

Российская академия наук

ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Том 98 № 4 2024 Апрель

Основан в 1930 г.
Выходит 12 раз в год
ISSN: 0044-4537

*Журнал издается под руководством
Отделения химии и наук о материалах РАН*

Главный редактор
академик РАН А.Ю. Цивадзе

Редакционная коллегия:

В.В. Азатян, В.Н. Андреев, О.В. Батищев, В.В. Болдырев,
Е.В. Болдырева, А.К. Буряк (*заместитель главного редактора*),
М.А. Воротынцев, К.С. Гавричев, Ю.Г. Горбунова, А.А. Горюнков,
С.Н. Калмыков, М.Г. Киселев, Т.Л. Кулова, Л.М. Кустов,
А.Л. Максимов, В.П. Мешалкин, В.Н. Пармон, Р.З. Сагдеев,
М.Ю. Синев, А.В. Столяров, С.Ф. Тимашев, Ю.К. Товбин,
И.А. Успенская (*ответственный секретарь*),
А.Ю. Цивадзе, В.П. Чижков

Международный консультативный совет:

А.Т. Бэлл (США), Ф. Вейнхольд (США),
О. Гошински (Швеция), Ж.-А. Дальмон (Франция),
Э. Дриоли (Италия), Е. Ковач (Швейцария),
У.А. Стилл (США), Х. Стратман (Нидерланды),
Дж.М. Томас (Великобритания), Д.В. Шусмит (Канада)

Зав. редакцией Н.М. Беленкина

Адрес редакции: 119071, Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
E-mail: physchem@pran.ru

Москва
ФГБУ «Издательство «Наука»

СОДЕРЖАНИЕ

ТОМ 98, НОМЕР 4, 2024

ПРОБЛЕМЫ, ТЕНДЕНЦИИ РАЗВИТИЯ И АКТУАЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Разрешение парадокса уравнения Дирака: феноменология

С. Ф. Тимашев

3

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА И ТЕРМОХИМИЯ

Фазовое равновесие в системе октадекан–пропан/*n*-бутан

И. Ш. Хабриев, В. Ф. Хайрутдинов, Т. Р. Ахметзянов, Л. Ю. Яруллин, И. М. Абдулагатов

16

Комплексообразование серебра(I) с 1-метил-2-меркаптоимидазолом
в водно-диметилсульфоксидном растворителе

А. С. Содатдинова, С. М. Сафармамадзода, Т. Р. Усачева, К. С. Мабаткадамзода

24

ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА И КАТАЛИЗ

Влияние природы промотированных циркониевых носителей на каталитическое поведение
катализаторов на основе Rh в реакции раскрытия циклогексана в *n*-гексан

*К. Е. Картавова, М. Ю. Машкин, К. Б. Калмыков, Г. И. Капустин, О. П. Ткаченко, И. В. Мишин,
С. Ф. Дунаев, А. Л. Кустов*

31

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ РАСТВОРОВ

Исследование процесса комплексообразования иона Cu^{2+} с L-аминопропионовой кислотой
в водном растворе

Г. Б. Эшова, Дж. А. Давлатшоева, Ф. Мираминзода, М. Рахимова

42

Характер взаимодействия некоторых карбоновых кислот с поверхностью дисперсного льда
из водных растворов на фоне KCl

В. И. Федосеева

49

СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Оценка энергий диссоциации донорно-акцепторных комплексов соединений элементов
13–15 групп в рамках статистической ЕС-модели

Д. А. Дойников, А. С. Завгородний, А. Ю. Тимошкин

54

Структура мезилатов пропил-, дипропил- и трипропиламмония по данным метода
молекулярной динамики

И. В. Федорова, М. А. Крестьянинов, Л. П. Сафонова

64

Эффективный алгоритм метода Хартри–Фока с хранением двухэлектронных интегралов в приближении разложения единичного оператора <i>И. О. Глебов, В. В. Поддубный</i>	74
Особенности кристаллической структуры и токсичности полиморфных модификаций родентицидной субстанции «дифенацин» <i>А. Н. Кочетов, Л. А. Носикова, З. А. Кудряшова, В. В. Чернышев, В. А. Тафеенко, С. Ф. Дунаев, А. Ю. Цивадзе</i>	86
Сольватное состояние эфира 18-краун-6 в неводных растворителях по данным квантово-химических расчетов <i>И. А. Кузьмина, М. А. Кованова</i>	99

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ И ПОВЕРХНОСТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

Учет не прямых корреляций взаимодействующих частиц на моно- и бимолекулярные скорости адсорбции и десорбции при хемосорбции <i>Е. В. Вотяков, Ю. К. Товбин</i>	104
Определение области фазы и двухфазного равновесия флюида в пространствах пор <i>Е. С. Зайцева, Ю. К. Товбин</i>	114
Применение лазерной десорбции/ионизации для исследования гетерополикислот <i>И. В. Миненкова, А. М. Емельянов, И. Г. Тарханова, А. К. Буряк</i>	130

ЭЛЕКТРОХИМИЯ. ГЕНЕРАЦИЯ И АККУМУЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГИИ ИЗ ВОЗОБНОВЛЯЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ

Явления переноса в системах щелочных металлов <i>Д. К. Белащенко</i>	140
Новые электрохимические системы для натрий-ионных аккумуляторов <i>Т. Л. Кулова, И. М. Гаврилин, А. М. Скундин, Е. В. Ковтушенко, Ю. О. Кудряшова</i>	156

БИОФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКАЯ БИОЛОГИЯ

Роль функциональных групп при комплексообразовании структурных аналогов ароматических аминокислот с пектином <i>Р. Х. Мударисова, О. С. Куковинец, С. В. Колесов, И. В. Новоселов</i>	163
------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-----