

Том 99, номер 3

ISSN 0044-4537
Март 2025



ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ



НАУКА
— 1727 —

СОДЕРЖАНИЕ

Том 99, номер 3, 2025

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА И ТЕРМОХИМИЯ

Фазовые равновесия и термодинамические свойства фаз в системе метансульфонат марганца — метансульфоновая кислота — вода: эксперимент и расчет

Е. В. Белова, А. С. Капелюшников, И. А. Успенская 375

Теплоемкость гексаалюмината магния-неодима $\text{NdMgAl}_{11}\text{O}_{19}$

П. Г. Гагарин, А. В. Гуськов, В. Н. Гуськов, М. А. Рюмин, Г. Е. Никифорова, К. С. Гавричев 384

ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА И КАТАЛИЗ

Конверсия диметилового эфира в низшие олефины на Rh-Mg/HZSM-5: роль Rh как модификатора

М. И. Шилина, Т. И. Батова, Т. К. Обухова, Н. В. Колесниченко 392

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ РАСТВОРОВ

Энтальпийные характеристики сольватации 1-аза-18-краун-6 в водно-этанольных и в водно-диметилсульфоксидных растворителях

Т. Р. Усачева, О. Н. Крутова, Н. Н. Куранова, Р. А. Кушнир, О. В. Кашина 402

СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Межмолекулярное связывание $\text{C}\cdots\text{H}\cdots\text{Cl}$ в комплексах метана, этана и пропана с молекулой хлористого водорода

А. Н. Исаев 408

ХЕМОИНФОРМАТИКА И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Моделирование процессов кристаллизации авиационного топлива с различным содержанием ароматических углеводородов

М. Н. Мамонтов, А. П. Оценко 420

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ И ПОВЕРХНОСТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

О выходе диффундирующей частицы из полости

В. Ю. Зицерман, Ю. А. Махновский 428

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ПРОЦЕССОВ РАЗДЕЛЕНИЯ. ХРОМАТОГРАФИЯ

Характерные параметры ненасыщенных ацильных остатков при жидкостной хроматографии липидов в средах с ионами серебра

В. П. Пчёлкин 433

Сравнительный анализ хромато-масс-спектрометрических методов обнаружения примесей в концентрированном пероксиде водорода — окислителе ракетного топлива

Ю. В. Самухина, А. Н. Глушко, А. К. Буряк 442

Термодинамика сорбции и закономерности удерживания галогенадамантанов на циклодекстринсодержащем сорбенте CYCLOBOND в условиях ВЭЖХ

С. Н. Яшкин, А. В. Базилин, Э. В. Рыжихина, Д. А. Светлов 450

ЭЛЕКТРОХИМИЯ. ГЕНЕРАЦИЯ И АККУМУЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГИИ ИЗ ВОЗОБНОВЛЯЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ

Физико-химические и электрохимические свойства растворов трифторметансульфоната лития в смесях сульфолан-1,3-диоксолан

Л. В. Шеина, Е. В. Карасева, А. Н. Лобов, В. С. Колосницын

459

ФОТОХИМИЯ, МАГНЕТОХИМИЯ, МЕХАНОХИМИЯ

Исследование фотоперегруппировки серосодержащих эфиров с помощью эффектов химической поляризации ядер

В. И. Порхун, Н. А. Кузнецова, А. Г. Подопригора, Ю. В. Богданова

471

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ И ВЗРЫВА

Формирование плотного продукта системы Ti-B-Fe, полученного самораспространяющимся высокотемпературным синтезом

О. К. Лепакова, О. А. Шкода, Б. Ш. Браверман

477

БИОФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКАЯ БИОЛОГИЯ

Молекулярная динамика и экспериментальное изучение структурного поведения фермента алкогольдегидрогеназы на графитических сорбентных поверхностях: ориентационные особенности титрируемых аминокислотных остатков

И. А. Байгунов, П. П. Гладышев, Х. Т. Холмуродов, Х. Эльхаес, М. Ибрагим

484

ДИСКУССИИ

Второе начало и современное состояние термодинамики

Ю. К. Товбин

499

Молекулярно-динамическое моделирование контактного плавления в биметаллических наносистемах

В. М. Самсонов, И. В. Талызин, С. А. Васильев, В. В. Пуйтов, А. А. Романов

513

CONTENTS

Vol. 99, No. 3, 2025

CHEMICAL THERMODYNAMICS AND THERMOCHEMISTRY

Phase equilibria and thermodynamic properties of phases in the manganese methanesulfonate – methanesulfonic acid – water system: experiment and calculations

E. V. Belova, A. S. Kapelyushnikov, I. A. Uspenskaya 375

Heat capacity of magnesium-neodymium hexaaluminate $\text{NdMgAl}_{11}\text{O}_{19}$

P. G. Gagarin, A. V. Guskov, V. N. Guskov, M. A. Ryumin, G. E. Nikiforova, K. S. Gavrichev 384

CHEMICAL KINETICS AND CATALYSIS

Conversion of dimethyl ether to light olefins on Rh-Mg/HZSM-5: role of Rh as a modifier

M. I. Shilina, T. I. Batova, T. K. Obukhova, N. V. Kolesnichenko 392

PHYSICAL CHEMISTRY OF SOLUTIONS

Enthalpic characteristics of solvation of 1-aza-18-crown-6 in aqueous-ethanol and aqueous dimethylsulfoxide solvents

T. R. Usacheva, O. N. Krutova, N. N. Kuranova, R. A. Kushnira, O. V. Kashina 402

STRUCTURE OF MATTER AND QUANTUM CHEMISTRY

Intermolecular binding of C...H-CL in complexes of methane, ethane, and propane with a chlorine hydride molecule

A. N. Isaev 408

CHEMOINFORMATICS AND COMPUTER MODELING

Modeling of crystallization processes of aviation fuel with different content of aromatic hydrocarbons

M. N. Mamontova, A. P. Oshchenko 420

PHYSICAL CHEMISTRY OF DISPERSED SYSTEMS AND SURFACE PHENOMENA

On the escape of the diffusing particle from the cavity

V. Yu. Zitserman, Yu. A. Makhnovskii 428

PHYSICAL CHEMISTRY OF SEPARATION PROCESSES. CHROMATOGRAPHY

Characteristic parameters of unsaturated fatty acid residues upon liquid chromatography of lipids in media with silver ions

V. P. Pchelkin 433

Comparative analysis of chromatograph mass spectrometric ways of detecting impurities in a concentrated hydrogen peroxidizer rocket fuel oxidizer

Yu. V. Samukhina, A. N. Glushko, A. K. Buryak 442

Thermodynamics of sorption and retention patterns of halogen adamantanes on cyclodextrin-containing CYCLOBOND sorbent under HPLC conditions

S. N. Yashkin, A. V. Bazilin, E. V. Ryzhikhina, D. A. Svetlov 450

ELECTROCHEMISTRY. GENERATION AND STORAGE OF ENERGY FROM RENEWABLE SOURCES

Physicochemical and electrochemical properties of lithium trifluoromethanesulfonate solutions in sulfolane-1,3-dioxolane mixtures

L. V. Sheina, E. V. Karaseva, A. N. Lobov, V. S. Kolosnitsyn 459

PHOTOCHEMISTRY, MAGNETOCHEMISTRY, MECHANOCHEMISTRY

Using chemical nuclear polarization effects to study photo-rearrangement of sulfur-containing thioesters

V.I. Porkhun, N.A. Kuznetsova, A.G. Podoprigora, Yu. V. Bogdanova

471

PHYSICAL CHEMISTRY OF COMBUSTION AND EXPLOSION PROCESSES

Formation of dense Ti-B-Fe system product obtained by self-propagating high-temperature synthesis

O. K. Lepakova, O. A. Shkoda, B. Sh. Braverman

477

BIOPHYSICAL CHEMISTRY AND PHYSICOCHEMICAL BIOLOGY

Molecular dynamics and experimental study of structural behavior of alcohol dehydrogenase enzyme on graphitic sorbent surfaces: orientational features of titratable amino acid residues

I. A. Baigunov, P. P. Gladyshev, Kh. T. Kholmurodov, H. Elhaes, M. Ibrahim

484

DISCUSSIONS

The second law and the current state of thermodynamics

Yu. K. Tovbin

499

Molecular dynamic modeling of contact melting in bimetallic nanosystems

V. M. Samsonov, I. V. Talyzin, S. A. Vasiliev, V. V. Puitov, A. A. Romanova

513
