

Российская академия наук  
Институт химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН

# ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

№ 1 2024 Январь

Выходит 12 раз в год  
ISSN 0207-401X

Журнал издаётся под руководством  
Института химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН

Главный редактор  
А. Л. Бучаченко

Институт физики твёрдого тела им. Ю.А. Осипяна РАН, г. Москва

Заместитель главного редактора  
С.Я. Уманский

Федеральный исследовательский центр химической  
физики им. Н.Н. Семёнова РАН

Ответственный секретарь  
М.Г. Голубков

Федеральный исследовательский центр химической  
физики им. Н.Н. Семёнова РАН

## Редакционная коллегия:

**В.В. Азатян** (Научно-исследовательский институт систем-  
ных исследований РАН)

**С.М. Алдошин** (Федеральный исследовательский центр  
проблем химической физики и медицинской химии РАН)

**М.И. Алымов** (Институт структурной макрокинетики и  
проблем материаловедения им. А.Г. Мержанова РАН)

**В.Л. Бердинский** (Оренбургский государственный универ-  
ситет)

**А.А. Берлин** (Федеральный исследовательский центр хи-  
мической физики им. Н.Н. Семёнова РАН)

**Г.В. Голубков** (Федеральный исследовательский центр хи-  
мической физики им. Н.Н. Семёнова РАН)

**М.В. Гришин** (Федеральный исследовательский центр хи-  
мической физики им. Н.Н. Семёнова РАН)

**Ю.Ф. Крупянский** (Федеральный исследовательский центр  
химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН)

**И.Н. Курочкин** (Институт биохимической физики имени  
Н.М. Эмануэля РАН)

**М.Я. Мельников** (Московский государственный универси-  
тет им. М.В. Ломоносова, химический факультет)

**В.И. Минкин** (Южный федеральный университет, Ростов-  
на-Дону)

**Ю.Н. Молин** (Институт химической кинетики и горения  
им. В.В. Воеводского СО РАН)

**Р.Б. Моргунов** (Федеральный исследовательский центр  
проблем химической физики и медицинской химии РАН)

**В.А. Надточено** (Федеральный исследовательский центр  
химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН)

**А.И. Никитин** (Федеральный исследовательский центр хи-  
мической физики им. Н.Н. Семёнова РАН)

**Е.М. Плисс** (Институт фундаментальной и прикладной  
химии Ярославского государственного университета им.  
П.Г. Демидова Ярославского государственного универси-  
тета)

**А.Ю. Семенов** (МГУ, Институт физико-химической био-  
логии им. А.Н. Белозерского)

**А.А. Скатова** (Институт металлоорганической химии им.  
Г.А. Разуваева РАН)

**В.Л. Столярова** (Санкт-Петербургский государственный  
университет)

**Л.И. Трахтенберг** (Федеральный исследовательский центр  
химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН)

**С.М. Фролов** (Федеральный исследовательский центр хи-  
мической физики им. Н.Н. Семёнова РАН)

prof. **V. Aquilanti** (Перуджийский университет, Italy), prof.

**G. Delgado-oBarrio** (Мадридский университет, Spain),

prof. **L.V. Eppelbaum** (Тель-Авивский университет, Israel),

prof. **S. Iijima** (Мейджо университет, Нагоя, Japan), prof.

**E. Nikitin** (Технион, Хайфа, Israel), prof. **B. Norden** (Гете-  
боргский университет, Sweden), prof. **B. Roos** (Лундский

университет, Sweden), prof. **E. Shustorovich** (USA), prof.

**V. Sundström** (Лундский университет, Sweden), prof. **J. Troe**

(Геттингенский университет, Germany), prof. **R.N. Zare**

(Стенфордский университет, USA)

Подписка на журнал принимается без ограничения всеми отделениями «Роспечати» (№ 71068 в каталоге).

Заведующая редакцией **И. Н. Михайлова**  
Адрес редакции: 119991, Москва, ул. Косыгина, 4  
Телефон: +7 495 939 7495  
e-mail: jcp@chph.ras.ru  
<http://j.chph.ru/>

© Российская академия наук, 2024

© Редколлегия журнала

“Химическая физика” (составитель), 2024

# СОДЕРЖАНИЕ

---

Том 43, номер 1, 2024

---

## Элементарные физико-химические процессы

**Феськов С.В.**

Метод расщепления поляризационных координат в задаче моделирования сверхбыстрого многостадийного переноса электрона в недебаевской среде

3

## Строение химических соединений, квантовая химия, спектроскопия

**Волохов В.М., Парахин В.В., Амосова Е.С., Волохов А.В., Лемперт Д.Б., Зюбина Т.С.**

Квантовохимические расчеты энтальпии образования изомерных 5/6/5-трициклических производных тетразинов, аннелированных нитротриазолами

13

## Кинетика и механизм химических реакций, катализ

**Авдеев Я.Г., Ненашева Т.А., Лучкин А.Ю., Маршаков А.И., Кузнецов Ю.И.**

Влияние органических ингибиторов коррозии на кинетику катодной реакции выделения водорода на стали в растворе серной кислоты

24

**Арсентьев С.Д., Давтян А.Г., Манукян З.О., Тавадян Л.А., Стрекова Л.Н., Арутюнов В.С.**

Кинетическое моделирование влияния условий сопряженного окисления пропана и этилена на выход пропилена

39

**Корсунский Б.Л., Самойленко Н.Г.**

Влияние саморазогрева на кинетику экзотермической реакции в изотермических условиях

47

**Молодочкина С.В., Лошадкин Д.В., Плисс Е.М.**

Кинетические особенности окисления метиллинолеата в мицеллах додецилсульфата натрия

52

## Горение, взрыв и ударные волны

**Конькова Т.С., Мирошничекно Е.А., Шастин А.В., Махов М.Н., Матюшин Ю.Н., Корсунский Б.Л.**

Термохимические свойства тринитрометил-1,3,5-триазинов

60

**Лемперт Д.Б., Игнатьева Е.Л., Степанов А.И., Дашко Д.В., Казаков А.И.,**

**Набатова А.В., Шилов Г.В., Лагодзинская Г.В., Корчагин Д.В., Алдошин С.М.**

Пропаргилзамещенные производные фуразанозепинов: синтез, структура, энтальпия образования, баллистическая эффективность

66

**Махов М.Н.**

Зависимость тротилового эквивалента подводного взрыва от содержания гидрида алюминия в энергетическом материале

79

---

---

### **Динамика фазовых переходов**

**Балдин Е.Д., Воробьева Г.А., Колбанев И.В., Лысков Н.В., Шляхтина А.В.**

Механизм фазообразования  $\text{Sm}_2\text{MoO}_6$  из механически активированной смеси оксидов

84

---

### **Химическая физика полимерных материалов**

**Шибряева Л.С., Комова Н.Н., Чиженко В.А., Богинская И.А.**

Влияние направленного электрического поля на особенности структурных формирований в пленках бутадиен-нитрильного каучука

92

---

### **Химическая физика наноматериалов**

**Иким М.И., Спиридонова Е.Ю., Громов В.Ф., Герасимов Г.Н., Трахтенберг Л.И.**

Влияние способа формирования композитов  $\text{ZnO-In}_2\text{O}_3$  на их структурные характеристики и проводимость

102

---

---