

ISSN 0044-4537

Май 2020

Том 94, Номер 5



ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

www.sciencejournals.ru

СОДЕРЖАНИЕ

Том 94, номер 5, 2020

МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ ПО ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ (ЧЕРНОГОЛОВКА)

- Физическая химия в россии и за рубежом:
от квантовой химии до эксперимента 655
- Теоретические и экспериментальные исследования
субнаноразмерных молекул и кластеров 657
О. П. Чаркин, Н. М. Клименко
- Моделирование влияния количества диметилсульфоксида
на энергию взаимодействия ионов в нафийон-подобных мембранах 672
*А. С. Зюбин, Т. С. Зюбина, Е. А. Сангинов, Р. Р. Каюмов,
Л. В. Шмыглева, Ю. А. Добровольский*
- Учет конформационной подвижности в квантово-химических
расчетах потенциалов окисления нитроксильных радикалов 680
В. Б. Лужков
- Теоретические колебательные спектры реакционных интермедиатов
в активном центре гуанозинтрифосфат-связывающих белков 686
Б. Л. Григоренко, А. В. Немухин
- Роль фуллерен-азотных комплексов щелочных металлов при фиксации азота,
катализируемой C_{60} 692
А. Ф. Шестаков
- Влияние заместителей в гидролизованных цефалоспориных
на внутримолекулярную связь $O-H\cdots N$ 698
Е. О. Левина, М. Г. Хренова, В. Г. Цирельсон
- Квантово-химическое и ИК-спектроскопическое исследование
ионной ассоциации в растворах $LiCF_3SO_3$ в ацетонитриле 706
А. М. Эркабаев, Т. В. Ярославцева, О. В. Бушкова
- Квантово-химическое моделирование строения комплексов сополимера
n-винилпирролидона с диметакрилатом триэтиленгликоля
с метформинном в водных растворах 713
В. М. Игнатьев, Н. С. Емельянова, Н. В. Фадеева, С. В. Курмаз
- Моделирование таутомерного равновесия и спектра
поглощения 4,5-диметил-2-(2'-гидроксифенил)имидазола 719
Д. П. Капуста, А. М. Кулакова, М. Г. Хренова
- Квантово-химическое моделирование спектральных свойств
красителя BODIPY с разными заместителями 726
А. В. Невидимов
- Спектроскопические свойства молекулы сульфида бария
в низколежащих электронных состояниях $X^1\Sigma^+$, $a^3\Pi$, $A^1\Pi$, $b^3\Sigma^+$ и $A^1\Sigma^+$ 731
А. Н. Смирнов, В. Г. Соломоник
- Объем фуллеренового каркаса и неаддитивность поляризуемости
эндофуллеренов и гидрированных эндофуллеренов
с инкапсулированными атомами благородных газов 738
А. Д. Закирова, Д. Ш. Сабилов
- Квантово-химическое моделирование реакций согласованного распада циклов 747
Н. С. Емельянова, Т. С. Покидова
- Молекулярно-динамическое моделирование напыления тонких пленок,
состоящих из слоев с чередующейся плотностью 754
Ф. В. Григорьев, В. Б. Сулимов, А. В. Тихонравов

Каталитический синтез и исследование углерод-графеновых структур <i>А. А. Арбузов, А. А. Володин, Б. П. Тарасов</i>	760
Оптические исследования анизотропии в органических проводниках $D_4[MBr_4](Solvent)$ <i>Е. И. Жилева, Н. В. Дричко, Г. В. Шилов, А. М. Флакина, С. А. Торунова, Р. Н. Любовская</i>	766
Особенности гидрирования магния с Ni-графеновым покрытием <i>Б. П. Тарасов, С. А. Можжухин, А. А. Арбузов, А. А. Володин, Э. Э. Фокина, П. В. Фурсиков, М. В. Лотоцкий, В. А. Яртысь</i>	772
Квантово-химическое моделирование адсорбции краун-эфиров различной структуры на поверхностях лития и углерода <i>Г. З. Тулибаева, О. В. Ярмоленко, А. Ф. Шестаков</i>	778
Влияние механической активации интерметаллического соединения $LaNi_{2.5}Co_{2.4}Mn_{0.1}$ на абсорбцию водорода <i>П. А. Коник, Е. А. Бердоносова, Е. В. Мещерякова, С. Н. Клямкин</i>	784
Фазовый состав и микроструктура сорбирующих водород композитов эвтектического сплава Mg–Ni с графеноподобным материалом <i>П. В. Фурсиков, А. М. Слепцова, С. А. Можжухин, А. А. Арбузов, В. Н. Фокин, Э. Э. Фокина, И. И. Ходос, Б. П. Тарасов</i>	789
Корреляция между характеристиками процессов газофазного и электрохимического гидрирования интерметаллических соединений <i>А. А. Володин, П. В. Фурсиков, Э. Э. Фокина, Б. П. Тарасов</i>	796
<hr/>	
К сведению авторов	803
<hr/>	