

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 57

Сентябрь-октябрь

№ 7, 2016

## ПРИМЕНЕНИЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

### СОДЕРЖАНИЕ

#### ОБЗОРЫ. СИНХРОТРОННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ В СО РАН

Кулипанов Г.Н., Мезенцев Н.А., Пиндюрин В.Ф.

#### Синхротронное излучение в Новосибирске: первые тринадцать лет

**Ключевые слова:** синхротронное излучение, рентгеновская дифракция, рентгеновская спектроскопия, EXAFS спектроскопия, вигглеры, порошковая дифракция, временное разрешение

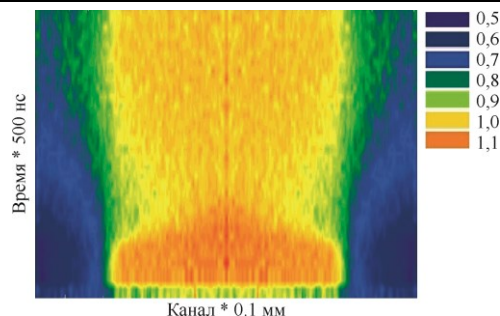


1351

Толочко Б.П., Золотарёв К.В.

#### Исследование быстропротекающих твёрдофазных химических реакций в Сибирском центре синхротронного и терагерцового излучения

**Ключевые слова:** синхротронное излучение, рентгеновская дифракция, химия твёрдого тела, быстропротекающие реакции, детонация, электрохимия, наводораживание, наноалмазы, *in situ* исследования, структура катализаторов

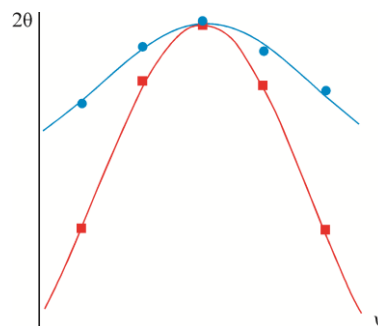


1362

Аракчеев А.С., Шмаков А.Н., Шарафутдинов М.Р., Толочко Б.П., Попов В.А., Шошин А.А., Васильев А.А., Сковородин Д.И., Полосаткин С.В., Бурдаков А.В., Батаев И.А., Батаев В.А.

#### Моделирование взаимодействия плазмы с первой стенкой термоядерного реактора – измерения остаточных механических напряжений в вольфраме после облучения на установке ГОЛ-3

**Ключевые слова:** взаимодействие плазмы с материалами, остаточные напряжения, синхротронное излучение, дифракция



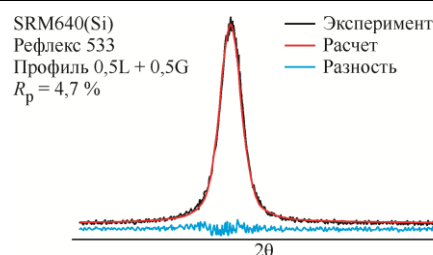
1389

ИЗДАТЕЛЬСТВО СО РАН  
НОВОСИБИРСК  
2016

Шмаков А.Н., Толочко Б.П., Дементьев Е.Н.,  
Шеромов М.А.

**Модернизированная экспериментальная  
рентгенодифракционная станция на канале №2  
вывода синхротронного излучения накопителя  
электронов ВЭПП-3**

**Ключевые слова:** рентгеновская дифракция,  
синхротронное излучение, структура

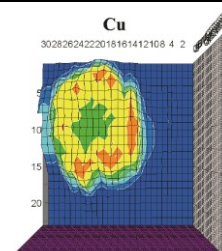


1395

Трунова В.А., Зверева В.В.

**Метод рентгенофлуоресцентного анализа  
с использованием синхротронного излучения:  
объекты исследования**

**Ключевые слова:** синхротронное излучение,  
рентгенофлуоресцентный анализ,  
рентгеновская микроскопия, биоткани,  
донные осадки



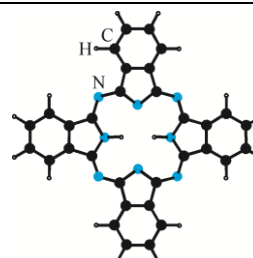
1401

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Семущкина Г.И., Мазалов Л.Н., Басова Т.В.

**Экспериментальное и теоретическое изучение  
рентгеновских K-спектров поглощения углерода  
и азота в молекуле фталоцианина H<sub>2</sub>Pc**

**Ключевые слова:** фталоцианин,  
рентгеновская абсорбционная спектроскопия,  
стационарная и нестационарная теории функционала  
плотности

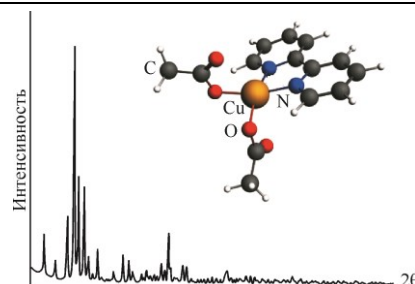


1408

Кременная М.А., Солдатов М.А., Будник А.П.,  
Ластовина Т.А., Солдатов А.В.

**Теоретическое и экспериментальное  
исследование моноядерного  
ацетатно-бипиридинового комплекса меди(II)**

**Ключевые слова:** ацетатно-бипиридиновый комплекс  
меди(II), прекурсор наночастиц оксида меди, ИК спектры,  
XANES, ЭПР, теория функционала плотности,  
локальная атомная и электронная структура

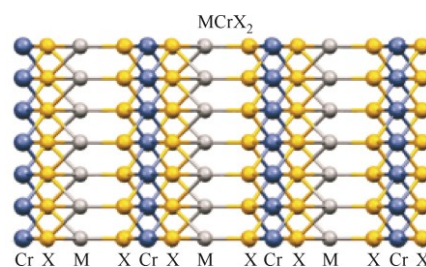


1423

Коротаев Е.В., Канажевский В.В., Перегудова Н.Н.,  
Сыровкашин М.М., Мазалов Л.Н., Соколов В.В.,  
Филатова И.Ю., Пичугин А.Ю.

**XANES-структуры рентгеновских K-спектров  
поглощения дихалькогенидов хрома  
CuCr<sub>1-x</sub>M<sub>x</sub>S<sub>2</sub> и MCrX<sub>2</sub>**

**Ключевые слова:** катион-замещенные дихалькогениды  
хрома, твердые растворы, термоэлектрические материалы,  
XANES спектроскопия, FDMNES,  
метод конечных разностей



1430

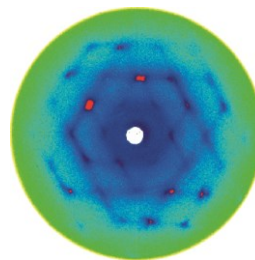
## СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Анчаров А.И., Золотарёв К.В.

1438

**Использование жесткого синхротронного излучения для дифракционных исследований. Структурные изменения при взаимодействии между жидкими и твердыми металлами**

**Ключевые слова:** синхротронное излучение, рентгеновская дифракция, жесткое рентгеновское излучение, интерметаллиды меди,  $\text{CuGa}_2$ ,  $\text{Cu}_3\text{Sn}$ ,  $\text{Cu}_6\text{Sn}_5$ ,  $\text{Cu}_{11}\text{In}_9$ ,  $\text{InSn}_4$ ,  $\text{In}_3\text{Sn}$ ,  $\text{InBi}_2$



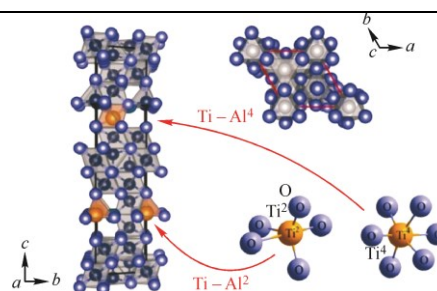
## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Панкин И.А., Кравцова А.Н., Положенцев О.Е., Солдатов А.В.

1445

**Моделирование дефектов замещения в структуре титансодержащего хибонита**

**Ключевые слова:** локальная атомная структура, геологические материалы, хибонит, компьютерное моделирование, теория функционала плотности, спектроскопия XANES

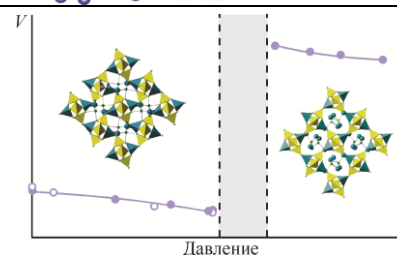


Серёткин Ю.В., Лихачёва А.Ю., Ращенко С.В.

1453

**Структурная эволюция Li-замещенного натролита при индуцированной давлением сверхгидратации: рентгеноструктурное исследование**

**Ключевые слова:** цеолиты, Li-натролит, высокое давление, сверхгидратация

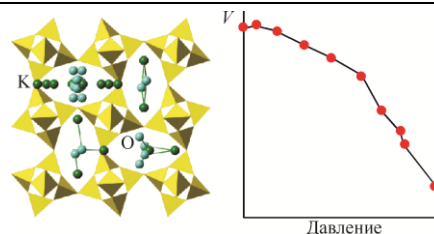


Серёткин Ю.В., Ращенко С.В., Анчаров А.И.

1463

**Влияние внекаркасных катионов на поведение K-замещенного гоннардита при высоком давлении**

**Ключевые слова:** цеолиты, K-гоннардит, K-натролит, высокое давление, сверхгидратация

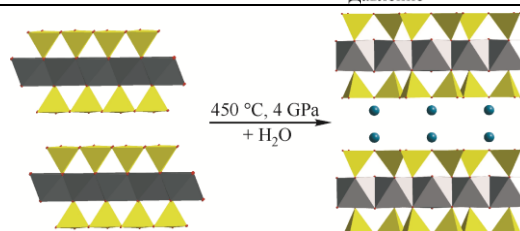


Лихачёва А.Ю., Ращенко С.В.

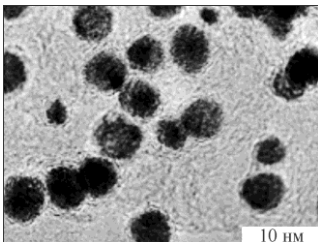
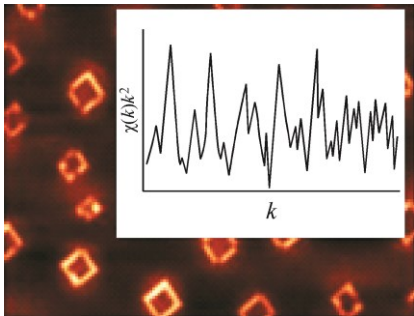
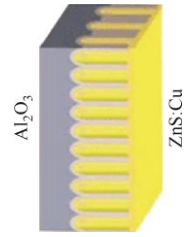
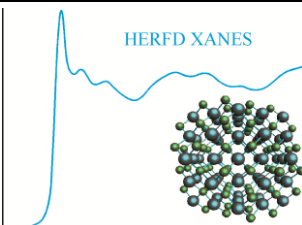
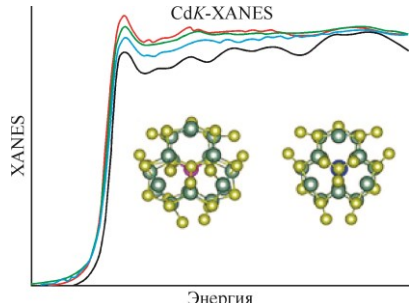
1469

**Дифрактометрия *in situ* образования высокобарической гидратированной модификации талька при 450 °C и 4 ГПа**

**Ключевые слова:** тальк, 10 Å фаза, высокая температура, высокое давление, дифрактометрия *in situ*, синхротронное излучение



## СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

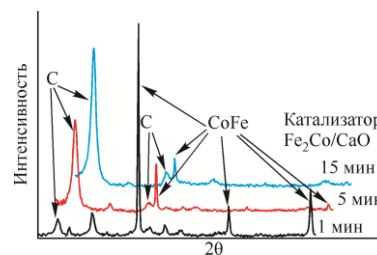
<p>Асанова Т.И., Асанов И.П., Тур В.А., Герасимов Е.Ю., Бжезинская М.</p> <p><b>PtPd-наночастицы на новых углеродных материалах</b></p> <p><b>Ключевые слова:</b> XAFS, РФЭС, биметаллические наночастицы PtPd, графен, терморасширенный графит, оксид графита, фторид графита</p>	 <p>1475</p>
<p>Эренбург С.Б., Трубина С.В., Зверева В.В., Зиновьев В.А., Двуреченский А.В., Кучинская П.А., Квашнина К.А.</p> <p><b>Микроструктура многослойных гетеросистем, содержащих молекулы из квантовых точек Ge в Si, на этапах их зарождения и роста по EXAFS спектрам</b></p> <p><b>Ключевые слова:</b> микроструктура, полупроводниковые гетеросистемы, молекулы из КТ GeSi, спектры EXAFS</p>	 <p>1485</p>
<p>Бельтюков А.Н., Чукавин А.И., Валеев Р.Г., Тригуб А.Л., Елькин И.А., Кривенцов В.В., Мезенцев Н.А.</p> <p><b>Структурное исследование светоизлучающих нанокompозитов на основе ZnS:Cu, осажденных методом взрывного испарения в матрицы пористого анодного Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b></p> <p><b>Ключевые слова:</b> светоизлучающие нанокompозиты, ZnS, EXAFS, РФА, структура</p>	 <p>1496</p>
<p>Кравцова А.Н., Панкин И.А., Солдатов М.А., Бутова В.В., Боброва И.А., Солдатов А.В.</p> <p><b>Анализ локальной атомной структуры квантовых точек семейства CdS</b></p> <p><b>Ключевые слова:</b> квантовые точки, сульфид кадмия, спектроскопия XANES высокого разрешения, атомная структура, компьютерное моделирование</p>	 <p>1501</p>
<p>Панкин И.А., Кравцова А.Н., Положенцев О.Е., Тригуб А.Л., Солдатов М.А., Солдатов А.В.</p> <p><b>Анализ атомной структуры коллоидных квантовых точек семейства CdSe: рентгеноспектральная диагностика и компьютерное моделирование</b></p> <p><b>Ключевые слова:</b> квантовые точки, селенид кадмия, допирование, локальная атомная структура, спектроскопия XANES, компьютерное моделирование, теория функционала плотности</p>	 <p>1508</p>

Красников Д.В., Шмаков А.Н., Кузнецов В.Л.,  
Ищенко А.В.

1515

**На пути к оптимизации свойств многослойных  
углеродных нанотрубок через *in situ* и *ex situ*  
исследования механизма их роста**

**Ключевые слова:** углеродные нанотрубки,  
*in situ* методы исследования, катализ,  
синхротронное излучение, дифракция

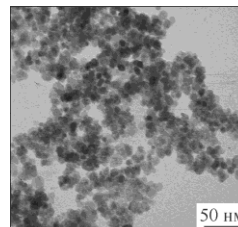


Ластовина Т.А., Бугаев А.А., Кубрин С.П.,  
Кудрявцев Е.В., Солдатов А.В.

1523

**Исследование структуры магнитных  
наночастиц, допированных ионами  
редкоземельных элементов**

**Ключевые слова:** магнитные частицы, оксиды железа,  
мессбауэровская спектроскопия, биомедицина

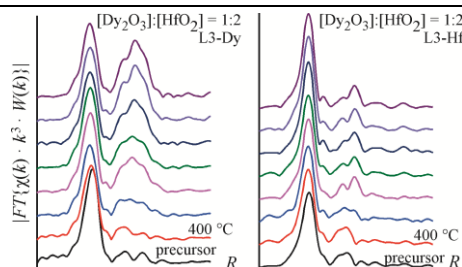


Менушенков А.П., Попов В.В., Зубавичус Я.В.,  
Ярославцев А.А.

1529

**Локальные особенности  
нанокристаллических структур  
сложных оксидов  $\text{Ln}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$  ( $\text{Ln} = \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}$ )**

**Ключевые слова:** флюорит, пирохлор,  
EXAFS-спектроскопия, PDF-анализ,  
аномальная дифракция

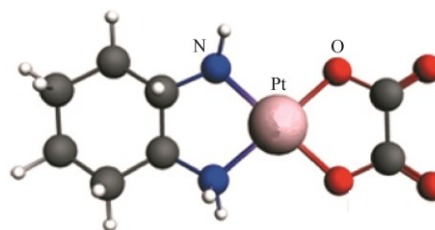


Положенцев О.Е., Кубрин С.П., Бутова В.В.,  
Кочкина В.К., Солдатов А.В., Стащенко В.В.

1539

**Структура и магнитные свойства чистых  
и допированных самарием наночастиц магнетита**

**Ключевые слова:** наночастицы, магнетит, маггемит,  
 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ,  $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ , допирование, редкоземельные элементы,  
XANES спектроскопия, мессбауэровская спектроскопия,  
вибрационный магнитометр

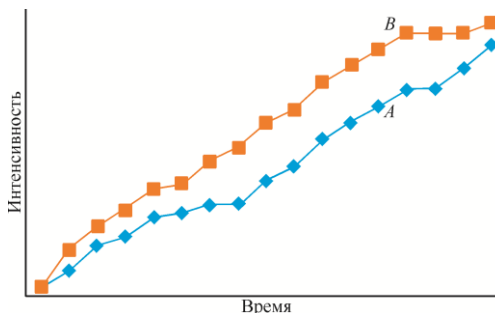


Толочко Б.П., Чернышёв А.П., Бохонов Б.Б.,  
Тен К.А., Прууэл Э.Р., Ляхов Н.З.

1550

**Исследование превращения адамантан – алмаз.  
Радикальный механизм образования наночастиц  
алмаза при ударно-волновом воздействии  
на адамантан**

**Ключевые слова:** адамантан, трициклодекан ( $\text{C}_{10}\text{H}_{16}$ ),  
синхротронное излучение, алмаз, наноалмаз,  
ультрадисперсный алмаз, малоугловое рассеяние,  
ударные волны, детонация





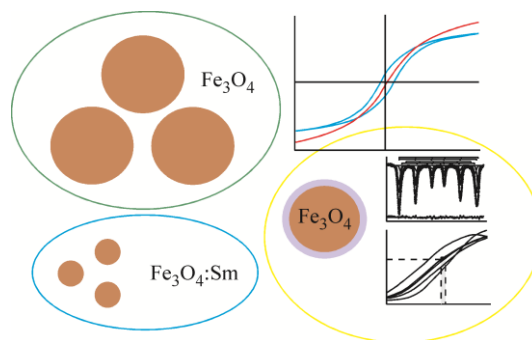
## СТРУКТУРА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Положенцев О.Е., Кочкина В.К., Мазалова В.Л.,  
Солдатов А.В.

1558

**Молекулярная и электронная структура водных растворов платиновых противоопухолевых препаратов по данным спектроскопии рентгеновского поглощения, инфракрасной и оптической спектроскопии и DFT расчетов**

**Ключевые слова:** координационные соединения платины(II), противоопухолевые препараты, цисплатин, карбоплатин, оксалиплатин, молекулярная и электронная структура, гидролиз, спектроскопия рентгеновского поглощения, методы УФ, оптической, инфракрасной спектроскопии



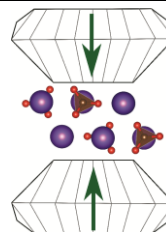
## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Гаврюшкин П.Н., Ращенко С.В., Шацкий А.Ф.,  
Литасов К.Д., Анчаров А.И.

1566

**Сжимаемость и фазовые переходы карбоната калия в интервале давлений до 30 Кбар**

**Ключевые слова:**  $K_2CO_3$ , высокие давления, кристаллохимия, сжимаемость, полиморфная модификация, аморфизация

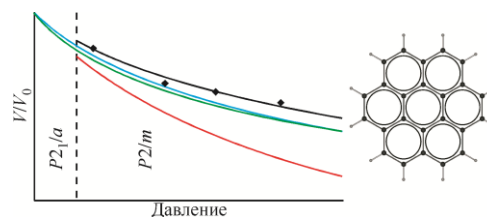


Чанышев А.Д., Лихачёва А.Ю., Гаврюшкин П.Н.,  
Литасов К.Д.

1570

**Сжимаемость, фазовые переходы и аморфизация коронена при давлении до 6 Гпа**

**Ключевые слова:** дифрактометрия при высоких давлениях, ячейка с алмазными наковальнями, коронен, сжимаемость



Содержание следующего номера — в конце журнала

Ответственный редактор выпуска:  
д.х.н. Б.П. Толочко