

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 58

Июль-август

№ 6, 2017

XXII ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ
«РЕНТГЕНОВСКИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ
И ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ»
20–23 сентября 2016 г.
Владивосток, Россия

СОДЕРЖАНИЕ

Вовна В.И., Домашевская Э.П., Окотруб А.В.

**Рентгеновская и рентгеноэлектронная
спектроскопия новых материалов**

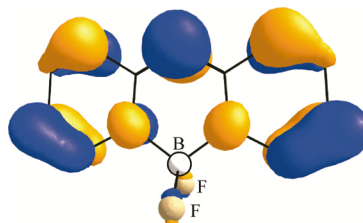


1103

Тихонов С.А., Вовна В.И., Борисенко А.В.

**Фотоэлектронные спектры и электронная
структура производных аза-бор-дипиридометена**

Ключевые слова: электронная структура,
фотоэлектронная спектроскопия,
теория функционала плотности, хелаты, комплексы бора,
аза-бор-дипиридометен

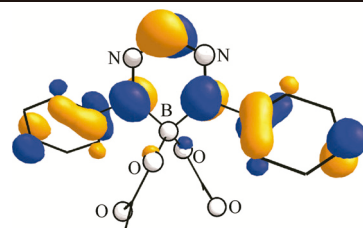


1107

Тихонов С.А., Львов И.Б., Вовна В.И.

**Фотоэлектронные спектры
и электронная структура азотсодержащих
хелатных комплексов бора**

Ключевые слова: электронная структура, фотоэлектронная
спектроскопия, теория функционала плотности, хелаты бора,
 β -дикетонаты, имидоиламинаты, формаганаты

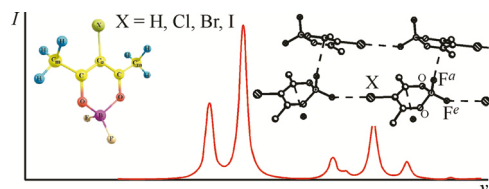


1115

Рябченко О.Б., Куартон Л.А., Свистунова И.В.,
Вовна В.И.

**Моделирование структуры и ИК спектров
ацетилацетоната дифторида бора
и его галогензамещенных производных**

Ключевые слова: галогензамещенные β -дикетонаты
дифторида бора, ИК спектры, квантово-химические расчеты
колебательных спектров, межмолекулярные взаимодействия
в кристалле



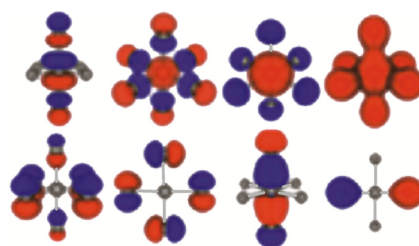
1125

ИЗДАТЕЛЬСТВО СО РАН
НОВОСИБИРСК
2017

Доценко А.А., Щека О.Л., Вовна В.И.

Электронное строение и возбужденные состояния молекулярных кристаллов гексагалогенидов сурьмы и теллура

Ключевые слова: люминесценция, электронная структура, s^2 -ионы, гексагалогениды, молекулярные кристаллы, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, теория функционала плотности

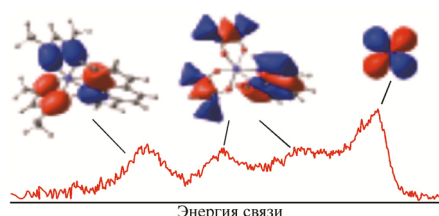


1136

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

Электронная структура аддуктов бис-ацетилацетонатов Ni(II) и Co(II) с фенантролином

Ключевые слова: электронная структура, β -дикетонаты 3d-металлов, аддукты с ароматическими лигандами, теория функционала плотности, рентгеновские фотоэлектронные спектры

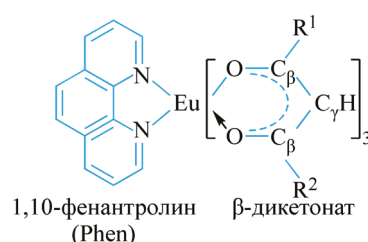


1147

Шурыгин А.В., Короченцев В.В., Чередниченко А.И., Вовна В.И.

Электронная структура аддуктов трис- β -дикетонатов Eu(III) с фенантролином: фотоэлектронные и теоретические исследования

Ключевые слова: фотоэлектронная спектроскопия, теория функционала плотности, аддукты β -дикетонатов, лантаноиды, электронное строение, европий

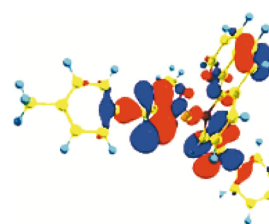


1158

Короченцев В.В., Еловский А.В., Вовна В.И., Осьмушко И.С., Мирочник А.Г., Калиновская И.В.

Электронная структура аддуктов карбоксилатных комплексов Nd(III) методами ТФП и РФЭС

Ключевые слова: рентгеноэлектронная спектроскопия, теория функционала плотности, карбоксилатные комплексы, аддукты, электронное строение, Nd(III)

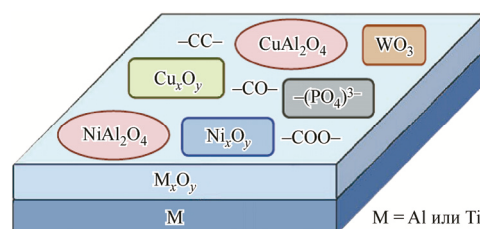


1166

Коблова Е.А., Устинов А.Ю., Руднев В.С., Лукиянчук И.В., Черных И.В.

Исследование Ni,Cu-содержащих ПЭО-покрытий на алюминии и титане методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии

Ключевые слова: рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, атомный состав, химическое состояние, строение поверхности, плазменно-электролитическое оксидирование, металлооксидные покрытия

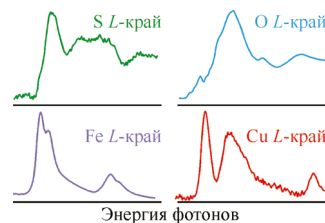


1175

Михлин Ю.Л., Романченко А.С., Томашевич Е.В., Волочаев М.Н., Лаптев Ю.В.

Изучение слоистого минерала валлериита методами РФЭС и XANES

Ключевые слова: валлериит, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия высоких энергий, TEY XANES

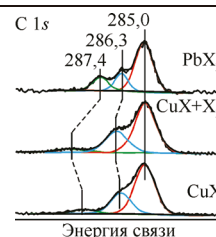


1184

Воробьев С.А., Сайкова С.В., Эренбург С.Б., Трубина С.В., Иванов Ю.Н., Максимов Н.Г., Михлин Ю.Л.

Сравнительное исследование структуры ксантогенатов меди и свинца

Ключевые слова: ксантогенат меди, ксантогенат свинца, дисксантоген, структура, РФЭС, EXAFS, твердотельный ЯМР

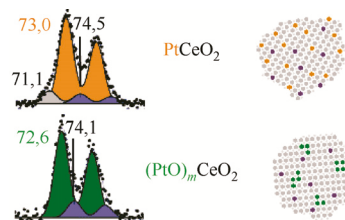


1191

Стадниченко А.И., Муравьев В.В., Светличный В.А.,
Боронин А.И.

**Состояние платины
в высокоактивных катализаторах Pt/CeO₂
по данным фотоэлектронной спектроскопии**

Ключевые слова: платина, оксид церия,
твердые растворы, РФЭС

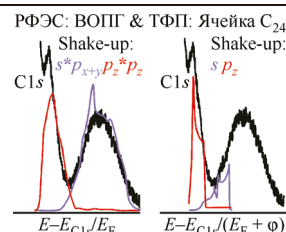


1199

Чолач А.Р., Асанов И.П., Брылякова А.А.

**Идентификация сопряженных
электронных переходов
в рентгеновских фотоэлектронных спектрах**

Ключевые слова: электронная спектроскопия,
неупругое рассеяние электронов, плотность состояний,
сопряженные электронные переходы

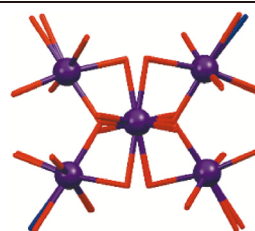


1208

Федоренко А.Д., Мазалов Л.Н., Фурсова Е.Ю.,
Овчаренко В.И., Калинин А.В., Лаврухина С.А.

**Рентгеноэлектронные и рентгеноспектральные
исследования электронной структуры
комплексов 6-ядерного пивалата Mn(II,III)**

Ключевые слова: РФЭС, РЭС, пивалат марганца
с изоникотинамидом

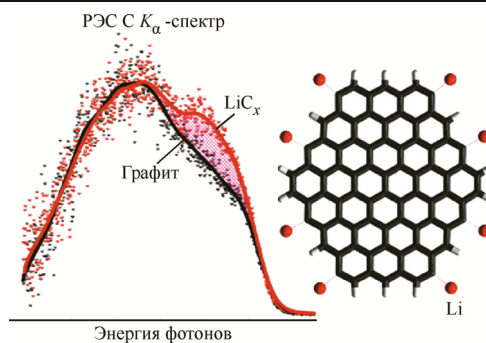


1214

Лаптева Л.Л., Федосеева Ю.В., Гевко П.Н.,
Смирнов Д.А., Гусельников А.В., Булушева Л.Г.,
Окотруб А.В.

**Рентгеноспектральное исследование
литированного графита,
полученного термическим напылением лития**

Ключевые слова: природный графит, литирование,
термическое напыление, рентгеновская эмиссионная
спектроскопия, ближняя тонкая структура рентгеновского
поглощения, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия,
квантово-химическое моделирование

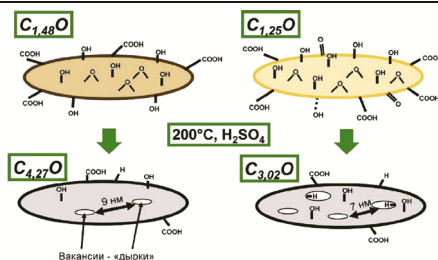


1221

Столярова С.Г., Кобелева Е. С., Асанов И.П.,
Окотруб А.В., Булушева Л.Г.

**Влияние состава оксида графита на структуру
продуктов его обработки в серной кислоте
при повышенной температуре**

Ключевые слова: оксид графита,
нагревание в серной кислоте, графен, дефекты, РФЭС,
NEXAFS

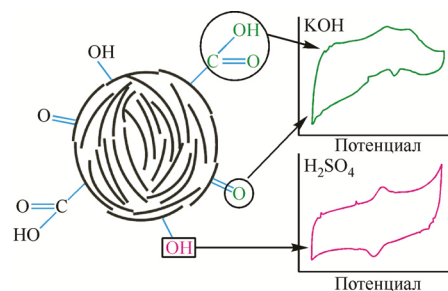


1228

Попов К.М., Федосеева Ю.В., Кохановская О.А.,
Раздьяконова Г.И., Смирнов Д.А., Булушева Л.Г.,
Окотруб А.В.

**Функциональный состав
и электрохимические характеристики
окисленного нанодисперсного углерода**

Ключевые слова: нанодисперсный углерод, окисление,
функциональный состав, РФЭС, NEXAFS,
электрохимические процессы,
циклическая вольтамперометрия, суперконденсаторы,
долговременное циклирование

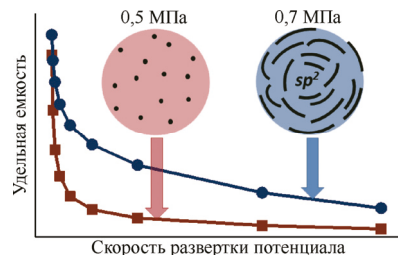


1235

Федосеева Ю.В., Попов К.М., Поздняков Г.А., Яковлев В.Н., Сеньковский Б.В., Булушева Л.Г., Окотруб А.В.

Строение углеродных наночастиц, полученных при адиабатическом сжатии ацетилена, и их применение в суперконденсаторах

Ключевые слова: углеродные наночастицы, РФЭС, NEXAFS, пиролиз ацетилена, адиабатическое сжатие

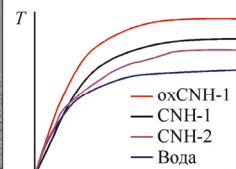
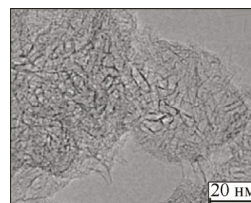


1244

Гурова О.А., Омелянчук Л.В., Дубатолова Т.Д., Антохин Е.И., Елисеев В.С., Юшина И.В., Окотруб А.В.

Синтез и модификация структуры углеродных нанохорнов для применения в гипертермии

Ключевые слова: углеродные нанохорны, РФЭС, NEXAFS, водные суспензии, спектроскопия оптической плотности поглощения, гипертермические свойства

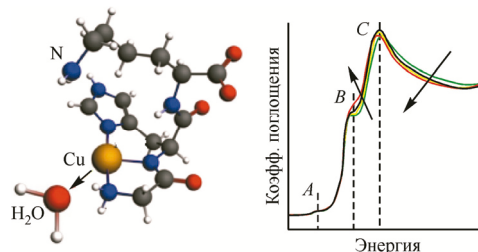


1253

Кременная М.А., Солдатов М.А., Подковырина Ю.С., Дадашева И.А., Солдатов А.В.

Рентгеноспектральное исследование медьсодержащего пептидного комплекса Cu(II)GHK

Ключевые слова: комплекс Cu(II)GHK, XANES, локальная атомная структура, пептид, метод конечных разностей

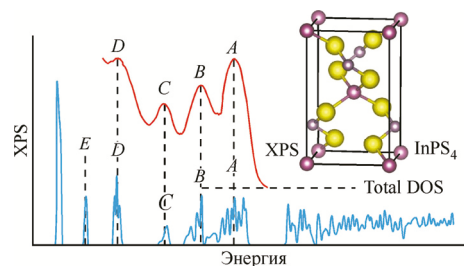


1261

Лаврентьев А.А., Габрелян Б.В., Ву В.Т., Никифоров И.Я., Никифорова В.С., Хижун О.Ю.

Экспериментальное и теоретическое исследование электронно-энергетической структуры фосфорсодержащих сульфидов InPS₄, Tl₃PS₄ и Sn₂P₂S₆

Ключевые слова: сульфиды, рентгеновские спектры, электронно-энергетическая структура, теория функционала плотности, обменно-корреляционные потенциалы

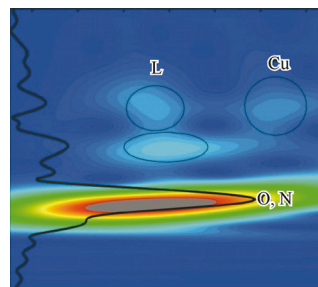


1268

Власенко В.Г., Попов Л.Д., Щербаков И.Н., Луков В.В., Левченков С.И., Панков И.В., Зубавичус Я.В., Тригуб А.Л.

Локальное атомное строение моно- и биядерных металлокомплексов на основе бис-азометинов 3-формилпирона и 3-формилкумарина

Ключевые слова: азометины, металлокомплексы, рентгеновская спектроскопия поглощения, вейвлет-анализ

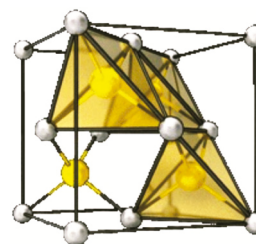


1274

Чукавин А.И., Валеев Р.Г., Зубавичус Я.В., Тригуб А.Л., Бельтюков А.Н.

Исследование наноструктур ZnS_xSe_{1-x}@Al₂O₃ методами рентгеновской дифракции и EXAFS спектроскопии

Ключевые слова: ZnS_xSe_{1-x}, наноструктуры, EXAFS, рентгеновская дифракция, нанопористый анодный оксид алюминия, термическое напыление



1285

Содержание следующего номера — в конце журнала

© Сибирское отделение РАН, 2017
© Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 2017