

ЖУРНАЛ  
СТРУКТУРНОЙ  
ХИМИИ  
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 53

Июль – август

№ 4, 2012

СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Belosludov R.V., Mizuseki H., Souissi M., Kawazoe Y.,  
Kudoh J., Subbotin O.S., Adamova T.P., Belosludov V.R.

**An atomistic level description of guest molecule effect  
on the formation of hydrate crystal nuclei  
by *ab initio* calculations**

**Keywords:** methane, ozone, clathrate hydrate,  
nucleation mechanism, first-principles calculations

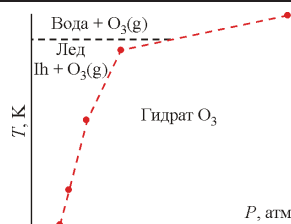


633

Субботин О.С., Адамова Т.П., Белослудов Р.В.,  
Мизусеки Х., Кавазоэ Ё., Белослудов В.Р.

**Теоретическое исследование условий образования  
гидратов озона**

**Ключевые слова:** решеточная динамика,  
термодинамические свойства, фазовые переходы,  
клатратные гидраты, озон, кислород

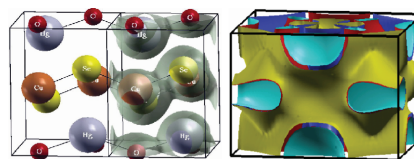


640

Банников В.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л.

**Электронная структура, поверхность Ферми  
и химическая связь  
в новом слоистом оксиселениде HgCuSeO**

**Ключевые слова:** слоистый оксиселенид HgCuSeO,  
электронная структура, химическая связь, FLAPW-GGA,  
моделирование

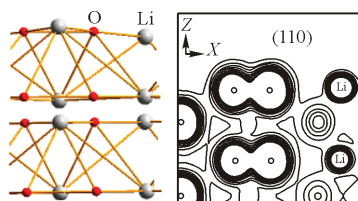


647

Корабельников Д.В., Журавлёв Ю.Н.,  
Алейникова М.В.

**Структура и электронные свойства поверхности  
пероксидов щелочных металлов**

**Ключевые слова:** пероксиды, структура поверхности,  
поверхностные состояния, слой, поверхностная энергия,  
релаксация поверхности, заряды

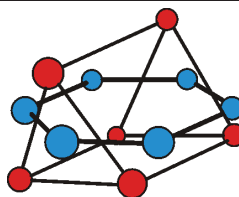


652

Грибов Л.А., Прокофьева Н.И.

**Гамильтониан для электронных состояний молекул при химических превращениях**

**Ключевые слова:** квантовая химия, химические превращения, гамильтониан для состояний электронов

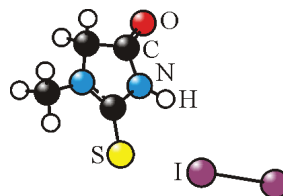


658

Tavakol H., Hadadi T., Roohi H.

**DFT, AIM, and NBO analysis of 1-methyl-2-thioxoimidazolidin-4-one tautomers and their complexes with iodine**

**Keywords:** tautomers, thioimidazoline, iodine complex, DFT, NBO, AIM

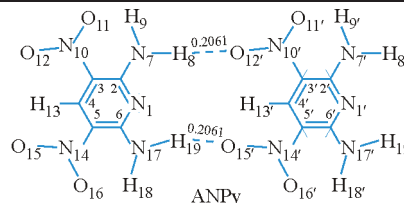


662

Xie L.-F., Ye C.-C., Ju X.-H., Zhao F.-Q.

**Theoretical study on dimers of 2,6-diamino-3,5-dinitropyridine and its N-oxide**

**Keywords:** 2,6-diamino-3,5-dinitropyridine, 2,6-diamino-3,5-dinitropyridine-1-oxide, intermolecular interaction, first-principle calculations, natural bond orbital

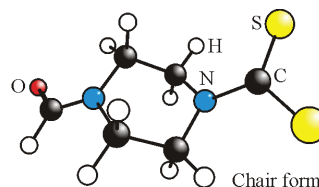


672

Beyramabadi S.A., Morsali A., Vahidi S.H.

**DFT characterization of 1-acetylpiperazinyldithiocarbamate ligand and its transition metal complexes**

**Keywords:** density functional theory, PCM, Schiff base, IR assignment, NBO, dithiocarbamate, piperazine

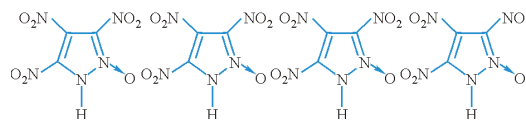


678

Ravi P., Gore G.M., Sikder A.K., Tewari S.P.

**A DFT study on the structure and detonation properties of amino, methyl, nitro and nitroso substituted 3,4,5-trinitropyrazole-2-oxides: new high energy materials**

**Keywords:** 3,4,5-trinitropyrazole-2-oxides, density, detonation performance, impact sensitivity



687

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Рядун А.А., Галашов Е.Н., Надолинный В.А., Шлегель В.Н.

**ЭПР и люминесценция кристаллов ZnWO<sub>4</sub>, активированных ионами гадолиния**

**Ключевые слова:** люминесценция, сцинтилляторы, кристаллы вольфрамата цинка, ЭПР ионов гадолиния



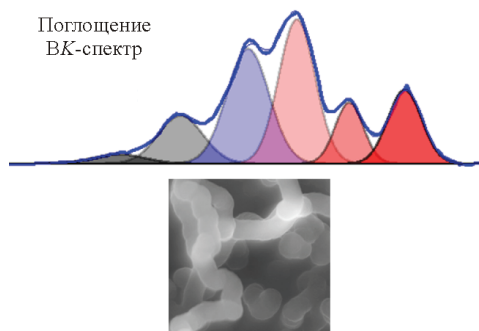
696

Федосеева Ю.В., Косинова М.Л., Прохорова С.А., Меренков И.С., Булушева Л.Г., Окотруб А.В., Кузнецов Ф.А.

**Рентгеноспектральное исследование электронного строения плёнок карбонитрида бора, полученных методом химического осаждения из газовой фазы на подложках Co/Si и CoO<sub>x</sub>/Si**

**Ключевые слова:** карбонитрид бора, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, рентгеновская спектроскопия поглощения, электронное строение

Поглощение  
ВК-спектр



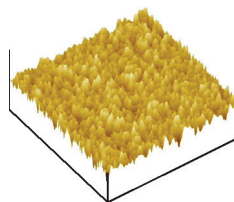
701

Кеслер В.Г., Косинова М.Л., Румянцев Ю.М., Суляева В.С.

710

**Исследование химического состава пленок  $BC_xN_y$  методами РФЭС и Оже-спектроскопии**

**Ключевые слова:** рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, Оже-спектроскопия, PECVD, пленки  $BC_xN_y$

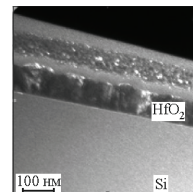


Смирнова Т.П., Яковкина Л.В., Борисов В.О., Кичай В.Н., Каичев В.В., Кривенцов В.В.

718

**Структура пленок  $HfO_2$  и двойных оксидов на его основе**

**Ключевые слова:** диоксид гафния, бинарные растворы, «high-k»-диэлектрики

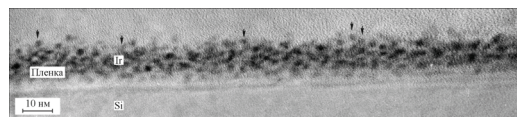


Гельфонд Н.В., Морозова Н.Б., Семянников П.П., Трубин С.В., Игуменов И.К., Гутаковский А.К., Латышев А.В.

725

**Получение тонких пленок металлов платиновой группы методом импульсного MOCVD: I. Осаждение Ir слоев**

**Ключевые слова:** пленки иридия, метод импульсного MOCVD, летучие соединения иридия (I, III), высокотемпературная масс-спектрометрия

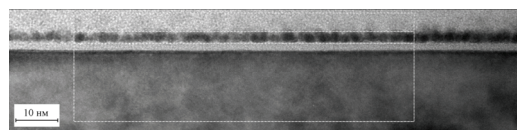


Морозова Н.Б., Гельфонд Н.В., Семянников П.П., Трубин С.В., Игуменов И.К., Гутаковский А.К., Латышев А.В.

735

**Получение тонких пленок металлов платиновой группы методом импульсного MOCVD: II. Осаждение Ru слоев**

**Ключевые слова:** летучие комплексы рутения (II, III) с органическими лигандами, высокотемпературная масс-спектрометрия, процессы термораспада, метод импульсного MOCVD



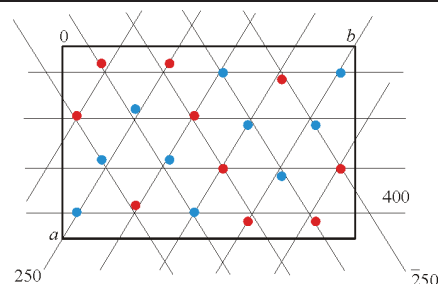
**КРИСТАЛЛОХИМИЯ**

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

744

**Кристаллографический анализ структур сульфидов с микродвойникованием на примере лиллианита и хейровскинта**

**Ключевые слова:** микродвойникование, лиллианит, хейровскинт, сульфиды, сульфосоли, «таблетчатые» структуры, структурообразующие факторы, катионные и анионные подрешетки, строительные блоки, кристаллографический анализ



Стабников П.А., Булушева Л.Г., Алфёрова Н.И., Смоленцев А.И., Корольков И.А., Первухина Н.В., Байдина И.А.

751

**Кристаллические структуры 1,1,1-трифтор-4-гидрокси-4-фенил-бут-3-ен-2-она, 2,2,6,6-тетраметил-3-гидрокси-гепт-3-ен-5-она, 2,2,6,6-тетраметил-3-метиламино-гепт-3-ен-5-она и исследование способности этих лигандов к комплексообразованию с металлами**

**Ключевые слова:** β-дикетоны, кристаллическая структура, упаковка молекул, хелатообразование

