



ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

Том 58  
ИЮНЬ  
ИЮЛЬ  
2017



# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



60 ЛЕТ ИНСТИТУТУ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ  
ИМ. А.В. НИКОЛАЕВА СО РАН

№ 5

НОВОСИБИРСК

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

ТОМ 58

Июнь-июль

№ 5, 2017

60 ЛЕТ ИНСТИТУТУ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ  
ИМ. А.В. НИКОЛАЕВА СО РАН

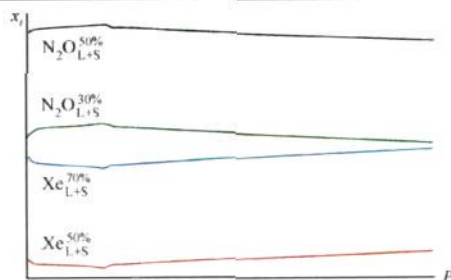
## СОДЕРЖАНИЕ

### ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Божко Ю.Ю., Субботин О.С., Гец К.В.,  
Жданов Р.К., Белослудов В.Р.

**Моделирование термобарических условий  
образования, состава и структуры  
для смешанных гидратов,  
содержащих ксенон и закись азота**

**Ключевые слова:** решеточная динамика,  
термодинамические свойства, фазовые равновесия,  
двойные клатратные гидраты, закись азота, ксенон



891

Рыжиков М.Р., Козлова С.Г.

**Индукцируемые токи и химические сдвиги  
ЯМР <sup>1</sup>H в кластерах переходных металлов  
(μ-H)<sub>2</sub>Fe<sub>3</sub>(μ<sub>3</sub>-Q)(CO)<sub>9</sub> (Q=S, Se, Te)**

**Ключевые слова:** кластерные трехъядерные соединения  
железа, индуцируемые токи, химические сдвиги ЯМР <sup>1</sup>H,  
теория функционала плотности

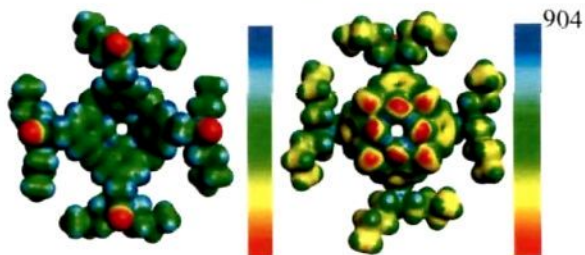


899

Мазалов Л.Н., Лаврухина С.А., Федоренко А.Д.,  
Семущкина Г.И., Калинин А.В.

**Электронное строение функционализированных  
три- и каликс[4]аренов**

**Ключевые слова:** рентгеновская эмиссионная  
спектроскопия, рентгеновская фотоэлектронная  
спектроскопия, квантово-химические расчеты,  
метод DFT, каликс[4]аренфосфиноксиды,  
тиакаликс[4]аренфосфиноксиды, экстрагент



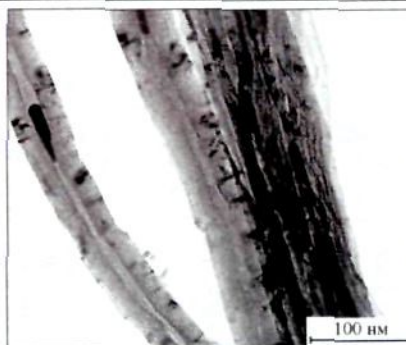
904

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Федосеева Ю.В., Дуда Т.А., Куреня А.Г.,  
Гусельников А.В., Журавлёв К.С., Вилков О.Ю.,  
Булушева Л.Г., Окотруб А.В.

**Рентгеноспектральное исследование  
наночастиц CdS, сформированных  
на поверхности массивов углеродных  
нанотрубок методом Ленгмюра–Блоджетт**

**Ключевые слова:** наночастицы CdS, углеродные  
нанотрубки, рентгеновская фотоэлектронная  
спектроскопия, рентгеновская спектроскопия  
поглощения, электронное строение

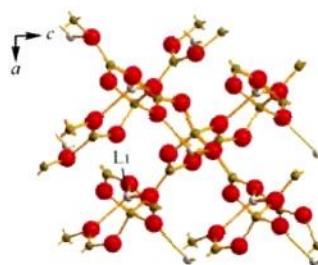


915

Рядун А.А., Надолинный В.А., Антонова О.В.,  
Рахманова М.И.

**Примесные и радиационные дефекты  
в кристаллах LiB<sub>3</sub>O<sub>5</sub>. Природа центров  
в кристаллах LiB<sub>3</sub>O<sub>5</sub>, ответственных  
за появление окраски в процессе длительной  
эксплуатации оптических элементов**

**Ключевые слова:** люминесценция, ЭПР спектроскопия,  
кристаллы трибората лития, катионные вакансии

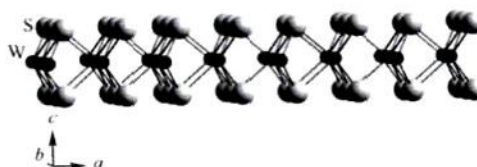


924

Романенко А.И., Яковлева Г.Е., Фёдоров В.Е.,  
Леднева А.Ю., Кузнецов В.А., Сотников А.В.,  
Цыганкова А.Р., Кучумов Б.М.

**Электронные транспортные свойства  
термоэлектриков на основе слоистых  
дихалькогенидов переходных металлов  
с замещениями**

**Ключевые слова:** слоистые халькогениды переходных  
металлов, электропроводность, термоэдс

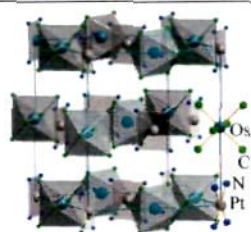


932

Асанова Т.И., Асанов И.П., Ким М.-Г., Корнев С.В.

***In situ* рентгеноспектральное исследование  
термического разложения двойной комплексной  
соли [Pt(NH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>][OsCl<sub>6</sub>]**

**Ключевые слова:** наносплав PtOs, биметаллические  
наночастицы, [Pt(NH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>][OsCl<sub>6</sub>], механизм термического  
разложения, XAFS, РФЭС, размерный эффект

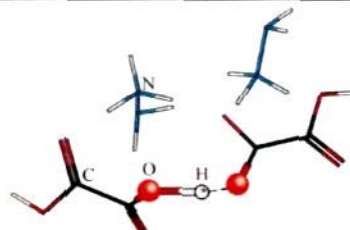


940

Галкина Ю.А., Крючкова Н.А., Вершинин М.А.,  
Колесов Б.А.

**Особенности проявления сильных  
водородных связей O—H...O и N—H...O  
в колебательных спектрах**

**Ключевые слова:** спектры КР, сильные водородные связи,  
квантово-химический расчет, изотопозамещение

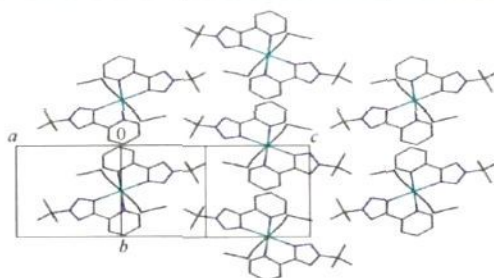


950

Шакирова О.Г., Лавренова Л.Г., Куратьева Н.В.,  
Богомяков А.С., Шелудякова Л.А., Мосалкова А.П.,  
Григорьев Ю.В.

**Исследование комплексов дицианамид  
и роданида железа(II)  
с 2-(2-трет-бутилтетразол-5-ил)пиридином**

**Ключевые слова:** синтез, координационные соединения,  
железо(II), 2-(2-трет-бутилтетразол-5-ил)пиридин,  
структура, магнитные свойства



958

**СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ**

Габуда С.П., Козлова С.Г., Компаньков Н.Б.,  
Редькина К.С.

**Распределение молекул на границе раздела фаз  
в водном растворе триэтиламина. ЯМР <sup>1</sup>H**

**Ключевые слова:** водный раствор триэтиламина,  
фазовый переход, ЯМР <sup>1</sup>H



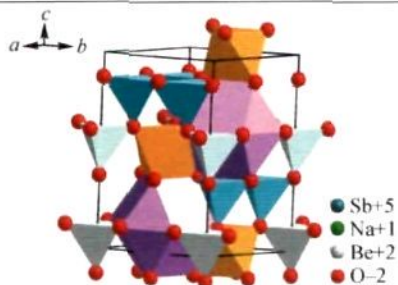
965

**КРИСТАЛЛОХИМИЯ**

Подберезская Н.В., Комаров В.Ю., Каменева М.Ю.,  
Козеева Л.П., Лавров А.Н.

**Исследование структурной реализации  
нестехиометрии по кислороду  
в монокристаллах RВaCo<sub>4</sub>O<sub>7+x</sub>**

**Ключевые слова:** кобальтаты, монокристаллы,  
нестехиометрия по кислороду, структурный анализ,  
обработка рентгенодифракционных данных,  
структурные модели

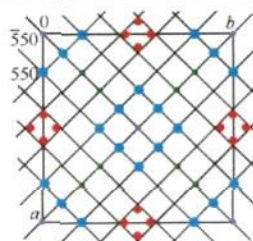


969

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

**Кристаллографический анализ атомных  
структур в исследовании механизмов  
кристаллизации**

**Ключевые слова:** кристаллографический анализ,  
катионные подрешетки, механико-волновая концепция  
кристаллического состояния, когерентная сборка,  
механизм кристаллизации

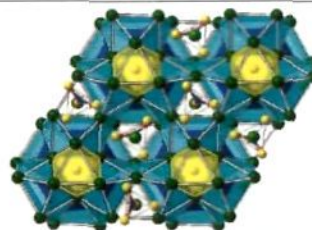


979

Бакакин В.В.

**О двойственной функции анионов  
в кристаллогенезисе соединений –  
структуро-направляющей и стабилизирующей**

**Ключевые слова:** катионные каркасы, темплаты,  
ортобораты, фторидобораты бария,  
фторидобораты свинца, антицеолиты

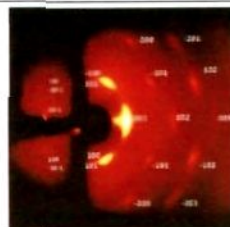


986

Сухих А.С., Басова Т.В., Громиллов С.А.

**Использование данных 2D дифрактометрии  
ориентированных образцов при выборе  
элементарной ячейки**

**Ключевые слова:** рентгеновская дифрактометрия  
поликристаллов, ориентированные образцы,  
тонкие пленки, индицирование, фталоцианины палладия

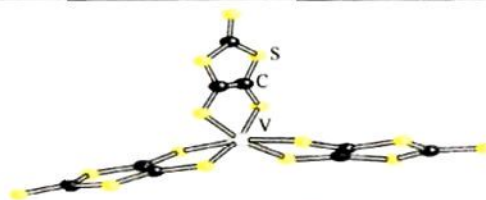


992

Фоменко Я.С., Гушин А.Л., Надолинный В.А.,  
Абрамов П.А., Соколов М.Н.

**Кристаллическая структура и спектры ЭПР  
( $\text{Bu}_4\text{N}$ ) $_2$ [V(dmit) $_3$ ]**

**Ключевые слова:** ванадий, дитиолатные комплексы,  
кристаллическая структура, спектры ЭПР

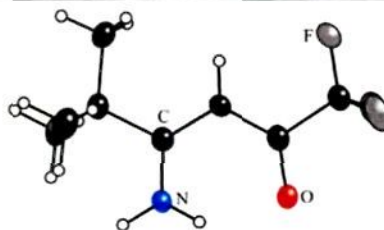


1003

Жаркова Г.И., Байдина И.А., Смоленцев А.И.,  
Стабников П.А., Морозова Н.Б.

**Структура и термические свойства нового  
летучего бис(1,1,1-трифтор-5,5-диметил-3-гексен-  
4-имино-2-оната) платины(II)**

**Ключевые слова:**  $\beta$ -иминокетонаты Pt(II), структура,  
летучесть, прекурсор для MOCVD

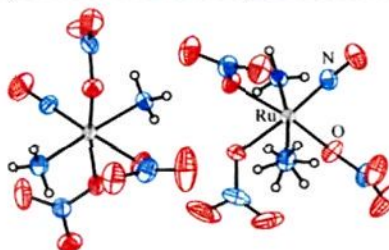


1009

Воробьев В.А., Емельянов В.А., Байдина И.А.,  
Пирязев Д.А.

**Первый пример кристаллической структуры  
тринитратокомплекса нитрозорутения(II)**

**Ключевые слова:** рутений, нитрозокомплексы,  
нитратокомплексы, амминоккомплексы, отработанное  
ядерное топливо, рентгеноструктурный анализ,  
расчеты DFT

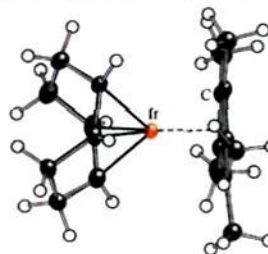


1014

Бонегардт Д.В., Ильин И.Ю., Сухих Т.С.,  
Морозова Н.Б.

**Кристаллическая структура и свойства  
(1,5-циклооктадиен)( $\eta^5$ -пентаметил-  
циклопентадиенил) иридия(I) [Ir(cod)Cp\*]**

**Ключевые слова:** иридий(I), 1,5-циклооктадиен,  
пентаметилциклопентадиен, рентгеноструктурный анализ,  
термогравиметрия

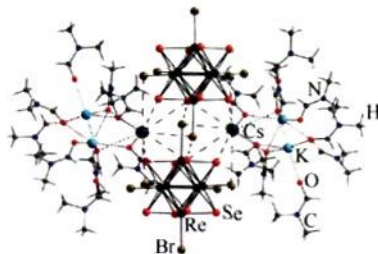


1022

Иванов А.А., Куратьева Н.В., Шестопапов М.А.,  
Мионов Ю.В.

**Кристаллическая структура  
кластерного комплекса  
[CsK $_2$ ( $\mu_3$ -DMF) $_2$ ( $\mu$ -DMF) $_3$ (DMF) $_4$ ][{Re $_6$ ( $\mu_3$ -Se) $_8$ }Br $_6$ ]**

**Ключевые слова:** синтез, рений,  
кристаллическая структура,  
октаэдрические халькогенидные кластеры

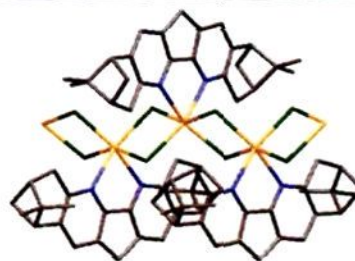


1027

Кокина Т.Е., Глинская Л.А., Васильев Е.С.,  
Рахманова М.И., Макарова С.В., Пирязев Д.А.,  
Корольков И.В., Ткачев А.В., Ларионов С.В.

**Структура и фотолюминесценция комплексов  
Zn(II) и Cd(II) с хиральным бис-пиридином,  
содержащим фрагменты природного (-)- $\alpha$ -пинена**

**Ключевые слова:** терпены, бис-пиридин, комплексы  
Zn(II) и Cd(II), структура, фотолюминесценция

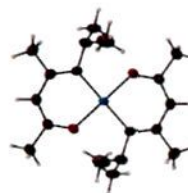


1032

Куратьева Н.В., Викулова Е.С., Шушанян А.Д.,  
Николаева Н.С., Доровских С.И., Михалёва Н.С.,  
Морозова Н.Б.

**Строение комплексов Cu(II) и Pd(II)  
с 2-(2,2-диметилгидразо)пентаноном-4)**

**Ключевые слова:** палладий(II), медь(II),  $\beta$ -кетоиминат,  
рентгеноструктурный анализ

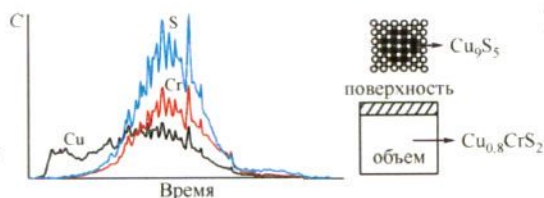


1042

Васильева И.Г.

**Химический аспект  
структурного разупорядочения  $\text{CuCrS}_2$   
и твердых растворов  $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$**

**Ключевые слова:** четверной сульфид медь-хром-ванадия, химическая неоднородность, разупорядочение, фазовые переходы



**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ  
И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Меренков И.С., Касаткин И.А., Максимовский Е.А.,  
Алфёрова Н.И., Косинова М.Л.

**Вертикально ориентированные слои  
гексагонального нитрида бора:  
PECVD синтез из триэтиламинборана  
и структурные особенности**

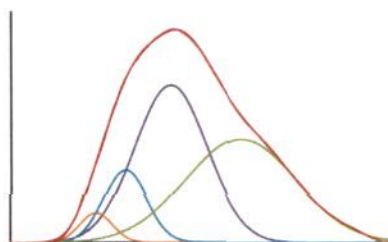
**Ключевые слова:** гексагональный нитрид бора, наностенки, PECVD, триэтиламинборан



Подлипская Т.Ю., Булавченко А.И.

**Исследование структуры водных полостей  
смешанных мицелл методом ИК–Фурье  
спектроскопии при экстракции анионных  
комплексов золота и платины**

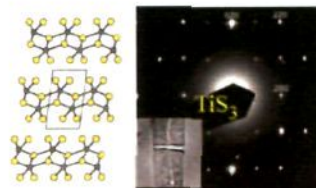
**Ключевые слова:** смешанные обратные мицеллы, Triton N-42, АОТ, экстракция, гидратная (связанная) вода, объемная (свободная) вода, ИК–Фурье спектроскопия



Полтарак П.А., Полтарак А.А., Артемкина С.Б.,  
Подлипская Т.Ю., Фёдоров В.Е.

**Получение и свойства наночастиц  
трисульфида титана**

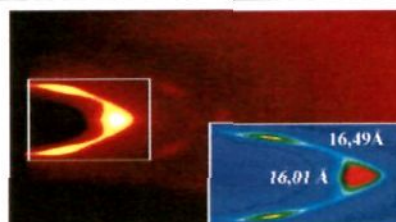
**Ключевые слова:** слоистые соединения, трисульфид титана, коллоидная дисперсия, ультразвуковое диспергирование, наночастицы трисульфида титана, фотон-корреляционная спектроскопия, гидродинамический диаметр, просвечивающая электронная микроскопия



Сухих А.С., Поляков М.С., Клямер Д.Д.,  
Громилев С.А., Басова Т.В.

**Исследование структурных особенностей  
и сенсорных свойств пленок  
2,9,16,23-тетра-*трет*-бутилфталоцианина цинка**

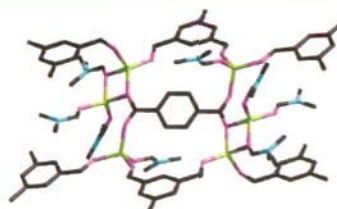
**Ключевые слова:** фталоцианины металлов, молекулярные пленки, РФА, химические сенсоры



Колтунова Т.К., Самсоненко Д.Г., Дыбцев Д.Н.,  
Федин В.П.

**Литий-карбоксилатные координационные  
полимеры на основе тримезиновой кислоты**

**Ключевые слова:** координационные полимеры, каркасные структуры, комплексы лития(I), рентгеноструктурный анализ



Содержание следующего номера — в конце журнала