

## СОДЕРЖАНИЕ

---

### ИТОГИ И ПЕРСПЕКТИВЫ

---

- 11 Метод классической молекулярной динамики: вклад в основания статистической физики.  
**Г. Э. Норман, В. В. Стегайлов**
- 

### ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

---

- 52 Магнитные свойства неуглеродных нанотрубок, имеющих в основном состоянии макроскопический спин. **В. О. Черановский, А. А. Кравченко**
- 58 Электростатические аспекты адсорбции на поверхности оксидов. **В. В. Лобанов**
- 69 Теоретичне дослідження частот та форм нормальних коливань кисеньвмісних адсорбційних комплексів на грані (100) кристалічного силіцію. **М. І. Теремінська, В. В. Лобанов**
- 75 Микроскопическая структура растворов  $\text{LiBF}_4$  в смесях циклических и линейных эфиров. **Е. А. Поступная, Я. В. Колесник, О. Н. Калугин**
- 88 Теоретическое исследование природы ионных ассоциатов в концентрированных растворах тетраалкиламмониевых солей в ацетонитриле. **Б. А. Мареха, Е. В. Лукинова, О. Н. Калугин**
- 95 Молекулярно-динамическое моделирование комплексов  $\text{Ca}^{2+}$  и  $\text{Ba}^{2+}$  с 2-фенил-3-гидроксихромоном в ацетонитриле. **В. Н. Агеенко, О. Н. Калугин**
- 104 Хиральные эффекты димеризации  $\alpha$ -аминокислот на поверхности раздела фаз вода/пар в рамках метода РМЗ. **Е. С. Фомина, Е. А. Беляева, Ю. Б. Высоцкий**
- 117 Конформационный анализ таутомерных форм заряженных и нейтральных молекул барбитуровой кислоты в рамках метода РМЗ. **А. А. Швед**
- 

### ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ И СПЕКТРОСКОПИЯ

---

- 125 Строение молекул и спектрально-флуоресцентные свойства структурно жестких аналогов 2,6-дистирилпиридина. **А. В. Григорович, А. О. Дорошенко, С. М. Москаленко, А. В. Невский, В. Г. Пивоваренко**
- 138 2,6-бис(5-фенил-1,3-оксазол-2-ил)пиридин как флуоресцентный сенсор на ионы тяжелых металлов. **И. Ю. Севрюков, В. В. Щербань, Л. Л. Лукацкая, З. А. Сизова, А. О. Дорошенко**
- 149 Новые арил- и гетарилзамещенные 2-пиразолина – производные альдегидов имидазольного ряда. **В. Н. Котляр, П. А. Пушкарев, А. П. Шкумат, В. Д. Орлов**
- 

### ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

---

- 157 Синтез и сорбционные свойства монолитных неорганических сорбентов на основе кремнезема. **А. М. Фролова, А. П. Бойченко, О. Ю. Коновалова, Л. П. Логинова**

- 166 Методи пробопідготовки нафтопродуктів для атомно-абсорбційного визначення плюмбуму. **О. І. Юрченко, Н. П. Титова, Г. В. Кобець**
- 172 Применение метода диэлектromетрии при экспертном исследовании нефтепродуктов. **В. А. Руднев, П. В. Карножицкий**

---

ФИЗИКО-ХИМИЯ РАСТВОРОВ

---

- 178 Электропроводность растворов  $\text{Bu}_4\text{NBr}$  в ацетонитриле в широком интервале концентраций. **Е. В. Лукинова, О. Н. Калугин**
- 185 Электролиты для химических источников тока на основе ионных жидкостей: растворы бромида 1-бутил-3-метил-имидазолия в ацетонитриле. **Ю. В. Ворошилова, Е. А. Дахова, О. Н. Калугин**
- 189 Электрическая проводимость и ассоциация  $\text{Bu}_4\text{NPh}_4$  в смесях пропиленкарбоната с 1,2-диметоксиэтаном. **Т. В. Черножук, В. Ю. Дубовицкая, О. Н. Калугин**
- 194 Ассоциация двухзарядного аниона бромкрезолового зеленого с катионами цианинов в водных растворах. **С. А. Шаповалов, Я. С. Киселева**
- 199 Вязкость и термодинамика вязкого течения системы вода — N-метилпирролидон. **Е. П. Безуглая, Н. А. Ляпунов, А. П. Красноперова, Г. Д. Юхно, А. В. Черный**
- 208 Взаимодействие комплексных ферроцианидных ионов с катионами полиметинов в водных растворах. **Е. А. Самойлов**

---

ХИМИЯ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

---

- 213 Термические и спектральные свойства новых смешанно-лигандных комплексов переходных металлов с 1,3-дителиол-2-тион-4,5-дителиолатом (dmit) и гетероциклическими диаминами. **С. В. Витушкина, В. А. Стародуб**
- 222 Особенности поведения изотритиондитиолатоцинката тетрабутиламмония в магнитном поле. **Г. Ю. Василец, Д. Л. Каменский, Э. П. Николова, М. Кайнакова**

---

ПОВЕРХНОСТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ

---

- 226 Адсорбционно-электрохимическое формирование пространственных структур в системе «активный уголь-благородный металл». **Ю. А. Тарасенко, И. П. Герасимюк, Н. Е. Евтушенко, А. А. Каленюк, В. Е. Клименко, В. С. Куць, В. Ф. Лапко, А. А. Лысенко**
- 240 Дослідження накопичення важких металів у біогумусах. **В. В. Манк, В. М. Галімова, В. Суровцев**

---

ЭЛЕКТРОХИМИЯ

---

- 245 Изучение особенностей поведения  $\alpha$ -латуни в растворах различного состава. **В. И. Ларин, Л. М. Егорова, Э. Б. Хоботова, М. А. Добриян, О. И. Юрченко**
- 253 Коррозионное поведение алюминия и его сплавов в растворах гидроксида натрия. **Т. С. Лукащук, В. И. Ларин**

- 259 Особливості процесу електровідновлення комплексних йонів бору та кремнію із хлоридно-флуоридних розплавів. **З. М. Проценко**

---

МОЛОДЕЖНЫЙ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ ФОРУМ

---

- 265 Электрохимическое формирование структуры осадков функционального золота из железистосинеродистого электролита. **О. Л. Берсирова, В. А. Герасименко, В. С. Кублановский**
- 270 Энергия активации электровосстановления бис-иминодиацетатных комплексов палладия (II). **В. С. Кублановский, В.Н. Никитенко, К. П. Руденко**
- 277 Электрохимический синтез озона в растворах  $\text{HClO}_4$  на  $\text{PbO}_2/\text{SnO}_2$ -аноде. **А. К. Болвако, А. А. Черник, И. М. Жарский**
- 281 Электрохимическое поведение и гальванохимическая обработка электродных материалов на основе компактов из синтетических алмазов разной природы и дисперсности в водных электролитах. **Е. Н. Федоришена, Е. П. Наконешная, И. А. Новоселова**
- 285 Наноструктурированные CdSe-электроды для фотоэлектрохимических преобразователей. **Т. С. Погребняк, Г. Я. Колбасов**
- 288 Корозійно-електрохімічні властивості та структура протекторних сплавів системи Al-Zn-Sa, мікролегованих ванадієм. **Ю. Б. Руденко, В. А. Швець, В. М. Талаш, В. О. Лавренко**
- 292 Структура никелевых гальванопокрытий, осажденных из метансульфоновых электролитов, и их физико-механические свойства. **И. В. Скар, А. С. Баскевич, Ф. И. Данилов**
- 296 Фотоэлектрохимическая система для аккумуляирования водорода. **И. А. Слободянюк, Л. Г. Щербакова, Г. Я. Колбасов, И. А. Русецкий**
- 299 Електрохромні властивості катодно осаджених плівок на основі оксидів W, Ni і Nb. **С. С. Фоманюк, Ю. С. Краснов, Г. Я. Колбасов, В. Н. Зайченко**
- 305 Доокиснення поверхні аморфних сплавів на основі Fe неорганічними аніонами. **О. М. Герцик, Л. М. Беднарська, Н. Л. Пандяк, А. О. Лема**
- 310 Моделирование влияния сольватационных эффектов на одноэлектронный перенос заряда в электродных реакциях на примере молибдатсодержащих расплавов. **В. В. Соловьёв, Е. Ф. Бут**
- 314 Квантовохимическое обоснование синтеза наноразмерных частиц вольфраматсодержащих расплавов в условиях катионного катализа. **В.В. Соловьёв, Л.А. Черненко**

---

К 80-ЛЕТИЮ НИИ ХИМИИ И 100-ЛЕТИЮ Д. Н. ГРИЦАНА

---

- 320 Профессор Д. Н. Грицан – основатель научной школы химической электродики в научно-исследовательском институте химии харьковского национального университета имени В. Н. Каразина. **В. И. Ларин, В. Д. Калугин**

---

ПАМ'ЯТНІ ДАТИ І ВОСПОМИНАННЯ

---

- 330 Георгій Романович Виногоров (к 110-летию со дня рождения). ***И. Н. Вьюнник, А. В. Черный***
- 331 У истоков: Лев Самойлович Палатник (к 100-летию со дня рождения). ***Н. Т. Гладких***
- 334 Самуил Вениаминович Цукерман (к 100-летию со дня рождения). ***В. Д. Орлов***
- 336 Василий Степанович Черный (к 95-летию со дня рождения). ***А. П. Красноперова***
- 337 Любовь Лазаревна Спивак (к 90-летию со дня рождения). ***А. В. Кравчина, Л. Т. Лебедева, А. В. Черный***
- 338 Иван Устинович Мартынченко (к 105-летию со дня рождения) ***Л. П. Логинова, А. В. Черный***
- 

ХРОНИКА

---

- 340 Профессор Христиан Райхардт – почетный доктор Харьковского национального университета имени В. Каразина. ***Н. О. Мчедлов-Петросян***

## CONTENTS

---

### RESULTS AND PROSPECTS

---

- 11 Method of classical molecular dynamics: contribution to the foundations of statistical physics.  
**G. E. Norman, V. V. Stegailov**
- 

### THEORETICAL CHEMISTRY

---

- 52 Magnetic properties of non carbone nanotubes with macroscopic ground state spin.  
**V. O. Cheranovskii, A. A. Kravchenko**
- 58 Electrostatic aspects of adsorption on oxide surfaces. **V. V. Lobanov**
- 69 A theoretical study on the frequencies and forms of normal vibrations of oxygen-containing adsorption complexes on the (100) face of crystalline silicon. **M. I. Terebinska, V. V. Lobanov**
- 75 Microscopic structure of LiBF<sub>4</sub> solutions in cyclic and linear carbonates. **O. O. Postupna, Ya. V. Kolesnik, O. N. Kalugin**
- 88 A theoretical study on the nature of ionic associates in concentrated solutions of tetraalkylammonium salts in acetonitrile. **B. A. Marekha, E. V. Lukinova, O. N. Kalugin**
- 95 Molecular dynamic simulations of Ca<sup>2+</sup> and Ba<sup>2+</sup> complexes with 3-hydroxyflavone in acetonitrile. **V. N. Agieienko, O. N. Kalugin**
- 104 The chiral effects of  $\alpha$ -amino acid dimerization at the air/water interface in the framework of PM3 method. **E. S. Fomina, E. A. Belyaeva, Yu. B. Vysotsky**
- 117 Conformational analysis of tautomeric forms of the molecules of charged and neutral barbituric acid within the framework of the method PM3. **A. A. Shved**
- 

### ORGANIC CHEMISTRY AND SPECTROSCOPY

---

- 125 Molecular structure and spectral-fluorescent properties of the structurally rigid analogs of 2,6-distyrylpyridine. **O. V. Grygorovych, A. O. Doroshenko, S. M. Moskalenko, O. V. Nevskii, V. G. Pyvovarenko**
- 138 2,6-bis(5-phenyl-1,3-oxazol-2-yl)pyridine as fluorescent sensor for the heavy metals cations. **I. Yu. Sevrakov, V. V. Scherban, L. L. Lukatskaya, Z. A. Syzova, A. O. Doroshenko**
- 149 New aril- and hetarilsubstitutes of 2-pyrosoline: aldehyde derivatives of imidazole series. **V. N. Kotlyar, P. A. Pushkaryov, A. P. Shkumat, V. D. Orlov**
- 

### CHEMICAL ANALYSIS

---

- 157 Synthesis and sorption properties of inorganic monolithic sorbent on the basis of silica. **A. M. Frolova, A. P. Boichenko, O. Yu. Konovalova, L. P. Loginova**
- 166 Sample preparation methods for the atomic absorption detection of plumbum in oil products. **O. I. Yurchenko, N. P. Titova, G. V. Kobets**

- 172 Applying the method of capacity at the petrochemical jury test. **V. A. Rudnev, P. V. Karnozgickij**
- 

PHYSICAL CHEMISTRY OF SOLUTIONS

---

- 178 Electrical conductivity of Bu<sub>4</sub>NBr solutions in acetonitrile in the wide concentration range. **E. V. Lukinova, O. N. Kalugin**
- 185 Electrolytes for chemical current sources based on ionic liquids: 1-butyl-3-methylimidazolium bromide solutions in acetonitrile. **Iu. V. Voroshylova, E. A. Dakhova, O. N. Kalugin**
- 189 Electroconductivity and association of tetrabutylammonium tetraphenylborate in propylene carbonate and 1,2-dimethoxyethane mixtures. **T. V. Chernozhuk, V. Yu. Dubovitskaya, O. N. Kalugin**
- 194 Association of two-charged bromocresol green anion with cyanine cations in aqueous solutions. **S. A. Shapovalov, Ya. S. Kiseliova**
- 199 Viscosity and the thermodynamics of the viscous flow of the system "Water – N-Methylpyrrolidone". **E. P. Bezuglaya, N. A. Lyapunov, A. P. Krasnoporyova, G. D. Yukhno, A. V. Cherny**
- 208 Interaction between complex ferrum-cyanide ions and polymethine cations in aqueous solutions. **E. A. Samoilov**
- 

CHEMISTRY OF COMPLEX COMPOUNDS

---

- 213 Thermal and spectral properties of new mixed-ligand complexes of transition metals with 1,3-dithiole-2-thione-4,5-dithiolate (dmit) and heterocyclic diamines. **S. V. Vitushkina, V. A. Starodub**
- 222 Особенности поведения изотритиондителиолатоцинката тетрабутиламмония в магнитном поле. **G. Y. Vasilets, D. L. Kamenskyi, E. P. Nikolova, M. Kajnakova**
- 

SURFACE CHEMISTRY

---

- 226 Adsorption-electrochemical formation of spatial structures in «active carbon – noble metal» system. **Yu. A. Tarasenko, I. P. Gerasymyuk, N. E. Evtushenko, G. O. Kaleniuk, V. E. Klimenko, V. S. Kuts, V. F. Lapko, A. O. Lysenko**
- 240 Accumulation of heavy metals by biohumus. **V. Mank, V. Galimova, I. Surovscev**
- 

ELECTROCHEMISTRY

---

- 245 Peculiarities of  $\alpha$ -brass behaviour in solutions with different compositions. **V. I. Larin, L. M. Egorova, E. B. Khobotova, M. A. Dobriyan, O. I. Yurchenko**
- 253 Corrosion of aluminum and its alloys in solutions of sodium hydroxide. **T. S. Lukashuk, V. I. Larin**
- 259 Peculiarity of electroreduction processes of complex ions of boron and silicon from chloride-fluoride melts. **Z. M. Protsenko**

---

YOUTH ELECTROCHEMICAL FORUM

---

- 265 Electrochemical formation of the structure of functional gold deposits from ferrocyanide electrolyte. **O. L. Bersirova, V. A. Gerasimenko, V. S. Kublanovsky**
- 270 The activation energy in the case of electroreduction of *bis*(iminodiacetate)palladium (II) complexes. **V. Kublanovsky, V. Nikitenko, K. Rudenko**
- 277 Electrochemical ozone synthesis in solutions of HClO<sub>4</sub> on PbO<sub>2</sub>/SnO<sub>2</sub>-anode. **A. K. Bolvako, A. A. Chernik, I. M. Zharsky**
- 281 Electrochemical behavior and galvanochemical processing of electrode materials based on compacts made from synthetic diamonds of different nature and dispersity in aqueous electrolytes. **E. N. Fedoryshena, E. P. Nakoneshnaya, I. A. Novoselova**
- 285 Nanostructured CdSe-electrode for photoelectrochemical conversions. **T. S. Pogrebnyak, G. Ya. Kolbasov**
- 288 Corrosion-electrochemical properties and structure of Al-Zn-Ca alloys micro-doped by vanadium. **J. Rudenko, V. Shvets, V. Talash, V. Lavrenko**
- 292 The structure of nickel electroplated coatings obtained from methanesulfonic electrolytes and their physic-mechanic properties. **I. V. Sknar, A. S. Baskevich, F. I. Danilov**
- 296 Photoelectrochemical system for hydrogen accumulation. **I. A. Slobodyanyuk, L. G. Scherbakova, G. Ya. Kolbasov, I. A. Rusetskii**
- 299 Electrochromic properties of cathodic films based on oxides of W, Ni and Nb. **S. S. Fomanuk, Yu. S. Krasnov, G. Ya. Kolbasov, V. N. Zaichenko**
- 305 Final oxydation of the surface of Fe-based amorphous alloys by inorganic anions. **O. M. Hertsyk, L. M. Bednarska, N. L. Pandiak, A. O. Lema**
- 310 Modelling the influence of solvation effects on one-electronic charge transfer in electrode reactions exemplified by molybdate containing melts. **V. V. Soloviev, E. F. But**
- 314 The quantum chemical ground of the synthesis of the tungstate melts nano-size particles in the conditions of the cationic catalysis. **V. V. Soloviev, L. O. Chernenko**

---

TO THE 80-th ANNIVERSARY OF RESEARCH INSTITUTE OF CHEMISTRY  
AND 100-th ANNIVERSARY OF D. N. GRITSAN

---

- 320 Professor D. N. Gritsan – the founder of the scientific school on the chemical electrode processes at the Research Institute of Chemistry, V. Karazin Kharkiv National University. **V. I. Larin, V. D. Kalugin**
- 

MEMORIA

---

- 330 G. R. Vinogorov (to the 100-th anniversary of birth). **I. N. V'yunnik, A. V. Cherniy**
- 331 At origins: L. S. Palatnik (to the 100-th anniversary of birth). **N. T. Gladkih**
- 334 S. V. Tsukerman (to the 100-th anniversary of birth). **V. D. Orlov**
- 336 V. S. Cherniy (to the 95-th anniversary of birth). **A. P. Krasnoperova**
- 337 L. L. Spivak (to the 90-th anniversary of birth). **A. V. Kravchina, L. T. Lebedeva, A. V. Cherniy**

338 I. U. Martinchenko (to the 105-th anniversary of birth) ***L. P. Loginova, A. V. Cherniy***

---

CHRONICLE

---

340 Professor Christian Reichardt – Doctor Honoris Causa of V. Karazin Kharkov National University. ***N. O. Mchedlov-Petrosyan***