

*Российская академия наук*

# ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Том 99    № 2    2025    Февраль

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 99, номер 2, 2025

## ПРОБЛЕМЫ, ТЕНДЕНЦИИ РАЗВИТИЯ И АКТУАЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Синхротронное излучение в решении задач оптимизации свойств порошков алюминия в качестве металлических горючих и сырья для аддитивных технологий

*Д. А. Еселевич, В. Г. Шевченко, З. С. Винокуров, Б. П. Толочко* 165

## ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА И ТЕРМОХИМИЯ

Термодинамические свойства титаната иттербия

*А. В. Гуськов, П. Г. Гагарин, В. Н. Гуськов, К. С. Гавричев* 184

Термохимия растворения тетра-4-карбоксифталоцианина гидроксоалюминия в водных растворах КОН при 298.15 К

*П. Д. Крутов, В. Е. Майзлиш, О. Н. Крутова, Т. Р. Усачева, М. И. Базанов, М. В. Числов, Е. Е. Киптикова* 195

Теплоемкостные характеристики сольватации иона аммония в смешанном растворителе N-метилпирролидон–вода при 298.15 К

*А. Н. Новиков, Е. И. Костылева, С. Н. Соловьёв* 200

Квантово-химическое изучение реакции N,O-диметилкарбамата с мономером и димером метиламина

*А. Я. Самуилов, Е. П. Кожанова, Я. Д. Самуилов* 205

Исследование парожидкостного равновесия смесей метанол–хлороформ–тетрагидрофуран и метанол–хлороформ–тетрагидрофуран–диметилсульфоксид при 101.32 кПа

*В. И. Жучков, В. М. Раева, Д. А. Рыжкин* 216

## ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА И КАТАЛИЗ

Получение метанола из CO<sub>2</sub> на Cu–Zn-катализаторах, нанесенных на коммерческие носители: влияние носителя и условий проведения реакции

*А. М. Баткин, М. А. Тедеева, К. Б. Калмыков, А. В. Леонов, Н. А. Давшан, П. В. Прибытков, С. Ф. Дунаев, И. П. Белецкая, А. Л. Кустов* 226

Дехлорирование хлоридно-сульфатных растворов с использованием озона

*А. В. Леванов, А. О. Оруджев, О. Я. Исайкина* 237

Влияние среды и внутримолекулярных колебаний на кинетику заселения триплетного состояния молекулы-донора

*Е. Н. Минакова, Е. А. Михайлова, В. А. Михайлова* 243

Физико-химические свойства и активность катализатора Mn/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в процессе превращения пропана в олефиновые углеводороды

*А. А. Восмерилов, А. А. Степанов, Л. Н. Восмерикова, Е. Ю. Герасимов, А. В. Восмерилов* 251

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ РАСТВОРОВ

Концентрационные зависимости теплоемкости растворов иодида аммония в смешанном растворителе N-метилпирролидон–вода при 298.15 К

*А. Н. Новиков, Е. И. Костылева, В. П. Бондарев, В. А. Василёв* 262

---

## СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Особенности кристаллизации алюмофосфатных гелей с различным соотношением ди-*n*-пропиламин/ $\text{Al}_2\text{O}_3$  в микро-мезопористое молекулярное сито  $\text{AlPO}_4-11$

*М. Р. Аглиуллин, В. Ю. Гуськов, Р. З. Куватова, В. В. Лазарев, Б. И. Кутепов* 267

К полуэмпирическому анализу обменных взаимодействий в металлоорганических каркасах, содержащих ионы с открытыми *d*-оболочками

*А. Л. Чугреев* 277

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ, СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

Стационарная редокс-сорбция растворенного в воде кислорода на зернистых слоях медь-ионообменных нанокомпозиов

*Т. А. Кравченко, О. А. Козадеров, Д. Д. Вахнин, И. А. Головин, А. Э. Мартынов* 286

Некоторые электрохимические явления, сопровождающие деструкцию нанокластерного полиоксомолибдата  $\text{Mo}_{132}$

*А. А. Остроушко, И. Д. Гагарин, А. Е. Пермякова* 297

Исследование экранирующих и поглощающих электромагнитное излучение свойств шунгитосодержащих материалов

*Ю. В. Самухина, А. К. Буряк* 304

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ И ПОВЕРХНОСТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

Электронное состояние родия в катализаторах окислительного карбонилирования метана в уксусную кислоту на основе  $\text{Rh}/\text{HZSM}-5$ : влияние добавок меди и цинка

*М. И. Шилина, Е. В. Храмов, Т. И. Батова, Н. В. Колесниченко* 309

Критическая точка смачивания в системе жидкий свинец — расплавленный галогенид щелочного металла

*В. П. Степанов* 319

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ПРОЦЕССОВ РАЗДЕЛЕНИЯ. ХРОМАТОГРАФИЯ

Введение катионирующих агентов в процессах мягкой ионизации короткоцепочечных пептидов: лазерная десорбция и электрораспыление

*Е. С. Кузнецова, И. С. Пыцкий, А. К. Буряк* 324

## ЭЛЕКТРОХИМИЯ. ГЕНЕРАЦИЯ И АККУМУЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГИИ ИЗ ВОЗОБНОВЛЯЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ

Сравнение каталитических свойств Pt- и Co-катодов в реакции восстановления нитритов до аммиака

*И. И. Кузнецова, О. К. Лебедева, Д. Ю. Культин, Л. М. Кустов* 331

Физико-химические свойства и функционирование отрицательных электродов с покрытиями на основе свинца в составе резервных химических источников тока

*П. А. Шеглов, Д. А. Самсонов, А. Б. Павленков, Т. Л. Кулова, А. Ю. Рычагов, А. М. Скундин, Е. Ю. Постнова* 339

## ФОТОХИМИЯ, МАГНЕТОХИМИЯ, МЕХАНОХИМИЯ

Фотокаталитическое окисление щавелевой кислоты кислородом и озоном в водном растворе

*А. В. Леванов, А. В. Лапина, О. Я. Исайкина* 351

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ И ВЗРЫВА

Определяющая роль гетерогенных реакций атомов и радикалов в распространения пламени

*В. В. Азатян, В. М. Прокопенко, Н. Н. Смирнов, С. К. Абрамов* 361

---

# CONTENTS

Vol. 99, No. 2, 2025

## CHALLENGES, DEVELOPMENT TRENDS, AND CURRENT PROBLEMS OF PHYSICAL CHEMISTRY

Synchrotron radiation in solving optimization problems for properties of aluminum powders as metallic fuels and raw materials for additive technologies

*D. A. Eselevich, V. G. Shevchenko, Z. S. Vinokurov, B. P. Tolochko* 165

## CHEMICAL THERMODYNAMICS AND THERMOCHEMISTRY

Thermodynamic properties of ytterbium titanate

*A. V. Guskov, P. G. Gagarin, V. N. Guskov, K. S. Gavrichева* 184

Thermochemistry of dissolution of tetra-4-carboxyphthalocyanine hydroxoaluminum in aqueous KOH solutions at 298.15 K

*P. D. Krutov, V. E. Maizlish, O. N. Krutova, T. R. Usacheva, M. I. Bazanov, M. V. Chislov, E. E. Kiptikova* 195

Heat capacity characteristics of ammonium ion solvation in a mixed N-methylpyrrolidone-water solvent at 298.15 K

*A. N. Novikov, E. I. Kostyleva, S. N. Solov'ev* 200

Quantum chemical study of the reaction of N, O-dimethylcarbamate with methylamine monomer and dimer

*A. Ya. Samuilov, E. P. Kozhanova, Ya. D. Samuilov* 205

Vapor-liquid equilibrium measurement of methanol – chloroform – tetrahydrofuran and methanol – chloroform – tetrahydrofuran – dimethyl sulfoxide mixtures at 101.32 kPa

*V. I. Zhuchkov, V. M. Raeva, D. A. Ryzhkin* 216

## CHEMICAL KINETICS AND CATALYSIS

Production of methanol from CO<sub>2</sub> on Cu-Zn-catalysts applied on commercial supports: impact of support and reaction conditions

*A. M. Batkin, M. A. Tedeeva, K. B. Kalmykov, A. V. Leonov, N. A. Davshaa, P. V. Pribytkov, S. F. Dunaev, I. P. Beletskaya, A. L. Kustov* 226

Dechlorination of chloride-sulfate solutions using ozone

*A. V. Levanov, A. O. Orudzhev, O. Ya. Isaikina* 237

Influence of environment and intramolecular vibrations on the kinetics of occupancy of the triplet state of the donor molecule

*E. N. Minakova, E. A. Mikhailova, V. A. Mikhailova* 243

Physical and chemical properties and activity of Mn/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyst during propane to olefinic hydrocarbon conversion

*A. A. Vosmerikov, A. A. Stepanov, L. N. Vosmerikova, E. Yu. Gerasimov, A. V. Vosmerikov* 251

## PHYSICAL CHEMISTRY OF SOLUTIONS

Concentration dependences of heat capacity of ammonium iodide solutions in mixed N-methylpyrrolidone-water solvent at 298.15 K

*A. N. Novikov, E. I. Kostyleva, V. P. Bondarev, V. A. Vasilev* 262

## STRUCTURE OF MATTER AND QUANTUM CHEMISTRY

Features of crystallization of aluminophosphate gels with different DI-n-propylamine/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ratio into micro-mesoporous molecular sieve AlPO<sub>4</sub>-11

*M. R. Agliullin, V. Yu. Guskov, R. Z. Kuvatova, V. V. Lazarev, B. I. Kutepov* 267

Towards a semi-empirical analysis of exchange interactions in metalorganic frameworks with open d-shell ions

*A. L. Tchougréeff*

277

---

## PHYSICAL CHEMISTRY OF NANOCLOUDS, SUPRAMOLECULAR STRUCTURES, AND NANOMATERIALS

Steady-state redox sorption of oxygen dissolved in water on granular layers of copper-ion-exchange nanocomposites

*T.A. Kravchenko, O.A. Kozaderov, D. D. Vakhnin, I. A. Golovin, A. E. Martynov*

286

Some electrochemical phenomena accompanying destruction of nanocluster polyoxomolybdate Mo<sub>132</sub>

*A.A. Ostroushko, I. D. Gagarin, A. E. Permyakova*

297

Studying electromagnetic radiation shielding and absorbing properties of shungite-containing substances

*Yu. V. Samukhina, A. K. Buryak*

309

---

## PHYSICAL CHEMISTRY OF DISPERSED SYSTEMS AND SURFACE PHENOMENA

Rhodium electronic state in catalysts Based on Rh/HZSM-5 for oxidative carbonylation of methane into acetic acid: effect of copper and zinc doping

*M. I. Shilina, E. V. Khramov, T. I. Batova, N. V. Kolesnichenko*

309

Critical wetting point in the liquid lead-molten alkali metal halogenide system

*V. P. Stepanov*

319

---

## PHYSICAL CHEMISTRY OF SEPARATION PROCESSES. CHROMATOGRAPHY

Introduction of cationizing agents in soft ionization processes of short-chain peptides: laser desorption and electrospraying

*E. S. Kuznetsova, I. S. Pytskii, A. K. Buryak*

324

---

## ELECTROCHEMISTRY. GENERATION AND STORAGE OF ENERGY FROM RENEWABLE SOURCES

Comparison of the catalytic properties of Pt and Co cathodes for the nitrite reduction reaction to ammonia

*I. I. Kuznetsova, O. K. Lebedeva, D. Yu. Kultin, L. M. Kustov*

331

Physicochemical properties and functioning of negative electrodes with lead-based coatings as part of backup chemical current sources

*P.A. Shcheglov, D. A. Samsonov, A. B. Pavlenkov, T. L. Kulova, A. Yu. Rychagov, A. M. Skundin, E. Yu. Postnova*

339

---

## PHOTOCHEMISTRY, MAGNETOCHEMISTRY, MECHANOCHEMISTRY

Photocatalytic oxidation of oxalic acid by oxygen and ozone in aqueous solution

*A. V. Levanov, A. V. Lapina, O. Ya. Isaikina*

351

---

## PHYSICAL CHEMISTRY OF COMBUSTION AND EXPLOSION PROCESSES

The determining role of heterogeneous reactions of atoms and radicals in flame propagation

*V. V. Azatyan, V. M. Prokopenko, N. N. Smirnov, S. K. Abramov*

361

---