

Российская академия наук
Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

№ 12 2024 Декабрь

Выходит 12 раз в год
ISSN 0207-401X

Журнал издаётся под руководством
Отделения химии и наук о материалах РАН

И.о. главного редактора
М.Г. Голубков

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

Ответственный секретарь
М.В. Гришин

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

Редакционная коллегия:

В.В. Азатян (Научно-исследовательский институт системных 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 университет)

А.А. Берлин (Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН)

А.Л. Бучаченко (Институт физики твёрдого тела им. Ю.А. Осипяна РАН, г. Москва)

Г.В. Голубков (Федеральный исследовательский центр химической 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 университет 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. Надточенко (Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН)

А.И. Никитин (Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН)

А.Ю. Семенов (МГУ, Институт физико-химической биологии 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 химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН)

V. Aquilanti (Перуджийский университет, Италия),

L.V. Eppelbaum (Тель-Авивский университет, Израиль),

S. Iijima (Мейджо университет, Нагоя, Япония), **E. Nikitin**

(Технион, Хайфа, Израиль), **B. Norden** (Гетеборгский уни-

верситет, Швеция), **E. Shustorovich** (США), **V. Sundström**

(Лундский университет, Швеция), **J. Troe** (Геттингенский

университет, Германия), **R.N. Zare** (Стенфордский уни-

верситет, США)

Подписка на журнал принимается без ограничения всеми отделениями «Роспечати» (№ 39432 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 12, 2024

Элементарные физико-химические процессы

Басалаев А.А., Кузьмичев В.В., Панов М.Н., Симон К.В., Смирнов О.В.

Фрагментация гетероциклических молекул при захвате одного электрона двухзарядными ионами 3

Азриель В.М., Акимов В.М., Ермолова Е.В., Кабанов Д.Б.,
Колесникова Л.И., Русин Л.Ю., Севрюк М.Б.

Сравнительный анализ моделирования столкновительно-индуцированной диссоциации
на двух разных поверхностях потенциальной энергии 16

Строение химических соединений, квантовая химия, спектроскопия

Диниахметова Д.Р., Колесов С.В.

Квантовохимическое моделирование взаимодействия фуллерена C_{60} с модельными
радикалами роста аллилхлорида винильного типа 30

Курков В.А., Чесалин Д.Д., Разживин А.П., Шкирина У.А., Пищальников Р.Ю.

Универсальный метод определения интенсивности электрон-фононного взаимодействия
в фотосинтетических пигментах с помощью эволюционного алгоритма оптимизации 40

Кинетика и механизм химических реакций, катализ

Самойленко Н.Г., Шкадинский К.Г., Шатунова Е.Н., Корсунский Б.Л.

Закономерности установления тепловых режимов в противоточном реакторе вытеснения 53

Агроскин В.Я., Бравый Б.Г., Гурьев В.И., Каштанов С.А., Чернышев Ю.А.

Исследование изменения поверхностной проводимости фтористого лития
при адсорбции фтористого водорода 61

Электрические и магнитные свойства материалов

Лукин Л.В.

Фотогенерация носителей тока в органических солнечных элементах.
Роль неравновесных состояний электронов и дырок 66

Химическая физика биологических процессов

Терешкин Э.В., Терешкина К.Б., Лойко Н.Г., Коваленко В.В., Крупянский Ю.Ф.

Особенности связывания ДНК с двумерными кристаллами бактериального белка
DPS бактерии *Escherichia Coli* на основе данных молекулярной динамики 84

Химическая физика наноматериалов

Еремина Е.А., Добровольский А.А., Лемеш И.А., Каплин А.В., Григорьева А.В., Гудилин Е.А.

Магнитные аэрогели на основе восстановленного оксида графита – сорбенты
канцерогенного соединения $K_2Cr_2O_7$

95

Шушин А.И., Уманский С.Я.

Проявление спин-селективности распада синглетных экситонов на пары триплетов
в кинетике распада экситонов в пленках рубрена

106

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

Структура и морфология кубического – ромбоэдрического In_2O_3 , допированного кобальтом

113
