

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 4Н-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 $Gd_2Ti_2O_7$

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 $Fe/MgAl_2O_4$ катализатора гидрирования CO

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

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–ДМАО/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. Пахнурова, Ю. Г. Слизов

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