

СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

- 9 Квантово-динамическое изучение коллинеарного реакционного рассеяния в реакции обмена $H + CH^{\prime} \rightarrow HCl + H^{\prime}$. **Д. П. Бабюк, В. В. Нечипорук**
- 16 Спектроскопические параметры молекулы 7LiH в методе CASCCSD. **Т. А. Клименко, В. В. Иванов**
- 26 Межмолекулярные взаимодействия: «физические» или «химические»? **Г. Б. Литинский**
- 31 *Ab initio* молекулярно-динамическое моделирование первой сольватной оболочки Li^+ в ацетонитриле. **А. Н. Корсун, О. Н. Калугин**

ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

- 39 Надежность идентификации аналитов с помощью искусственных нейронных сетей. **Я. Н. Краснянчин, А. В. Пантелеймонов, Ю. В. Холин**
- 47 Характеристики мицеллообразования додецилсульфата натрия и цетилпиридиний хлорида в присутствии алифатических спиртов и карбоновых кислот. **Л. П. Логинова, А. П. Бойченко, М. Н. Галат, Куак Нгуен Кхань Нгуен, Н. Н. Камнева, В. В. Варченко**
- 56 Влияние мицеллярной среды Бридж 35 на протолитические свойства ряда аминокислот. **А. П. Бойченко, А. Ю. Сидоренко, В. В. Марков, Х. Ле Конг, А. Г. Матвеева, Л. П. Логинова**
- 65 Разработка методики получения монолитных сорбентов на основе кремнезема, пригодных для планарной хроматографии. **А. М. Фролова, О. Ю. Коновалова, А. П. Бойченко, Л. П. Логинова**
- 74 Оптический сенсор на основе отвержденного желатинового геля для фотометрического определения сульфатов в водных средах. **Е. А. Решетняк, В. Е. Асмолов, Н. Н. Немец, Н. А. Никитина**
- 82 Лінійні залежності енергій сольватації (LSER) для кількісної характеристики та порівняння мицелярних хроматографічних систем. **О. П. Бойченко, А. Ю. Сидоренко, В. В. Марков, Л. П. Логінова**
- 93 Атомно-абсорбционное, атомно-эмиссионное с индуктивно-связанной плазмой и рентгенофлуоресцентное определение аналитов в многокомпонентных образцах. **О. И. Юрченко, М. А. Добриян, Н. П. Титова, А. А. Правда**
- 101 Спектрофотометрическое определение иодата и периодата при совместном присутствии. **А. В. Дрозд, Т. С. Тишакова**
- 107 Синтез та дослідження сорбційних властивостей діоксиду титану субмікронного розміру. **М. С. Єрмолаєва, О. І. Юрченко, К. М. Беліков, Є. Ю. Брильова**

ФИЗИКО-ХИМИЯ РАСТВОРОВ

- 114 Сольватация ионов в системе $\text{LiClO}_4\text{-(CH}_3)_2\text{SO}_2$. **Д. О. Третьяков, В. Д. Присяжный, М. М. Гафуров, К. Ш. Рабаданов, М. И. Горобец, С. А. Кириллов**
- 120 Процессы гомо- и гетероассоциации ионов красителей в водных растворах. **С. А. Шаповалов, В. И. Ларин, Е. А. Самойлов, Я. А. Свищёва, Я. С. Киселёва, Т. А. Чёрная, Т. В. Сахно, М. А. Добриян**
- 133 Инфракрасные спектры молекулярных и ионных форм флуоресцеина, эозина и 2,4,5,7-тетранитрофлуоресцеина в ДМСО: теоретический расчет и эксперимент. **А. В. Бирюков, А. В. Лебедь, Н. О. Мчедлов-Петросян**
- 148 Электрическая проводимость и ионная ассоциация Bu_4NClO_4 и Bu_4NPh_4 в γ -бутиролактоне и смеси пропиленкарбоната с 1,2-диметоксиэтаном 50:50. **Т. В. Черножук, В. Ю. Дубовицкая, О. Н. Калугин**
- 154 Структура ионных ассоциатов в концентрированных растворах солей тетраалкиламмония в ацетонитриле по результатам ^1H -ЯМР спектроскопического эксперимента. **Е. В. Лукинова, Б. А. Мареха, А. В. Туров, О. Н. Калугин**
- 159 Электропроводность и ассоциация имидазольевых и пиридиниевых ионных жидкостей в ацетонитриле. **Ю. В. Ворошилова, Е. А. Дахова, В. В. Чабан, О. Н. Калугин**
- 164 Влияние природы катиона на комплексообразование в системе $\text{Me}(\text{ClO}_4)_2$ – 2-фенил-3-гидроксихромон – ацетонитрил. **В. Н. Агеенко, А. Д. Рошаль, О. Н. Калугин**
- 169 Связывание ионов металлов макроциклическим бииндолизином и его ациклическим аналогом в дихлорметане. **Н. В. Настапова, Г. Р. Насыбуллина, В. В. Янилкин, А. А. Калинин, В. А. Мамедов**
- 175 Электропроводность растворов несимметричных электролитов: предельные подвижности индивидуальных ионов и равновесия в водных сульфатных системах. **В. И. Рубцов, Д. Н. Большаков**
- 182 Влияние характера межчастичных взаимодействий в смешанном растворителе вода — (1,2 пропандиол : полиэтиленгликоль-400) на растворимость нитрата миконазола. **Е. П. Безуглая, Г. Д. Юхно, А. П. Красноперова, Н. А. Ляпунов, Ю. М. Столпер**
- 189 Ассоциация ионов пикрата и калия в апротонном растворителе: исследование методами кондуктометрии и спектрофотометрии. **И. Н. Пальваль, А. В. Лебедь, Н. О. Мчедлов-Петросян**
- 198 К вопросу об оценке общей концентрации кислородсодержащих примесей в расплавах галогенидов щелочных металлов. **Т. П. Реброва, В. Л. Чергинец, Т. В. Пономаренко**
- 203 Влияние катионных кислот на процессы удаления кислородсодержащих примесей из расплава и сцинтилляционные свойства монокристаллов CsI. **В. Л. Чергинец, Ю. Н. Дацько, Т. П. Реброва, В. Ф. Гончаренко, В. Ю. Педаш**
- 209 Діаграма фазових рівноваг системи Y-Ga-Sb при 500 °С. **І. С. Антонишин, С. В. Орицин, О. В. Жак**

ЭЛЕКТРОХИМИЯ

- 215 Поведінка електрохімічних систем з електростатичною адсорбцією на простих окисно-відновних електродах. **В. В. Нечипорук, В. Д. Юзькова, М. М Ткачук**
- 224 Электродные материалы на основе нанокристаллических оксидов олова, марганца и кобальта. **Э. В. Панов, С. М. Малёванный, Д. В. Коломыцев, Е. А. Генкина, Т. С. Глушак, В. Ф. Лапшин**
- 231 Электрокаталитические свойства электродов на основе наночастиц TiO_2 при электровосстановлении кислорода. **Г. Я. Колбасов, В. С. Воробец, Л. В. Блинкова, С. Я. Обловатная**
- 235 Химическое растворение α -латуни в хлоридных растворах. **В. И. Ларин, Л. М. Егорова, Э. Б. Хоботова, О. И. Юрченко, М. А. Добриян, Н. П. Титова**
-

ПОВЕРХНОСТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ

- 241 Наночастицы палладия в поверхностном слое гидридкремнезема и их активность в окислении монооксида углерода. **Н. А. Иващенко, К. В. Каток, В. А. Тертых, В. В. Янишпольский, Л. П. Олексенко, Л. В. Луценко, С. А. Хайнаков**
- 248 Каталітичні (ензимоподібні) властивості багаточарових вуглецевих нанотрубок. **К. В. Глевацька, О. М. Бакалінська, Ю. О. Тарасенко, М. Т. Картель**
- 256 Повышение эффективности сорбционной активности ферроникелевых шлаков. **И. В. Грайворонская, Э. Б. Хоботова, В. В. Даценко, О. И. Юрченко, В. Н. Баумер**
- 260 Химическая оценка отходов угледобычи. **М. И. Уханёва, Э. Б. Хоботова**

CONTENTS

THEORETICAL CHEMISTRY

- 9 Quantum study of collinear reactive scattering in the exchange reaction $H + ClH' \rightarrow HCl + H'$.
D. P. Babyuk, V. V. Nechyporuk
- 16 CASCCSD spectroscopic constants of 7LiH molecule. ***T. A. Klimenko, V. V. Ivanov***
- 26 Intermolecular interactions: the classification problem. ***G. B. Litinskii***
- 31 *Ab initio* molecular dynamics simulation of the first solvent shell of the Li^+ in acetonitrile.
O. M. Korsun, O. N. Kalugin
-

CHEMICAL ANALYSIS

- 39 Reliability of identification of analytes in terms of artificial neural networks.
Ya. N. Krasnianchyn, A. V. Panteleimonov, Yu. V. Kholin
- 47 Micelle formation characteristics of sodium dodecylsulphate and cetylpyridinium chloride in the presence of aliphatic alcohols and carboxylic acids. ***L. P. Loginova, A. P. Boichenko, M. N. Galat, Kuak Nguen Khan Nguen, N. N. Kamneva, V. V. Varchenko***
- 56 Effect of micellar media Brij 35 on protolytic properties of a series of aminodiphosphonic acids.
A. P. Boichenko, A. Yu. Sidorenko, V. V. Markov, H. Le Cong, A. G. Matveeva, L. P. Loginova
- 65 A new method for obtaining monolithic silica sorbents suitable for planar chromatography.
A. M. Frolova, O. Yu. Konovalova, A. P. Boichenko, L. P. Loginova
- 74 Optical sensor on the basis of hardened gelatinous gel for the photometric determination of sulfates in aqueous media. ***E. A. Reshetnyak, V. E. Asmolov, N. N. Nemets, N. A. Nikitina***
- 82 Linear solvation energy relationships (LSER) for quantitative characteristics and comparison of micellar chromatographic systems. ***A. P. Boichenko, A. Yu. Sydorenko, V. V. Markov, L. P. Loginova***
- 93 Atomic absorption, atomic emission with inductively coupled plasma and X-ray fluorescent detection of analytes in mul-ticomponent samples. ***O. I. Yurchenko, M. A. Dobriyan, N. P. Titova, A. A. Pravda***
- 101 Spectrophotometric determination of jointly present iodate and periodate. ***A. V. Drozd, T. S. Tishakova***
- 107 Synthesis and sorption properties of submicron titanium dioxide particles. ***M. S. Ermolaeva, O. I. Yurchenko, K. N. Belikov, E. Yu. Brylyova***
-

PHYSICAL CHEMISTRY OF SOLUTIONS

- 114 Solvation of ions in the system $LiClO_4-(CH_3)_2SO_2$. ***D. O. Tretiakov, V. D. Prisiazhniy, M. M. Gafurov, K. Sh. Rabadanov, M. I. Gorobots, S. A. Kirillov***

- 120 The processes of homo- and heteroassociation of ions of dyes in aqueous solutions. **S. A. Shapovalov, V. I. Larin, Y. A. Самойлов, Y. A. Svishchova, Y. S. Kiseliova, T. A. Chernaya, T. V. Sakhno, M. A. Dobriyan**
- 133 IR spectra of molecular and ionic forms of fluorescein, eosin, and 2,4,5,7-tetranitrofluorescein in DMSO: theoretical study and experiment. **A. V. Biryukov, A. V. Lebed, N. O. Mchedlov-Petrossyan**
- 148 Electric conductivity and ionic association of tetrabutylammonium perchlorate and tetraphenylborate in γ -butyrolactone and 50:50 mixture of propylene carbonate with 1,2-dimethoxyethane. **T. V. Chernozhuk, V. Yu. Dubovitskaya, O. N. Kalugin**
- 154 Structure of ionic associates in concentrated solutions of tetraalkylammonium salts in acetonitrile revealed by $^1\text{H-NMR}$ spectroscopic experiment. **E. V. Lukinova, B. A. Marekha, A. V. Turov, O. N. Kalugin**
- 159 Conductivity and association of imidazolium and piridinium ionic liquids in acetonitrile. **Iu. V. Voroshylova, E. A. Dakhova, V. V. Chaban, O. N. Kalugin**
- 164 The influence of the cation nature on complexation in the system $\text{Me}(\text{ClO}_4)_2$ -3-hydroxyflavone-acetonitrile. **V. N. Agieienko, A. D. Roshal, O. N. Kalugin**
- 169 The binding of metal ions by mycrocyclic biindolizine and its acyclic analogue in dichloromethane. **N. V. Nastapova, G. R. Nasybullina, V. V. Yanilkin, A. A. Kalinin, V. A. Mamedov**
- 175 The conductivity of unsymmetrical electrolyte solutions: limiting conductivities of individual ions in aqueous sulfate systems. **V. I. Rubtsov, D. N. Bolshakov**
- 182 The influence of the nature of intermolecular interaction in the mixed solvent water – (1,2-propyleneglycol : polyethyleneglycol-400) on myconazol nitrate solubility. **E. P. Bezugla, G. D. Yukhno, A. P. Krasnopyorova, N. A. Lyapunov, Yu. M. Stolper**
- 189 The association of picrate and potassium ions in aprotic solvent: a conductance and spectrophotometry study. **I. N. Palval, A. V. Lebed, N. O. Mchedlov-Petrossyan**
- 198 On estimation of total concentration of oxygen-containing impurities in molten alkali metal halides. **T. P. Rebrova, V. L. Cherginets, T. V. Ponomarenko**
- 203 On the effect of cation acids on processes of removal of oxygen-containing admixtures from melt and scintillation properties of CsI crystals. **V. L. Cherginets, Yu. N. Datsko, T. P. Rebrova, V. F. Goncharenko, V. Yu. Pedash**
- 209 Solid state phase equilibria in the Y-Ga-Sb system at 500 °C. **I. S. Antonyshyn, S. V. Oryshchyn, O. V. Zhak**
-

ELECTROCHEMISTRY

- 215 Behavior of electrochemical systems with electrostatic adsorption on simple redox electrode. **V. V. Nechyporuk, V. D. Yuz'kova, M. M. Tkachuk**

- 224 Electrode materials based on nanocrystalline tin dioxides, manganese oxides, cobalt oxides. **E. V. Panov, S. M. Malyovanyi, D. V. Kolomyicev, E. A. Genkina, T. S. Glushchak, V. F. Lapshin**
- 231 Electrocatalytic properties of electrodes on the basis of TiO₂ nanoparticles at oxygen electroreduction. **G. Ya. Kolbasov, V. S. Vorobets, L. V. Blinkova, S. Ya. Oblovatnaya**
- 235 Chemical dissolution of Cu/Zn 62/28 brass in chloride solutions. **V. Larin, L. Egorova, E. Khobotova, O. Yurchenko, M. Dobriyan, N. Titova**
-

SURFACE CHEMISTRY

- 241 Palladium nanoparticles in surface layer of hydridesilica and their activity in carbon monoxide oxidation. **N. A. Ivashchenko, K. V. Katok, V. A. Tertykh, V. V. Yanishpolskii, L. P. Oleksenko, L. V. Lutsenko, S. A. Khainakov**
- 248 Catalytic (enzyme-like) properties of multilayer carbon nanotubes. **K. V. Glevatska, O. M. Bakalinska, Yu. O. Tarasenko, M. T. Kartel**
- 256 The improvement of efficacy of ferronickel slags sorption activity. **I. Grayvoronskaya, E. Khobotova, V. Datsenko, O. Yurchenko, V. Baumer**
- 260 The chemical estimation of coal extraction wasters. **M. I. Ukhanyova, E. B. Khobotova**