

ISSN 0044-4537

Том 93, Номер 10

Октябрь 2019



# ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

[www.sciencejournals.ru](http://www.sciencejournals.ru)

# СОДЕРЖАНИЕ

Том 93, номер 10, 2019

## К 90-ЛЕТИЮ ХИМИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА МГУ

К юбилею химического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова	1443
Развитие расчетных методов в лаборатории химической термодинамики химического факультета МГУ	
<i>А. Л. Восков, Н. А. Коваленко, И. Б. Куценок, И. А. Успенская</i>	1445
Молекулярно-ситовой катализ: Пионерские работы химиков МГУ	
<i>И. Ф. Московская, Б. В. Романовский</i>	1455
Спектроскопия двухатомных молекул за рамками адиабатического приближения	
<i>Е. А. Пазюк, В. И. Пупышев, А. В. Зайцевский, А. В. Столяров</i>	1461
Реконструкция электронной плотности интермедиатов реакции гидролиза N-ацетиласпартата аспартоацилазой	
<i>М. Г. Хренова, Е. Д. Коц, А. М. Кулакова, А. В. Немухин</i>	1470
Применение распределенных мультипольных моментов для решения задач вычислительной химии	
<i>А. А. Рыбаков, И. А. Брюханов, А. В. Ларин</i>	1477
Предсказание энталпий сублимации циклических производных мочевины с использованием модели молекулярного электростатического потенциала	
<i>О. Н. Рыжова, О. В. Дорофеева</i>	1494
Строение и конформационная динамика молекулы 2,2-диметилпропаналя в низших возбужденных синглетном ( $S_1$ ) и триплетном ( $T_1$ ) электронных состояниях	
<i>И. А. Годунов, В. А. Батаев, Н. Н. Яковлев</i>	1500
Функциональные группы оксида графита: Экспериментальные данные и неэмпирическое моделирование	
<i>Е. А. Шиляева, Ю. В. Новаковская</i>	1506
Обобщенная модель локального состава, ее возможности и ограничения	
<i>Н. А. Коваленко</i>	1517
Роль температурной зависимости энталпии ионного обмена в прогнозировании поведения ионообменной системы	
<i>В. А. Иванов, Е. А. Карпюк, О. Т. Гавлина, С. И. Каргов</i>	1522
Адсорбционные равновесия в нанопорах кремнеземов с привитыми бромпропильными группами	
<i>Т. М. Рошина, Н. К. Шония</i>	1529
Синтез и физико-химические свойства иерархических цеолитов MWW	
<i>Е. Е. Князева, А. В. Шкурапатов, Д. С. Засухин, И. В. Добрякова, О. А. Пономарева, И. И. Иванова</i>	1538
Влияние искрового плазменного спекания на состав, структуру и электропроводность азотзамещенных углеродных нанотрубок, модифицированных наночастицами кобальта	
<i>С. А. Черняк, А. С. Иванов, К. И. Маслаков, Р. Ю. Новоторцев, Дж. Ни, С. В. Савилов, В. В. Лунин</i>	1545
Влияние функционализации допированных азотом углеродных нанотрубок на электропроводность	
<i>Е. В. Суслова, Е. А. Архипова, А. В. Калашник, А. С. Иванов, С. В. Савилов, Хуи Ся, В. В. Лунин</i>	1551

Влияние кобальта на каталитические свойства платины в окислении CO: Эксперимент и квантово-химическое моделирование	1556
Д. А. Пичугина, Н. А. Никитина, Н. Е. Кузьменко, Д. И. Потемкин	
Особенности образования манганитов лантана в каналах углеродных нанотрубок	1564
А. Н. Ульянов, С. В. Савилов, Е. А. Архипова, С. В. Максимов, А. В. Шумянцев, В. В. Лунин	
Низкотемпературный синтез гибридныхnanoформ на основе антибактериального препарата диоксидина и наночастиц биологически активных металлов (серебро, медь), включенных в биополимерные криогели	
Т. И. Шабатина, О. И. Верная, А. В. Нуждина, В. П. Шабатин, А. М. Семенов, М. Я. Мельников	1569
Наноструктурированные NiMo- и NiW-катализаторы окисления тиофена, полученные методом лазерного электродиспергирования	
А. А. Брыжин, И. Г. Тарханова, К. И. Маслаков, С. А. Николаев, С. А. Гуревич, В. М. Кожевин, Д. А. Явсин, М. Г. Гантман, Т. Н. Ростовщикова	1575
Палладий-кобальтовые катализаторы на углеродном носителе в гидроредукции хлорбензола	
С. В. Клоков, Е. С. Локтева, Е. В. Голубина, К. И. Маслаков, О. Я. Исайкина, М. В. Тренихин	1584