

# СОДЕРЖАНИЕ

Том 85, номер 6, 2011

## ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА И ТЕРМОХИМИЯ

Анализ термодинамических свойств и фазовых равновесий в системе Si—P

*Н. А. Арутюнян, А. И. Зайцев, Н. Г. Шапошников*

1005

Термодинамический подход к исследованию селективности  
жидкокристаллических реентрантных фаз

*С. В. Блохина, М. В. Ольхович, А. В. Шарапова*

1010

Энталпии образования молекул и отрицательных ионов бромидов иттербия

*М. Ф. Бутман, Д. Н. Сергеев, В. Б. Моталов, Л. С. Кудин, А. С. Крючков, К. В. Кремер*

1016

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ РАСТВОРОВ

Модификация структуры и кинетическая устойчивость  
комплексов октаэтилпорфина с палладием(II)

*Т. Н. Ломова, М. Е. Клюева, Е. Ю. Тюляева*

1020

Термохимические характеристики взаимодействия L-цистеина  
с глицерином, этиленгликолем и 1,2-пропиленгликолем в водных растворах

*В. Г. Баделин, И. Н. Межевой*

1028

Термодинамика ступенчатой диссоциации D,L-триптофана в водном растворе

*Л. А. Кочергина, В. В. Черников, О. В. Платонычева*

1032

Зависимость энталпий растворения и переноса DL- $\alpha$ -аланил-DL- $\alpha$ -аспарагина  
от состава бинарных растворителей вода + амиды при 298.15 K

*В. Г. Баделин, В. И. Смирнов*

1038

Влияние состава водно-ацетонового растворителя на термодинамику  
комплексообразования 18-краун-6-эфира с глицином

*Т. Р. Усачева, И. А. Кузьмина, В. А. Шарнин, И. В. Чернов, Е. Маттеоли*

1043

Влияние сольватации на образование комплексов Ag<sup>+</sup> с 18-краун-6-эфиром  
в водно-диметилсульфоксидных растворителях

*Т. Р. Усачева, И. А. Кузьмина, В. А. Шарнин, Н. С. Сидоренко, С. И. Воронина*

1047

## СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Моделирование инфракрасных и рamanовских спектров кластеров  
диоксида кремния, абсорбирующих воду

*А. Е. Галашев, О. Р. Рахманова, Л. А. Земнухова*

1050

Молекулярно-динамическое моделирование Bu<sub>4</sub>N<sup>+</sup> в диметилформамиде:  
объемные изменения при сольватации

*М. Г. Киселев, Л. П. Сафонова*

1055

Молекулярно-динамическое моделирование ударного сжатия металлов.

Железо и растворы железо—серы

*Д. К. Белащенко, О. И. Островский*

1063

Структура водородносвязанных кластеров в суб- и сверхкритической воде

*М. Л. Антипова, Д. Л. Гурин, В. Е. Петренко*

1074

Влияние среды на оптическое вращение пропиленоксида и полипропиленоксида

*Р. Г. Макитра, Г. Г. Миляна, Е. Я. Пальчикова*

1081

Исследование строения гибридных систем хитозана  
с помощью pH-чувствительного нитроксильного радикала

*А. В. Мехаев, А. В. Пестов, Л. С. Молочников, Е. Г. Ковалева,  
Ю. Г. Ятлук, И. А. Григорьев, И. А. Кирилюк*

1086

The ab initio Study and NBO Analysis of the Solvent Dielectric Constant Effects  
and the Implicit Water Molecules on the Structural Stability  
of the 1-(6-Chloroquinoxalin-2-yl)-2-(4-(trifluoromethyl)-2, 6-dinitrophenyl) Hydrazine

*M. Noei, S. Suzangarzadeh, S. Golshani, A. Tahan*

1092

The Structures and Stability of Pentacoordinate Germyleenoid PhCH<sub>2</sub>(OH)CH<sub>3</sub>GeLiF

*Y. Qi, D. Feng*

1100

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ И НАНОМАТЕРИАЛОВ

Синтез и идентификация смешанного фуллеренола, полученного  
методом прямого одностадийного окисления фуллереновой сажи

*K. Н. Семенов, Н. А. Чарыков, В. А. Кескинов, Д. Г. Летенко,  
В. А. Никитин, В. И. Намазбаев*

1108

Тяжелые фуллерены для полупроводниковых фотодиодов на длины волн 1.5–5.0 мкм

*В. В. Шерстнев, Н. А. Чарыков, К. Н. Семенов,  
Н. И. Алексеев, В. А. Кескинов, О. А. Крохина*

1116

Сенсор на основе композитных пленок SnO<sub>2</sub> + In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> при детектировании CO в воздухе

*T. В. Белишева, В. Ф. Громов, Г. Н. Герасимов, Е. Ю. Спиридонова,  
С. А. Бондаренко, Л. И. Трахтенберг*

1122

Расчет молекулярных постоянных для электронных состояний

B<sup>1</sup>P<sub>u</sub>, C<sup>1</sup>P<sub>u</sub>, (1) <sup>1</sup>P<sub>g</sub>, (2) <sup>3</sup>S<sub>g</sub><sup>+</sup> димера рубидия

*A. Д. Смирнов*

1127

Theoretical Study on Electronic Structures and Spectroscopic Regularities  
of Ethylated Single-walled Carbon Nanotubes

*Y. Yu, S. Yuan, J. Xu, and S. Wu*

1132

Характеристики наноразмерной модификации  $\eta$ -TiO<sub>2</sub>

*Г.М. Кузьмичева, Е. В. Савинкина, Л. И. Белогорохова,  
Б. Н. Маврин, В. Р. Флид, А. Г. Яковенко, А. И. Белогорохов*

1138

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

Сорбция тиоцианат-ионов на ионитах комплексообразующего типа

*О. Н. Кононова, Н. Г. Горяева, Ю. С. Кононов*

1142

Диффузия и выход водорода из металлов под действием ионизирующего излучения

*Ю. И. Тюрин, Н. Н. Никитенков, В. В. Ларионов*

1148

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ПРОЦЕССОВ РАЗДЕЛЕНИЯ. ХРОМАТОГРАФИЯ

Моделирование систем комплексообразовательной хроматографии  
при наличии ионизирующего излучения

*О. В. Харитонов, Л. А. Фирсова*

1155

Водяной пар как газ-носитель в капиллярной газовой хроматографии

*А. В. Чуйкин, С. В. Григорьев, А. А. Великов*

1162

## КОЛЛОИДНАЯ ХИМИЯ И ЭЛЕКТРОХИМИЯ

Пространственная локализация электродной реакции  
в нанокомпозитах медь–ионообменник

*М. Ю. Чайка, Т. А. Кравченко, Е. В. Булавина, В. С. Горшков, А. Б. Ярославцев*

1166

Влияние состава электролита на pH гидратообразования никеля

*By Txi Зуен, О. В. Долгих, Н. В. Соцкая*

1173

## ФОТОХИМИЯ И МАГНЕТОХИМИЯ

Photocatalytic Oxidation of Organic Dyes with Visible-Light-Driven Co-Doped TiO<sub>2</sub> Photocatalysts

Dongang Zhang, Fanbin Zeng

1178

## БИОФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

Воздействие комплексообразующих лекарственных препаратов на щелочную фосфатазу

L. Ф. Амяшева, Е. С. Чухрай, Н. Д. Степина, Н. Н. Новикова, Э. А. Юрьева

1185

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Катализитический пиролиз полимерных смесей

B. Г. Систер, Ю. В. Луговой, Ю. Ю. Косиццов, Э. М. Сульман, Е. М. Иванникова

1192

Влияние структуры алифатического амина на его катализитическую активность в реакции окисления антрана в диметилсульфоксиде

A. A. Сердюк, M. Г. Касянчук, I. A. Онейда, B. C. Толкунов

1195

Расчеты термодинамических параметров поверхностного слоя бинарной системы натрий–калий

B. Б. Алчагиров, Л. Х. Афаунова, З. А. Кегадуева, Р. Х. Архестов

1198

## **ФОТОХИМИЯ И МАГНЕТОХИМИЯ**

Photocatalytic Oxidation of Organic Dyes with Visible-Light-Driven Co-Doped TiO<sub>2</sub> Photocatalysts

*Dongang Zhang, Fanbin Zeng*

1178

## **БИОФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ**

Воздействие комплексообразующих лекарственных  
препаратов на щелочную фосфатазу

*Л. Ф. Атаяшева, Е. С. Чухрай, Н. Д. Степина, Н. Н. Новикова, Э. А. Юрьева*

1185

## **КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ**

Катализитический пиролиз полимерных смесей

*В. Г. Систер, Ю. В. Луговой, Ю. Ю. Косицков, Э. М. Сульман, Е. М. Иванникова*

1192

Влияние структуры алифатического амина на его катализическую активность  
в реакции окисления антрана в диметилсульфоксиде

*A. A. Сердюк, М. Г. Касянчук, И. А. Онейда, В. С. Толкунов*

1195

Расчеты термодинамических параметров поверхностного  
слоя бинарной системы натрий–калий

*Б. Б. Алчагиров, Л. Х. Афаунова, З. А. Кегадуева, Р. Х. Архестов*

1198