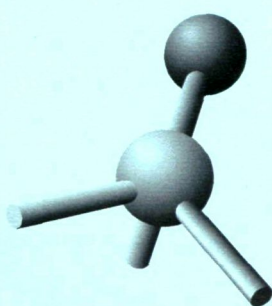


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 58
ноябрь
декабрь
2017

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



№ 8

НОВОСИБИРСК

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 58

Ноябрь-декабрь

№ 8, 2017

СО Д Е Р Ж А Н И Е

К юбилею академика Ф.А. Кузнецова 1525

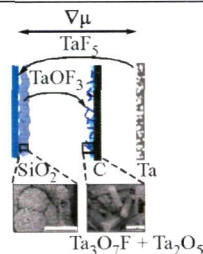
**КУЗНЕЦОВСКИЕ ЧТЕНИЯ – 2017
ЧЕТВЕРТЫЙ СЕМИНАР ПО ПРОБЛЕМАМ
ХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ
ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ
1–3 февраля 2017, ИНХ СО РАН, Новосибирск**

Лозанов В.В., Бакланова Н.И., Пирязев Д.А.

1527

**Термодинамическое моделирование
и экспериментальное исследование реакционного
химического осаждения из газовой фазы
в системе Ta—C—Si—O—F**

Ключевые слова: термодинамическое моделирование,
осаждение из газовой фазы, карбид тантала,
оксифторид тантала, монокристалл

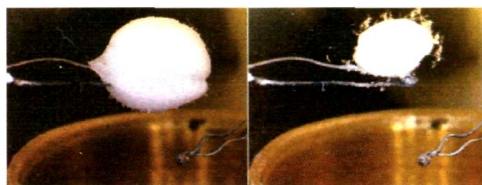


Лукашов В.В., Макаров М.С., Макарова С.Н.,
Игуменов И.К.

1534

**Молекулярно-кинетические аспекты процессов
парообразования летучих координационных
соединений с органическими лигандами**

Ключевые слова: химическое осаждение из газовой фазы,
кинетика сублимации, тепломассоперенос,
β-дикетонаты металлов

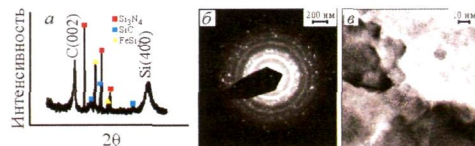


Файнер Н.И., Пушкарёв Р.В., Шестаков В.А.,
Гутаковский А.К.

1543

**Влияние условий синтеза на структуру
и свойства новых материалов SiC_xN_yMe_z
для спинтроники**

Ключевые слова: термодинамическое моделирование,
1,1,1,3,3,3-гексаметилдисилазан, ферроцен, николоцен,
кобальтоцен, химическое осаждение пленок
из газовой фазы при пониженном давлении,
нанокompозитные пленки SiC_xN_yFe_z

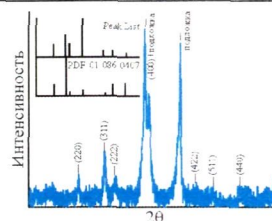


Дёмин В.Н., Смирнова Т.П., Борисов В.О., Грачёв Г.Н.,
Смирнов А.Л., Хомяков М.Н.

1553

**Новый лазерно-плазменный процесс получения
твёрдых покрытий и их структурные
характеристики**

Ключевые слова: лазерная плазма мощного оптического
разряда, нитрид углерода, твёрдые покрытия

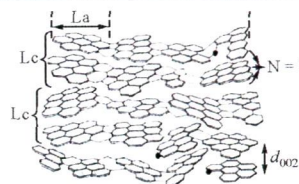


Э.М. Мороз

1560

**Возможности рентгенографических методов
в определении структурных характеристик
углеродных материалов**

Ключевые слова: рентгенографические методы,
углеродные материалы, структура наноматериалов

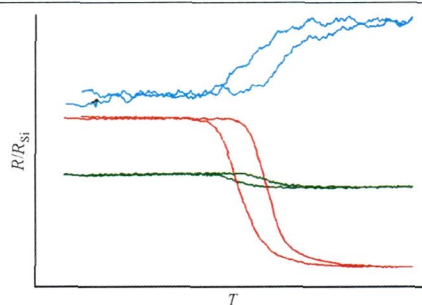


Шаяпов В.Р., Яковкина Л.В., Булина Н.В.,
Черникова Н.А.

1566

**Температурные зависимости оптических свойств
и фазового состава пленок диоксида ванадия,
полученных химическим осаждением
из газовой фазы**

Ключевые слова: диоксид ванадия, пленки,
химическое осаждение из газовой фазы,
рентгенофазовый анализ, фазовый переход,
оптические свойства

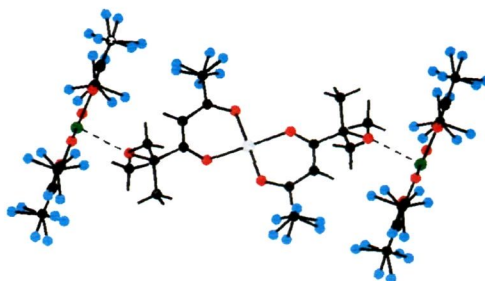


Крисюк В.В., Уркасым кызы С., Байдина И.А.,
Романенко Г.В., Корольков И.В., Корецкая Т.П.,
Петрова Н.И., Тургамбаева А.Е.

1573

**Структура и термические свойства
гетерометаллических комплексов
для газофазного осаждения Cu—Pd пленок**

Ключевые слова: медь, палладий, β-дикетонаты,
кристаллическая структура, летучий гетерометаллический
комплекс, термические свойства, биметаллические пленки,
MOCVD прекурсор

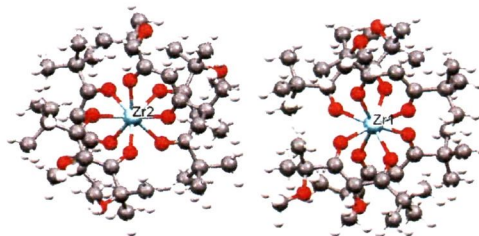


Тургамбаева А.Е., Крисюк В.В., Байдина И.А.,
Корольков И.В., Ильин И.Ю., Уркасым кызы С.,
Игуменов И.К.

1581

**Летучие комплексы циркония со стерически
затрудненными β-дикетонатами: структура
и термические свойства**

Ключевые слова: цирконий, дикетонаты,
кристаллическая структура, летучий металлоорганический
комплекс, термические свойства, термолит,
MOCVD прекурсор

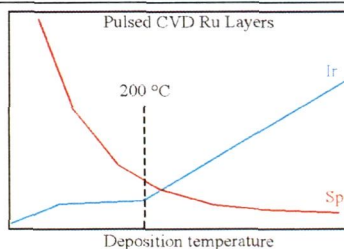


Васильев В.Ю.

1589

**Структура, состав и электрическое сопротивление
тонких слоев металлического рутения, полученных
импульсным осаждением из газовой фазы**

Ключевые слова: слои рутения, карбонил-диеновый
предшественник, импульсное осаждение из газовой фазы,
плотность, структура, состав
и электрическое сопротивление слоев рутения

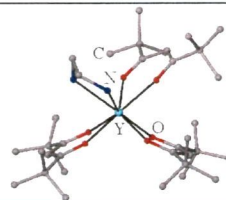


Мосягина С.А., Куратьева Н.В., Жерикова К.В.

1597

**Кристаллическая структура
трис-(дипивалоилметанато)(этилендиамин)-
иттрия(III)**

Ключевые слова: иттрий, дипивалоилметан, этилендиамин, синтез, рентгеноструктурный анализ

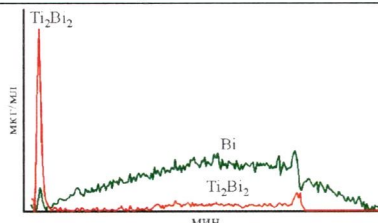


Малахов В.В.

1602

**Стехиография в исследовании пространственной
неоднородности химического состава и структуры
тонких пленок и наноструктурированных систем**

Ключевые слова: стехиографический метод
дифференцирующего растворения,
фазовый состав тонких пленок

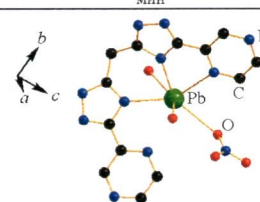


Gao E.-J., Meng B., Su J.-Q., Peng T.-T., Qi Z.-Z., Jia B.,
Feng Y.-H., Zhu M.-C.

1610

**Structure, DNA bonding and biological activity
of a novel Pb(II) complex
of 1,1-bis(5-(pyrazin-2-yl)-1,2,4-triazol-3-yl) methane**

Keywords □Pb complex, DNA binding, biological activity

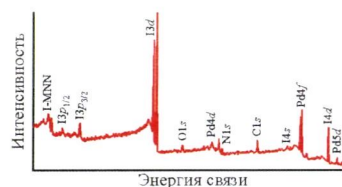


Юданова Е.С., Дуда Т.А., Терещенко О.Е.,
Семёнова О.И.

1617

**Свойства монокристаллов
тридидоплюмбата(II) метиламмония**

Ключевые слова: синтез, рост кристаллов,
фотолюминесценция, фотоэлектронная спектроскопия,
солнечный элемент

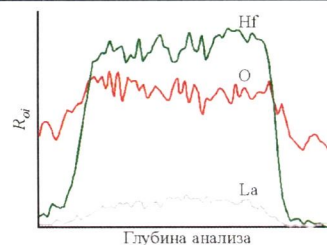


Смирнова Т.П., Яковкина Л.В., Борисов В.О.,
Лебедев М.С.

1623

**Фазовый состав наноразмерных оксидных
пленочных структур на основе HfO₂,
легированного лантаном и скандием**

Ключевые слова: пленки, легирование,
твердые растворы в наносистемах La—Hf—O
и Sc—Hf—O, микроструктура



Старинский С.В., Суляева В.С., Шухов Ю.Г.,
Черков А.Г., Тимошенко Н.И., Булгаков А.В.,
Сафонов А.И.

1631

**Сравнение структур золотых наночастиц,
синтезированных методами лазерного
и магнетронного напыления**

Ключевые слова: наночастицы золота, импульсная лазерная
абляция, магнетронное напыление, отжиг тонких пленок



ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Басалаев Ю.М., Копытов А.В., Поплавной А.С.,
Рябчиков И.С.

1638

**Первопринципное и феноменологическое
моделирование фоновых спектров кристаллов
BeMN₂ (M = C, Si, Ge, Sn)**

Ключевые слова: халькопирит, BeCN₂, BeSiN₂, BeGeN₂,
BeSnN₂, модель Китинга, химическая связь,
колебательный спектр

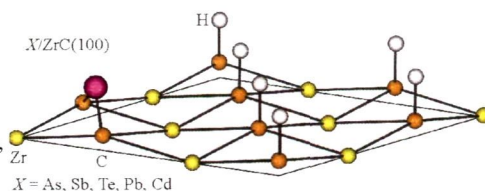


Малыхин С.Е., Бурьлин М.Ю.

1648

Квантово-химическая оценка силы связывания атомов As, Cd, Pb, Sb, Se, Te поверхностью ZrC(100)

Ключевые слова: атомно-абсорбционная спектрометрия, генерация гидридов, сорбент-модификатор, карбид циркония, энергия адсорбции, теория функционала плотности, квантовая химия

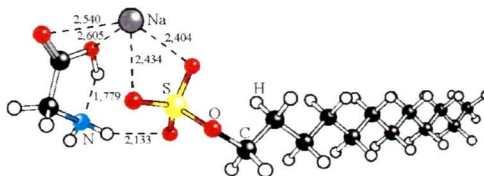


Гиричева Н.И., Курбатова М.С., Тюнина Е.Ю., Баделин В.Г.

1654

Квантово-химическое исследование молекулярного строения комплексов додецилсульфата натрия с глицином и цистеином

Ключевые слова: аминокислоты, глицин, цистеин, додецилсульфат натрия, комплексы, квантово-химические расчеты, метод DFT, молекулярная структура, геометрические характеристики



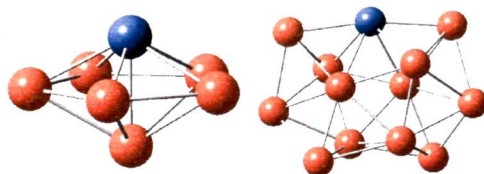
Liu N., Guo L., Wen C., Cao Z.

1661

Reaction mechanism of the preferential oxidation of the CO reaction in an H₂ stream over Cu—Ni bimetallic catalysts:

A computational study

Keywords: CO-PROX in H₂ stream, mechanism, Cu_nNi (n = 3—12) clusters catalyzed, density functional theory



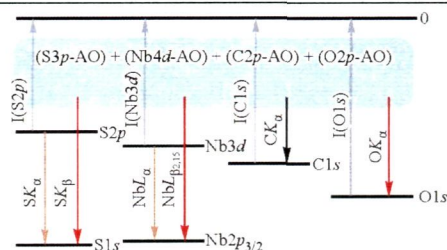
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Мазалов Л.Н., Федоренко А.Д., Парыгина Г.К., Гушин А.Л., Соколов М.Н., Далматова С.А.

1675

Рентгеноспектральное исследование электронного строения биядерных комплексов ниобия с дисульфидными мостиковыми лигандами (S₂)²⁻

Ключевые слова: рентгеновская эмиссионная спектроскопия, биядерные комплексы ниобия, дисульфидные мостиковые лиганды

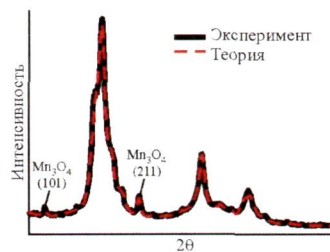


Панкин И.А., Кравцова А.Н., Положенцев О.Е., Будник А.П., Цатурян А.А., Бугаев А.Л., Тригуб А.Л., Солдатов А.В.

1683

Рентгеноспектральная диагностика структуры квантовых точек на основе сульфидов и оксидов цинка и марганца

Ключевые слова: квантовые точки, сульфид цинка, допирование, микроволновой синтез, локальная атомная и электронная структура, синхротронное излучение, спектроскопия XANES



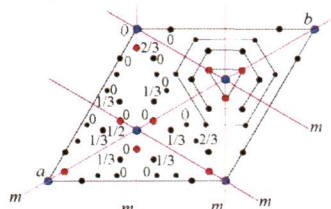
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

1691

Кристаллографический анализ структурных типов апатита и турмалина: правила максимальной симметризации и когерентной сборки

Ключевые слова: кристаллографический анализ, катионные подрешетки, когерентная сборка, механизм кристаллизации, принцип максимальной симметризации

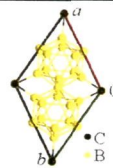


Коновалихин С.В., Пономарев В.И., Шилов Г.В.,
Ковалев И.Д.

1699

Моноклинные кристаллы карбида бора

Ключевые слова: карбид бора, рентгеноструктурный анализ,
структурное моделирование

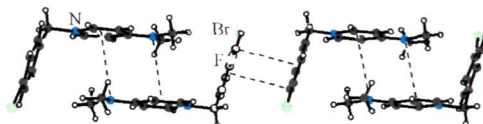


Liu Y., Zhou Y.-H., Liao X.-L., Man L.-M., Wang B.-W.,
Zhou J.-R., Ni C.-L.

1706

Crystal structure and magnetic properties of a hybrid compound disubstituted benzyl dimethylaminopyridinium bis(maleonitriledithiolate)cuprate(II)

Keywords: substituted benzyl dimethylaminopyridium,
bis(maleonitriledithiolate) copper(II) anion, weak interactions,
magnetic properties

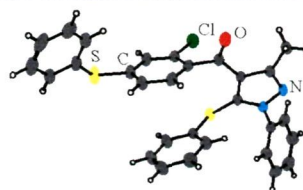


Sun G.-X., Zhai Z.-W., Sun Z.-H., Tan C.-X., Weng J.-Q.,
Liu X.-H.

1713

Crystal structure of (2-chloro-4-(phenylthio)phenyl) (3-methyl-1-phenyl-5-(phenylthio)-1H-pyrazol-4-yl) methanone

Keywords: aryl sulfide, synthesis, crystal structure

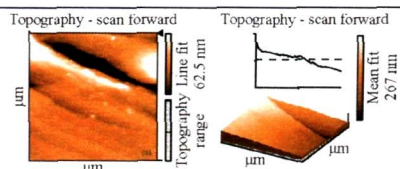


КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Supriya S., Fernández-Martínez F.

Thermal, dielectric and surface analysis of NaDP doped glycine phosphite single crystals

Keywords: atomic force microscopy, characterization, surfaces,
growth from solutions, single crystal growth, dielectric materials

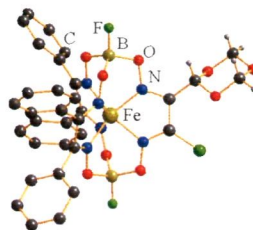


1718

Вершинин М.А., Бурдуков А.Б., Первухина Н.В.,
Куратьева Н.В., Ельцов И.В.

Строение продукта свободно-радикального замещения атома хлора в клатрохелате железа(II) на фрагмент 1,3,5-триоксана

Ключевые слова: клатрохелаты, железо(II),
реакционная способность координированных лигандов,
гомолитическое замещение

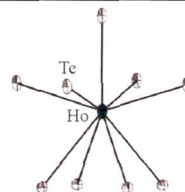


1722

Муравьева В.К., Помелова Т.А., Тарасенко М.С.,
Куратьева Н.В., Наумов Н.Г.

Кристаллическая структура $LnTe_3$, где $Ln=La, Ho$

Ключевые слова: РЗЭ, халькогениды, теллуриды,
кристаллическая структура

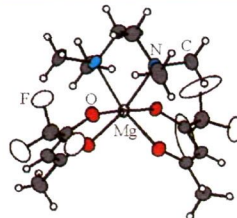


1726

Викулова Е.С., Жерикова К.В., Пирязев Д.А.,
Корольков И.В., Морозова Н.Б., Игуменов И.К.

Строение двух полиморфных модификаций бис-трифторацетилатацетонато- (N,N,N',N'-тетраметилэтилендиамин)магния

Ключевые слова: магний, β-дикетонаты, диамины,
МОСVD прекурсор, рентгеноструктурный анализ



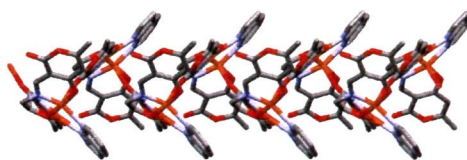
1731

Попов Л.Д., Щербаков И.Н., Власенко В.Г.,
Левченков С.И., Луков В.В., Александров Г.Г.

1735

**Кристаллическая структура и магнитные свойства
нового полимерного биядерного хелата меди(II)
с основанием Шиффа на основе 3-формилпирона
и 1,3-диаминпропанола-2**

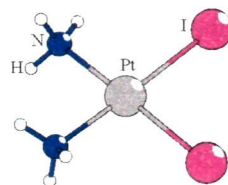
Ключевые слова: хелат меди(II), основание Шиффа,
рентгеноструктурный анализ, магнитные свойства



Васильченко Д.Б., Задесенец А.В., Байдина И.А.,
Пиразев Д.А., Романенко Г.В.

**Кристаллические структуры
цис-дидиододиамминплатины
и *транс*-диазидодиамминплатины**

Ключевые слова: платина, иодид, азид, аммиак

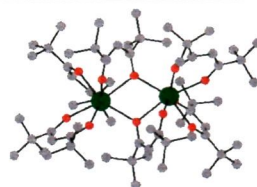


1739

Стабников П.А., Мосягина С.А., Жерикова К.В.,
Корольков И.В., Первухина Н.В., Морозова Н.Б.

**Структуры двух комплексов неодима(III)
и гольмия(III) с дивалоилметаном**

Ключевые слова: дивалоилметанаты Ln(III),
кристаллическая структура, термогравиметрия

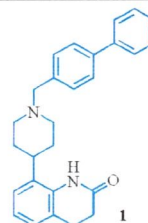


1743

Ullah N., Altaf M., Mansha M.

**Crystal structures
of 1-aryl-4-(biarylmethylene)piperazine
and piperidine, structurally related to adoprazine**

Keywords: 1-aryl-4-(biarylmethylene)piperazine,
1-aryl-4-(biarylmethylene)-piperidine, 5-HT_{1A} receptor,
D₂ receptor, schizophrenia



1747

Указатель статей. Том 58.....	1752
Авторский указатель. Том 58.....	1763

Содержание следующего номера — в конце журнала