожон А.А., Сомов Н.В.

Кристаллическая структура нового биядерного комплекса бис(2,4,6,8-тетраметил-2,4,6,8-тетраазабицикло(3.3.0)октан-3,7-дион-О,О')-тетрааква-гексакис(нитрато-О,О')-диевропия(III)**Ключевые слова:** синтез, биядерные бисмочевины, мебикар, европий(III), структура, десятивершинник, ИК, РСА

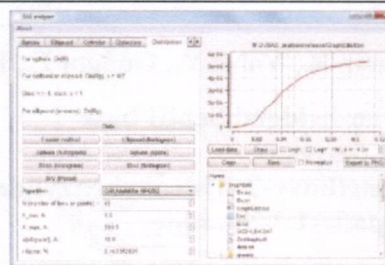
Алиев З.Г., Зюзин И.Н., Алдошин С.М.

Молекулярная и кристаллическая структура 1,2-бис(метил-ОНН-азокси-окси)этана**Ключевые слова:** алкокси-NNO-азоксисоединения, алкил-ОНН-азокси-оксисоединения, 1,2-бис(метил-ОНН-азокси-окси)этан, (2Z,8Z)-4,7-диокса-2,3,8,9-тетраазадека-2,8-диен-2,9-диоксид, кристаллическая структура, *gosh*-конформация

Магеррамов А.М., Исмиев А.И., Аллахвердиев М.А., Малеев А.В., Потехин К.А.

Кристаллическая структура продуктов реакции фенилгидразина с диацетилзамещенным кетолом циклогексанового ряда**Ключевые слова:** конформация циклов, β-кетолы, N-фенилпиразолы**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Полуянов С.А., Тузиков Ф.В., Ларичев Ю.В., Цыбуля С.В.

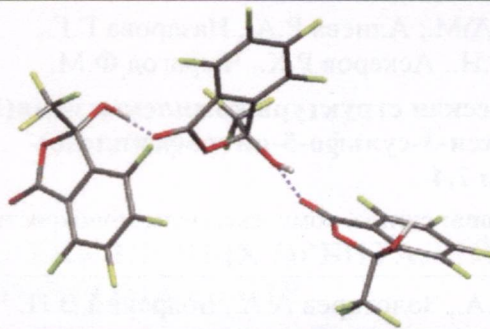
Программное обеспечение SAS_ANALYZER для обработки данных малоуглового рентгеновского рассеяния**Ключевые слова:** малоугловое рентгеновское рассеяние, обработка данных, минимизация, наноразмерные системы

Рыбалова Т.В., Гатилов Ю.В., Зонов Я.В.,
Карпов В.М.

815

Супрамолекулярная архитектура кристаллов перфторированных 3-алкилфталидов

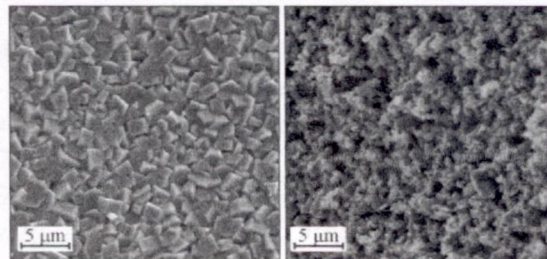
Ключевые слова: 3-гидрокси-перфтор-3-алкилфталиды, рентгеноструктурный анализ, межмолекулярные взаимодействия, квантово-химические расчеты, супрамолекулярная архитектура, полиморфы



Jodaian V., Langeroodi N.S., Najafi E.

Structure and photoluminescence properties of TiO₂ nanoparticles synthesized from a novel luminescent nano-titanium complex

Keywords: titanium complex, photoluminescence, size effect, TiO₂, Raman vibration



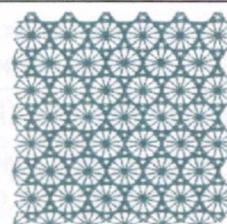
822

ОБЗОРЫ

Маленков Г.Г.

Структуры элементов IV группы и твердых фаз воды

Ключевые слова: полиморфизм, лед, углерод, кремний, германий, олово, кристаллические структуры, аморфные тела, клатратные соединения



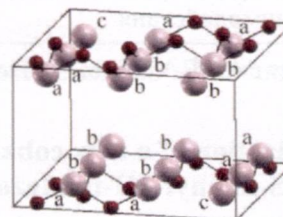
831

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Банников В.В., Шеин И.Р.

Электронное строение нестехиометрических слоистых фаз LaZnAsO_{1-δ} со структурой ZrCuSiAs: FLAPW-GGA моделирование

Ключевые слова: 1111 фазы, нестехиометрия, *ab initio* моделирование

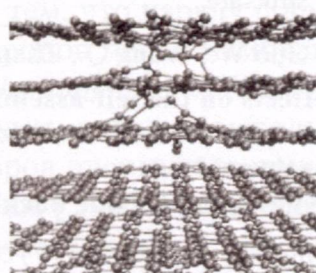


843

Шеин И.Р., Кузнецов М.В., Еняшин А.Н.

Молекулярнодинамическое моделирование образования дефектов в тонких пленках графита методом функционала электронной плотности в приближении сильной связи

Ключевые слова: графен, графит, точечные дефекты, метод функционала электронной плотности, молекулярная динамика



846

Виноградова И.С., Фалалеев О.В.

Свободная вода в семенах фасоли: процесс набухания по данным магнитно-резонансной микротомографии

Ключевые слова: ¹H магнитно-резонансная микротомография, семена фасоли, набухание семян, распределение воды

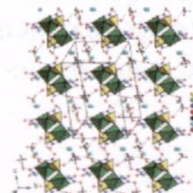


851

Ouerfelli N., Chebbi H., Faouzi Zid M.

Crystal structure of a novel layered iron arsenate-oxalate (NH₄)₃K₃[Fe₂(HAsO₄)₂(C₂O₄)₄] · 2H₂O

Keywords: synthesis, iron arsenate-oxalate, single crystal X-ray diffraction, crystal structure

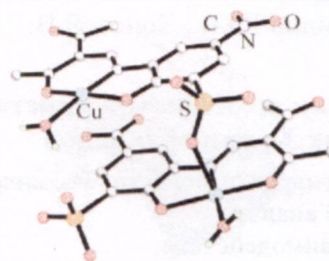


854

Магеррамов А.М., Алиева Р.А., Назарова Г.Г.,
Бахманова Ф.Н., Аскеров Р.К., Чырагов Ф.М.

**Кристаллическая структура комплекса меди(II)
с 3-(2-гидрокси-3-сульфо-5-нитрофенилазо)-
пентадионом 2,4**

Ключевые слова: синтез, комплекс, медь, монокристалл,
 β -дикетоны

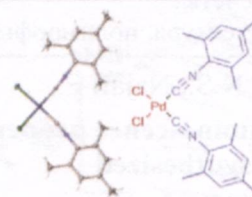


858

Кинжалов М.А., Золотарев А.А., Боярский В.П.

**Кристаллическая структура
комплекса *цис*-[PdCl₂(CNMe_s)₂]**

Ключевые слова: синтез, комплексы палладия,
изоцианиды

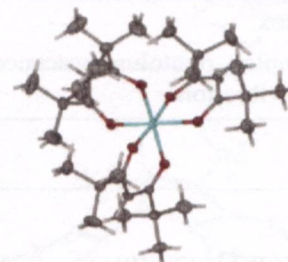


861

Сысоев С.В., Наумов Д.Ю., Куратьева Н.В.,
Жерикова К.В., Громилов С.А., Морозова Н.Б.,
Кузин Т.М., Гельфонд Н.В.

**Кристаллохимическое исследование
трис-дипивалоилметаната рутения(III)**

Ключевые слова: рутений, дипивалоилметан,
рентгеноструктурный анализ, кристаллохимия

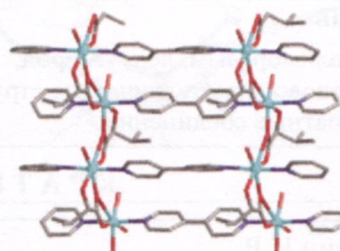


865

Завахина М.С., Самсоненко Д.Г., Федин В.П.

**Кристаллическая структура двух гомохиральных
металл-органических полимеров на основе
S-3,3-диметилмолочной кислоты**

Ключевые слова: кристаллическая структура,
координационные полимеры, хиральные комплексы,
супрамолекулярные взаимодействия

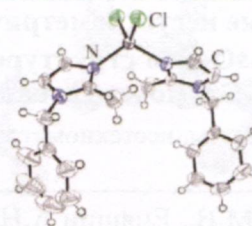


868

Bouchouit M., Bouraiou A., Bouacida S., Belfaitah A.,
Merazig H.

**Structural characterization of a new cobalt(II)
complex of 1-benzyl-5-methyl-1H-imidazole**

Keywords: X-ray crystallographic analysis, imidazole,
cobalt complex, crystal structure

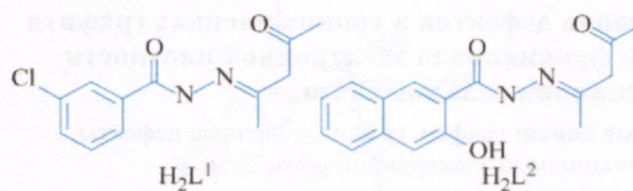


873

Cui Y.-M., Yang D., Guo W., Wang Q., Zhang P.

**Substituent group effects on the self-assembly
of oxovanadium(V) complexes with hydrazone
ligands bearing benzoic acid
(1-methyl-3-oxobutylidene)hydrazone backbones**

Keywords: hydrazone ligands, oxovanadium(V) complex,
self-assembly, substituent effects, crystal structure

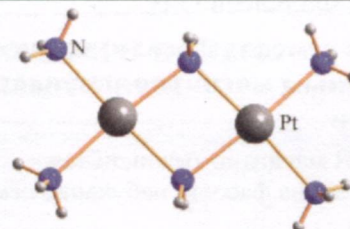


877

Ye Q.-S., Xie M.-J., Li X.-N., Liu W.-P., Yu J.,
Chang Q.-W., Jiang J., Yan C.-X., Li J.

**Crystal structure of di- μ -amido-
bis[diammineplatinum(II)] nitrate**

Keywords: synthesis, platinum, amide, ammine,
crystal structure



882

Содержание следующего номера — в конце журнала