

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА И ТЕРМОХИМИЯ

Энергии образования равновесных термических вакансий
оксидов щелочно-земельных металлов,
галогенидов щелочных металлов и металлов

В. Я. Чеховской, М. И. Савенкова

1625

Моделирование синтеза и термодинамические характеристики процесса
десольватации *трис*-тетрагидрофуранатов борогидридов лантаноидов

Б. А. Гафуров, И. У. Мирсаидов, Д. Х. Насруллоева, А. Бадалов

1630

Энтальпии образования ацетильных радикалов

Ю. Д. Орлов, Е. М. Чернова, М. Ю. Орлов, В. В. Туровцев

1636

ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА И КАТАЛИЗ

Ингибиование горения смесей метана с воздухом

В. В. Азатян, Г. Р. Сайкова

1640

Биметаллические катализаторы Со—Fe/носитель:
динамика гидрирования CO

Г. В. Панкина, П. А. Чернавский, В. В. Лунин

1647

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ РАСТВОРОВ

Влияние воды на температуры конформационных переходов
иммуноглобулина G человека

В. Ф. Урьяш, Н. Ю. Кокурина

1653

Особенности температурных и концентрационных зависимостей
контракции водных растворов этанола

В. Я. Гоцульский, Н. П. Маломуж, В. Е. Чечко

1660

Механизм протонирования азуленов в водных растворах кислот

Ю. А. Михеев, Л. Н. Гусева, Ю. А. Ершов

1668

Доменообразование в контактном слое на границе воды
и поляризующейся подложки

С. В. Шевкунов

1678

Особенности структур бинарных смесей сверхкритического CO₂
с полярными веществами по данным молекулярной динамики

Д. Л. Гурина, М. Л. Антипова, В. Е. Петренко

1686

Кислотно-основные свойства окта(3,5-ди-*трем*-бутилфенокси)фталоцианина
в растворах трифтормуксусной кислоты в дихлорметане при 298 K

Е. Е. Суслова, Е. Н. Овченкова, Т. Н. Ломова

1693

СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Механизм окисления убихинола железо-серным белком риске в рамках метода функционала плотности

Ан. М. Кузнецов, А. Н. Маслий, Е. М. Зуева, Л. И. Кришталик

1698

УФ-спектроскопия производных метанофуллеренов с различной степенью замещения

*Ю. Н. Биглова, В. А. Крайкин, С. А. Торосян, В. В. Михеев,
А. Г. Мустафин, С. В. Колесов, М. С. Мицхахов*

1705

Характеристики колебательного движения атомов в однокомпонентном дефектном кристалле

Ю. К. Товбин, С. В. Титов

1709

Квантово-механическое и молекулярное моделирование мономолекулярного термического распада винилпропиленового и винилбутилового эфиров

Б. Шахрох, Г. Н. Саргсян, А. Б. Арутюнян

1715

Структура и свойства магнитных композитных сорбентов на основе сверхсшитых полистиролов

*А. В. Пастухов, В. А. Даванков, К. И. Лубенцова,
Е. Г. Косандрович, В. С. Солдатов*

1721

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ И НАНОМАТЕРИАЛОВ

Начальная стадия эпитаксиальной сборки графена из карбида кремния и ее моделирование полуэмпирическими методами квантовой химии.
Углеродная грань

Н. И. Алексеев, В. В. Лучинин, Н. А. Чарыков

1728

Моделирование условий формирования графенов и графеновых наностенок полуэмпирическими методами квантовой химии

Н. И. Алексеев, В. В. Лучинин, Н. А. Чарыков

1741

Механизм проводимости и сенсорного откликаnanostructured пленок $\text{In}_2\text{O}_3 + \text{ZnO}$

Г. Н. Герасимов, В. Ф. Громов, Т. В. Белышева, Л. И. Трахтенберг

1752

Эпитаксиальная сборка графена на грани (0001) карбида кремния: моделирование полуэмпирическими методами

*Н. И. Алексеев, А. А. Кальянин, Д. Д. Карманов,
В. В. Лучинин, С. А. Тарасов, Н. А. Чарыков*

1761

Окисление фуллеритов C_{60} и C_{70} на воздухе

*В. В. Аксенова, Р. М. Никонова, В. И. Ладьянов,
Н. Б. Тамм, Е. В. Скокан, Б. Е. Пушкарев*

1771

Свойства проводящих пленок из электрофоретического концентрата наночастиц серебра и золота в АОТ

А. И. Булавченко, П. С. Поповецкий, Е. А. Максимовский

1779

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

Получение Со-содержащих алюмосиликатов со слоисто-столбчатой
микропористой структурой из монтмориллонитовых глин

Т. В. Конькова, М. Б. Алексина, А. П. Рысов

1785

КОЛЛОИДНАЯ ХИМИЯ И ЭЛЕКТРОХИМИЯ

Диаграммы образования пленок In_2S_3 и In_2Se_3 на ситалле
в реакциях осаждения по данным потенциометрического титрования

С. С. Туленин, С. А. Бахтееев, Р. А. Юсупов, Л. Н. Мaskaева, В. Ф. Марков

1791

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Влияние термомеханической обработки на термическую
стабильность аморфных сплавов Fe--B

В. И. Лысов, Т. Л. Цареградская, О. В. Турков, Г. В. Саенко

1798