

Российская академия наук

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

Том 69 № 5 2024 Сентябрь—Октябрь

Основан в 1956 г.

Выходит 6 раз в год

ISSN 0023-4761

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор
М. В. Ковальчук

Редакционная коллегия:

А.С. Авилов, В.Л. Аксёнов, В.А. Бушуев,
А.Э. Волошин (*заместитель главного редактора*), И.Л. Ерёменко,
А.Г. Забродский, М.Ю. Каган, В.М. Каневский,
П.К. Кашкаров (*заместитель главного редактора*),
В.В. Кведер, С.Л. Киселев,
А.Ф. Константинова (*ответственный секретарь*),
А.Г. Литвак, А.А. Макаров, Э.Х. Мухамеджанов,
В.Я. Панченко, В.О. Попов, Д.Ю. Пущаровский,
Н.И. Сорокина, С.Н. Чвалун

Зав. редакцией И.Н. Миронова

Адрес редакции: 119333, В-333, Ленинский проспект, 59

тел. 8(499)135-60-70

E-mail: redcryst@crys.ras.ru

Москва
ФГБУ «Издательство «Наука»

© Российская академия наук, 2024

© Редколлегия журнала «Кристаллография»
(составитель), 2024

СОДЕРЖАНИЕ

Том 69, номер 5, 2024

ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

- Компьютерная дифракционная томография: сравнительный анализ применения управляемого и вейвлет-фильтров для обработки изображений
В. И. Бондаренко, С. Ш. Рехвиашвили, Ф. Н. Чуховский 755
- Численное моделирование рентгеновской секционной топографии газовых пор в кристалле карбида кремния
В. Г. Кон 764

СТРУКТУРА НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

- Дефектная кристаллическая структура $\alpha\text{-Na}_{0.5-x}\text{R}_{0.5+x}\text{F}_{2+2x}$ ($R = \text{Dy-Lu, Y}$) по данным рентгеновской и электронной дифракции.
I. Методика моделирования дефектной структуры на примере $\alpha\text{-Na}_{0.35}\text{Dy}_{0.65}\text{F}_{2.30}$
Е. А. Сульянова, Б. П. Соболев, В. И. Николайчик, А. С. Авилов 771
- Диссимметризация в минералах группы эвдиалита. I. Упорядоченная модель распределения катионов в кристаллической структуре амаблита-(Ce) в рамках $P3$ -симметрии
Р. К. Расцветаева, С. М. Аксенов, В. М. Гридчина, Н. В. Чуканов 787

СТРУКТУРА ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

- Морфология кристаллов этилендиаминтетраацетатозинкатов триэтилендиамина и тетраметилэтилендиамина
В. В. Семенов, Н. В. Золотарева, Н. М. Лазарев, Б. И. Петров, Т. И. Лопатина, Е. Н. Разов 795

СТРУКТУРА МАКРОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

- Молекулярная динамика и малоугловое рентгеновское рассеяние: сопоставление вычислительного и экспериментального подходов к изучению структуры биологических комплексов
М. В. Петухов, Т. В. Ракитина, Ю. К. Агапова, Д. Е. Петренко, Д. Д. Подшивалов, В. И. Тимофеев, Г. С. Петерс, Ю. А. Гапонов, Э. В. Бочаров, Э. В. Штыкова 802

ДИНАМИКА РЕШЕТКИ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

- Процесс сверхглубокого проникания высокоскоростных металлических частиц в твердое тело
А. И. Никитин, В. А. Никитин, А. М. Величко, Т. Ф. Никитина 811

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ

- Температурная эволюция атомной структуры и влияние локального окружения атомов на оптические свойства кристалла Na_2SiF_6
А. П. Дудка, Д. Н. Каримов, Т. Г. Головина, А. Ф. Константинова 821
- Влияние отжига кристаллов катангасита $\text{Ca}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ на их оптическую активность
Т. Г. Головина, А. Ф. Константинова, В. М. Касимова, Е. В. Забелина, Н. С. Козлова, Г. Ю. Деев, О. А. Бузанов 834

Многоугловые спектрофотометрические методы отражения
для определения коэффициентов преломления

Е. В. Забелина, Н. С. Козлова, В. М. Касимова

843

Полярность ретикулярных граней и термодинамическое
состояние гранной системы кристалла

Л. А. Адмакин, А. Л. Адмакин

851

ПОВЕРХНОСТЬ, ТОНКИЕ ПЛЕНКИ

Фотополимеризация пленок Ленгмюра–Шефера симметричных молекул
дииновых *N*-арилкарбаматов с различным количеством CH_2 -групп в спейсерах

А. С. Алексеев, С. Ю. Вязьмин, А. Б. Иванов, В. В. Клечковская, М. С. Лукасов

858

НАНОМАТЕРИАЛЫ, КЕРАМИКА

Нанопроволоки из тройных сплавов — особенности синтеза и магнитные свойства

*Д. Р. Хайретдинова, И. М. Долуденко, И. В. Перунов, И. С. Волчков,
Л. В. Панина, Д. Л. Загорский, К. В. Фролов, В. М. Каневский*

866

Аномальное упрочнение двухкомпонентных неупорядоченных кристаллов

Б. В. Петухов

876

РОСТ КРИСТАЛЛОВ

Проверка применимости крупнозернистого силового поля MARTINI
для моделирования белковых олигомеров в кристаллизационном растворе

*Ю. В. Кордонская, В. И. Тимофеев, М. А. Марченкова,
Ю. В. Писаревский, Ю. А. Дьякова, М. В. Ковальчук*

885

Кристаллы пара-кватерфенила и его триметилсилильного производного.

I. Рост из растворов, структура и кристаллохимический анализ
по методу поверхностей Хиршфельда

*В. А. Постников, Н. И. Сорокина, М. С. Лясникова, Г. А. Юрасик,
А. А. Кулишов, Т. А. Сорокин, О. В. Борщев, Е. А. Свидченко, Н. М. Сурин*

891

Переходное состояние вещества во флуктуационной модели роста кристалла

В. И. Ракин

907