

П  
Ж92

Том 87, Номер 10

ISSN 0044-4537

Октябрь 2013



# ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

<http://www.naukaran.ru>  
<http://www.maik.ru>



“НАУКА”

# СОДЕРЖАНИЕ

---

---

Том 87, номер 10, 2013

---

---

## 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

Ингибирование горения смесей метана с воздухом

*В. В. Азатян, Г. Р. Сайкова* 1640

Биметаллические катализаторы Co–Fe/носитель: динамика гидрирования CO

*Г. В. Панкина, П. А. Чернавский, В. В. Луни* 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 CO<sub>2</sub> с полярными веществами по данным молекулярной динамики

*Д. Л. Гурина, М. Л. Антипова, В. Е. Петренко* 1686

Кислотно-основные свойства окта(3,5-ди-*трет*-бутилфеноксифталоцианина в растворах трифторуксусной кислоты в дихлорметане при 298 К

*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. Кристаллик* 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. Мифтахов* 1705

Характеристики колебательного движения атомов в однокомпонентном дефектном кристалле

*Ю. К. Товбин, С. В. Титов* 1709

Квантово-механическое и молекулярное моделирование мономолекулярного термического распада винилпропилового 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 отклика наноструктурированных пленок  $\text{In}_2\text{O}_3 + \text{ZnO}$

*Г. Н. Герасимов, В. Ф. Громов, Т. В. Бельшева, Л. И. Трахтенберг* 1752

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

*Н. И. Алексеев, А. А. Кальнин, Д. Д. Карманов, В. В. Лучинин, С. А. Тарасов, Н. А. Чарыков* 1761

Окисление фуллеритов  $\text{C}_{60}$  и  $\text{C}_{70}$  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. Алехина, А. П. Рысев*

1785

---

## **КОЛЛОИДНАЯ ХИМИЯ И ЭЛЕКТРОХИМИЯ**

Диаграммы образования пленок  $\text{In}_2\text{S}_3$  и  $\text{In}_2\text{Se}_3$  на ситалле в реакциях осаждения по данным потенциометрического титрования

*С. С. Туленин, С. А. Бахтеев, Р. А. Юсупов, Л. Н. Маскаева, В. Ф. Марков*

1791

---

## **КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ**

Влияние термомеханической обработки на термическую стабильность аморфных сплавов Fe–В

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

1798

---

---