

Журнал издается одновременно на русском («Известия Академии наук. Серия химическая») и английском («Russian Chemical Bulletin») языках. Подробную информацию о журнале, содержания номеров журнала в графической форме и аннотации статей, а также годовые предметные и авторские указатели можно получить в Интернете по адресу: <http://russchembull.ru>

The Journal is published in Russian and English.

The International Edition is published under the title "Russian Chemical Bulletin" by Springer:  
233 Spring St., New York, NY 10013, USA. Tel.: 212 460 1572. Fax: 212 647 1898.

Detailed information concerning the journal, contents of issues with graphical and text abstracts, as well as annual subject and author indices can be found in the Internet at <http://russchembull.ru>

## Содержание

Валерий Петрович Шibaев (к восьмидесятилетию со дня рождения)

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, x

Геннадий Петрович Швейкин (к девяностолетию со дня рождения)

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, xi

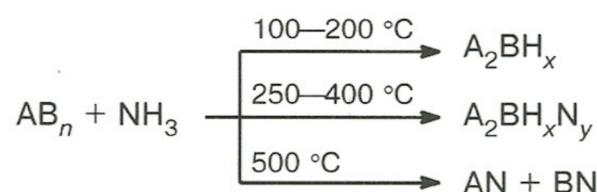
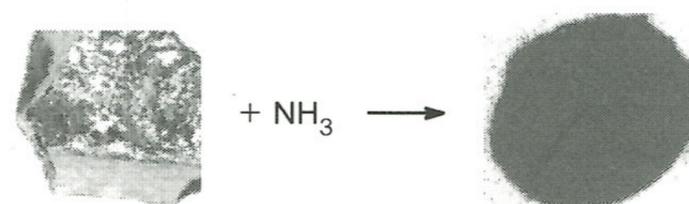
Выпуск 8 2016 г. составлен из статей сотрудников Института проблем химической физики и приурочен к 60-летию со дня основания Института.

## Обзоры

Диспергирование и фазовые превращения при взаимодействии с аммиаком интерметаллических соединений и сплавов Ti, Zr и Y с железом и никелем

Б. П. Тарасов, Э. Э. Фокина,  
В. Н. Фокин

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1887

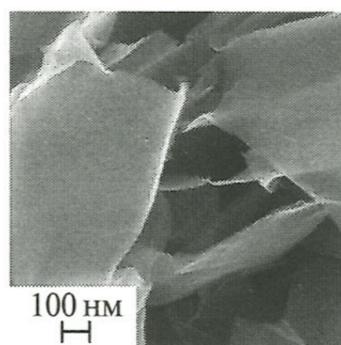


Синтез графеноподобных наноструктур и формирование на их основе катализаторов и водород-аккумулирующих композитов

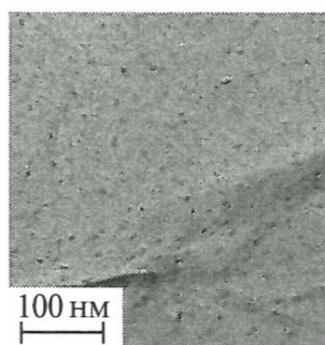
А. А. Арбузов, С. А. Можжухин,  
А. А. Володин, П. В. Фурсиков,  
Б. П. Тарасов

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1893

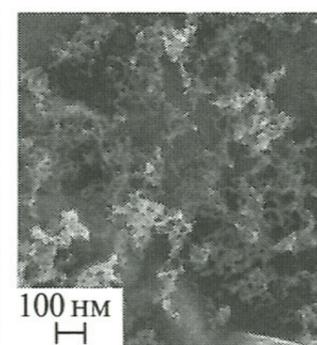
Графеноподобный материал



Ni наночастицы на графеновом материале



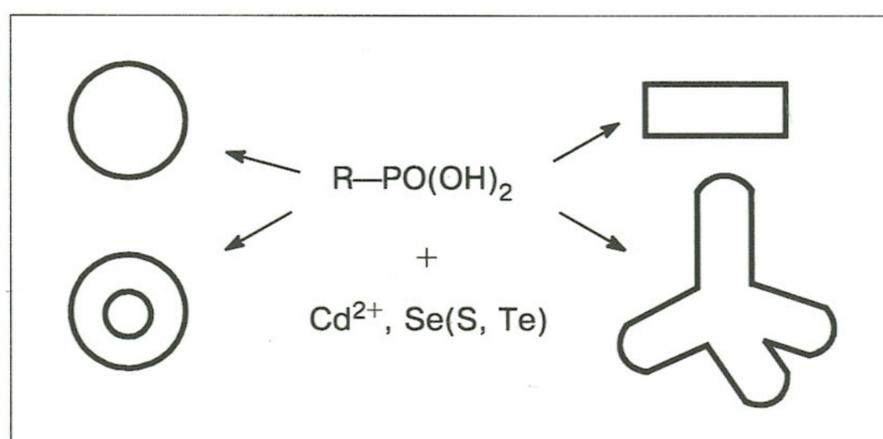
Углеродные наночастицы, синтезированные на поверхности графенового материала



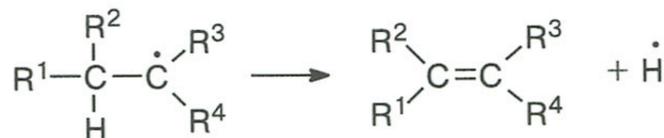
Фосфоновые кислоты как стабилизирующие лиганды для коллоидных квантовых точек халькогенидов кадмия

М. Г. Спиринов, С. Б. Бричкин,  
В. Ф. Разумов

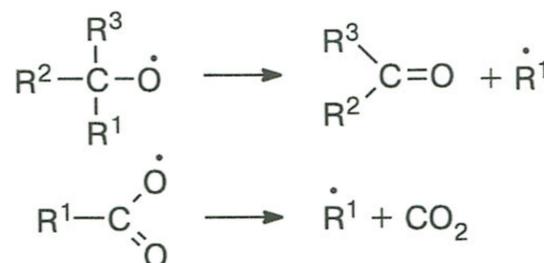
Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1902



Факторы, влияющие на энергетику и геометрию переходного состояния при распаде радикалов

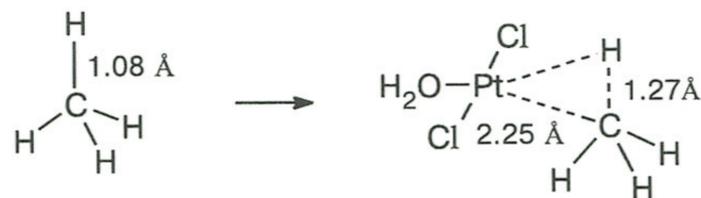


Е. Т. Денисов, Т. С. Покидова



Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1910

Координационная активация метана и других алканов на комплексах металлов



А. А. Штейнман

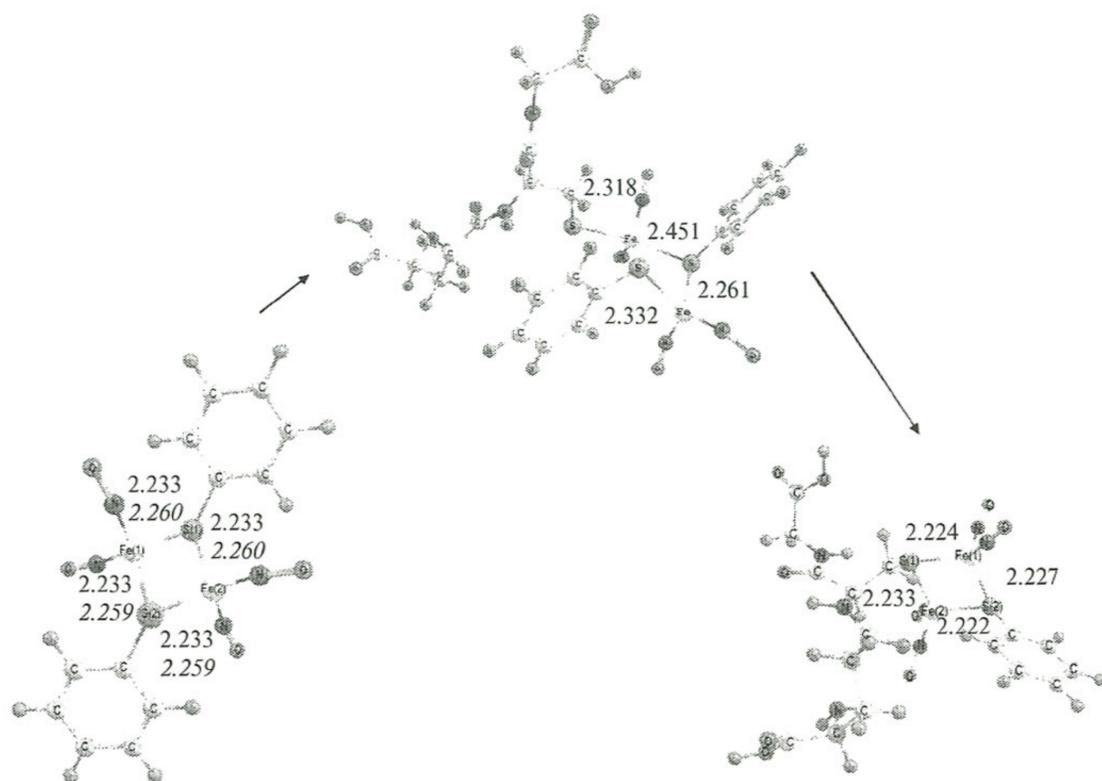
Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1930



### Полные статьи

Квантово-химические подходы к изучению связи Fe—S в эфирах Руссена: реакция замещения функциональных лигандов на глутатион

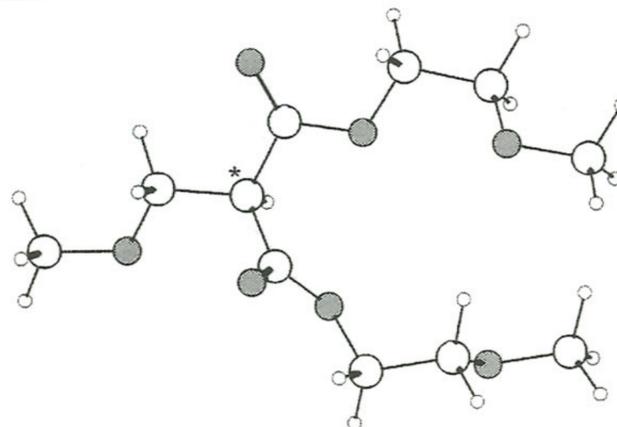
Н. С. Емельянова, Н. А. Санина,  
С. М. Алдошин



Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1945

Квантово-химическое моделирование деградации полимерной матрицы и молекул растворителя нанокompозитных полимерных гель-электролитов

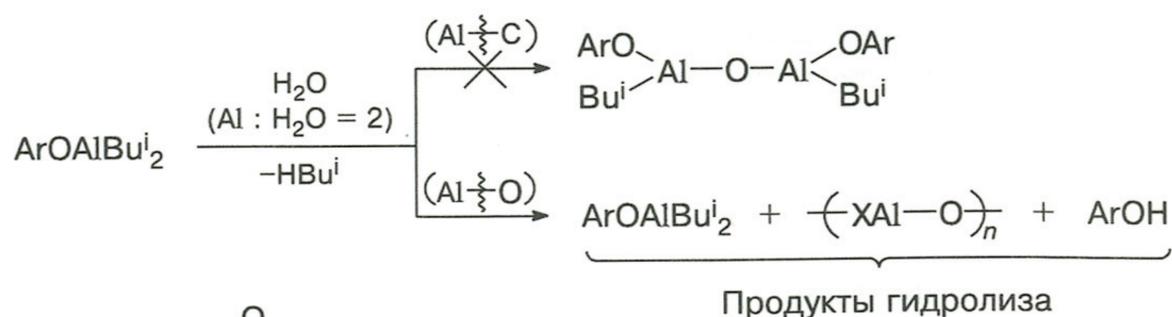
Г. З. Тулибаева, А. Ф. Шестаков,  
А. В. Черняк, В. И. Волков,  
К. Г. Хатмуллина, А. В. Юдина,  
А. А. Игнатова, О. В. Ярмоленко



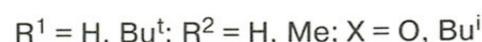
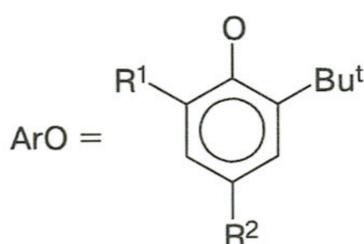
Фрагмент новой цепи полимера с третичным атомом углерода, который соседствует с двумя карбоксильными группами.

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1951

Исследование гидролиза арилоксидов изобутилалюминия методами ЯМР  $^1H$  и квантовой химии



Е. Е. Файнгольд, И. В. Жарков,  
Н. М. Бравая, А. В. Черняк

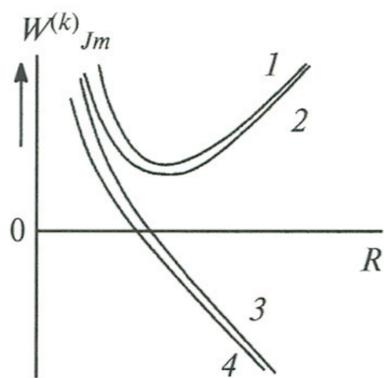


Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1958

**Релятивистский эффект Яна—Теллера  $G_g[3/2] \times (t_{2g} + e_g)$  в кубических и октаэдрических молекулах**

Л. В. Полуянов, В. М. Волохов

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1966



Качественный вид одномерных сечений бирадиальных потенциальных поверхностей вдоль линии  $r^*R = rR^*$ :  $W^{(1)}$  (1),  $W^{(2)}$  (2),  $W^{(3)}$  (3),  $W^{(4)}$  (4).

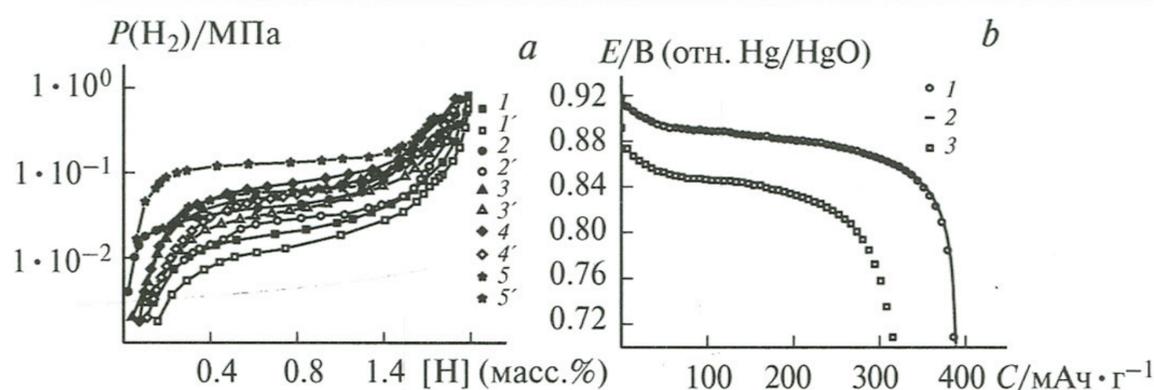
$$W_{Jm}^{(K)}(R, r) = \frac{\hbar^2}{2M_t} \frac{(J+0.5)^2}{2M_t} \frac{(J+0.5)^2}{R^2} + \frac{\hbar^2}{2M_e} \frac{m^2}{r^2} + \Lambda_{Jm}^{(K)}(R, r),$$

$k = 1-4$

**Водородсорбционные и электрохимические свойства интерметаллических соединений  $La_2MgNi_9$  и  $La_{1.9}Mg_{1.1}Ni_9$**

В. Б. Сон, А. А. Володин, Р. В. Денис, В. А. Яртысь, Б. П. Тарасов

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1971



(a) Изотермы абсорбции и десорбции в системе  $La_{1.9}Mg_{1.1}Ni_9-H_2$ : абсорбция (1) и десорбция при 303 К (1'); абсорбция (2) и десорбция при 313 К (2'); абсорбция (3) и десорбция при 323 К (3'); абсорбция (4) и десорбция при 333 К (4'); абсорбция (5) и десорбция при 343 К (5'); (b) удельная емкость электродов со сплавами  $La_2MgNi_9$  (1),  $La_{1.9}Mg_{1.1}Ni_9$  (2) и  $LaNi_5$  (3) при 293 К и плотности тока разряда  $60 \text{ mA} \cdot \text{г}^{-1}$ .

**Энтальпии образования и перестройки ароматических радикалов**

Е. А. Мирошниченко, Л. Л. Пашенко, Т. С. Конькова, Ю. Н. Матюшин, А. А. Берлин

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1977

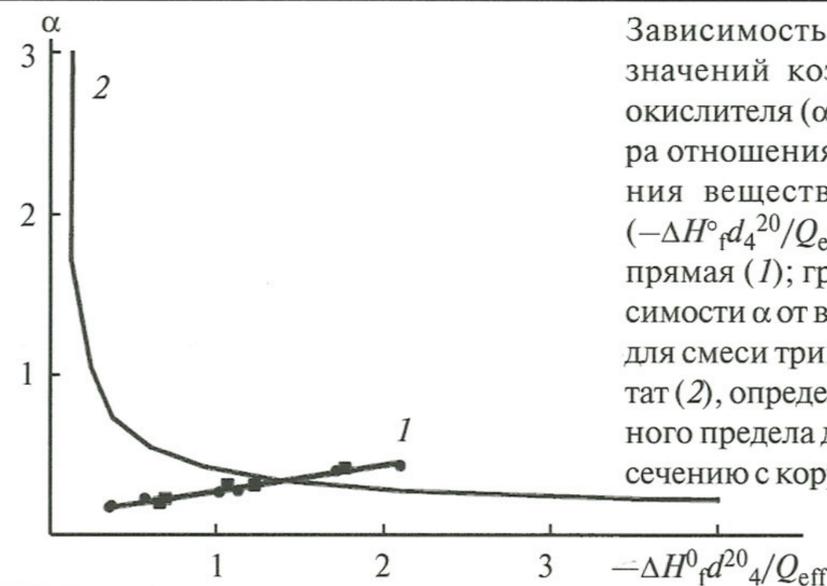
$$D(R_1-R_2) = \Delta_f H^\circ(R_1^\bullet) + \Delta_f H^\circ(R_2^\bullet) - \Delta_f H^\circ(R_1R_2)$$

$D$  — энергия диссоциации связи

**Вычисление концентрационных пределов детонации жидких гомогенных взрывчатых систем**

В. А. Гаранин, В. А. Дубовицкий, Д. А. Нестеренко, Л. Б. Романова

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1981

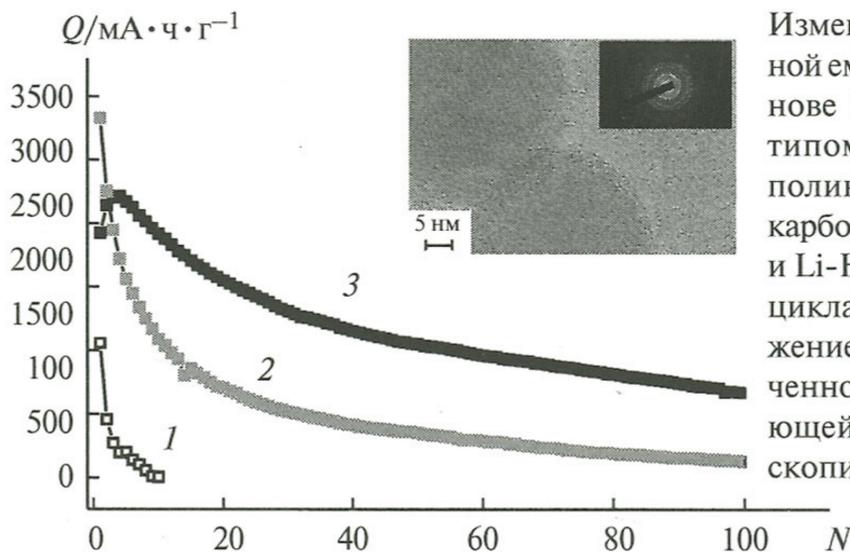


Зависимость экспериментальных значений коэффициента избытка окислителя ( $\alpha$ ) от значения параметра отношения энтальпии образования вещества к энергии взрыва ( $-\Delta H^0_f d_4^{20} / Q_{\text{eff}}$ ) и корреляционная прямая (1); график расчетной зависимости  $\alpha$  от величины  $-\Delta H^0_f d_4^{20} / Q_{\text{eff}}$  для смеси тринитротетан—этилацетат (2), определение концентрационного предела детонации по его пересечению с корреляционной прямой.

**Влияние типа связующего на стабильность тонкопленочных анодов на основе наночастиц  $Si@SiO_2$  для литий-ионных аккумуляторов**

Е. Ю. Евщик, Д. В. Новиков, В. И. Берестенко, А. В. Левченко, Е. А. Сангинов, Ю. А. Добровольский

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1986

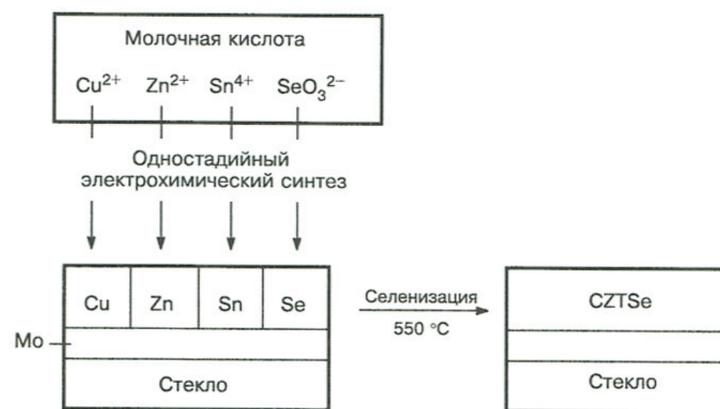


Изменение разрядной удельной емкости ( $Q$ ) анодов на основе  $Si@SiO_2$  с различным типом связующего агента: поливинилиденфторид (1), карбоксиметилцеллюлоза (2) и Li-Нафион (3);  $N$  — номер цикла. На вставке — изображение частиц кремния, полученное методом просвечивающей электронной микроскопии.

### Одностадийный электрохимический синтез из растворов, содержащих молочную кислоту, слоев Cu—Zn—Sn—Se — предшественников поглощающих пленок

В. В. Ракитин, М. В. Гапанович,  
Г. Ф. Новиков

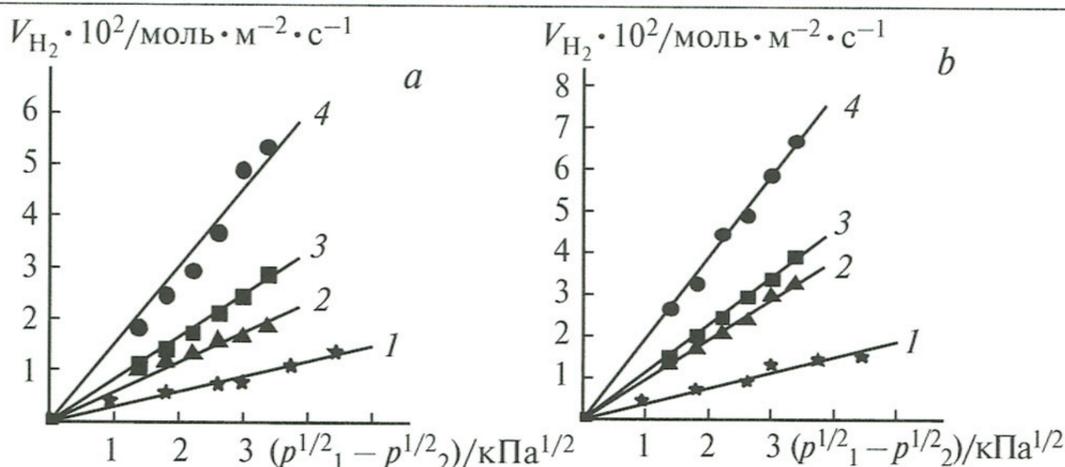
Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1990



### Разделительные свойства фольги из сплавов Pd—In(6%)—Ru(0.5%), Pd—Ru(6%) и Pd—Ru(10%) и влияние CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> и водяного пара на скорость потока H<sub>2</sub> через исследуемые мембраны

Л. П. Диденко, Л. А. Семенцова,  
П. Е. Чижов, В. Н. Бабак,  
В. И. Савченко

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 1997

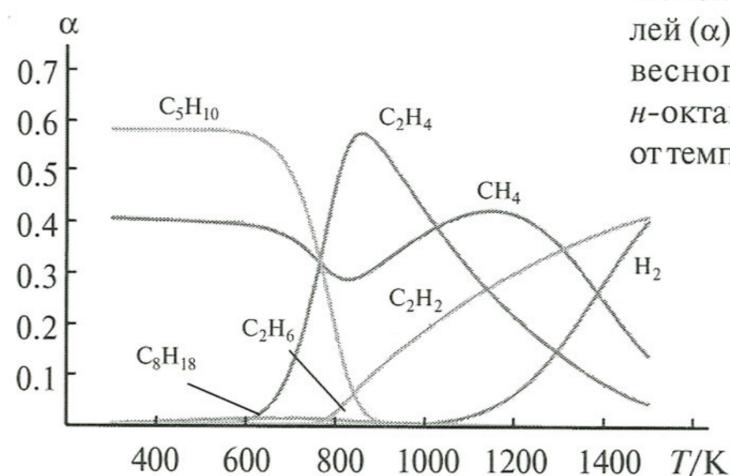


Зависимость скорости потока водорода ( $V_{H_2}$ ) от разности квадратных корней из величин парциального давления водорода на палладиевых мембранах с различными легирующими добавками при 673 (а) и 773 К (б): 1 — Pd—Ag(23%), 2 — Pd—Ru(6%), 3 — Pd—Ru(10%), 4 — Pd—In(6%)—Ru(0.5%).

### Моделирование процессов термического разложения углеводородных топлив в обогреваемых каналах

И. С. Аверьков, А. В. Байков,  
Л. С. Яновский, В. М. Волохов,  
А. В. Волохов

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2004

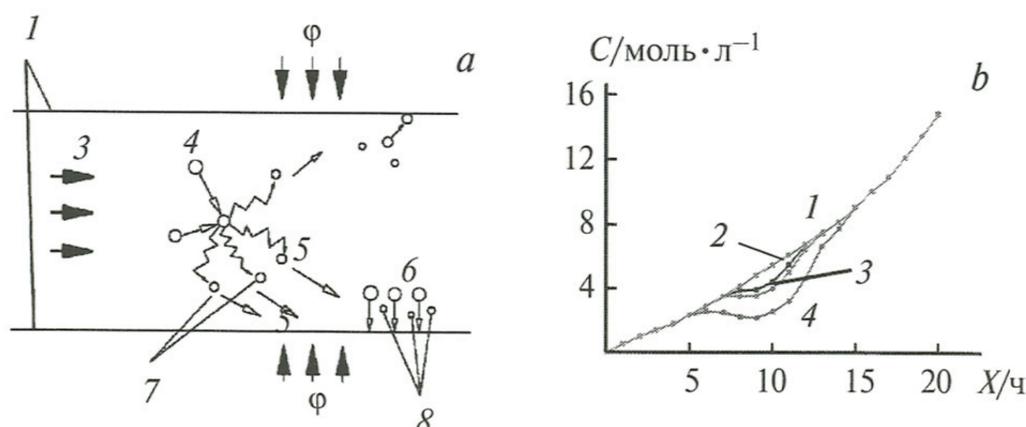


Изменение мольных долей ( $\alpha$ ) продуктов равновесного разложения *n*-октана в зависимости от температуры.

### Особенности окисления модельного углеводородного топлива в канале под воздействием электростатического поля

П. Д. Токталиев, С. И. Мартыненко,  
Л. С. Яновский, В. М. Волохов,  
А. В. Волохов

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2011

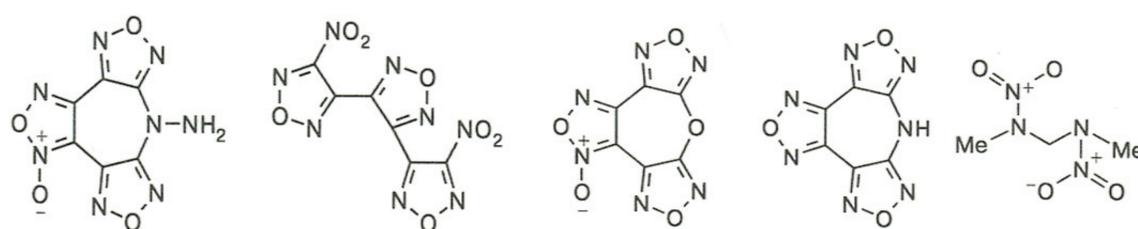


(а) Упрощенная схема процесса образования отложений: 1 — стенки, 2 — каталитические реакции на поверхности, 3 — течение, 4 — химические реакции, 5 — воздействие электромагнитного поля, 6 — продукты, 7 — радикалы, 8 — электронная компонента. (б) Зависимости количества образовавшихся предвестников кокса от разности потенциалов между электродами; приведены данные по 20 сечениям;  $Re = 4000$ ,  $T_{in} = 400$  К, установившийся режим;  $V = 0$  (1), 75 (2), 150 (3) и 200 В (4);  $X/h$  — безразмерная координата, ось  $OX$  направлена вдоль канала,  $h$  — ширина канала.

### Энергетические возможности смесевых твердых ракетных топлив на основе бимолекулярных кристаллов, содержащих CL-20

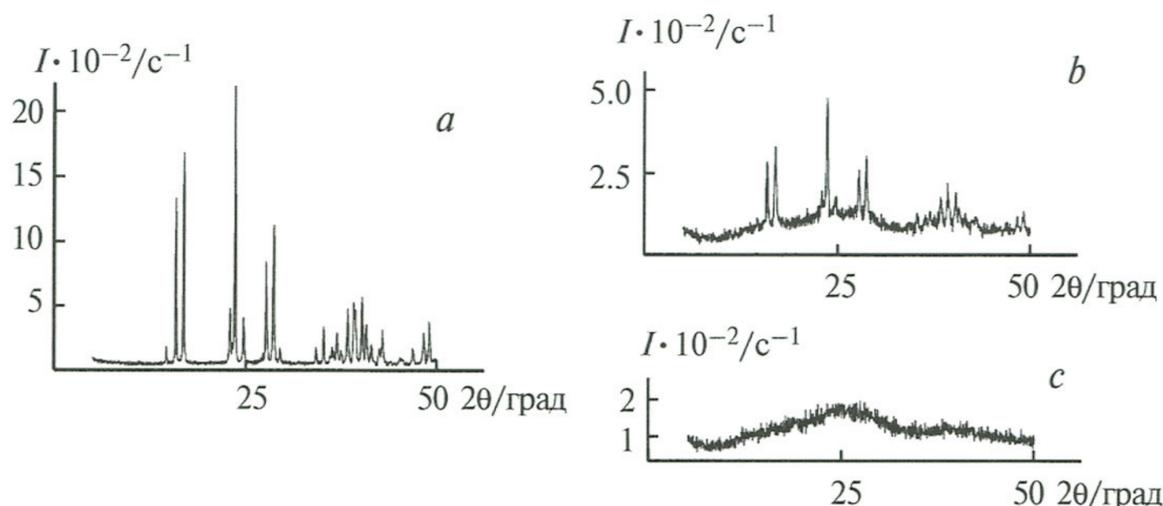
С. М. Алдошин, Д. Б. Лемперт,  
Т. К. Гончаров, А. И. Казаков,  
С. И. Согласнова, Е. М. Дорофеев,  
Н. А. Плишкин

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2018



### Механохимическое разрушение кристаллогидратов ацетилендикарбоксилатов кобальта и цинка при дегидратации

Н. Н. Волкова, Г. И. Джардималиева,  
Б. Э. Крисюк, Н. В. Чуканов,  
В. А. Шершнев, Г. В. Шилов

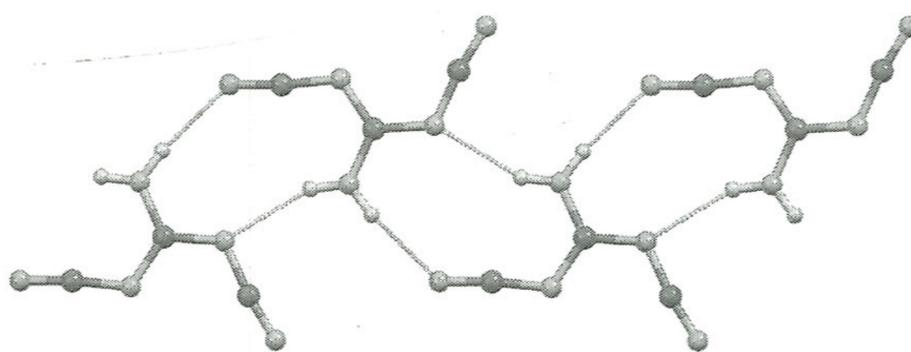


Порошковые рентгеновские дифрактограммы  $\text{ZnADC} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  (a) и продуктов разложения  $\text{ZnADC} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  на стадиях, соответствующих потере массы 12% (b) и 18% (c).

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2025

### Первая катион-радикальная соль бис(этиленди-тио)тетрагидрофульвалена с органическим анионом $[\text{C}(\text{NCN})_2\text{NH}_2]^-$ : синтез, структура и проводящие свойства

Н. Д. Куш, Н. Г. Спицына,  
А. М. Колесникова, С. В. Симонов

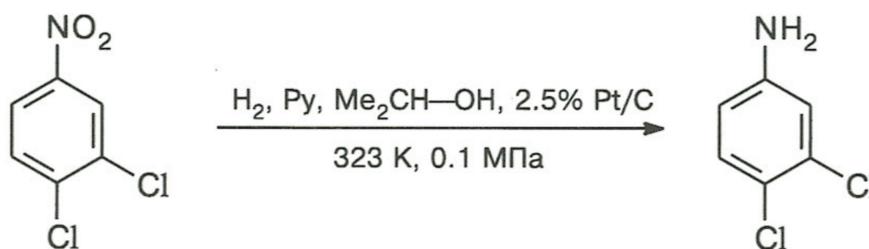


Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2034

### Исследование жидкофазного каталитического гидрирования 3,4-дихлорнитробензола в присутствии пиридина в безградиентном проточном режиме на катализаторе Pt/C

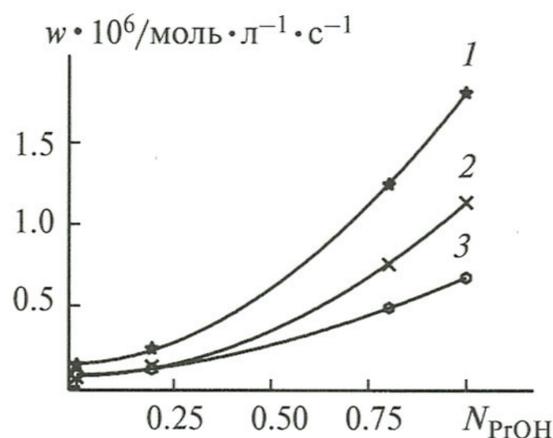
В. Г. Дорохов, Г. Ф. Дорохова,  
В. И. Савченко

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2040



### Влияние состава бинарного растворителя хлорбензол—пропанол на механизм реакции $N,N'$ -дифенил-1,4-бензохинондиимина с тиофенолом

В. Т. Варламов, А. В. Гадомская



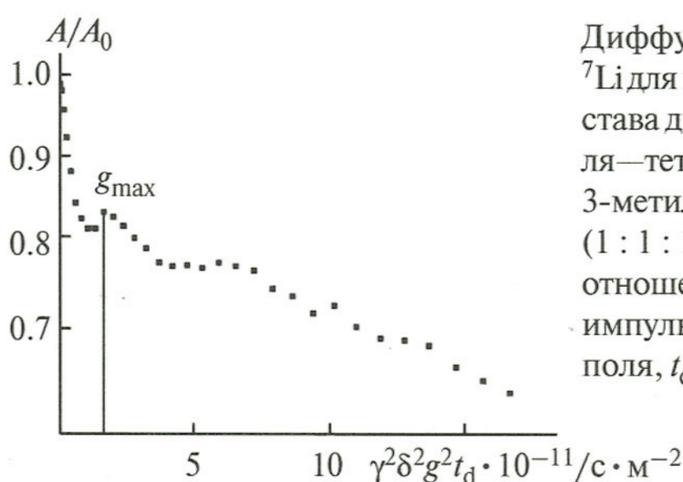
Зависимость скорости реакции  $N,N'$ -дифенил-1,4-бензохинондиимина с тиофенолом от содержания пропанола ( $N_{\text{PrOH}}$ ) в бинарном растворителе хлорбензол—*n*-пропанол: суммарная (1), нецепная (2) и цепная реакция (3).

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2046

### Влияние структуры сетчатого полимерного геле-электролита на ионную и молекулярную подвижность электролитной системы соль $\text{LiBF}_4$ —ионная жидкость 3-метил-1-этил-имидазолий-тетрафторборат

А. В. Черняк, М. П. Березин,  
Н. А. Слесаренко, В. А. Забродин,  
В. И. Волков, А. В. Юдина,  
Н. И. Шувалова, О. В. Ярмоленко

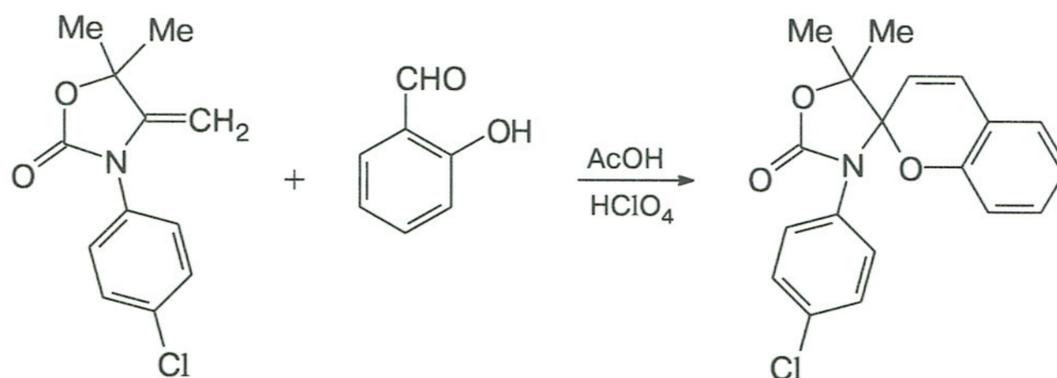
Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2053



Диффузионное затухание на ядрах  $^7\text{Li}$  для полимерного электролита состава диакрилат полиэтиленгликоля—тетрафторборат лития—1-этил-3-метил-имидазолийтетрафторборат (1 : 1 : 1, мол.);  $\gamma$  — гиромагнитное отношение,  $\delta$  — длина градиентного импульса,  $g$  — градиент магнитного поля,  $t_d$  — время диффузии.

### Изучение строения спиропиранов на основе 1,3-оксазолидина

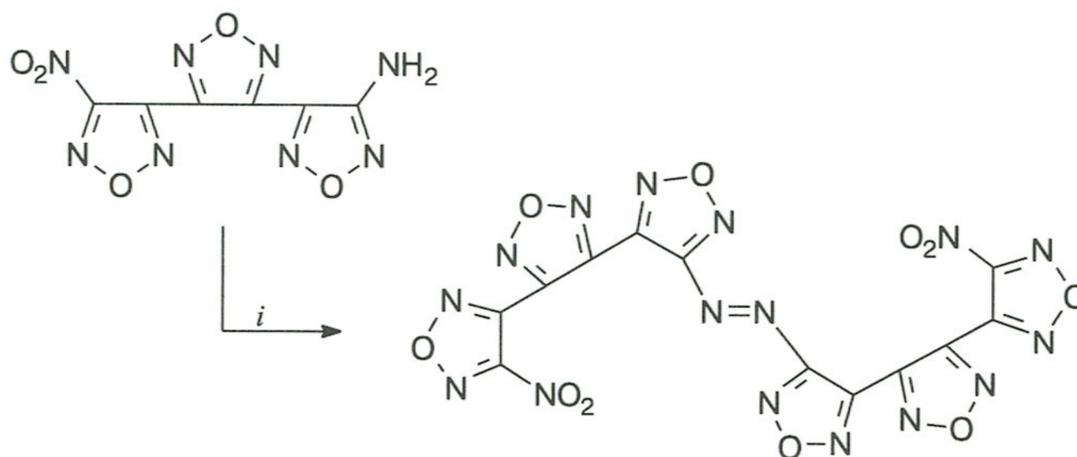
Б. С. Лукьянов, В. В. Ткачев,  
М. Б. Лукьянова, А. Н. Утенышев,  
Р. В. Тюрин, М. С. Коробов,  
С. М. Алдошин



Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2059

### Новое энергоемкое соединение — бис(4''-нитро-[3,3':4',3'']трифуразан-4-ил)диазен

А. И. Степанов, В. С. Санников,  
Д. В. Дашко, А. Г. Росляков,  
А. А. Астратъев, З. Г. Алиев,  
Т. К. Гончаров, С. М. Алдошин

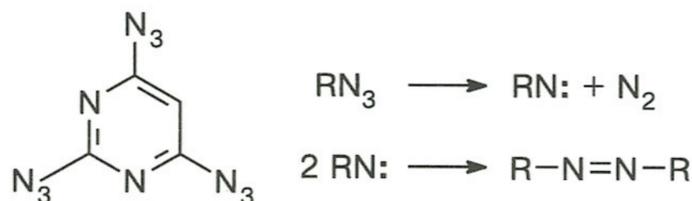


Реагенты и условия: *i*. AcOH, H<sub>2</sub>O, HCl, KMnO<sub>4</sub>.

Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2063

### Термическое разложение 2,4,6-триазидопиримидина в расплаве

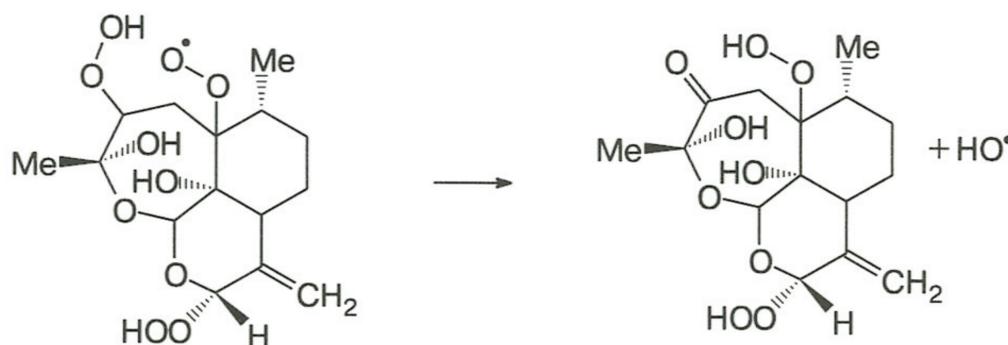
В. В. Неделько, Б. Л. Корсунский,  
Т. С. Ларикова, С. В. Чапышев,  
Н. В. Чуканов, Шу Юаньцзе



Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2068

### Кинетический анализ генерирования радикалов перокси-, гидрокси- и алкоксипроизводными 10-дигидроартемизинина

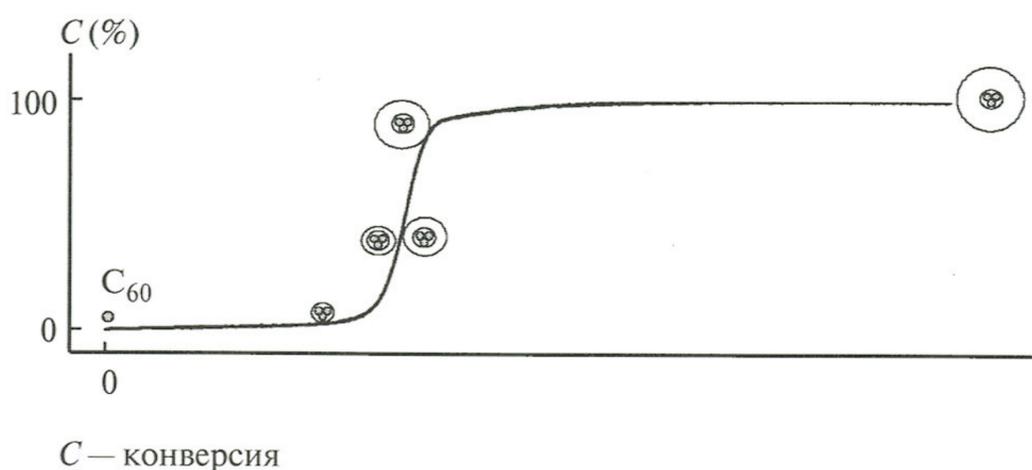
Е. Т. Денисов, Т. Г. Денисов



Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2072

### Формирование звездообразных водорастворимых полимерных структур в процессе радикальной полимеризации *N*-изопропилакриламида в присутствии C<sub>60</sub>

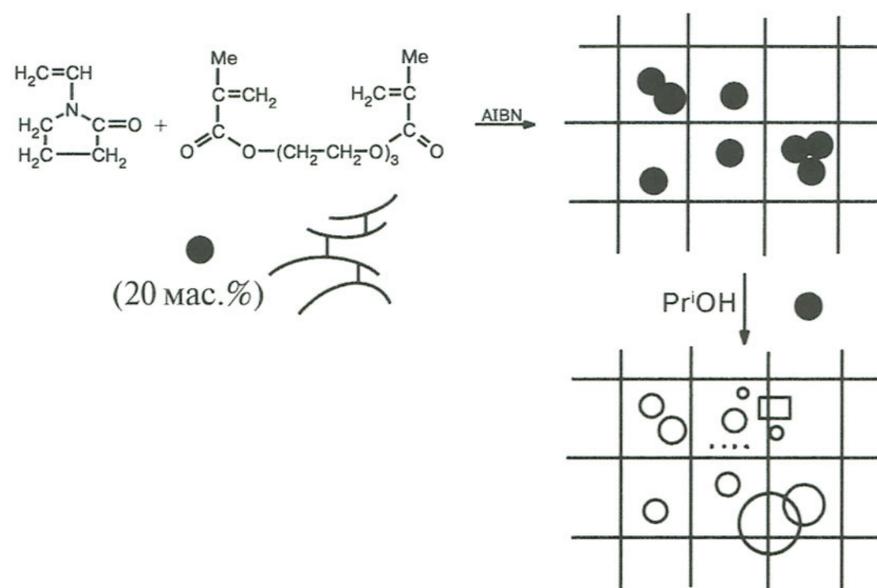
Е. Г. Атовмян, А. А. Грищук,  
Г. А. Эстрина, Я. И. Эстрин



Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2082

### Новые полимерные материалы на основе *N*-винилпирролидона с регулируемой нанопористой структурой

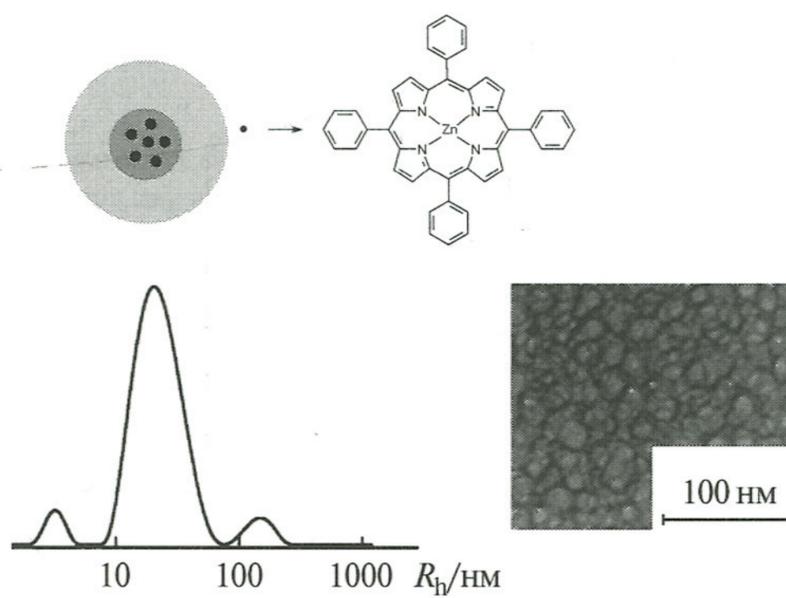
Н. В. Фадеева, С. В. Курмаз,  
Е. И. Кнерельман, Г. И. Давыдова,  
В. И. Торбов, Н. Н. Дремова



Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2089

### Получение полимерных наночастиц амфифильного сополимера *N*-винилпирролидона с диметакрилатом триэтиленгликоля и исследование их свойств *in vitro*

С. В. Курмаз, Н. А. Образцова,  
А. А. Балакина, А. А. Терентьев



Изв. АН. Сер. хим., 2016, № 8, 2097