

# СОДЕРЖАНИЕ

Том 95, номер 2, 2021

## ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА И ТЕРМОХИМИЯ

Фазовые равновесия, фазовая структура и взаимодиффузия в смесях полимеров полистирол–полифенилметилсилоксан

*А. А. Потеряев, А. Д. Алиев, А. Е. Чалых, А. В. Шапагин*

157

Фазовые равновесия в системах

диантипирилметан–органическая кислота–хлороводород–вода

*О. С. Кудряшова, А. М. Елохов*

165

Термодинамические свойства расплавов систем Gd–Sn и Gd–Sn–Ni

*В. С. Судавцова, М. А. Шевченко, В. Г. Кудин, Н. В. Подопригора,  
А. С. Козорезов, Л. А. Романова, М. И. Иванов*

170

Вязкость расплавов Fe–Mn–C

*О. А. Чикова, Н. И. Синицин, В. В. Вьюхин*

177

Термодинамические свойства раствора 2-этоксиэтанола в авиационном керосине

*М. Н. Мамонтов, А. П. Ощенко*

183

Термохимические свойства бис-фенилпропиолата трифенилсульфуры

$\text{Ph}_3\text{Sb}(\text{OC(O)C}\equiv\text{CPh})_2$

*Д. В. Лякаев, А. В. Маркин, П. Е. Горюнова, Н. Н. Смирнова,  
А. В. Князев, В. В. Шарутин, О. К. Шарутина*

192

## ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА И КАТАЛИЗ

Кинетика образования молекулярного водорода при радиолизе гексана и смеси  $\text{C}_6\text{H}_{14}$ – $\text{H}_2\text{O}$  на поверхности  $n\text{-ZrO}_2$

*Т. Н. Агаев, Ш. З. Мусаева, Г. Т. Иманова*

197

Твердофазный каталитический изотопный обмен водорода на дейтерий в мексидоле

*А. К. Дадаян, Ю. А. Борисов, Ю. А. Золотарев, Э. В. Бочаров,  
И. Ю. Нагаев, Н. Ф. Мясоедов*

201

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ РАСТВОРОВ

Кислотно-основное равновесие нового замещенного 1,2,3-триазольным фрагментом производного 6-метилурацила в водных растворах

*А. А. Ахияров, Л. М. Губайдуллина, Л. Ф. Сайфина, В. Э. Семенов, Л. А. Рамазанова,  
А. Н. Лобов, И. С. Файзрахманов, И. Е. Алексина, С. П. Иванов*

207

Самодиффузия производных фуллерена  $\text{C}_{60}$  в водных растворах и суспензиях эритроцитов по данным ямр с импульсным градиентом магнитного поля

*И. А. Авилова, Ю. В. Солдатова, О. А. Краевая, А. В. Жиленков, Е. А. Долгих,  
Р. А. Котельникова, П. А. Трошин, В. И. Волков*

213

Влияние состава водно-органических растворителей на устойчивость комплексов ионов меди(II) с анионами янтарной и малеиновой кислот

*Н. В. Тукумова, Н. В. Белова, Т. Р. Усачева, Чан Тхи Зьеу Тхуан*

220

Влияние структуры имидазолиевых ионных жидкостей на электропроводность и процессы ионной ассоциации в растворах ацетонитрила

*О. Е. Журавлев*

226

Анализ размеров макромолекул альбумина в его водных растворах

*Н. П. Маломуж, А. В. Хорольский*

231

# **СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ**

Молекулярные структуры гетеролигандных макротетрациклических комплексов ионов 3d-элементов с фталоцианином и фторид-анионом  
в рамках теории функционала плотности

*Д. В. Чачков, О. В. Михайлов*

238

ReaxFF молекулярно-динамическое моделирование крекинга компонентов вакуумного газоилья в присутствии нанокластера никеля

*Р. Х. Шаяхметова, Э. М. Хамитов*

247

Оптические и магнитные свойства гетеролигандного комплекса стеарата гадолиния с ацетилацетоном

*С. Н. Иванин, В. Ю. Бузько, А. И. Горячко, В. Т. Панюшкин*

256

# **ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

Конформационные изменения однородно заряженных цепей полиэлектролитов на поверхности поляризованной золотой наночастицы: молекулярно-динамическое моделирование и теория гауссовой цепи в поле

*Н. Ю. Кручинин, М. Г. Кучеренко, П. П. Няясов*

262

# **ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЯВЛЕНИЙ**

Масс-спектрометрия лазерной десорбцией/ионизацией порошков магния, вольфрама и бора до и после механохимической активации

*А. Ю. Шолохова, А. И. Малкин, А. К. Буряк*

272

Адсорбция 2,4-дихлорфенола и фенола из водных растворов силикатным адсорбентом

*Г. И. Гусев, А. А. Гущин, В. А. Гриневич, Д. В. Филиппов, Е. А. Москаленко, М. А. Шильке*

279

# **ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ПРОЦЕССОВ РАЗДЕЛЕНИЯ. ХРОМАТОГРАФИЯ**

Особенности рекуррентной аппроксимации параметров удерживания полифункциональных соединений в обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии

*И. Г. Зенкевич, Д. А. Никитина*

285

# **КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ**

Метадинамическое исследование кристаллизации переохлажденной Леннард-Джонсовской жидкости

*В. Г. Байдаков, Е. О. Розанов, С. П. Проценко*

294