

ISSN 0044-4537

Том 97, Номер 8

Август 2023

# ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ



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



# СОДЕРЖАНИЕ

---

---

Том 97, номер 8, 2023

---

---

## ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА И ТЕРМОХИМИЯ

О выборе отсчетных состояний при термодинамическом описании необменной сорбции

*О. Н. Хохлова, В. Ю. Хохлов, С. А. Лисицына*

1079

Расчет энергии гиббса сольватации пиридина в неводных растворителях

*И. А. Кузьмина, М. А. Кованова, С. О. Перова*

1084

Термодинамические и высокотемпературные свойства  $KFe_{0.33}W_{1.67}O_6$

*А. Г. Шварева, В. М. Кяшкин, Н. Н. Смирнова,  
А. В. Маркин, Д. Г. Фукина, А. В. Князев*

1087

## ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА И КАТАЛИЗ

Электрокаталитическое восстановление  $CO_2$   
в присутствии N-замещенных солей 2,4,6-трифенилпиридина

*А. В. Долганов, Л. А. Климаева, С. Г. Кострюков, А. Ш. Козлов,  
А. Д. Юдина, О. В. Тарасова, А. В. Князев*

1097

Изучение механизма электрокаталитической реакции получения  
молекулярного водорода в присутствии N-метил-2,4,6-трифенилпиридинильного  
катиона с использованием метода DFT

*А. В. Долганов, Л. А. Климаева, Е. Е. Мурюмин, А. Д. Юдина,  
А. С. Загороднова, А. В. Танкова, Т. В. Бойкова, Ю. Н. Ковалева, А. В. Князев*

1106

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ РАСТВОРОВ

Растворимость в трехкомпонентной системе  $NdCl_3-PrCl_3-H_2O$  при  $25^\circ C$

*А. В. Румянцев, А. А. Гурьева, В. П. Герман, В. А. Кескинов, Н. А. Чарыков,  
А. А. Блохин, Н. А. Кулепова, Б. К. Шаймарданова, М. А. Саденова, Л. В. Шушкевич*

1111

Протолитические равновесия L-аланил-L-гистидина в водном растворе

*С. Н. Гридчин, В. М. Никольский*

1119

Смешанная сетка водородных связей в водных растворах 3-амино-1-пропанола.  
Результаты молекулярно-динамического моделирования

*Н. К. Балабаев, Г. М. Агаян, М. Н. Родникова, И. А. Солонина, А. Б. Разумова*

1128

## СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Структурные причины неионтоносного поведения текучих систем

*В. Н. Матвеенко, Е. А. Кирсанов*

1137

О конформационном переходе “кресло”—“ванна” циклогексанона  
в процессе окисления циклогексана

*С. В. Пучков, Ю. В. Непомнящих*

1155

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ, СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

Определение характеристик модели молекулярной сорбции  
на примере разделения компонентов экстракционной фосфорной кислоты  
методом “удерживания” на ионите

*М. А. Казначеев, Н. А. Тихонов, Р. Х. Хамизов*

1161

Нанотермодинамика на примере металлических наночастиц

*В. М. Самсонов, С. А. Васильев, И. В. Талызин, К. К. Небывалова, В. В. Пуйтов*

1167

## **ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ И ПОВЕРХНОСТНЫХ ЯВЛЕНИЙ**

Формирование симметрии кривых элюирования в линейной динамике адсорбции

*А. В. Ларин, И. А. Полунина*

1178

DFT-исследование потенциальных барьеров и траектории адсорбции/десорбции CO<sub>2</sub> и диссоциации CO<sub>2</sub> на кластеры, моделирующие поверхности Fe (100), (110) и (111)

*Н. Н. Толкачев, Я. А. Покусаева, В. И. Богдан*

1181

---

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

Особенности удерживания диэфиров лютеина на C16-стационарных фазах с различными диаметрами пор

*В. И. Дайнека, С. М. Староверов, Г. Г. Васияров, Т. Г. Буржинская, И. П. Блинова*

1192

## **ФОТОХИМИЯ, МАГНЕТОХИМИЯ, МЕХАНОХИМИЯ**

Химическая поляризация ядер при фотовосстановлении антрахинонов

*В. И. Порхун, Н. А. Кузнецова, И. В. Поляков, А. С. Юдина*

1196

## **ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ И ВЗРЫВА**

Температурная зависимость реакции окисления водорода сернистым ангидридом

*П. С. Гукасян, Э. М. Макарян, А. А. Арутюнян, А. Г. Давтян*

1200

Влияние состояния поверхности реакционного сосуда на характеристики горения газовых смесей, содержащих галогензамещенный углеводород

*С. Н. Копылов, П. С. Копылов, И. П. Елтышев, И. Р. Бегишев*

1207

Изучение природы вспышек светоизлучения процесса взрывного окисления водорода в присутствии SO<sub>2</sub>

*Э. М. Макарян, П. С. Гукасян, А. А. Арутюнян*

1213

---

## **БИОФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКАЯ БИОЛОГИЯ**

Сравнительный анализ влияния нативного и полимерного β-циклодекстринов на растворимость и мембранный проницаемость барититиниба

*Е. С. Делягина, А. А. Гарibyan, И. В. Терехова*

1218