

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ЖУРНАЛ
СТРУКТУРНОЙ
ХИМИИ**
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 12 раз в год

Т О М 60

Октябрь

№ 10, 2019

СОДЕРЖАНИЕ

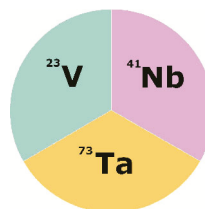
ОБЗОРЫ

Гущин А.Л., Рогачев А.В., Фоменко Я.С., Соколов М.Н.

1595

**Халькогенидные кластерные комплексы
переходных металлов пятой группы:
синтетические и структурные аспекты**

Ключевые слова: кластерные комплексы,
халькогенидные кластеры, ванадий, ниобий, тантал,
кристаллическая структура



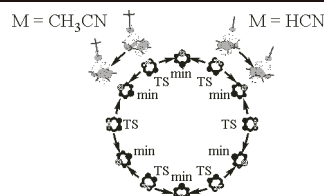
ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Береговая И.В., Андреев Р.В., Щеголева Л.Н.

1643

**Псевдовращение катион-радикала бензола,
ассоциированного с молекулой HCN или CH₃CN**

Ключевые слова: межмолекулярные взаимодействия,
ион-молекулярные комплексы, ян-теллеровские ионы,
поверхность потенциальной энергии, псевдовращение



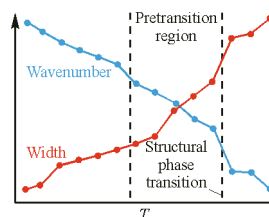
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Алиев А.Р., Ахмедов И.Р., Какагасанов М.Г.,
Алиев З.А.

1649

**Предпереходные явления в области структурного
фазового перехода в перхлорате калия**

Ключевые слова: ионные кристаллы,
комбинационное рассеяние, молекулярная спектроскопия,
колебательная релаксация, предпереход, перхлораты



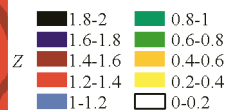
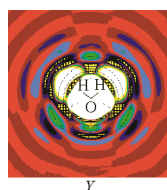
СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Теплухин А.В.

1655

**Термодинамические и структурные характеристики
воды SPC/E при температуре 290 К
и высоком давлении**

Ключевые слова: вода, моделирование, Монте-Карло,
NpT, высокие давления, параллельные вычисления

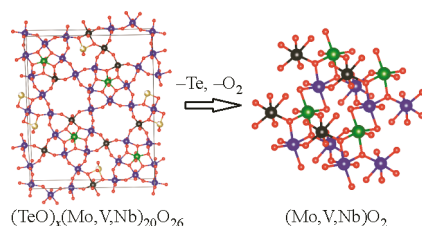


КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Кардаш Т.Ю., Марчук А.С., Ищенко А.В.,
Симаненко А.А., Лазарева Е.В., Свиницкий Д.А.

In situ исследование структурных трансформаций
активной фазы катализаторов VMoNbTeO
в восстановительных условиях

Ключевые слова: катализаторы VMoNbTeO , фаза M1,
рентгеновская дифракция *in situ*

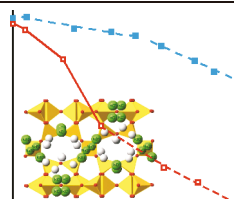


1664

Серёткин Ю.В., Бакакин В.В.

**Структура K,Na-замещенного цеолита стеллерита
и ее эволюция при высоком давлении**

Ключевые слова: цеолиты, K,Na-замещенный стеллерит,
структура, высокое давление,
индуцированная давлением гидратация

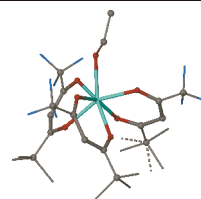


1677

Жерикова К.В., Куратьева Н.В.

**Кристаллохимическое исследование
двух комплексов скандия(III)
с пивалоилтрифторацетоном**

Ключевые слова: скандий, пивалоилтрифторацетон, синтез,
рентгеноструктурный анализ, ТГ/ДТА, прекурсор MOCVD

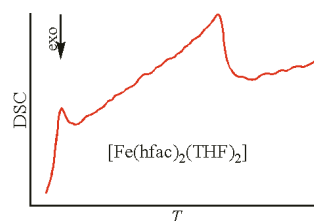


1688

Романенко Г.В., Фокин С.В., Пищур Д.П.,
Богомяков А.С., Овчаренко В.И.

**Термоиндуцируемые структурные превращения
[Fe(hfac)2(THF)2]**

Ключевые слова: железо(II), гексафторацетилацетонат,
фазовые переходы,
молекулярная и кристаллическая структура

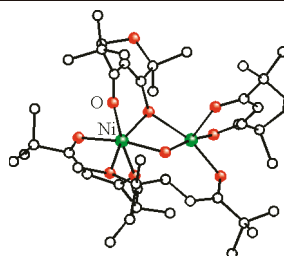


1696

Уркасым кызы С., Крисюк В.В., Тургамбаева А.Е.,
Байдина И.А., Комаров В.Ю., Коротаев Е.В.,
Корольков И.В.

**Метоксизамещенные β-дикетонаты
переходных металлов: синтез и свойства**

Ключевые слова: β-дикетонаты переходных металлов,
кристаллическая структура, разнолигандные комплексы,
термические свойства, молекулярные магнетики

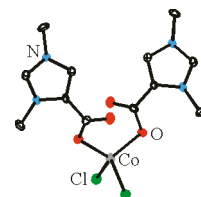


1701

Шаповалов С.С., Колос А.В., Махин А.П.,
Скабицкий И.В., Симоненко Н.П., Минин В.В.

**Комплексы галогенидов кобальта и меди
на основе 1,3-диметилимидазолий-4-карбоксилата**

Ключевые слова: бетаин, цвиттер-ион, норзоанемонин,
ТГА, ЭПР

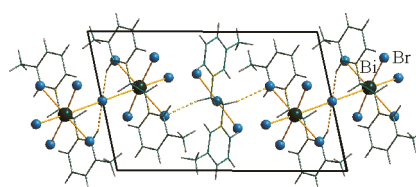


1714

Адонин С.А., Соколов М.Н., Федин В.П.

**Кристаллические структуры бромовисмутатных
комплексов $((3\text{-MePy})_2\text{C}_2)_4[\text{Bi}_2\text{Br}_{11}][\text{BiBr}_6]$
и $(3\text{-MePy})_2\text{C}_2[\text{Bi}_2\text{Br}_{11}](\text{Br}_3)$**

Ключевые слова: висмут, галогенидные комплексы,
полиядерные комплексы, полигалогениды

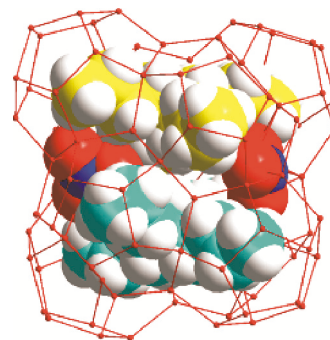


1721

Родионова Т.В., Одинцов Д.С., Манаков А.Ю.,
Комаров В.Ю.

**Ионные клатратные гидраты нитрата
тетра-*n*-бутиламмония (TBANO₃)
и смешанного TBA(NO₃,OH):
новые сверхструктуры тетрагональной структуры I**

Ключевые слова: ионные клатратные гидраты,
нитрат тетра-*n*-бутиламмония,
гидроксид тетра-*n*-бутиламмония, структуры,
рентгеноструктурный анализ, разупорядоченные структуры,
локальное упорядочение

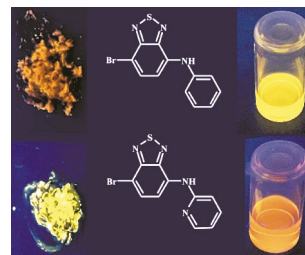


1726

Сухих Т.С., Хисамов Р.М., Баширов Д.А.,
Ковтунова Л.М., Куратьева Н.В., Конченко С.Н.

**Влияние заместителя на структуру
и фотофизические свойства фениламино-
и пиридиламино-2,1,3-бензотиадиазолов**

Ключевые слова: 2,1,3-бензотиадиазол,
кристаллическая структура, нековалентные взаимодействия,
электронная спектроскопия поглощения, фотолюминесценция

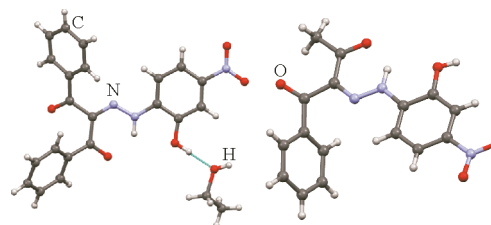


1736

Бахманова Ф.Н., Тахирли Ш.А., Аскеров Р.К.,
Гаджиева С.Р., Чырагов Ф.М.

**Изучение кристаллической
и молекулярной структуры
азосоединений двух β-дикетонных методом
рентгеноструктурного анализа**

Ключевые слова: β-дикетон, синтез азосоединений,
рентгеноструктурный анализ, упаковка молекул,
водородная связь

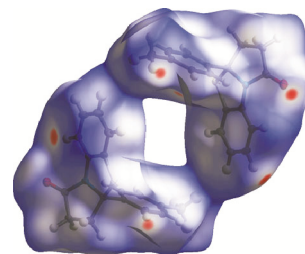


1746

Гринёв В.С., Линькова Е.И., Васильченко Д.С.,
Егорова А.Ю.

**Кристаллическая структура, особенности упаковки
и анализ поверхностей Хиршфельда
3а-(*n*-толил)-3,3а-дигидробензо[*d*]пирроло-
[2,1-*b*]тиазол-1(2*H*)-она**

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ,
кристаллическая структура, дигидробензопирролотиазолон



1753

Содержание следующего номера — в конце журнала