

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 56

Ноябрь-декабрь

№ 6, 2015

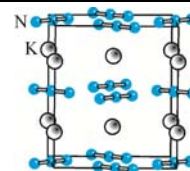
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Кравченко Н.Г., Поплавной А.С.

**Электронная структура и химическая связь
в кристаллах KN_3 и KSCN**

Ключевые слова: азид калия, тиоцианат калия,
зонные спектры, функционал плотности

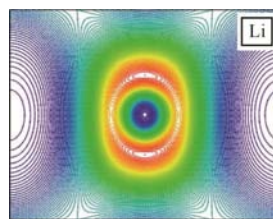


1081

Басалаев Ю.М., Стародубцева М.В.

**Особенности распределения заряда валентных
электронов в кристаллах $\text{LiB}^{\text{IV}}\text{X}^{\text{V}}$**

Ключевые слова: функционал плотности,
метод подрешеток, сфалерит,
полухейслеровское соединение, разностная плотность,
деформационная плотность

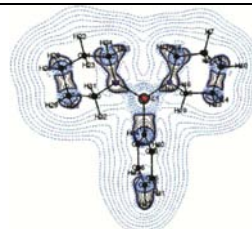


1088

Алексеев Н.В.

**Квантово-химическое исследование связей
алюминий – азот в соединениях
трехкоординированного алюминия**

Ключевые слова: квантовая химия,
метод NBO, метод AIM

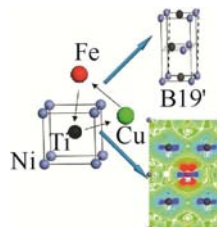


1095

Yin J.Y., Li G.F., Si Y.L., Ying G., Peng P.

**Micromechanism of Cu and Fe alloying process
on the martensitic phase transformation
of NiTi-based alloys: First-principles calculation**

Keywords: NiTi alloy, martensitic phase transformation,
micromechanism, first principles calculation



1103

Трунаева Е.С., Хохлова О.Н., Хохлов В.Ю.

**Квантово-химическое моделирование
гидратации и ассоциации фенилаланина
в растворе**

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование,
гидратация, фенилаланин



1111

ИЗДАТЕЛЬСТВО СО РАН
НОВОСИБИРСК
2015

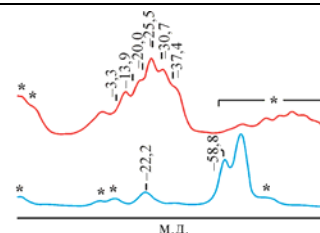
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Слободюк А.Б., Диденко Н.А., Годнева М.М.

1116

Исследование строения гидратированных фторофосфатоцирконатов (гафнатов) методом ЯМР

Ключевые слова: фторофосфатоцирконаты, фторофосфатогафнаты, ЯМР, диффузионная подвижность, кристаллическое строение

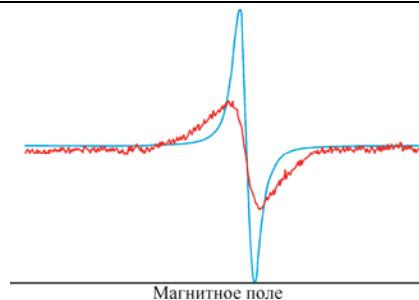


Шаяпов В.Р., Надолинный В.А., Кожемяченко С.И., Румянцев Ю.М., Файнер Н.И.

1123

Структурные дефекты в пленках $\text{SiC}_x\text{N}_y\text{H}_z$, полученных плазмохимическим осаждением из паров гексаметилдисилазана

Ключевые слова: PECVD, пленки, электронный парамагнитный резонанс, гексаметилдисилазан, оборванные связи, кластеры углерода

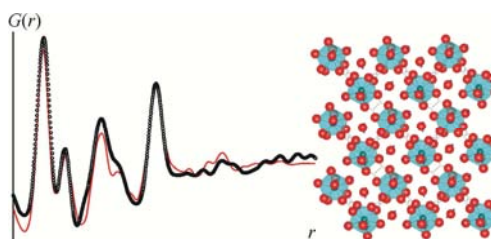


Анчарова У.В., Пахарукова В.П., Матвиенко А.А., Цыбуля С.В.

1129

Структурные исследования наноматериалов методом радиального распределения электронной плотности с использованием просвечивающей дифрактометрии на синхротронном излучении

Ключевые слова: синхротронное излучение, рентгеновская дифракция, радиальное распределение электронной плотности, нанокристаллические материалы, локальная структура

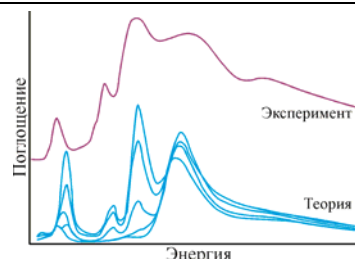


Шматко В.А., Яловега Г.Э.

1137

Особенности химической связи во фторированных и гидрированных углеродных нанотрубках: анализ поляризованных спектров NEXAFS

Ключевые слова: поляризованные спектры NEXAFS, функционализированные одностенные углеродные трубки, хиральность, π^* - и σ^* - симметрия орбиталей



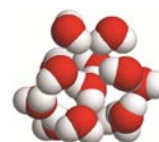
СТРУКТУРА ЖДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Хахалин А.В., Градобоева О.Н., Хамидуллина Р.Ф.

1144

Быстрая методика анализа структурных свойств водных кластеров с примесями с количеством присутствующих в них молекул воды более 12

Ключевые слова: численные методы, водные кластеры, конфигурации, кодирование структуры

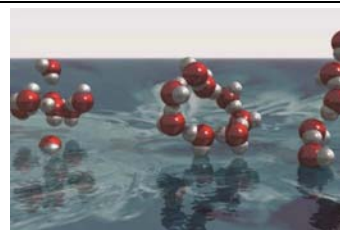


Коротких О.П., Кочурова Н.Н., Козлова Т.Н.

1149

Электропроводность водного раствора децилсульфата натрия и характер гидратации его аниона

Ключевые слова: децилсульфат натрия, водные растворы, электропроводность, гидратация, критическая концентрация мицеллообразования

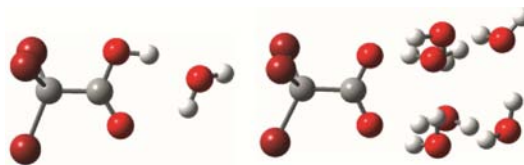


Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В.

1156

Гидратация молекул CBr_3COOH и анионов $\text{CBr}_3\text{CO}_2^-$ в водных растворах

Ключевые слова: трибромуксусная кислота, трибромацетат натрия, водные растворы, колебательный спектр, расчет методом ТФП, строение гидратов молекул CBr_3COOH , строение гидратов анионов $\text{CBr}_3\text{CO}_2^-$



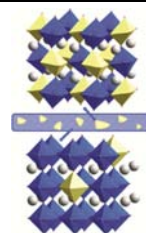
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Артимонова Е.В., Савинская О.А., Беленькая И.В., Немудрый А.П.

1165

Исследование структурных особенностей нестехиометрических $\text{SrCo}_{0,8-x}\text{Fe}_{0,2}\text{W}_x\text{O}_{3-\delta}$ ($0 < x < 0,1$) перовскитов

Ключевые слова: нестехиометрические перовскиты, наноструктурирование, керамические мембраны

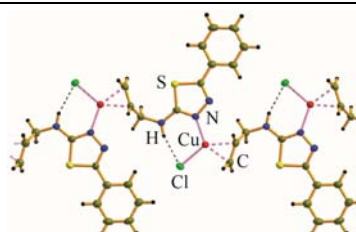


Слывка Ю.И.

1171

Особенности строения π -комплексов CuCl и Cu_2SiF_6 с 2-аллиламино-5-фенил-1,3,4-тиадиазолом состава $[\text{CuCl}(\text{C}_{11}\text{H}_{11}\text{N}_3\text{S})]$ и $[\text{Cu}(\text{C}_{11}\text{H}_{11}\text{N}_3\text{S})(\text{H}_2\text{O})(\text{CH}_3\text{CN})]_2\text{SiF}_6 \cdot 2\text{CH}_3\text{CN}$

Ключевые слова: медь(I), π -комплекс, 1,3,4-тиадиазол, кристаллическая структура

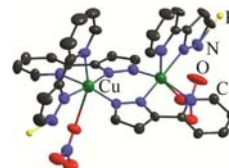


Liu X.B., Huan D.H., Cui G.H., Han L.H.

1177

Crystal structures of copper(II) and zinc(II) complexes derived from 3-(2-pyridyl)pyrazole

Keywords: copper(II), crystal structure, 3-(2-pyridyl)pyrazole, zinc(II)

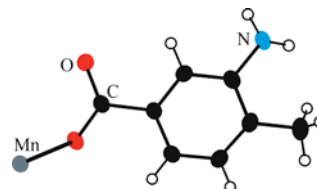


Khosa M.K., Wood P.T., Humphrey S.M., Harrison W.T.A.

1183

Crystal structures of a family of layered coordination polymers containing divalent metal ions (Mn^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} and Zn^{2+}) and the 3-amino 4-methyl benzoate ion

Keywords: coordination polymer, bridging ligand, layered structure

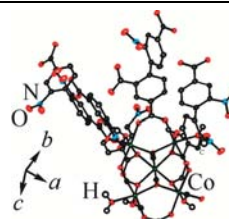


Wu R.-F., Shi H.-P., Zhang J.-R., Chang F.-F.

1189

A novel 3D energetic coordination polymer containing Co(II) atoms in a pentanuclear cluster

Keyword: coordination polymer, pentanuclear clusters, energetic materials



Тарасенко М.С., Наумов Н.Г., Куратьева Н.В.

1196

Строение координационных полимеров $\text{Cs}_2[\{\text{Ln}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{C}_2\text{H}_6\text{O})\}\{\text{Re}_6\text{Se}_8(\text{CN})_6\}_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ($\text{Ln} = \text{La}, \text{Nd}$)

Ключевые слова: рений, октаэдрический кластер, РЗЭ, комплексные соединения, кристаллическая структура

