

СОДЕРЖАНИЕ

Том 88, номер 4, 2014

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА И ТЕРМОХИМИЯ

Термодинамические характеристики боридов редкоземельных элементов RB₆₆ в интервале 2–300 К

В. В. Новиков, Д. В. Авдащенко, А. В. Матовников, С. Л. Будько

549

Молярная вязкость жидких металлов в интервале 300–4000 К

Е. Ю. Тюнина

557

Стандартные энталпии образования 4-метилбифенила и 4,4'-диметилбифенила

С. М. Пименова, Л. Л. Пащенко, Е. А. Мирошниченко, И. А. Нестеров

564

Расчет поляризуемости и диэлектрической проницаемости жидкого гелия

Н. М. Путинцев, Д. Н. Путинцев

569

Неклассические критические индексы в статистической теории жидкостей и уравнение состояния с регулярными и масштабными членами

П. П. Безверхий, В. Г. Мартынец, В. Н. Бондарев

574

Термодинамические характеристики протолитических равновесий тетраметилендиамин-N,N,N',N'-тетрауксусной кислоты

С. Н. Гридчин, В. М. Никольский

◆

581

Коэффициент взаимной диффузии в смеси газов ртуть – аргон

В. В. Мешков, В. Н. Попов, Л. Р. Фокин

586

Расчет термодинамических свойств водных растворов нитритов щелочных металлов на основе модифицированного уравнения Робинсона–Стокса

А. М. Рудаков, В. В. Сергеевский

593

ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА И КАТАЛИЗ

Кинетика каталитической гидрогенизации 4-нитроанилина в водных растворах 2-пропанола с добавками кислоты или основания

Нгуен Тхи Тху Ха, А. А. Меркин, А. А. Комаров, Д. О. Корнатенков, О. В. Лефедова

598

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ РАСТВОРОВ

Влияние сольватации на термодинамику образования комплексов эфира 18-краун-6 с глицином и триглицином в водно-этанольных растворах при 298 К

Т. Р. Усачева, Фам Тхи Лан, В. А. Шарнин

602

Фазовые равновесия в системе вода–пиридин–масляная кислота при 25,0 °C

Д. Г. Черкасов, З. В. Чепурina, К. К. Ильин

607

СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

ИК-спектроскопическое исследование комплексообразования молекул аммиака и воды в матрице KBr

*И. В. Воротынцев, И. И. Гринвальд, И. Ю. Калагаев,
А. Н. Петухов, Е. А. Сутягина, А. В. Воротынцев,
Е. В. Дербишер, Н. А. Петухова, В. М. Воротынцев*

611

Оценка на примере димера воды ошибки суперпозиции базисных наборов в явнокоррелированном методе CCSD(T)(F12)

В. В. Беликов, Д. А. Бохан, Д. Н. Трубников

615

Взаимодействие N-винилпирролидона с метилметакрилатом

В. В. Зайцева, А. В. Штонда, Т. Г. Тюрина, А. Р. Багдасарова, С. Ю. Зайцев

620

Энергия диссоциации N–H-связи в фенотиазинах и дифениламинах

Е. Т. Денисов, Т. Г. Денисова

629

Электронографическое исследование равновесной структуры гексаметилентетрамина с использованием данных квантовой химии и колебательной спектроскопии

Л. С. Хайкин, О. Е. Грикина, Н. М. Карасев, Д. М. Ковтун, И. В. Kochиков

638

Квантово-химические расчеты силил- и алкил- псевдогалогенидов X_3YNCZ ($X = H$ или CH_3 ; $Y = C$ или Si ; $Z = O, S$ или Se) и электронографическое исследование равновесной структуры молекулы $(CH_3)_3SiNCSe$

Л.С. Хайкин, О.Е. Грикина, И.В. Kochиков, Н.Ф. Степанов

643

Энергии газофазного депротонирования нитрозамещенных бензолсульфоновой и бензойной кислот.

Роль конформационной изомерии сульфокислот

С. Н. Иванов, Н. И. Гиричева, Т. В. Нуркевич, М. С. Федоров

647

Исследование структуры молекулы цианометоксидиметиламинометана методом газовой электронографии и квантовой химии

Е. П. Альтова, Р. Г. Костяновский, И. Ф. Шишков

653

Колебательные спектры и устойчивые конформации N-метилацетамида и $(1S,5S,6R)$ -6-ацетиламино-(5'-метоксииндоло[2,3-b])бицикло[3.2.1]окт-2-ена

И. Б. Давыдова, В. М. Сенявин, О. Н. Зефирова, Г. М. Курамшина, Ю. А. Пентин

657

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ И НАНОМАТЕРИАЛОВ

“Эффект Армстронга” как инструмент исследования структуры жидких полярных диэлектриков

Ю. А. Лебедев

667

Применение позитронной спектроскопии для выявления наноразмерных структур в жидких смесях. Выявлениеnanoагломераторов n-пропанола в его водных растворах

П. С. Степанов, В. М. Бяков, А. Г. Залужный

672

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

Влияние удельной поверхности активированных углей на сорбцию ионов $[Au(CN)_2]^-$ из водных растворов

*Р. И. Ибрагимова, С. Ф. Гребенников, В. В. Гурьянов,
Д. А. Пичугина, А. С. Кривов, Н. В. Воробьев-Десятовский*

679

Механизм кристаллизационного модифицирования ферригидрита полимерным гидрогелем по данным мессбауэровской спектроскопии

Ю. Д. Перфильев, А. Л. Николаев, А. В. Гопин, Л. А. Куликов

686

Ионный обмен и молекулярная сорбция щавелевой кислоты сильноосновным анионообменником

Е. В. Крисилова, Г. Ю. Орос, А. В. Крисилов, В. Ф. Селеменев

692

Ингибирование растворения меди в водных растворах триазолов

Ю. И. Кузнецов, М. О. Агафонкина, Н. П. Андреева

697

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ПРОЦЕССОВ РАЗДЕЛЕНИЯ. ХРОМАТОГРАФИЯ

Сорбция производных адамантана на модифицированной
полиэтиленгликолем графитированной термической саже

С. Н. Яшкін, Ю. А. Агеева

704

Селективность неподвижных фаз на основе пиридиниевых
ионных жидкостей для капиллярной газовой хроматографии

М. В. Шашков, В. Н. Сидельников, П. А. Заикин

714

Исследование кинетики сорбции ртути(II) на карбоксильном
катионите КБ-4 микрокалориметрическим методом

Е. А. Зауэр

720

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Ориентация кристаллов h-BN на поверхности водной суспензии

С. С. Бацанов, С. М. Гаврилкин

723
