

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 59

Май-июнь

№ 4, 2018

## СО Д Е Р Ж А Н И Е

### ВТОРАЯ РОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ «ГРАФЕН: МОЛЕКУЛА И 2D КРИСТАЛЛ» ИНХ СО РАН,

Новосибирский государственный университет,  
7 – 11 августа 2017 г.

Федосеева Ю.В., Окотруб А.В.

**Научные достижения в области исследования  
графена и родственных структур**

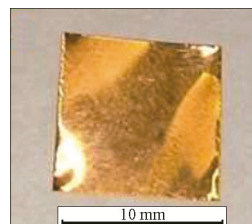


787

Архипов В.Е., Гусельников А.В., Попов К.М., Гевко П.Н.,  
Федосеева Ю.В., Смирнов Д.А., Булушева Л.Г.,  
Окотруб А.В.

**Оптимизация параметров синтеза графена  
на медной фольге при пониженном давлении метана**

**Ключевые слова:** графен, CVD-синтез, медная фольга,  
электронная структура, РФЭС

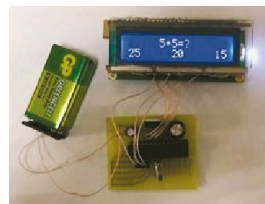


792

Николаев Д.В., Попов В.И., Тимофеев В.Б.,  
Смагулова С.А.

**Синтез графеновых пленок большой площади  
методом газофазного осаждения**

**Ключевые слова:** графен, CVD, КРС, перенос, сенсорные  
панели, датчик влажности

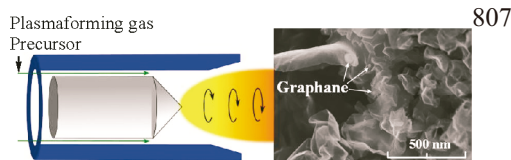


800

Шавелкина М.Б., Амиров Р.Х., Алиханов Н.-Р.,  
Вахитов И.Р., Шаталова Т.Б.

**Непрерывный синтез гидрированных графенов  
при использовании термической плазмы**

**Ключевые слова:** плазматрон, струя плазмы, плазмохимия,  
конверсия, метан, синтез, графен, гидрированный графен, гелий

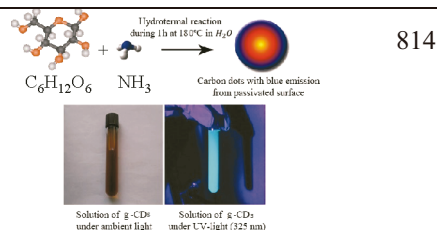


807

Егорова М.Н., Томская А.Е., Капитонов А.Н.,  
Алексеев А.А., Смагулова С.А.

**Гидротермальный синтез люминесцирующих  
углеродных точек из глюкозы и сажи березовой коры**

**Ключевые слова:** глюкоза, сажа, гидротермальный синтез,  
углеродные точки, люминесценция углеродных точек



814

ИНХ СО РАН  
НОВОСИБИРСК  
2018

Лобяк Е.В., Булушева Л.Г., Галицкий А.А.,  
Смирнов Д.А., Flahaut E., Окотруб А.В.

**Структура и электрохимические свойства  
углеродных нанотрубок, синтезированных  
с использованием катализаторов, полученных  
при разложении нанесенных  
на MgO полимолибдатов Co, Ni и Fe**

**Ключевые слова:** углеродные нанотрубки, CCVD синтез,  
полимолибдаты Co, Ni, Fe, суперконденсатор

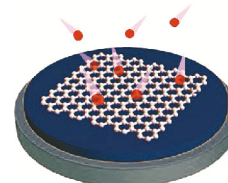


820

Неустроев Е.П., Ноговицына М.В., Соловьев Б.Д.,  
Куркина И.И., Николаев Д.В.

**Воздействие плазмы SF<sub>6</sub> на свойства оксида графена**

**Ключевые слова:** оксид графена, плазмохимическая  
обработка, гексафторид серы, фторирование,  
изменение электрических сопротивлений

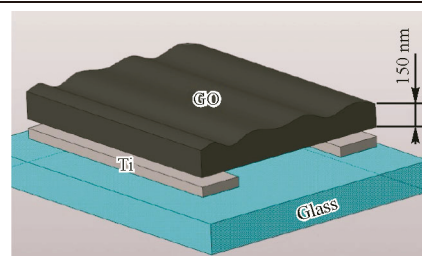


827

Тимофеева Т.Е., Евсеев З.И., Винокуров П.В.,  
Александров Г. Н., Смагулова С.А.

**Влияние температурных условий синтеза оксида  
графена на зависимость проводимости  
от влажности после термического восстановления**

**Ключевые слова:** оксид графена, термическое  
восстановление, сенсоры влажности, карбоксильные группы,  
зависимость проводимости от влажности

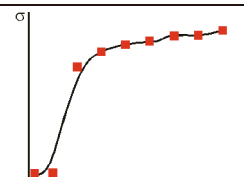


834

Бочаров Г.С., Елецкий А.В.

**Перколяционный переход при термическом  
восстановлении оксида графена**

**Ключевые слова:** перколяция, оксида графена, РФЭС,  
вольт-амперные характеристики

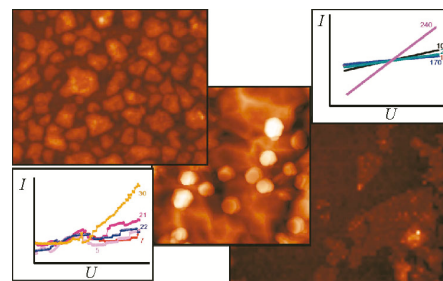


841

Куркина И.И., Васильева Ф.Д.

**Сравнение структурных и электрических свойств  
фторированного графена, оксида графена  
и графеновых пленок, функционализированных  
N-метилпирролидоном**

**Ключевые слова:** фторированный графен, оксид графена,  
графен, функционализированный N-метилпирролидоном,  
электрические свойства, структурные свойства,  
отрицательное дифференциальное сопротивление,  
ступенчатое увеличение тока, микроструктуры



850

Васильева Ф.Д., Капитонов А.Н., Томская А.Е.,  
Смагулова С.А.

**Исследование свойств суспензии, пленок и бумаг  
оксида графита, синтезированного из природного  
графита месторождения Южной Якутии**

**Ключевые слова:** природный графит, оксид графита (ОГр),  
пленка из оксида графита, бумага из оксида графита,  
оксид графена (ОГ)

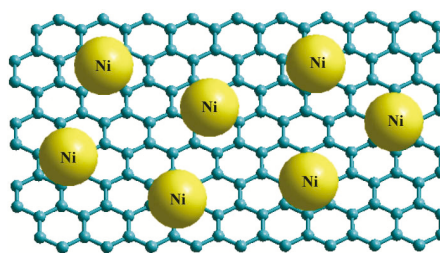


859

Тарасов Б.П., Арбузов А.А., Можжухин С.А.,  
Володин А.А., Фурсиков П.В.

**Композиты с 2D графеновыми структурами  
для водородной энергетики и катализа процессов  
с участием водорода**

**Ключевые слова:** оксид графита, графен,  
графеноподобный материал, водород, металл, гидрид,  
катализатор, композит, нановолокно, нанотрубка,  
углеродная наноструктура

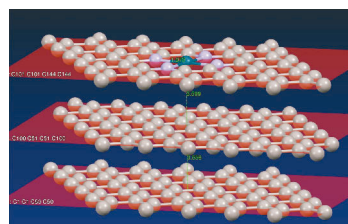


867

Чесноков В.В., Кривенцов В.В., Малыхин С.Е.,  
Чичкань А.С., Подъячева О.Ю.

**Стабилизация атомов палладия  
в порфирино-подобных фрагментах углеродных  
нановолокон, допированных азотом**

**Ключевые слова:** углеродные нановолокна, палладий,  
допирование, азот, порфирин

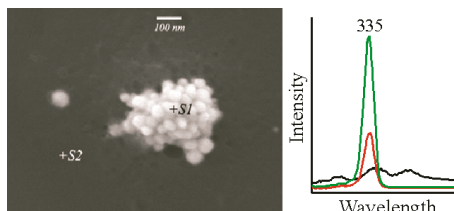


876

Неустроев Е.П., Куркина И.И., Мамаева С.Н.,  
Ноговицына М.В.

**Синтез, характеристика и применение  
нанокompозитов на основе серебряных наночастиц  
и оксида графена**

**Ключевые слова:** графен, оксид графена,  
наночастицы серебра, оптические и электрические свойства,  
нефропатия

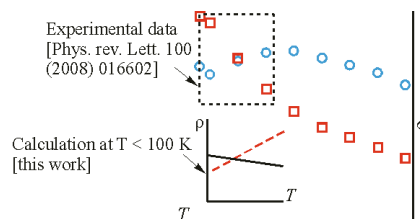


883

Бобенко Н.Г., Егорушкин В.Е., Мельникова Н.В.,  
Белослудцева А.А., Баркалов Л.Д., Пономарёв А.Н.

**Низкотемпературные особенности плотности  
электронных состояний эпитаксиального графена**

**Ключевые слова:** графен, плотность состояний,  
ближний порядок, структурные дефекты,  
транспортные свойства

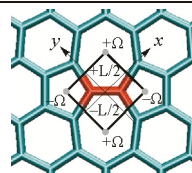


889

Красавин С.Е., Осипов В.А.

**Рассеяние фононов протяженными дефектами  
в поликристаллическом графене**

**Ключевые слова:** графен, граница зерна, теплопроводность,  
дислокационный диполь, длина свободного пробега

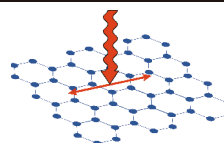


896

Кибиc О.В., Дини К., Иорш И.В., Драгунов В.П.,  
Шелых И.А.

**Электромагнитный дрессинг графена**

**Ключевые слова:** графен, электронные свойства

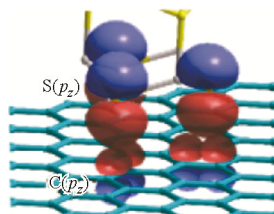


903

Седельникова О.В., Ewels С.Р., Булушева Л.Г.,  
Окотруб А.В.

**Оптические свойства квантовых точек CdS  
на графене**

**Ключевые слова:** графен, сульфид кадмия, квантовая точка,  
диэлектрическая проницаемость, теория функционала  
плотности

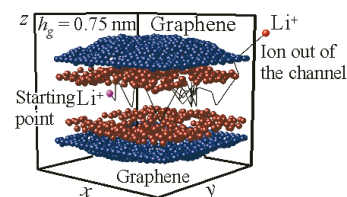


907

Галашев А.Е., Рахманова О.Р., Иваничкина К.А.

**Компьютерное исследование применения графеновой и графитовой поддержки для стабилизации силицена**

**Ключевые слова:** литий, молекулярная динамика, самодиффузия, силицен, структура

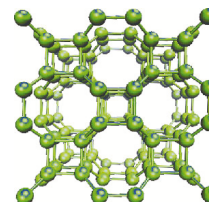


914

Баимова Ю.А., Рысаева Л.Х.

**Деформационное поведение трехмерных углеродных структур при гидростатическом сжатии**

**Ключевые слова:** скомканный графен, алмазоподобная структура, неупругая деформация механические свойства, молекулярная динамика



921

Алексеев Н.И., Бройко А.П., Калёнов В.Е., Корляков А.В., Лагош А.В., Лившиц А.О., Лучинин В.В., Хмельницкий И.К.

**Структура гибких графеновых электродов, модифицированных серебром, для разработки актюаторов биомиметических систем**

**Ключевые слова:** графен, биомиметические системы, электроактивные полимеры, искусственный мускул, восстановленный оксид графена

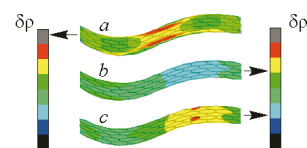


929

Седельникова О.В., Першин Ю.В.

**Деформация заряженной графеновой мембраны**

**Ключевые слова:** графен, мембрана, конденсатор, теория функционала плотности

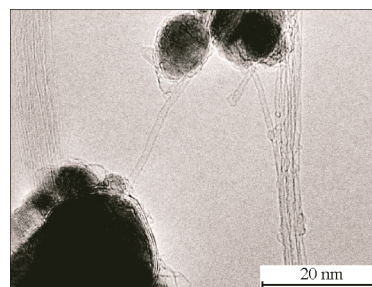


938

Кузнецов В.А., Бердинский А.С., Романенко А.И., Брянцев Я.А., Архипов В.Е., Окотруб А.В., Федоров В.Е.

**Электронный транспорт и тензорезистивный эффект в пленках разупорядоченных одностенных углеродных нанотрубок на подложках из полиэтилентерефталата**

**Ключевые слова:** углеродные нанотрубки, туннельная проводимость обусловленная тепловыми флуктуациями (FITC), электросопротивление, коэффициент тензочувствительности, сенсор, балка равного сопротивления изгибу

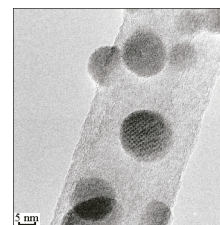


943

Артёмкина С.Б., Козлова М.Н., Полтарак П.А., Грайфер Е.Д., Фёдоров В.Е.

**Полисульфиды металлов 4-6 групп: от объемных образцов к наноразмерным материалам**

**Ключевые слова:** полисульфиды, переходные металлы, низкоразмерные структуры, коллоидные растворы, наноматериалы, катодные материалы, фотокатализ



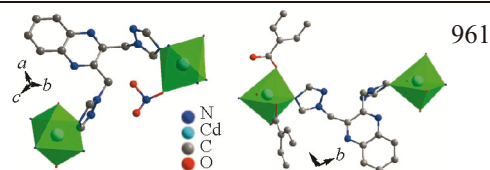
951



Zhao Q., Fan H.-T., Yang H., Song W.-C., Shen Z.

**Structure and optical properties of plane type and Z-type topology triazole quinoxaline Cd(II) complexes**

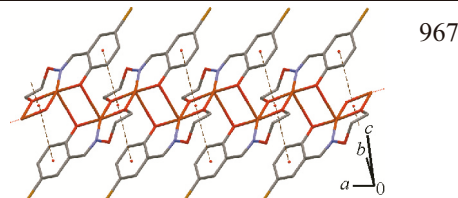
**Keywords:** self-assembly, crystal structure, topology, fluorescence spectra



Wang L., Hao J., Dong Y.-J., Dong X.-Y., Dong W.-K.

**An unexpected salamo-type copper(II) complex: Synthesis, crystal structure, thermal behavior and spectroscopic analysis**

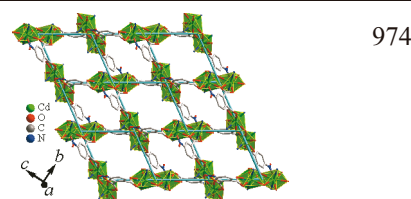
**Keywords:** asymmetric Salamo-type ligand, Cu(II) complex, synthesis, crystal structure, spectroscopic analysis



Huang Y.-J., Wang J.-J., Zheng Y.-Q., Zhu H.-L., Zhu X.-L.

**Structures and spectral study of two binuclear Cd(II) complexes based on 4-nitro-1,2-benzenedicarboxylic acid**

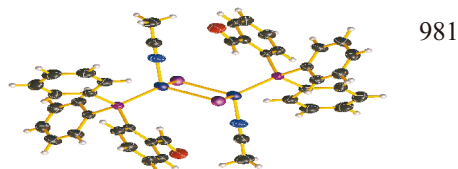
**Keywords:** synthesis, Cd(II) coordination polymers, crystal structures, spectra properties, DFT



Aguirrechu-Comerón A., Hernández-Molina R., González-Platas J.

**Structure of two new compounds of copper(I) iodide with N-donor and P-donor ligands**

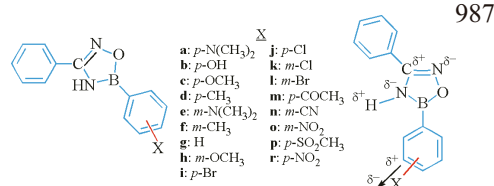
**Keywords:** copper(I), crystal structures, structural versatility



Pir M., Agirbas H.

**Experimental and computational IR spectroscopic studies on the transmission of substituent effects on N—H, C=N, B—N and B—O bond stretching frequencies in 3,5-disubstituted 1,2,4,5-oxadiazaboroles**

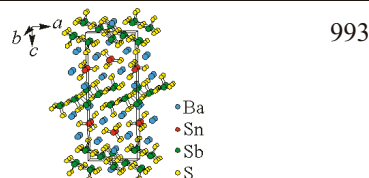
**Keywords:** DFT calculations, IR stretching frequencies, oxadiazaboroles, transmission of substituent effects



Zhao H.-J.

**Crystal structure and optical property of the quaternary sulfide Ba<sub>2.77</sub>SnSb<sub>2.16</sub>S<sub>8</sub>**

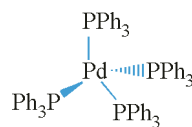
**Keywords:** synthesis, antimony chalcogenides, crystal structure, optical property



Wang H.-F., Yih K.-H., Yang C.-H., Lee G.-H., Huang K.-F.

**Crystal structures of 2,2'-bipyridyl palladium(II) complexes [Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>{κ<sup>1</sup>-C<sub>10</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>Br}(Br)] and [Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Br]<sub>2</sub>{μ,κ<sup>2</sup>-C<sub>10</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>}**

**Keywords:** synthesis, 6,6'-dibromo-2,2'-bipyridyl, palladium, dipalladium, X-ray diffraction

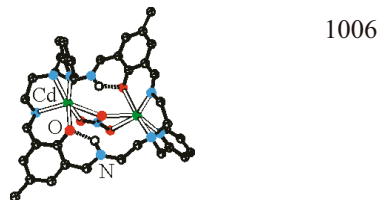


Golbedaghi R., Haqgu M., Arabi A., Golshani Y.

**A new dinuclear Cd(II) macrocyclic complex of a Schiff base ligand:**

**Synthesis, characterization, NMR and MASS spectroscopy investigation and *ab initio* calculations**

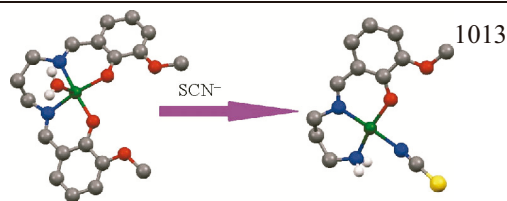
**Keywords:** dinuclear, macrocyclic, Schiff base, DFT, Cd



Thakurta S., Pilet G.

**A template-directed approach for the synthesis of a new mono-condensed Schiff base complex of copper(II)**

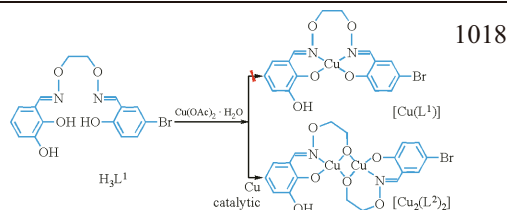
**Keywords:** template synthesis, mono-condensed ligand, copper(II), crystal structure, hydrogen bonding



Dong X.-Y., Zheng Sh.-Sh., Dong Y.-J., Meng J.-L., Dong W.-K.

**Crystal structure and luminescence property of the zinc(II) complex based on 2-hydroxynaphthaldehyde**

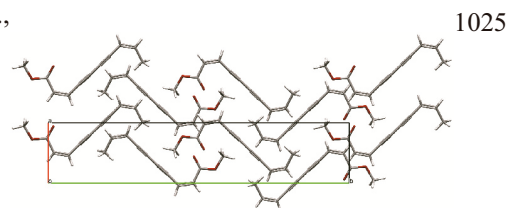
**Keywords:** synthesis, salamo-type bisoxime compound, Zn(II) complex, synthesis, crystal structure, luminescence property



Suleimen Ye.M., Van Hecke K., Ibatayev Zh.A., Iskakova Zh.B., Akatan K., C.H.G. Martins, T.S. Silva

**Crystal structure and biological activity of matricaria ester isolated from *Tripleurospermum inodorum* (L.) Sch. Bip.**

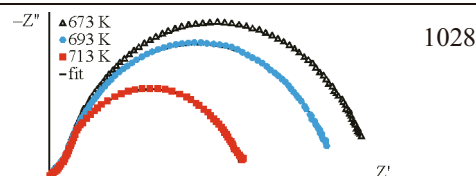
**Keywords:** matricaria ester, (2Z,8Z)-deca-2,8-diene-4,6-dienoic acid methyl ester, *Tripleurospermum inodorum* (L.) Sch. Bip., X-ray crystallographic analysis, NMR spectroscopy, cytotoxic activity, antioxidant activity



Dridi W., Zid M.F.

**Crystal structure and electrical properties of new triple molybdate  $\text{Na}_{0.45}\text{K}_{1.55}\text{Cu}_3(\text{MoO}_4)_4$**

**Keywords:** solid state, X-ray diffraction, molybdate, electrical properties



Содержание следующего номера — в конце журнала