



*Российская
академия наук*

ISSN 1026—3500

Известия Академии наук

Серия
химическая

2016 **8**
стр. 1887—2102

Журнал издается одновременно на русском («Известия Академии наук. Серия химическая») и английском («Russian Chemical Bulletin») языках. Подробную информацию о журнале, содержания номеров журнала в графической форме и аннотации статей, а также годовые предметные и авторские указатели можно получить в Интернете по адресу: <http://russchembull.ru>

The Journal is published in Russian and English.

The International Edition is published under the title "Russian Chemical Bulletin" by Springer:
233 Spring St., New York, NY 10013, USA. Tel.: 212 460 1572. Fax: 212 647 1898.

Detailed information concerning the journal, contents of issues with graphical and text abstracts, as well as annual subject and author indices can be found in the Internet at <http://russchembull.ru>

Содержание

Валерий Петрович Шибаев (к восьмидесятилетию со дня рождения)

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, x

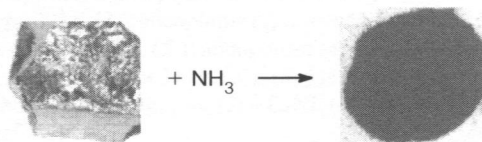
Геннадий Петрович Швейкин (к девяностолетию со дня рождения)

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, xi

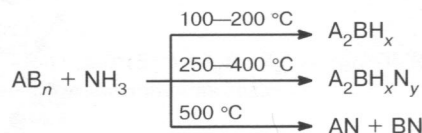
Выпуск 8 2016 г. составлен из статей сотрудников Института проблем химической физики и приурочен к 60-летию со дня основания Института.

Обзоры

Диспергирование и фазовые превращения при взаимодействии с аммиаком интерметаллических соединений и сплавов Ti, Zr и Y с железом и никелем



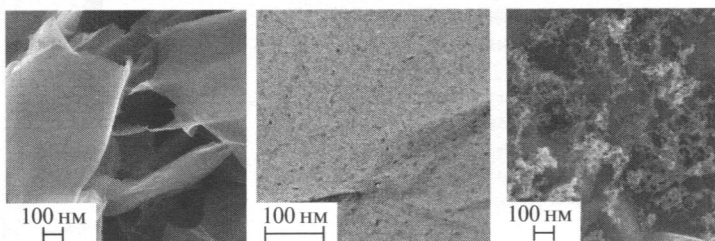
Б. П. Тарасов, Э. Э. Фокина,
В. Н. Фокин



Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1887

Синтез графеноподобных наноструктур и формирование на их основе катализаторов и водород-аккумулирующих композитов

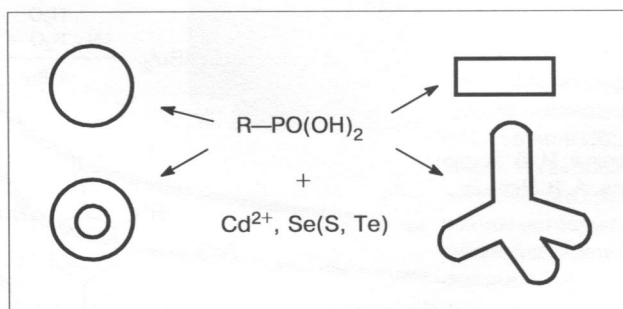
Графеноподобный материал Ni наночастицы на графеновом материале Углеродные наночастицы, синтезированные на поверхности графенового материала



А. А. Арбузов, С. А. Можжухин,
А. А. Володин, П. В. Фурсиков,
Б. П. Тарасов

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1893

Фосфоновые кислоты как стабилизирующие лиганды для коллоидных квантовых точек халькогенидов кадмия



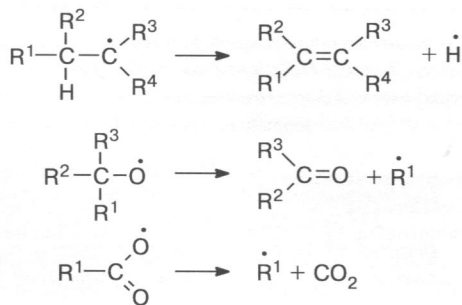
М. Г. Спирын, С. Б. Бричкин,
В. Ф. Разумов

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1902

Факторы, влияющие на энергетику и геометрию переходного состояния при распаде радикалов

Е. Т. Денисов, Т. С. Покидова

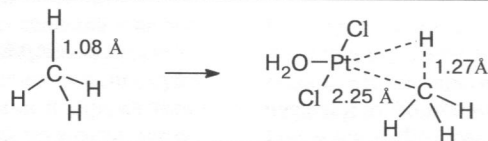
Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1910



Координационная активация метана и других алканов на комплексах металлов

А. А. Штейнман

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1930

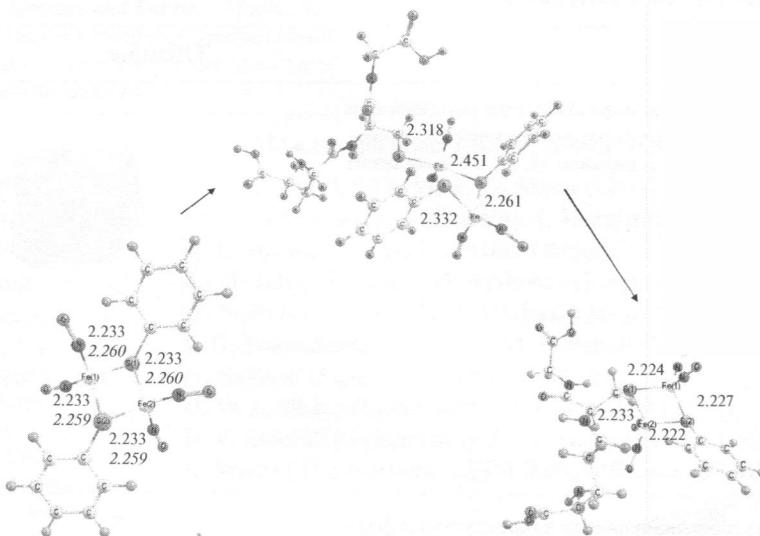


Полные статьи

Квантово-химические подходы к изучению связи Fe—S в эфирах Руссена: реакция замещения функциональных лигандов на глутатион

Н. С. Емельянова, Н. А. Санина,
С. М. Алдошин

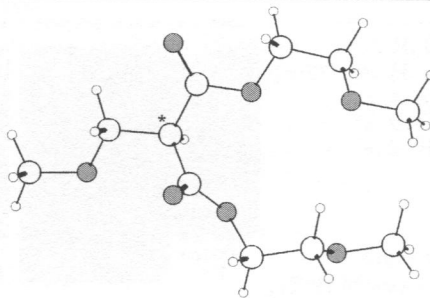
Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1945



Квантово-химическое моделирование деградации полимерной матрицы и молекул растворителя нанокompозитных полимерных гель-электролитов

Г. З. Тулибаева, А. Ф. Шестаков,
А. В. Черняк, В. И. Волков,
К. Г. Хатмуллина, А. В. Юдина,
А. А. Игнатова, О. В. Ярмоленко

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1951

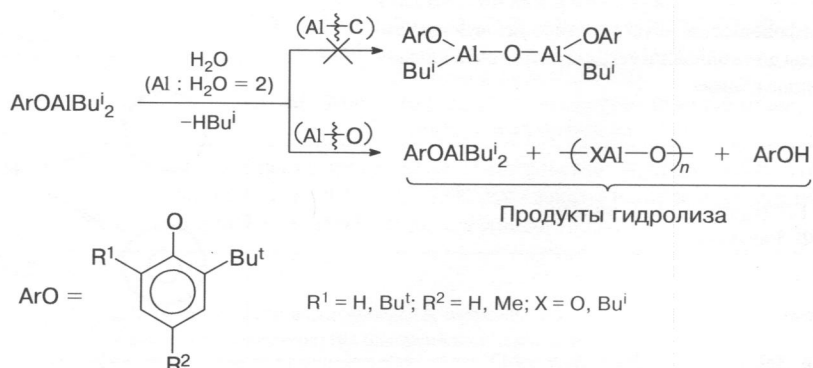


Фрагмент новой цепи полимера с третичным атомом углерода, который соседствует с двумя карбоксильными группами.

Исследование гидролиза арилоксидов изобутилалюминия методами ЯМР ^1H и квантовой химии

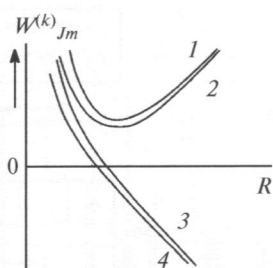
Е. Е. Файнгольд, И. В. Жарков,
Н. М. Бравая, А. В. Черняк

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1958



Релятивистский эффект Яна—Теллера $G_g[3/2] \times (t_{2g} + e_g)$ в кубических и октаэдрических молекулах

Л. В. Полуянов, В. М. Волохов



Качественный вид одномерных сечений бирадиальных потенциальных поверхностей вдоль линии $r^*R = rR^*$: $W^{(1)}$ (1), $W^{(2)}$ (2), $W^{(3)}$ (3), $W^{(4)}$ (4).

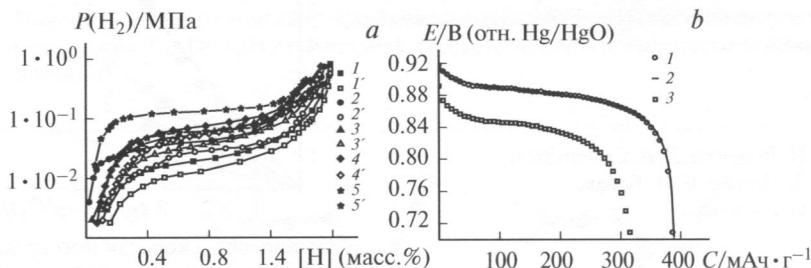
$$W_{Jm}^{(k)}(R, r) = \frac{\hbar^2}{2M_t} \frac{(J+0.5)^2}{2M_t} \frac{(J+0.5)^2}{R^2} + \frac{\hbar^2}{2M_e} \frac{m^2}{r^2} + \Lambda_{Jm}^{(k)}(R, r),$$

$k = 1-4$

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1966

Водородсорбционные и электрохимические свойства интерметаллических соединений La_2MgNi_9 и $La_{1.9}Mg_{1.1}Ni_9$

В. Б. Сон, А. А. Володин,
Р. В. Денис, В. А. Яртысь,
Б. П. Тарасов



(a) Изотермы абсорбции и десорбции в системе $La_{1.9}Mg_{1.1}Ni_9-H_2$: абсорбция (1) и десорбция при 303 К (1'); абсорбция (2) и десорбция при 313 К (2'); абсорбция (3) и десорбция при 323 К (3'); абсорбция (4) и десорбция при 333 К (4'); абсорбция (5) и десорбция при 343 К (5'); (b) удельная емкость электродов со сплавами La_2MgNi_9 (1), $La_{1.9}Mg_{1.1}Ni_9$ (2) и $LaNi_5$ (3) при 293 К и плотности тока разряда 60 $mA \cdot g^{-1}$.

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1971

Энтальпии образования и перестройки ароматических радикалов

Е. А. Мирошниченко, Л. Л. Пашенко,
Т. С. Конькова, Ю. Н. Матюшин,
А. А. Берлин

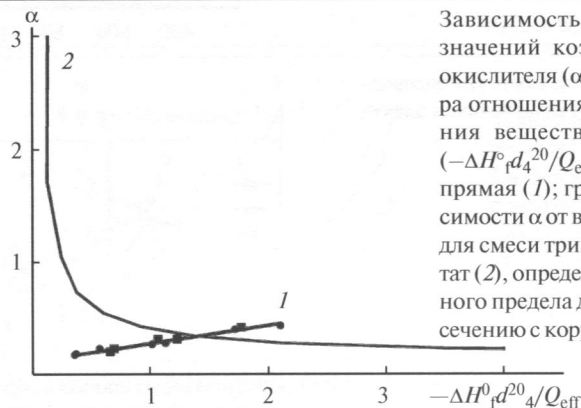
$$D(R_1-R_2) = \Delta_f H^\circ(R_1 \cdot) + \Delta_f H^\circ(R_2 \cdot) - \Delta_f H^\circ(R_1 R_2)$$

D — энергия диссоциации связи

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1977

Вычисление концентрационных пределов детонации жидких гомогенных взрывчатых систем

В. А. Гаранин, В. А. Дубовицкий,
Д. А. Нестеренко, Л. Б. Романова

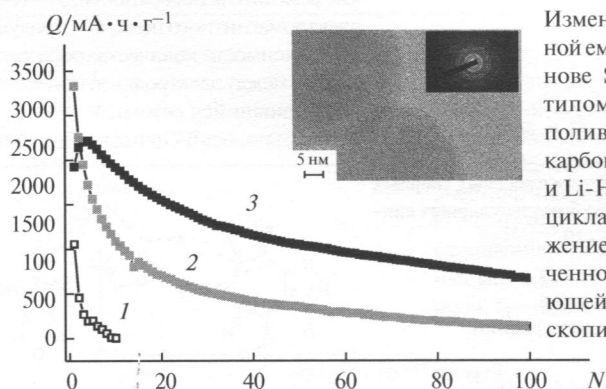


Зависимость экспериментальных значений коэффициента избытка окислителя (α) от значения параметра отношения энтальпии образования вещества к энергии взрыва ($-\Delta H^0 d_4^{20} / Q_{eff}$) и корреляционная прямая (1); график расчетной зависимости α от величины $-\Delta H^0 d_4^{20} / Q_{eff}$ для смеси тринитрометан—этилацетат (2), определение концентрационного предела детонации по его пересечению с корреляционной прямой.

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1981

Влияние типа связующего на стабильность тонкопленочных анодов на основе наночастиц $Si@SiO_2$ для литий-ионных аккумуляторов

Е. Ю. Евщик, Д. В. Новиков,
В. И. Берестенко, А. В. Левченко,
Е. А. Сангинов, Ю. А. Добровольский



Изменение разрядной удельной емкости (Q) анодов на основе $Si@SiO_2$ с различным типом связующего агента: поливинилиденфторид (1), карбоксиметилцеллюлоза (2) и Li-Нафтон (3); N — номер цикла. На вставке — изображение частиц кремния, полученное методом просвечивающей электронной микроскопии.

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1986

Одностадийный электрохимический синтез из растворов, содержащих молочную кислоту, слоев Cu—Zn—Sn—Se — предшественников поглощающих пленок

В. В. Ракитин, М. В. Гапанович,
Г. Ф. Новиков

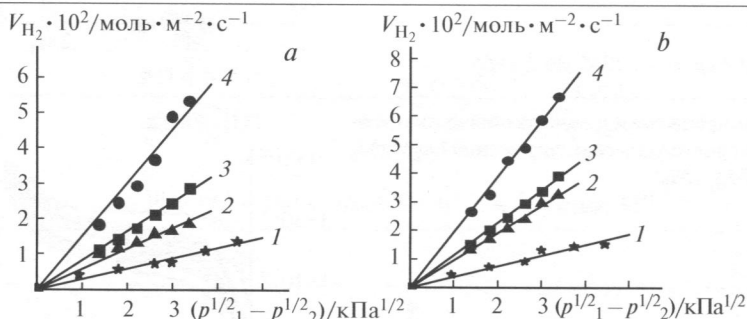
Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1990



Разделительные свойства фольги из сплавов Pd—In(6%)—Ru(0.5%), Pd—Ru(6%) и Pd—Ru(10%) и влияние CO₂, CH₄ и водяного пара на скорость потока H₂ через исследуемые мембраны

Л. П. Диденко, Л. А. Семенцова,
П. Е. Чижов, В. Н. Бабак,
В. И. Савченко

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1997

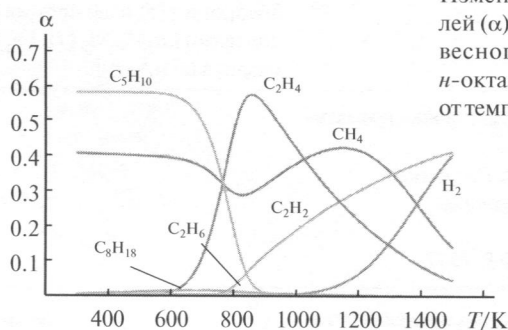


Зависимость скорости потока водорода (V_{H_2}) от разности квадратных корней из величин парциального давления водорода на палладиевых мембранах с различными легирующими добавками при 673 (а) и 773 К (б): 1 — Pd—Ag(23%), 2 — Pd—Ru(6%), 3 — Pd—Ru(10%), 4 — Pd—In(6%)—Ru(0.5%).

Моделирование процессов термического разложения углеводородных топлив в обогреваемых каналах

И. С. Аверьков, А. В. Байков,
Л. С. Яновский, В. М. Волохов,
А. В. Волохов

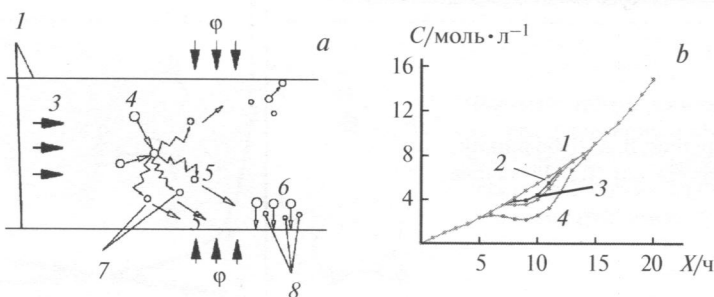
Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2004



Изменение мольных долей (α) продуктов равновесного разложения *n*-октана в зависимости от температуры.

Особенности окисления модельного углеводородного топлива в канале под воздействием электростатического поля

П. Д. Токталиев, С. И. Мартыненко,
Л. С. Яновский, В. М. Волохов,
А. В. Волохов

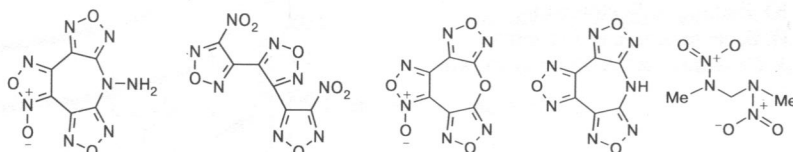


(а) Упрощенная схема процесса образования отложений: 1 — стенки, 2 — каталитические реакции на поверхности, 3 — течение, 4 — химические реакции, 5 — воздействие электромагнитного поля, 6 — продукты, 7 — радикалы, 8 — электронная компонента. (б) Зависимости количества образовавшихся предвестников кокса от разности потенциалов между электродами; приведены данные по 20 сечениям; $Re = 4000$, $T_{in} = 400$ К, установившийся режим; $V = 0$ (1), 75 (2) и 200 В (4); X/h — безразмерная координата, ось OX направлена вдоль канала, h — ширина канала.

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2011

Энергетические возможности смесевых твердых ракетных топлив на основе бимолекулярных кристаллов, содержащих CL-20

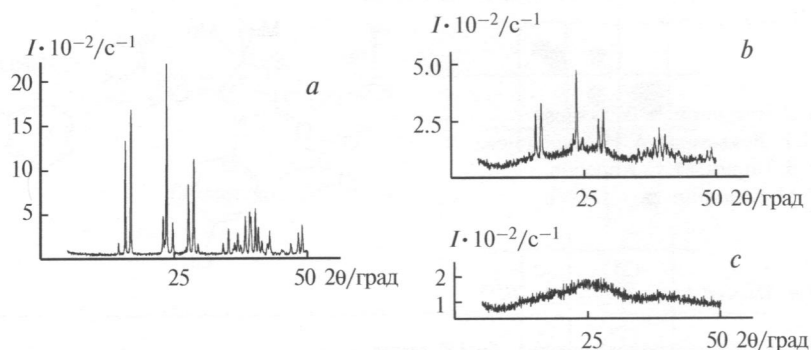
С. М. Алдошин, Д. Б. Лемперт,
Т. К. Гончаров, А. И. Казаков,
С. И. Согласнова, Е. М. Дорофеев,
Н. А. Плишкин



Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2018

Механохимическое разрушение кристаллогидратов ацетилендикарбоксилатов кобальта и цинка при дегидратации

Н. Н. Волкова, Г. И. Джардималиева,
Б. Э. Крисюк, Н. В. Чуканов,
В. А. Шершнева, Г. В. Шилов

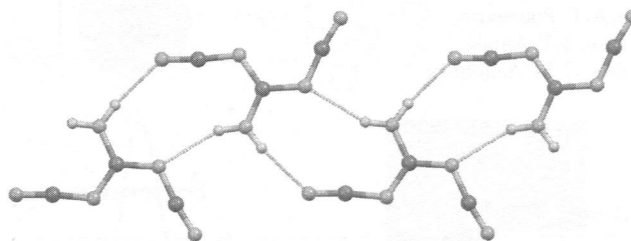


Порошковые рентгеновские дифрактограммы $\text{ZnADC} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (a) и продуктов разложения $\text{ZnADC} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ на стадиях, соответствующих потере массы 12% (b) и 18% (c).

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2025

Первая катион-радикальная соль бис(этиленди-тио)тетрагидрафульвалена с органическим анионом $[\text{C}(\text{NCN})_2\text{NH}_2]^-$: синтез, структура и проводящие свойства

Н. Д. Куш, Н. Г. Спицына,
А. М. Колесникова, С. В. Симонов

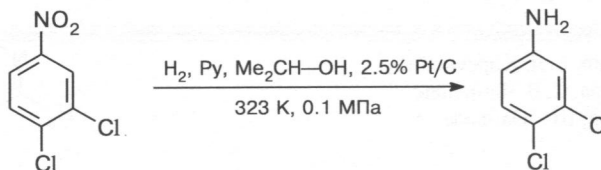


Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2034

Исследование жидкофазного каталитического гидрирования 3,4-дихлорнитробензола в присутствии пиридина в безградиентном проточном режиме на катализаторе Pt/C

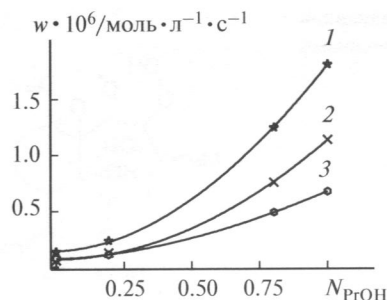
В. Г. Дорохов, Г. Ф. Дорохова,
В. И. Савченко

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2040



Влияние состава бинарного растворителя хлорбензол—пропанол на механизм реакции N,N' -дифенил-1,4-бензохинондиимина с тиофенолом

В. Т. Варламов, А. В. Гадомская

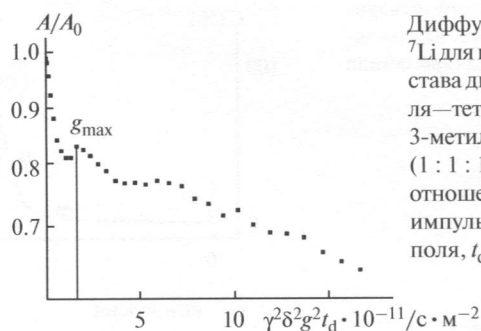


Зависимость скорости реакции N,N' -дифенил-1,4-бензохинондиимина с тиофенолом от содержания пропанола (N_{PrOH}) в бинарном растворителе хлорбензол—*n*-пропанол: суммарная (1), нецепная (2) и цепная реакция (3).

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2046

Влияние структуры сетчатого полимерного гелелектролита на ионную и молекулярную подвижность электролитной системы соль LiBF_4 —ионная жидкость 3-метил-1-этил-имидазолий-тетрафторборат

А. В. Черняк, М. П. Березин,
Н. А. Слесаренко, В. А. Забродин,
В. И. Волков, А. В. Юдина,
Н. И. Шувалова, О. В. Ярмоленко

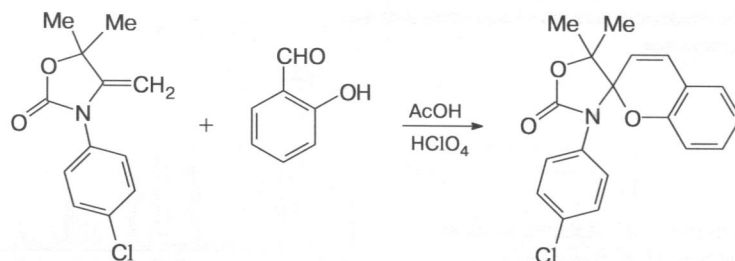


Диффузионное затухание на ядрах ^7Li для полимерного электролита состава диакрилат полиэтиленгликоля—тетрафторборат лития—1-этил-3-метил-имидазолийтетрафторборат (1 : 1 : 1, мол.); γ — гиромагнитное отношение, δ — длина градиентного импульса, g — градиент магнитного поля, t_d — время диффузии.

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2053

Изучение строения спиропиранов на основе 1,3-оксазолидина

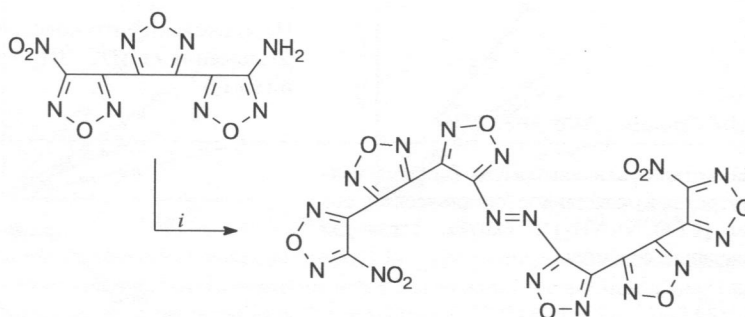
Б. С. Лукьянов, В. В. Ткачев,
М. Б. Лукьянова, А. Н. Утенышев,
Р. В. Тюрин, М. С. Коробов,
С. М. Алдошин



Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2059

Новое энергоемкое соединение — бис(4''-нитро-[3,3':4',3'']трифуразан-4-ил)диазен

А. И. Степанов, В. С. Санников,
Д. В. Дашко, А. Г. Росляков,
А. А. Астратъев, З. Г. Алиев,
Т. К. Гончаров, С. М. Алдошин

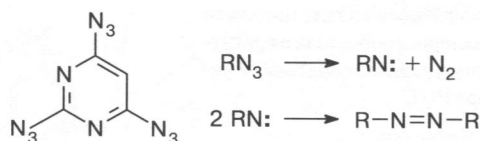


Реагенты и условия: *i*. AcOH, H₂O, HCl, KMnO₄.

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2063

Термическое разложение 2,4,6-триазидопиримидина в расплаве

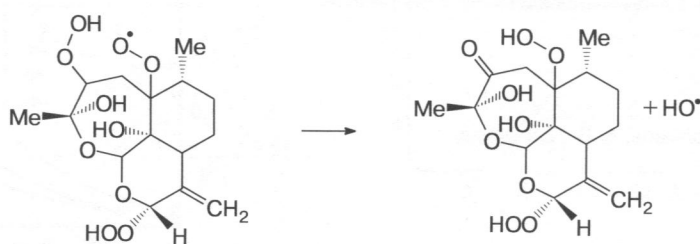
В. В. Неделько, Б. Л. Корсунский,
Т. С. Ларикова, С. В. Чапышев,
Н. В. Чуканов, Шу Юаньцзе



Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2068

Кинетический анализ генерирования радикалов перокси-, гидрокси- и алкоксипроизводными 10-дигидроартемизинина

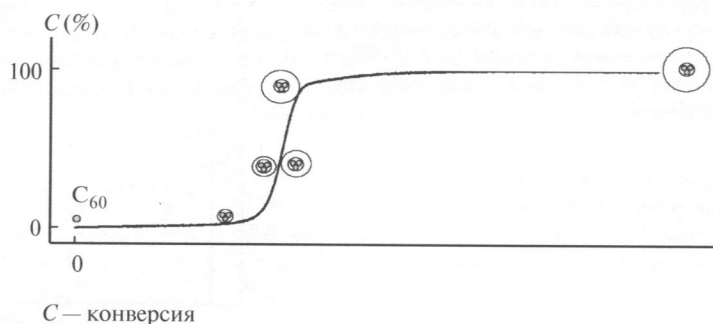
Е. Т. Денисов, Т. Г. Денисов



Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2072

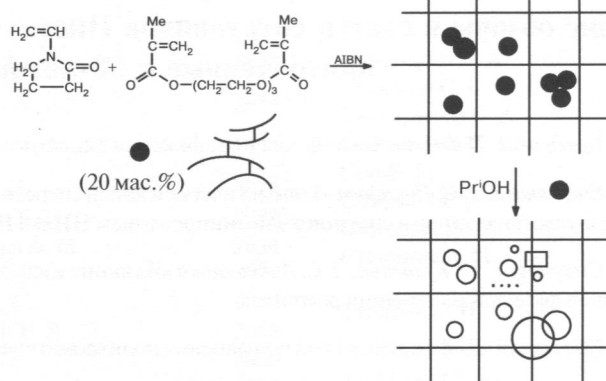
Формирование звездообразных водорастворимых полимерных структур в процессе радикальной полимеризации *N*-изопропилакриламида в присутствии C₆₀

Е. Г. Атовмян, А. А. Гришук,
Г. А. Эстрина, Я. И. Эстрин



Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2082

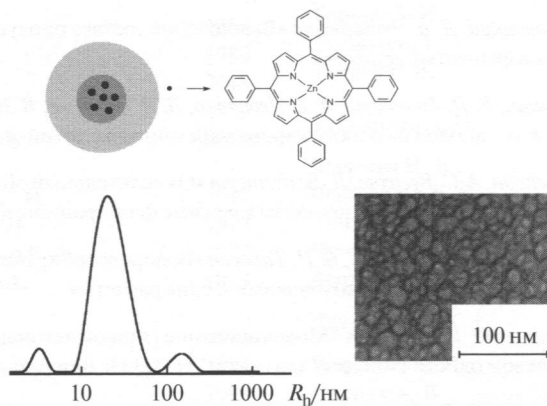
Новые полимерные материалы на основе *N*-винилпирролидона с регулируемой нанопористой структурой



Н. В. Фадеева, С. В. Курмаз,
Е. И. Кнерельман, Г. И. Давыдова,
В. И. Торбов, Н. Н. Дремова

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2089

Получение полимерных наночастиц амфифильного сополимера *N*-винилпирролидона с диметакрилатом триэтиленгликоля и исследование их свойств *in vitro*



С. В. Курмаз, Н. А. Образцова,
А. А. Балакина, А. А. Терентьев

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2097

Авторский указатель

Аверьков И. С.	2004	Жарков И. В.	1958	Семенцова Л. А.	1997
Алдошин С. М.	1945, 2018, 2059, 2063	Забродин В. А.	2053	Симонов С. В.	2034
Алиев З. Г.	2063	Игнатова А. А.	1951	Слесаренко Н. А.	2053
Арбузов А. А.	1893	Казаков А. И.	2018	Согласнова С. И.	2018
Астратьев А. А.	2063	Кнерельман Е. И.	2089	Сон В. Б.	1971
Атовмян Е. Г.	2082	Колесникова А. М.	2034	Спирин М. Г.	1902
		Конькова Т. С.	1977	Спицына Н. Г.	2034
Бабак В. Н.	1997	Коробов М. С.	2059	Степанов А. И.	2063
Байков А. В.	2004	Корсунский Б. Л.	2068	Тарасов Б. П.	1887, 1893, 1971
Балакина А. А.	2097	Крисюк Б. Э.	2025	Терентьев А. А.	2097
Березин М. П.	2053	Курмаз С. В.	2089, 2097	Ткачев В. В.	2059
Берестенко В. И.	1986	Куш Н. Д.	2034	Токталиев П. Д.	2011
Берлин А. А.	1977			Торбов В. И.	2089
Бравая Н. М.	1958	Ларикова Т. С.	2068	Тулибаева Г. З.	1951
Бричкин С. Б.	1902	Левченко А. В.	1986	Тюрин Р. В.	2059
		Лемперт Д. Б.	2018		
Варламов В. Т.	2046	Лукьянов Б. С.	2059	Утенышев А. Н.	2059
Волков В. И.	1951, 2053	Лукьянова М. Б.	2059	Фадеева Н. В.	2089
Волкова Н. Н.	2025			Файнгольд Е. Е.	1958
Володин А. А.	1893, 1971	Мартыненко С. И.	2011	Фокин В. Н.	1887
Волохов А. В.	2004, 2011	Матюшин Ю. Н.	1977	Фокина Э. Э.	1887
Волохов В. М.	1966, 2004, 2011	Мирошниченко Е. А.	1977	Фурсиков П. В.	1893
		Можжухин С. А.	1893	Хатмуллина К. Г.	1951
Гадомская А. В.	2046	Неделько В. В.	2068	Чапышев С. В.	2068
Гапанович М. В.	1990	Нестеренко Д. А.	1981	Черняк А. В.	1951, 1958, 2053
Гаранин В. А.	1981	Новиков Г. Ф.	1990	Чижов П. Е.	1997
Гончаров Т. К.	2018, 2063	Новиков Д. В.	1986	Чуканов Н. В.	2025, 2068
Гришук А. А.	2082			Шершнев В. А.	2025
Давыдова Г. И.	2089	Образцова Н. А.	2097	Шестаков А. Ф.	1951
Дашко Д. В.	2063			Шилов Г. В.	2025
Денис Р. В.	1971	Пашенко Л. Л.	1977	Штейнман А. А.	1930
Денисов Т. Г.	2072	Плишкин Н. А.	2018	Шувалова Н. И.	2053
Денисов Е. Т.	1910, 2072	Покидова Т. С.	1910		
Джардималиева Г. И.	2025	Полуянов Л. В.	1966	Эстрин Я. И.	2082
Диденко Л. П.	1997			Эстрина Г. А.	2082
Добровольский Ю. А.	1986	Разумов В. Ф.	1902		
Дорофеев Е. М.	2018	Ракитин В. В.	1990	Юаньцзе Шу	2068
Дорохов В. Г.	2040	Романова Л. Б.	1981	Юдина А. В.	1951, 2053
Дорохова Г. Ф.	2040	Росляков А. Г.	2063		
Дремова Н. Н.	2089			Яновский Л. С.	2004, 2011
Дубовицкий В. А.	1981	Савченко В. И.	1997, 2040	Ярмоленко О. В.	1951, 2053
		Сангинов Е. А.	1986		
Евщик Е. Ю.	1986	Санина Н. А.	1945	Яртысь В. А.	1971
Емельянова Н. С.	1945	Санников В. С.	2063		