

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 6 раз в год

Т О М 55

Ноябрь-декабрь

№ 6, 2014

СО Д Е Р Ж А Н И Е

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Плахутин Б.Н.

1055

**Общая форма полного одноэлектронного
гамильтониана в ограниченном методе
Хартри–Фока для открытых оболочек**

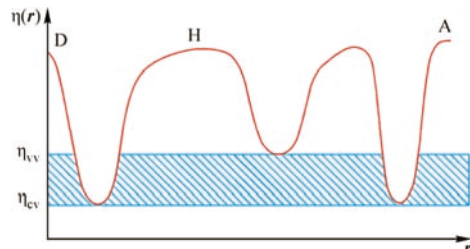
$$\hat{R} = \hat{R}_{(1)} + \hat{R}_{(2)} + \hat{R}_{(3)}; \hat{R}_{(3)} = ?$$

Ключевые слова: ограниченный метод Хартри–Фока, вариационный принцип, теоремы Купманса и Бриллюэна, общее выражение для хартри-фовского гамильтониана

Вашенко А.В., Афонин А.В.

1064

**Изучение внутримолекулярных водородных связей
C–H...X (X = N, O) в рамках теории функции
локализации электронов**

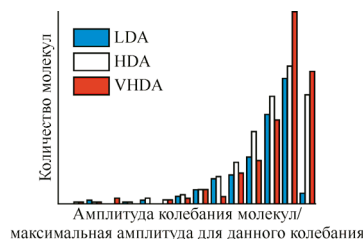


Ключевые слова: внутримолекулярная водородная связь, функция локализации электронов, индекс бифуркации внутренних и валентных электронов, квантовая теория «Атомы в молекулах»

Гец К.В., Белослудов В.Р.

1073

**Теоретическое исследование свойств
низкочастотных колебаний аморфных льдов
низкой, высокой и сверхвысокой плотности**

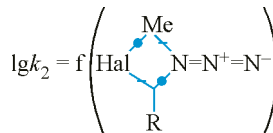


Ключевые слова: межмолекулярные взаимодействия, молекулярная динамика, решеточная динамика, аморфные льды, коллективные колебания, фазовые переходы

Нугманов Р.И., Маджидов Т.И., Халиуллина Г.Р.,
Баскин И.И., Антипин И.С., Варнек А.А.

1080

**Разработка моделей «структура–свойство»
в реакциях нуклеофильного замещения
с участием азидов**



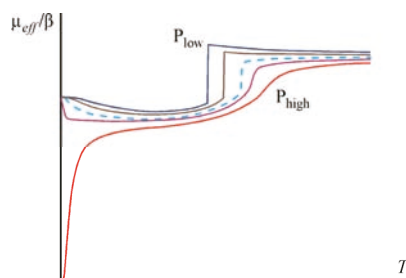
Ключевые слова: хемоинформатика, молекулярное моделирование, нуклеофильное замещение, константа скорости, конденсированный граф реакции

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Морозов В.А.

Качественное описание трансформации термических магнитоструктурных переходов в цепочке обменных кластеров под действием внешнего давления

Ключевые слова: молекулярные магнетики, обменный кластер, спин-кроссовер, магнитоструктурные переходы, эффективный магнитный момент

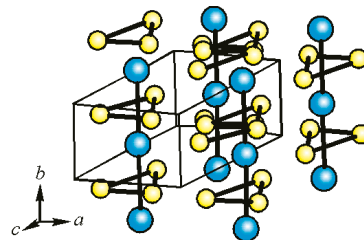


1088

Шкварин А.С., Ярмошенко Ю.М., Яблонских М.В., Меренцов А.И., Титов А.Н.

Исследование электронной структуры TiS₂ методами рентгеновской спектроскопии

Ключевые слова: резонансная фотоэмиссия, фотоэлектронная и абсорбционная спектроскопия, трисульфид титана

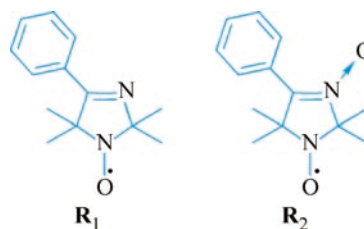


1095

Мазалов Л.Н., Федоренко А.Д., Крючкова Н.А., Диков Ю.П., Полюенко Ю.Ф., Григорьев И.А.

Рентгеноспектральное и рентгеноэлектронное изучение электронного строения парамагнитных и диамагнитных производных 3-имидазолина

Ключевые слова: свободные нитрокислые радикалы, производные 3-имидазолина, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, рентгеновская эмиссионная спектроскопия, эффективные заряды, спиновая плотность

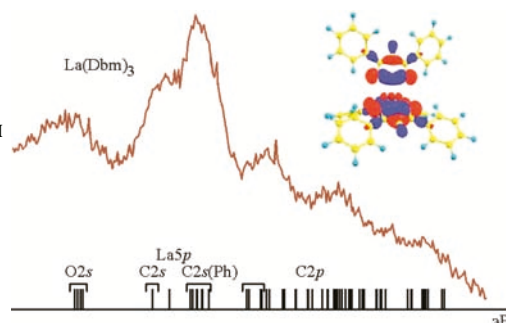


1100

Короченцев В.В., Вовна В.И., Калиновская И.В., Комиссаров А.А., Доценко А.А., Шурыгин А.В., Мирочник А.Г., Сергиенко В.И.

Электронная структура трис-дibenзоилметанатов редкоземельных элементов Sc, Y, La по результатам исследований методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и теории функционала электронной плотности

Ключевые слова: рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, теория функционала плотности, трис-дibenзоилметанаты металлов, редкоземельные элементы Sc, Y, La, электронное строение



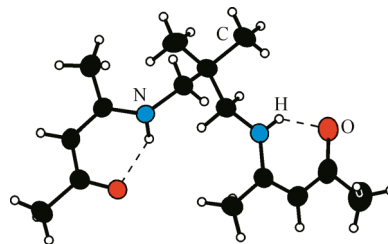
1114

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Доровских С.И., Куратьева Н.В., Ткачёв С.В., Трубин С.В., Стабников П.А., Морозова Н.Б.

Комплексы меди(II) с основаниями Шиффа: структуры и термическое поведение

Ключевые слова: лиганды с основаниями Шиффа, комплексы меди(II), рентгеноструктурный анализ, термогравиметрия



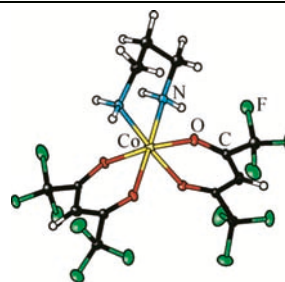
1124

Доровских С.И., Пирязев Д.А., Плюснина О.А.,
Зеленина Л.Н., Морозова Н.Б.

1132

**Новые β -дикетонатные комплексы кобальта(II)
с 1,3-диаминопропаном: синтез, структуры и
термическое поведение**

Ключевые слова: аддукты кобальта(II), β -дикетонат,
рентгеноструктурный анализ, ДСК, МОСVD,
Со-содержащие пленки

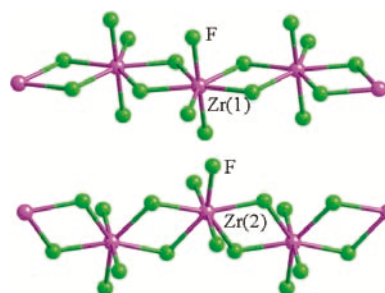


Давидович Р.Л., Ткачёв В.В., Логвинова В.Б.,
Ставила В.

1140

**Новые типы строения полимерных цепочечных
анионов в кристаллических структурах
комплексных фторидов циркония**

Ключевые слова: комплексный фторид циркония,
4-амино-1,2,4-триазол, гидроксоний, тетраэтиламмоний,
кристаллическая структура, полимерная цепь,
пентагональная бипирамида, тетраэдерный фрагмент

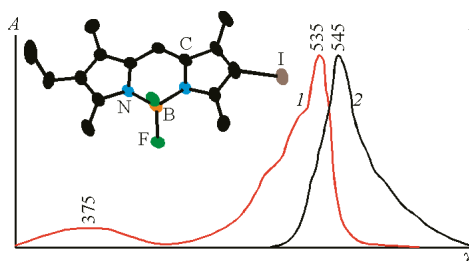


Гусева Г.Б., Антина Е.В., Нуранеева Е.Н., Березин М.Б.,
Вьюгин А.И.

1149

**Кристаллическая структура и спектрально-
люминесцентные свойства моноиодзамещенного
борфторидного комплекса дипирролилметена**

Ключевые слова: моноиодзамещенный дипирролилметенат
бора(III), BODIPY, кристаллическая структура,
спектрально-люминесцентные свойства



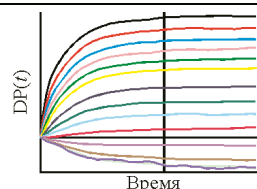
КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Волошин В.П., Маленков Г.Г., Наберухин Ю.И.

1155

**Долговременные корреляции в диффузионном
движении атомов жидкого аргона**

Ключевые слова: жидкий аргон, диффузионное движение,
коллективные эффекты, крупномасштабные корреляции

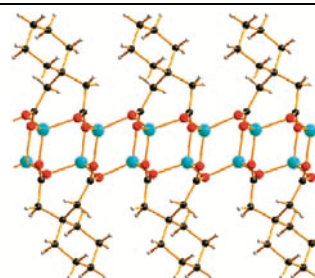


Алиев С.Б., Самсоненко Д.Г., Дыбцев Д.Н.,
Арджент С.П., Блэйк А.Дж., Шродер М., Федин В.П.

1158

**Циклогександиацетат дилития – слоистый
координационный полимер с невалентными
гидрофобными контактами**

Ключевые слова: литий, кристаллическая структура,
слоистые координационные полимеры,
невалентные взаимодействия

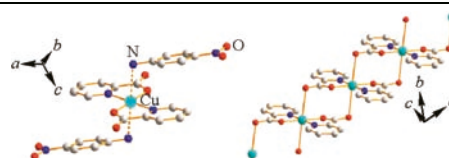


Niu J., Yuan L.-F., Li J., Guo H., Zhang F.-X.

1160

Crystal structures of two new Cu(II) complexes

Keywords: copper complex, crystal structure, 2-picolinic acid,
4-nitrophenylamine, synthesis

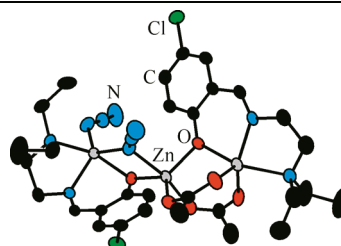


Sheng G.-H., Cheng X.-S., You Z.-L., Zhu H.-L.

1165

Crystal structure of a novel phenolato, azido, and acetato Co-bridged trinuclear zinc(II) complex derived from 4-chloro-2-[(2-diethylaminoethylimino)methyl]phenol

Keywords: Schiff base, trinuclear complex, zinc complex, crystal structure, X-ray crystallography

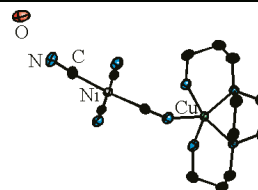


Smékal Z., Adams H.

1170

Binuclear complex [Cu(bappz)(μ-NC)Ni(CN)₃]·H₂O (bappz = 1,4-bis(3-aminopropyl)piperazine)

Keywords: copper(II) complexes, tetracyanonickelates(II), cyano-bridged complexes, X-ray structure analysis

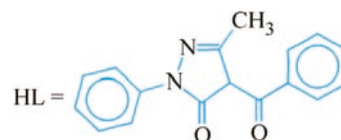


Чумаков Ю.М., Петренко П.А., Жуля Ф.Г.,
Цапков В.И., Гуля А.П.

1174

Кристаллическая структура бис(4-бензоил-3-метил-1-фенил-4,5-дигидро-1H-пиразол-5-онато)-(этанол)-диоксоуран(VI) этанол сольвата

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, комплексы диоксоурана, 4-бензоил-3-метил-1-фенил-4,5-дигидро-1H-пиразол-5-он

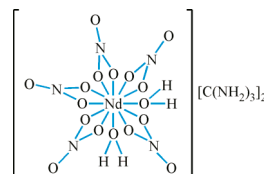


William W.N.

1178

Crystal structure of diguanidinium diaquapentakis(nitrato)neodymium(III)

Keywords: crystal structure, neodymium nitrate complex, guanidinium cation, hydrogen bonding

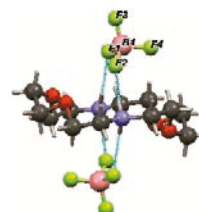


Гельмбольдт В.О., Ганин Э.В., Липковский Я.,
Фонарь М.С.

1182

Строение бис(тетрафторобората) 1,10-дiazоний-18-краун-6

Ключевые слова: краун-эфир, комплекс хозяин-гость, водородные связи, кристаллическая структура



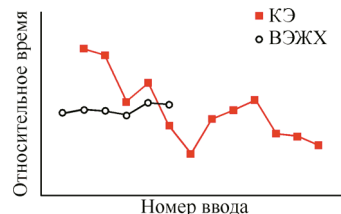
**МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ
«МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ СОСТАВА И СТРУКТУРЫ
ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ»,
НОВОСИБИРСК, 21 – 25 ОКТЯБРЯ 2013 г.**

Жданов А.А., Шуваева О.В.

1184

Применение методов капиллярного электрофореза и высокоэффективной жидкостной хроматографии для изучения комплексных полиоксометалатов

Ключевые слова: капиллярный электрофорез, ион-парная ВЭЖХ, гетерополисоединения

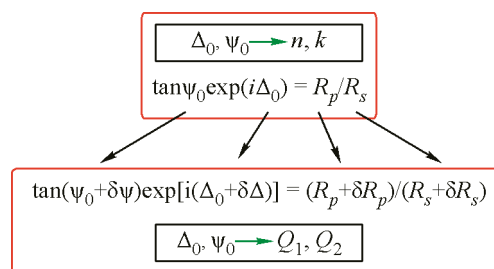


Максимова О.А., Косырев Н.Н., Варнаков С.Н.,
Лященко С.А., Овчинников С.Г.

1190

Особенности анализа эллипсометрических данных для магнитных наноструктур

Ключевые слова: магнитоэллипсометрия, эллипсометрические измерения, магнитооптический эффект Керра, тонкие пленки, модель полубесконечной среды, коэффициент преломления, коэффициент поглощения, магнитооптический параметр

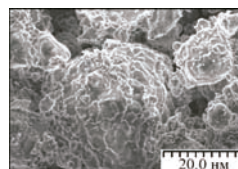


Габрук Н.Г., Олейникова И.И., Шутеева Т.А.

1198

Углеродный фитосорбент – получение, структура

Ключевые слова: скорлупа грецкого ореха, карбонизация, углеродный фитосорбент, электронная микроскопия, флавоноиды, зверобой, биологически активные соединения

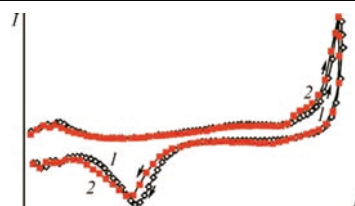


Ахмедов М.А., Хидиров Ш.Ш.

1204

Определение состава и свойств метансульфокислоты методом вольтамперометрии

Ключевые слова: вольтамперометрия, адсорбция, электрод, поляризация, потенциал, платина, метансульфокислота, серная кислота

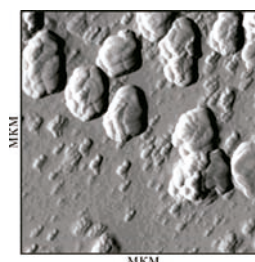


Дягилев Д.В., Ларичев Т.А., Пугачёв В.М.,
Владимиров А.А., Сотникова Л.В., Манина Т.С.,
Степанов А.Ю., Дудникова Ю.Н.

1208

Исследование дисперсности и структуры нанокристаллических порошков фотоактивного диоксида титана

Ключевые слова: диоксид титана, анатаз, рутил, фотокатализатор, синтез, золь-гель метод, адсорбция

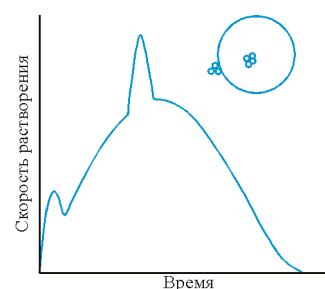


Почтарь А.А., Васильева И.Г., Малахов В.В.

1216

Определение проявлений пространственной неоднородности химического состава функциональных материалов методами стехиографии

Ключевые слова: фазовый анализ, метод дифференцирующего растворения, неоднородность состава и структуры твердых фаз, математическое моделирование динамических процессов растворения



Довлитова Л.С., Почтарь А.А., Малахов В.В.

1222

Определение фазового состава предшественников катализаторов многослойных углеродных нанотрубок стехиографическим методом дифференцирующего растворения

Ключевые слова: катализаторы синтеза МУНТ, дифференцирующее растворение, стехиографический метод

