$CystH)_2(1,10\text{-}phen)_2](NO_3)_4 \cdot H_2O$ (II) – будут приведены результаты рентгеноструктурного анализа (РСА).

Комплекс I кристаллизуется в триклинной сингонии с пространственной группой P-1, параметры элементарной ячейки, Å: a = 13.86, b = 13.82 , c = 12.17, $\alpha = 122.13^o$, $\beta = 103.61^o$, $\gamma = 91.40^o$, $V(Å^3)$ = 1887.0, Z = 1, R = 7.02%; II - в моноклинной сингонии с пространственной группой Cc, параметры элементарной ячейки, Å: a = 24.53, b = 13.10 , c = 22.65, $\beta = 104.26^o$, $V(Å^3)$ = 7052.25, Z = 4, R = 3.16%.

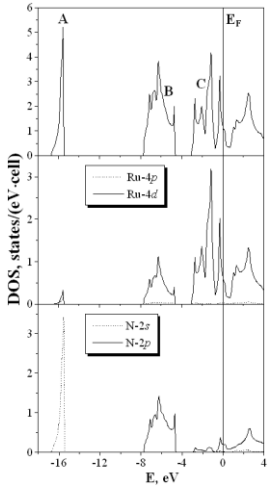
Рассмотрено исследование влияния ультрамалых количеств комплекса II на усиление действия аденозина в условиях инфаркта миокарда передней стенки левого желудочка крыс линии «Вистар». Показано, что ультрамалые количества комплекса II приводят к усилению действия аденозина. Последнее проявляется в снижении уровня артериального давления (АД) и уменьшении тахикардии. Между уровнем АД, уменьшением частоты сердечных сокращений и концентрацией комплекса II установлена корреляционная зависимость. Выявлено, что в отличие от препаратов платины, комплекс II не вызывает цито- и нефротоксичного действия.

ОТНОСИТЕЛЬНАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ, СТРУКТУРНЫЕ, УПРУГИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА СЕРИИ ПОЛИМОРФНЫХ МОДИФИКАЦИЙ НИТРИДА РУТЕНИЯ ПО ДАННЫМ ЗОННЫХ FLAPW-GGA РАСЧЕТОВ

Банников В.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л.
Институт химии твердого тела УрО РАН
620990, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, д. 91

В последние годы значительный интерес привлекают свойства карбидов и нитридов платиноидов. Недавно был синтезирован нитрид рутения состава RuN [1], который, как сообщалось, обладает структурой каменной соли [RS], однако *ab initio* зонные расчеты предсказали механическую неустойчивость данной фазы [2]. В настоящей работе с привлечением зонного FLAPW-GGA метода исследованы структурные, электронные свойства и относительная стабильность шести модификаций RuN – со структурой [RS], цинковой обманки [ZB] и [CsCl] (кубические), куперита [PtS] (тетрагональная), а также [WC] и [NiAs] (гексагональные). Установлено, что наиболее стабильной среди них является [ZB], имеющая минимальную энергию в расчете на форм. единицу (см. Таблицу), причем в целом по ряду рассмотренных

полиморфов стабильность падает с ростом координационного числа (КЧ). Все рассмотренные RuN фазы обладают ненулевой плотностью электронных состояний на уровне Ферми ($N(E_F)$), причем ее значение существенно превышает таковое для *гпу*-Ru (0.808 сост./эВ в расчете на атом). [RS] фаза является магнитной (магнитный момент μ_{tot}, на форм. единицу составляет около 1 μ_B), рассчитанные μ_{tot} для [WC] и [NiAs] фаз значительно меньше, тогда для остальных фаз получено немагнитное состояние. Расчетные значения констант упругости для наиболее стабильной [ZB] фазы (C_{11}=280.4 ГПа, C_{12}=258.6 ГПа и C_{44}=168.4 ГПа) удовлетворяют критерию механической устойчивости кубических кристаллов. На рисунке показаны полные и парциальные плотности состояний для [ZB] фазы. Полоса B образована смешанными N-2*p* и Ru-4*d* состояниями, ответственными за формирование ковалентной составляющей Ru-N связей. В то же время расчет в схеме Бейдера эффективных зарядов атомов дает для Ru и N значения 43.00*e* и 8.00*e*, следовательно, в кристалле имеет место перенос заряда Ru→N, и Ru-N связи следует отнести к смешанному ковалентно-ионному типу.



	КЧ	a, Å	c, Å	ΔE, эВ	$N(E_F)$, сост./эВ	μ_{tot}, μ_B
[ZB]	4	4.555	-	0	1.245	0.000
[PtS]	4	2.692	6.042	0.465	1.893	0.002
[NiAs]	6	2.948	5.272	0.770	3.230	0.294
[WC]	6	2.754	3.017	1.238	2.652	0.093
[RS]	6	4.313	-	1.276	5.125	1.011
[CsCl]	8	2.675	-	1.762	2.240	0.000

1. M.G. Moreno-Armenta, J. Diaz, A. Martinez-Ruiz, G. Soto. J. Phys. Chem. Solids, 68, 1989 (2007)

2. V.V. Bannikov, I.R. Shein, N.I. Medvedeva, A.L. Ivanovskii, J. Magn. Magnet. Mater., 321, 3624 (2009)