

Том 88, Номер 4

ISSN 0044-4537

Апрель 2014



# ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

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



“НАУКА”

# СОДЕРЖАНИЕ

Том 88, номер 4, 2014

## ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА И ТЕРМОХИМИЯ

Термодинамические характеристики боридов редкоземельных элементов $R\text{B}_{66}$ в интервале 2–300 К <i>В. В. Новиков, Д. В. Авдащенко, А. В. Матовников, С. Л. Будько</i>	549
Молярная вязкость жидких металлов в интервале 300–4000 К <i>Е. Ю. Тюнина</i>	557
Стандартные энтальпии образования 4-метилбифенила и 4,4'-диметилбифенила <i>С. М. Пименова, Л. Л. Пащенко, Е. А. Мирошниченко, И. А. Нестеров</i>	564
Расчет поляризуемости и диэлектрической проницаемости жидкого гелия <i>Н. М. Путинцев, Д. Н. Путинцев</i>	569
Неклассические критические индексы в статистической теории жидкостей и уравнение состояния с регулярными и масштабными членами <i>П. П. Безверхий, В. Г. Мартынец, В. Н. Бондарев</i>	574
Термодинамические характеристики протолитических равновесий тетраметилендиамин-N,N,N',N'-тетрауксусной кислоты <i>С. Н. Гридчин, В. М. Никольский</i>	581
Коэффициент взаимной диффузии в смеси газов ртуть – аргон <i>В. В. Мешков, В. Н. Попов, Л. Р. Фокин</i>	586
Расчет термодинамических свойств водных растворов нитритов щелочных металлов на основе модифицированного уравнения Робинсона–Стокса <i>А. М. Рудаков, В. В. Сергиевский</i>	593

## ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА И КАТАЛИЗ

Кинетика каталитической гидрогенизации 4-нитроанилина в водных растворах 2-пропанола с добавками кислоты или основания <i>Нгуен Тхи Тху Ха, А. А. Меркин, А. А. Комаров, Д. О. Корпатенков, О. В. Лефедова</i>	598
---	-----

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ РАСТВОРОВ

Влияние сольватации на термодинамику образования комплексов эфира 18-краун-6 с глицином и триглицерином в водно-этанольных растворах при 298 К <i>Т. Р. Усачева, Фам Тхи Лан, В. А. Шарнин</i>	602
Фазовые равновесия в системе вода–пиридин–масляная кислота при 25.0°C <i>Д. Г. Черкасов, З. В. Чепурина, К. К. Ильин</i>	607

## СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

ИК-спектроскопическое исследование комплексообразования молекул аммиака и воды в матрице $\text{KBr}$ <i>И. В. Воротынец, И. И. Гринвальд, И. Ю. Калагаев, А. Н. Петухов, Е. А. Сулягина, А. В. Воротынец, Е. В. Дербишер, Н. А. Петухова, В. М. Воротынец</i>	611
Оценка на примере димера воды ошибки суперпозиции базисных наборов в явнокоррелированном методе $\text{CCSD(T)}(\text{F12})$ <i>В. В. Беликов, Д. А. Бохан, Д. Н. Трубников</i>	615

Взаимодействие N-винилпирролидона с метилметакрилатом <i>В. В. Зайцева, А. В. Штонда, Т. Г. Тюрина, А. Р. Багдасарова, С. Ю. Зайцев</i>	620
Энергия диссоциации N—H-связи в фенотиазинах и дифениламинах <i>Е. Т. Денисов, Т. Г. Денисова</i>	629
Электронографическое исследование равновесной структуры гексаметилентетрамина с использованием данных квантовой химии и колебательной спектроскопии <i>Л. С. Хайкин, О. Е. Грикина, Н. М. Карасев, Д. М. Ковтун, И. В. Кочиков</i>	638
Квантово-химические расчеты силлил- 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 $(CH_3)_3SiNCSe$ <i>Л.С. Хайкин, О.Е. Грикина, И.В. Кочиков, Н.Ф. Степанов</i>	643
Энергии газофазного депротонирования нитрозамещенных бензолсульфоновой и бензойной кислот. Роль конформационной изомерии сульфокислот <i>С. Н. Иванов, Н. И. Гиричева, Т. В. Нуркевич, М. С. Федоров</i>	647
Исследование структуры молекулы цианометоксидиметиламинометана методом газовой электронографии и квантовой химии <i>Е. П. Альтова, Р. Г. Костяновский, И. Ф. Шишков</i>	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 <i>И. Б. Давыдова, В. М. Сенявин, О. Н. Зефирова, Г. М. Курамшина, Ю. А. Пентин</i>	657

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ И НАНОМАТЕРИАЛОВ

“Эффект Армстронга” как инструмент исследования структуры жидких полярных диэлектриков <i>Ю. А. Лебедев</i>	667
Применение позитронной спектроскопии для выявления наноразмерных структур в жидких смесях. Выявление наноагломератов <i>n</i> -пропанола в его водных растворах <i>П. С. Степанов, В. М. Бяков, А. Г. Залужный</i>	672

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

Влияние удельной поверхности активированных углей на сорбцию ионов $[Au(CN)_2]^-$ из водных растворов <i>Р. И. Ибрагимова, С. Ф. Гребенников, В. В. Гурьянов, Д. А. Пичугина, А. С. Кривов, Н. В. Воробьев-Десятовский</i>	679
Механизм кристаллизационного модифицирования ферригидрита полимерным гидрогелем по данным мессбауэровской спектроскопии <i>Ю. Д. Перфильев, А. Л. Николаев, А. В. Гопин, Л. А. Куликов</i>	686
Ионный обмен и молекулярная сорбция щавелевой кислоты сильноосновным анионообменником <i>Е. В. Крисилова, Г. Ю. Орос, А. В. Крисилов, В. Ф. Селеменев</i>	692
Ингибирование растворения меди в водных растворах триазолов <i>Ю. И. Кузнецов, М. О. Агафонкина, Н. П. Андреева</i>	697

## **ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ПРОЦЕССОВ РАЗДЕЛЕНИЯ. ХРОМАТОГРАФИЯ**

Сорбция производных адамантана на модифицированной  
полиэтиленгликолем графитированной термической саже

*С. Н. Яшкин, Ю. А. Агеева*

704

Селективность неподвижных фаз на основе пиридиновых  
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

---

---

---

Сдано в набор 21.10.2013 г.	Подписано к печати 24.01.2014 г.	Дата выхода в свет 23 еж.	Формат $60 \times 88^{1/8}$
Цифровая печать	Усл. печ. л. 22.5	Усл. кр.-отг. 3.1 тыс.	Уч.-изд. л. 22.5
	Тираж 134 экз.	Зак. 45	Бум. л. 11.25
			Цена свободная

---

Учредитель: Российская академия наук

---

Издатель: Российская академия наук. Издательство “Наука”, 117997 Москва, Профсоюзная ул., 90  
Оригинал-макет подготовлен МАИК “Наука/Интерпериодика”  
Отпечатано в ППП «Типография “Наука”», 121099 Москва, Шубинский пер., 6