

Российская академия наук

ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Том 98 № 11 2024 Ноябрь

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 11, 2024

ПРОБЛЕМЫ, ТЕНДЕНЦИИ РАЗВИТИЯ И АКТУАЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Оценка информационной достоверности физико-химических свойств гексагидрата нитрата цинка для прикладных исследований

*Д. С. Тестов, С. В. Моржухина, В. Р. Гашимова, А. М. Моржухин,
А. В. Крюкова-Селивёрстова, Е. А. Денисова, О. В. Соболев*

3

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА И ТЕРМОХИМИЯ

Статистико-термодинамический анализ влияния химического состава на изменение температур плавления галогенидов щелочных металлов

А. Г. Давыдов

14

Моделирование адсорбции лития в 4H-SiC , переноса электронов и термодинамических функций соединений системы Si-C-Li

С. М. Асадов, С. Н. Мустафаева, В. Ф. Лукичев

24

Нелинейная теория роста частиц новой фазы в переохлажденных металлических расплавах

М. В. Дудоров, А. Д. Дрозин, В. Е. Рощин, Г. П. Вяткин

34

Термодинамические свойства титаната гадолиния $\text{Gd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$

П. Г. Гагарин, А. В. Гуськов, В. Н. Гуськов, А. В. Хорошилов, К. С. Гавричев

40

Феноменологическая теория критической точки и фундаментальное уравнение состояния в физических переменных

И. В. Кудрявцева, С. В. Рыков

48

Термодинамика сольватации иона серебра(I) в неводных растворителях

И. А. Кузьмина, М. А. Кованова

63

ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА И КАТАЛИЗ

Модифицирование индием $\text{Fe/MgAl}_2\text{O}_4$ катализатора гидрирования CO

Г. В. Панкина, А. Н. Харланов, П. А. Чернавский, К. И. Маслаков, А. В. Шумяцев

67

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ РАСТВОРОВ

Фотокаталитическая деструкция цефтриаксона в водных растворах

М. Р. Сизых, А. А. Батоева, К. Д. Алексеев

79

СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Трис(пентафторфенил)-2-пиридилэтилгерман: синтез, идентификация и квантово-химические расчеты

*О. Г. Замышляева, Р. В. Румянцев, Г. К. Фукин, Л. С. Медведева, С. С. Сологубов,
А. В. Маркин*

87

Фазообразование, полиморфизм, оптические свойства и проводимость соединений и твердых растворов на основе Nd_2WO_6

Е. Д. Балдин, Н. В. Лысков, В. А. Рассулов, А. В. Шляхтина

99

Синтез, микроструктура и свойства керамики $\text{NaNbO}_3\text{--LiNbO}_3$, допированной фторидом лития

Г. М. Калева, Е. Д. Политова, С. А. Иванов, А. В. Мосунов, С. Ю. Стефанович, Н. В. Садовская

108

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ, СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

Физикохимия процессов сольватации/ассоциации в системе водорослевая целлюлоза/наноцеллюлоза—ДМАА/LiCl

К. Г. Боголицын, А. Э. Паршина, Д. А. Поломарчук

116

Температура и энтальпия плавления наноксидов UO_2 и ThO_2 различной морфологии

А. П. Чернышев

125

ХЕМОИНФОРМАТИКА И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Определение изменения дипольного момента при возбуждении в хромофоре зеленого флуоресцентного белка из траекторий молекулярной динамики с потенциалами квантовой механики/молекулярной механики методами машинного обучения

Т. М. Захарова, А. М. Кулакова, М. А. Криницкий, М. И. Варенцов, М. Г. Хренова

133

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ И ПОВЕРХНОСТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

Влияние функциональных групп модифицирующих хелатов на адсорбцию ароматических углеводов поверхностью кремнезема

Е. А. Пахнутова, Ю. Г. Слижов

139

ЭЛЕКТРОХИМИЯ. ГЕНЕРАЦИЯ И АККУМУЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГИИ ИЗ ВОЗОБНОВЛЯЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ

Конденсированные гетероциклические соединения на основе 1,10-фенатролина в реакции электрокаталитического получения молекулярного водорода: влияние заместителей на эффективность процесса

А. В. Долганов, А. Д. Юдина, Т. В. Бойкова, О. Ю. Гани, Л. А. Климаева, Ю. В. Улякина, А. А. Бурмистрова, Е. А. Кемаева, Е. В. Окина, Е. Е. Мурюмин, А. В. Князев

148

Влияние молекулярного йода на электрокинетические свойства суспензий для электрофоретического осаждения

Е. Г. Калинина, Д. С. Русакова, Т. В. Терзиян

156