

ВЕСТНИК

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Серия 4 | 2011 | ФИЗИКА
Выпуск 1 | Март | ХИМИЯ

НАУЧНО-ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ. ИЗДАЁТСЯ С АВГУСТА 1946 ГОДА

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

- Хайдаров Г. Г., Хайдаров А. Г., Машек А. Ч.* Физическая природа
поверхностного натяжения жидкости 3
- Габдулсадыкова Г. Ф., Усольцева Н. В., Жарова М. А., Соцкий В. В.* Мезоморфизм
и надмолекулярная организация СТ-комплексов производных бензоламина
с акцепторами электронов 9
- Никитченко А. Н.* Построение изображения рассеивающих объектов
по данным межскважинных наблюдений 17
- Пучков А. М.* Метод вычисления матричных элементов для уравнения Дирака
в кулоновском поле 24
- Неверов В. С., Комолкин А. В., Волкова Т. Г.* Исследование влияния структурной
изомерии на молекулярную подвижность жидких кристаллов методом
молекулярной динамики 34

ХИМИЯ

- Бахшиев Н. Г., Аюпян С. Х.* К 50-летию создания межкафедральной
лаборатории спектроскопии 54
- Панов М. Ю.* Об использовании термодинамических активностей
в химической кинетике 67
- Кучек А. Э., Васютин О. А., Кашкаров А. А., Грибанова Е. В., Шуткевич В. В.*
Влияние модификации поверхности марганец-цинковой феррошпинели
на её адсорбционные свойства 75
- Уколов А. И., Зенкевич И. Г.* Установление структуры изомерных алкиларенов
с использованием аддитивных схем оценки газохроматографических
индексов удерживания 83



САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ОСНОВАН В 1724 ГОДУ
1824 – ГОД ВЫХОДА В СВЕТ ПЕРВОГО ИЗДАНИЯ УНИВЕРСИТЕТА

© Авторы статей, 2011

© Издательство
Санкт-Петербургского
университета, 2011

<i>Москвин А. Л., Мельниченко А. Н., Диченко О. Ю., Москвин Л. Н.</i> Влияние структуры массообменных матриц и фазоразделительных мембран на «эффект памяти» хроматомембранных ячеек в парофазном анализе	94
<i>Бессонова Е. А., Поликарпов Н. А., Карцова Л. А., Потоллицына В. Е.</i> Исследование возможностей новых сверхразветвлённых полимеров в качестве псевдостационарных фаз в электрокинетической хроматографии при определении белков	103

КРАТКИЕ НАУЧНЫЕ СООБЩЕНИЯ

<i>Беляев В. Б., Зандхас В., Шлык И. И.</i> Малочастичные мезон-ядерные кластеры .	110
<i>Зайцев С. А., Попов Ю. В., Кныр В. А.</i> Решение задачи двукратной ионизации атома гелия быстрым электроном в <i>J</i> -матричном подходе	115
<i>Шеляпина М. Г., Сирецкий М. Ю., Харченко К. А., Скрябина Н. Е., Фрюшар Д.</i> Неэмпирические расчёты стабильности гидридов интерметаллических соединений — материалов для хранения водорода	120
<i>Казаров А. Г., Колос С. Е., Рябов Ю. Ф., Соловьёв И. Б.</i> Организация управляющего программного обеспечения системы сбора данных эксперимента АТЛАС	124
<i>Смосарева И. В., Козин А. О., Деметьев И. А., Кондратьев Ю. В.</i> Калориметрическое определение энтальпии сублимации тетратрифторацетата димолибдена(II) и тетраформиата димолибдена(II)	129
<i>Морозов П. Е., Власова М. В., Порецкий М. С., Земцова Е. Г., Цыганенко А. А., Смирнов В. М.</i> Особенности протекания химических реакций при синтезе методом ML-ALD квазиодномерных наноструктур на поверхности кремнезёма	133
<i>Арбенин А. Ю., Земцова Е. Г., Мужжонен И. Н., Смирнов В. М.</i> Синтез ферромагнитного материала с упорядоченной системой железных наночастиц на основе мезопористого кремнезёма	136
РЕФЕРАТЫ	141
ABSTRACTS	146
CONTENTS	149
СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ	150

РЕФЕРАТЫ

УДК 532.61

Хайдаров Г. Г., Хайдаров А. Г., Машек А. Ч. **Физическая природа поверхностного натяжения жидкости** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 3–8.

Доказано, что физическое понятие поверхностного натяжения жидкости является частью понятия внутренней энергии. Предложена физическая модель испарения жидкости. Выведена формула для расчёта коэффициента поверхностного натяжения жидкости. Формула была проверена на справочных значениях для 64 веществ в пределах температур от -253 до $+200$ градусов Цельсия. Дана единая концепция для физических понятий — поверхностное натяжение и внутренняя энергия жидкости. Выводы согласуются со взглядами других авторов. Физическая модель определяет связь и расчётные формулы для значений теплоёмкостей одно-, двухатомных газов. Библиогр. 7 назв. Табл. 1.

Ключевые слова: поверхностное натяжение, внутренняя энергия, теплоёмкость, газ, молекула, теплота парообразования, жидкость.

УДК 532.783:004.94

Габдулсадыкова Г. Ф., Усольцева Н. В., Жарова М. А., Соцкий В. В. **Мезоморфизм и надмолекулярная организация СТ-комплексов производных бензоламина с акцепторами электронов** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 9–16.

Исследованы мезоморфные свойства СТ-комплексов двух замещённых производных бензоламина. Проведены численные эксперименты для построения структурных моделей комплексов с переносом заряда одного из исследуемых соединений и двух акцепторов электронов — TNF и (-)-ТАРА. Библиогр. 9 назв. Ил. 7. Табл. 2.

Ключевые слова: мезоморфные свойства, комплекс с переносом заряда (СТ-комплекс), акцептор электронов, молекулярный докинг.

УДК 550.34.012, 550.34.062, 550.34.013.4

Никитченко А. Н. **Построение изображения рассеивающих объектов по данным межскважинных наблюдений** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 17–23.

Предложена методика построения изображения рассеивающих объектов по данным межскважинных наблюдений, основанная на векторной миграции Кирхгофа со специальными весовыми функциями. Рассмотрены различные методы диагностики мигрированных изображений. Обсуждаются результаты применения методики к синтетическим данным. Библиогр. 9 назв. Ил. 4.

Ключевые слова: векторная миграция, весовая функция, изображение, дифракция, межскважинные наблюдения.

УДК 539.192

Пучков А. М. **Метод вычисления матричных элементов для уравнения Дирака в кулоновском поле** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 24–33.

Предложен метод вычисления матричных элементов для уравнения Дирака в кулоновском поле, основанный на вириальных соотношениях. Установлена связь вириальных соотношений с матрицами. Найден явный вид матриц для прямой и обратной рекурсии, что позволило решить проблему отрицательных степеней. На примере вычисления вероятностей запрещённых $M1$ -переходов показано, как надо применять этот метод к конкретным задачам. Библиогр. 17 назв.

Ключевые слова: вириальные соотношения, поправки высоких порядков к сверхтонкой структуре и g -фактору водородоподобных ионов, вероятности запрещённых магнитодипольных переходов.

УДК 539.193:544.258

Неверов В. С., Комолкин А. В., Волкова Т. Г. **Исследование влияния структурной изомерии на молекулярную подвижность жидких кристаллов методом молекулярной динамики** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 34–53.

Методом многомасштабного моделирования молекулярной динамики исследовано влияние структурной изомерии на молекулярную подвижность и свойства двух жидких кристаллов:

n-метоксibenзилиден-*n'*-*n*-бутиланилина и *n*-*n*-бутилоксибензилиден-*n'*-толуидина — изомеров, принадлежащих к классу азометинов. Проведённое длительное моделирование позволило наблюдать медленные процессы в исследованных веществах и установить причины их различных свойств в жидкокристаллической фазе. Библиогр. 44 назв. Ил. 12. Табл. 7.

Ключевые слова: жидкие кристаллы, молекулярная динамика, многомасштабное моделирование, структурная изомерия, азометины.

УДК 535:539:543

Бахшиев Н. Г., Акопьян С. Х. К 50-летию создания межкафедральной лаборатории спектроскопии // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 54–66.

Проанализирован опыт работы на химическом факультете ЛГУ научно-учебно-методического подразделения нового типа – межкафедральной лаборатории спектроскопии. Рассмотрены основные направления исследований и наиболее важные научные результаты. Приведена информация об учебном процессе в лаборатории и о возможности спектроскопических исследований на базе лаборатории для сотрудников, аспирантов и студентов факультета. Библиогр. 40 назв.

Ключевые слова: межкафедральная лаборатория, спектроскопия, направления исследований, научные результаты, учебный процесс, методическая работа.

УДК 541.127

Панов М. Ю. Об использовании термодинамических активностей в химической кинетике // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 67–74.

Обсуждены некоторые проблемы, возникающие в кинетике неидеальных систем при замене в кинетических уравнениях концентраций на термодинамические активности. На примере реакций 1-го и 2-го порядка с использованием теории растворов Макмиллана–Майера показано, что наблюдаемые кинетические закономерности могут заметно отличаться от принятых в формальной кинетике. Библиогр. 19 назв.

Ключевые слова: коэффициенты активности, скорость реакции, молекулярные теории растворов.

УДК 541.18:537

Кучек А. Э., Васютин О. А., Кашкаров А. А., Грибанова Е. В., Шуткевич В. В. Влияние модификации поверхности марганец-цинковой феррошпинели на её адсорбционные свойства // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 75–82.

Методом соосаждения синтезирован ряд образцов Mn–Zn-шпинели и проведено модифицирование некоторых образцов путем добавления в реакционную смесь в конце синтеза небольшого количества $Zn(NO_3)_2$ или $FeCl_3$. На полученных образцах проведены опыты по изучению адсорбции красителей (конго красный) и ионов металлов (Cu^{2+} и Pb^{2+}), которые показали, что использование в качестве модификатора поверхности шпинели хлорида железа практически не изменило ее адсорбционных свойств, тогда как появление на её поверхности ZnO (в результате обработки $Zn(NO_3)_2$) приводит к значительному их увеличению по отношению ко всем изученным веществам. Библиогр. 7 назв. Ил. 4. Табл. 2.

Ключевые слова: феррошпинели, ZnO, адсорбция, конго красный (КК), ионы Cu^{2+} и Pb^{2+} .

УДК 54.061:543.544.25:547.022

Уколов А. И., Зенкевич И. Г. Установление структуры изомерных алкиларенов с использованием аддитивных схем оценки газохроматографических индексов удерживания // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 83–93.

Описана идентификация моно- и диалкилбензолов в смесях продуктов алкилирования бензола и алкилбензолов по методу Фриделя–Крафтса. Структура веществ устанавливалась с помощью прямых и обращённых аддитивных схем оценки газохроматографических индексов удерживания, без привлечения масс-спектральной информации. Идентифицировано 7 моноалкилбензолов и 26 диалкилпроизводных. Библиогр. 16 назв. Ил. 8. Табл. 8.

Ключевые слова: индексы удерживания, аддитивные схемы, алкилбензолы.

УДК 543.544

Москвин А. Л., Мельниченко А. Н., Диченко О. Ю., Москвин Л. Н. **Влияние структуры массообменных матриц и фазоразделительных мембран на «эффект памяти» хроматомембранных ячеек в парофазном анализе** // Вестн. С.-Петербург. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 94–102.

Работа посвящена сравнению массообменных свойств хроматомембранных ячеек (ХМЯ) с различными видами хроматомембранных массообменных блоков. Показано, что массообмен более эффективно проходит в блоках с бипористой структурой, тогда как поликапиллярные блоки предпочтительнее для непрерывного технологического контроля on-line, где требуется минимальное время отклика на изменение концентрации компонента в потоке контролируемой среды. Выявлена основная причина возникновения остаточного аналитического сигнала при переходе от больших концентраций исследуемых компонентов к меньшим в парофазном анализе с ХМЯ — образование конденсата на поверхности гидрофобной фазоразделительной мембраны. Предложен способ устранения этого эффекта. Библиогр. 7 назв. Ил. 6. Табл. 4.

Ключевые слова: парофазный анализ, хроматомембранный массообменный процесс.

УДК 543.544

Бессонова Е. А., Поликарпов Н. А., Карцова Л. А., Потолицына В. Е. **Исследование возможностей новых сверхразветвлённых полимеров в качестве псевдостационарных фаз в электрокинетической хроматографии при определении белков** // Вестн. С.-Петербург. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 103–109.

В работе изучены возможности новых полимерных материалов — олигосахаридных производных сверхразветвлённых полиэтилениминов (PEI-Mal) — в качестве псевдостационарных фаз при определении белков (альбумин, миоглобин, инсулин, лизоцим) методом электрокинетической хроматографии. Исследовано влияние массы ядра, степени функционализации и концентрации PEI-Mal в составе рабочего буфера на эффективность и селективность разделения аналитов при различных значениях pH буферного электролита. Библиогр. 15 назв. Ил. 8. Табл. 1.

Ключевые слова: белки, сверхразветвлённые полиэтиленимины, электрокинетическая хроматография.

УДК 530.145

Беляев В. Б., Зандхас В., Шлык И. И. **Малочастичные мезон-ядерные кластеры** // Вестн. С.-Петербург. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 110–114.

Рассмотрена 3-частичная система $\phi\phi N$. Найдена энергия связи системы на основании дифференциальных уравнений Фаддеева. Построен новый мезон-мезонный ϕ - ϕ -потенциал, действующий в d -волне. Потенциал построен так, чтобы воспроизвести параметры $f_2(2010)$ -резонанса в упругом канале ($f_2 \rightarrow \phi + \phi$). Для описания ϕ - N -взаимодействия выбран s -волновой притягивающий потенциал, дающий для энергии связи $E_{\phi N}$ примерно 9 МэВ. Библиогр. 9 назв. Ил. 1.

Ключевые слова: системы трёх частиц, уравнения Фаддеева, мезон-ядерные системы.

УДК 539.182

Зайцев С. А., Попов Ю. В., **Кныр В. А.** **Решение задачи двукратной ионизации атома гелия быстрым электроном в J -матричном подходе** // Вестн. С.-Петербург. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 115–119.

Сформулирована новая версия метода J -матрицы для расчётов дифференциальных сечений двукратной ионизации атома гелия быстрым электроном. Рассчитанная трёхчастичная волновая функция, описывающая движение двух свободных электронов в поле ядра, удовлетворяет точным граничным условиям, когда один электрон находится далеко от пары «ядро + другой электрон», а рассчитанное пятикратное дифференциальное сечение реакции $\text{He}(e,3e)\text{He}^{++}$ хорошо согласуется с экспериментом как по форме угловых распределений, так и по абсолютной величине. Библиогр. 11 назв. Ил. 1.

Ключевые слова: трёхчастичные кулоновские системы, задача рассеяния, уравнения Фаддеева, амплитуда $(e, 3e)$ развала, штурмовский базис.

УДК 538.911

Шеляпина М. Г., Сирецкий М. Ю., Харченко К. А., Скрыбина Н. Е., Фрюшар Д. **Неэмпирические расчёты стабильности гидридов интерметаллических соединений — материалов для хранения водорода** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 120–123.

Представлены результаты теоретических расчётов электронной структуры и стабильности ряда соединений на основе магния и их гидридов, выполненных в рамках неэмпирических методов — зонных (FLAPW, KKR-CPA) и кластерных. Исследовалась роль различных химических элементов (*d*-металлы, Al, Ca) на стабильность гидрида магния. Библиогр. 10 назв. Ил. 3.

Ключевые слова: неэмпирические расчёты, гидрид магния.

УДК 519.687.4

Казаров А. Г., Колос С. Е., Рябов Ю. Ф., Соловьёв И. Б. **Организация управляющего программного обеспечения системы сбора данных эксперимента АТЛАС** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 124–128.

Система триггера и сбора данных эксперимента АТЛАС (ATLAS TDAQ System) призвана обеспечить передачу данных, зарегистрированных субдетекторами АТЛАС, отбор событий в соответствии с заданной конфигурацией и запись отобранных событий в систему постоянного хранения. Система состоит из множества разнородных программных модулей, выполняющихся на нескольких тысячах компьютеров, объединённых в локальную сеть. Дан обзор общей организации программных средств, ответственных за конфигурацию, управление и мониторинг работы всей системы сбора данных. Подробно описаны ключевые особенности архитектуры и реализации некоторых компонентов. Система развёрнута на площадке АТЛАС и в течение последних лет успешно применялась в ходе испытаний и калибровок субдетекторов АТЛАС, а также для сбора первых физических данных на LHC в 2009–2010 гг. Библиогр. 9 назв. Ил. 3.

Ключевые слова: АТЛАС, сбор данных, конфигурация, управление, контроль, мониторинг.

УДК 541.115

Слюсарева И. В., Козин А. О., Дементьев И. А., Кондратьев Ю. В. **Калориметрическое определение энтальпии сублимации тетратрифторацетата димолибдена(II) и тетраформиата димолибдена(II)** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 129–132.

Выполнено калориметрическое определение энтальпии сублимации тетратрифторацетата димолибдена(II) ($\Delta_{\text{sub}}H^0(420\text{ K})=115,3\pm 1,2$ кДж/моль) и тетраформиата димолибдена(II) ($\Delta_{\text{sub}}H^0(483\text{ K})=135,0\pm 1,4$ кДж/моль димолибдена(II)). Библиогр. 9 назв. Табл. 4.

Ключевые слова: энтальпия сублимации, калориметрия, тетратрифторацетат димолибдена(II), тетраформиат димолибдена(II).

УДК 544.723.54

Морозов П. Е., Порецкий М. С., Власова М. В., Земцова Е. Г., Цыганенко А. А., Смирнов В. М. **Особенности протекания химических реакций при синтезе методом ML-ALD квазиодномерных наноструктур на поверхности кремнезёма** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 133–135.

В работе методом ИК-спектроскопии изучены особенности взаимодействия пропаргилового спирта и хлорида железа(III) с поверхностными функциональными группами кремнезёма. Библиогр. 2 назв. Ил. 1.

Ключевые слова: метод ML-ALD, железо-органические наноструктуры, строение, кремнезём, функциональные группы, поверхность, ИК-спектроскопия.

УДК 546.28-121+54.057

Арбенин А. Ю., Земцова Е. Г., Мукконен И. Н., Смирнов В. М. **Синтез ферромагнитного материала с упорядоченной системой железных наночастиц на основе мезопористого кремнезёма** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2011. Вып. 1. С. 136–140.

В настоящей работе рассматривается возможность получения композиционного материала с упорядоченной системой армирующих ферромагнитных наночастиц на основе мезопористого кремнезёма. Ряд синтезов, проведённых в работе, привёл к получению устойчивого ферромагнитного материала. Методом электронной микроскопии доказано, что металлические частицы находятся в порах, а не на поверхности частиц кремнезёма. Материал обладает остаточной намагниченностью, что подтверждает наличие ферромагнитных свойств. Библиогр. 3 назв. Ил. 4. Табл. 3.

Ключевые слова: наночастицы, композиционные материалы, ферромагнетизм.

ABSTRACTS

Khaidarov G. G., Khaidarov A. G., Mashek A. Ch. The physical nature of liquid surface tension.

It is proved that the physical concept of liquid surface tension is a part of the concept of internal energy. The physical model of liquid evaporation and formula obtained for calculating surface tension of the liquid are suggested. The formula was tested on reference values for 64 substances in the temperature range from -253 to $+200$ degrees Celsius. A unified concept for physical notions of surface tension and the internal energy of the liquid is also obtained. A physical model is agreed with the views of the other authors. The result of this model is formulas for calculating values of specific heats for one- and two atomic gas.

Keywords: surface tension, internal energy, specific heat, gas, molecule, heat of vaporization, liquid.

Gabdulsadykova G. F., Usol'tseva N. V., Zharova M. A., Sotsky V. V. Mesomorphic properties and supramolecular structure of CT-complexes of benzeneamine derivatives with electron acceptors.

Mesomorphic properties of CT-complexes of two substituted benzeneamine derivatives have been investigated. The numerical experiments for modeling the charge transfer complex structure, forming one of the analyzed compounds and electron acceptors — TNF and (-)-TAPA have been realized.

Keywords: mesomorphic properties, charge transfer complex (CT-complex), electron acceptor, molecular docking.

Nikitchenko A. N. Diffraction imaging with cross-well data.

The diffraction imaging methodology for cross-well data is suggested. The methodology is based on vector Kirchhoff migration with special weight functions. Various methods of image diagnostics are considered. The synthetic data application results are discussed.

Keywords: vector migration, weight function, image, diffraction, cross-well.

Puchkov A. M. The method of calculating matrix elements for the Dirac equation in the Coulomb field.

The method of calculating matrix elements for the Dirac equation in the Coulomb field based on the virial relations is suggested. The connection of virial relations for the Dirac equation in the Coulomb field with matrices is shown. An explicit form of matrices for direct and inverse recursion is found. It is shown on an example of calculating probabilities of forbidden $M1$ -transitions how it is necessary to apply this method to particular problems.

Keywords: virial relations, calculation of higher-order corrections to the hyperfine splitting and to the g factor in H-like ions, probabilities of forbidden magnetic-dipole transitions.

Neverov V. S., Komolkin A. V., Volkova T. G. Multiscale molecular dynamics investigation of differences between structure and properties of two liquid crystal isomers.

Differences between structure and properties of two liquid crystal isomers: MBBA and BOBT, both belonging to azomethines, were investigated by means of long multiscale molecular dynamics simulation. Reasons for two studied isomers to have different properties in a liquid-crystalline phase were found as a result of simulation performed. Several slow processes in liquid crystals were also observed.

Keywords: liquid crystals, molecular dynamics, multiscale simulations, azomethines, structural isomers.

Bakhshiev N. G., Akopyan S. Kh. To the 50th anniversary of creation of interchair laboratory of spectrochemistry.

The experience of organization of scientific-educational and methodological subdivision of a new type — interchair laboratory of spectrochemistry — at the Faculty of Chemistry of LGU in 1961 is analysed. The main directions of research and the most important scientific results are considered. The information of the educational process at the laboratory and the possibility of spectroscopic investigation on the basis of the laboratory for research workers and post graduates of the faculty is presented.

Keywords: spectrochemistry, intermolecular interaction, history.

Panov M. Yu. On the use of thermodynamic activities in chemical kinetics.

Several problems arising due to the substitution of concentrations by thermodynamic activities in a kinetic equation for non-ideal systems have been discussed. With the use of McMillan-Mayer theory of solutions on the examples of the first and second order reactions it is shown that apparent kinetic regularities may distinctly differ from usually accepted ones in formal kinetics.

Keywords: activity coefficients, rate of reaction, molecular theory of solutions.

Kuchek A. E., Vasyutin O. A., Kashkarov A. A., Gribanova E. V., Shutkevich V. V. Surface modification influence on adsorption properties of ferromagnetic Mn-Zn spinel.

The surface modification of samples of synthesized Mn-Zn spinel was carried out by addition of small amount of $Zn(NO_3)_2$ or $FeCl_3$ in reaction mixture at the end of the coprecipitation process. Adsorption of Congo Red and ions of toxic metals Pb^{2+} and Cu^{2+} on the surface of original and modified spinels was studied by spectrophotometry. (on reaction with 4 [2-pyridylazo]-resorcin (PAR) and by potentiometry (with the aid of Cu- and Pb-selective electrodes). The results obtained showed that the adsorption of all studied objects is the highest on ZnO-modified spinel samples whereas Fe-modification does not give a positive result.

Keywords: ferrosinels, ZnO, adsorption, Congo Red, Cu^{2+} and Pb^{2+} ions.

Ukolov A. I., Zenkevich I. G. Using additive methods of GC retention indices evaluation in structure elucidation of isomeric alkylarenes.

Identification of the mono- and dialkylbenzenes in reaction mixtures of Friedel-Crafts alkylation of benzene and alkylbenzenes are discussed. Revealing the structures was carried out with the direct and reversed additive schemes of retention indices evaluation, without using mass-spectral data. As a result 7 monoalkylbenzenes and 26 dialkylbenzenes were identified.

Keywords: retention indices, additive scheme, alkylbenzenes.

Moskvin A. L., Melnichenko A. N., Dichenko O. Yu., Moskvin L. N. Influence of structure of mass-transfer units and phase-separating membrane on "memory effect" in chromatomembrane cells during head-space analysis.

This work is devoted to a comparison of mass-transfer properties of chromatomembrane cells (CMC) with different types of chromatomembrane mass-transfer units. It is shown that blocks with biporous structure provide more effective mass-transfer between phases than block with polycapillary structure, whereas blocks with polycapillary structure are preferred for a continuous analysis process while on-line monitoring takes place in which minimum response time of analytical signal change is required. The authors have also identified the cause of the residual analytical signal after changing concentration of analyte in water phase from higher to lower in the head-space analysis with a CMC. It was condensation on the surface of the hydrophobic phase-separating membrane. A way to eliminate this effect was finally suggested.

Keywords: head-space analysis, chromatomembrane mass-transfer process.

Bessonova E. A., Polikarpov N. A., Kartsova L. A., Potolicyna V. E. Investigation of new hyperbranched polymer possibilities as pseudostationary phases in EKC in determination of proteins.

The possibilities of new polymeric materials — (oligo-)saccharide's derivatives of hyperbranched polyethyleneimines (PEI-Mal) — as pseudostationary phases in electrokinetic chromatography in determination of proteins (albumin, myoglobin, insulin, lysozyme) is studied. Influence of weight of the PEI core, degree of (oligo-)saccharide units and concentration PEI-Mal as a part of the working buffer on efficiency and selectivity separation of analytes is investigated at various values of buffer electrolyte pH.

Keywords: proteins, hyperbranched polyethylenimines, electrokinetic chromatography.

Belyaev V. B., Sandhas W., Shlyk I. I. Few-body meson-nuclear clusters.

3-body system $\phi\phi N$ is considered. The binding energy of the system is found on the basis of differential Faddeev equations. New meson-meson $\phi\phi$ potential acting in d -wave is built. The potential is constructed to fit the parameters of $f_2(2010)$ resonance in the elastic channel ($f_2 \rightarrow \phi + \phi$). s -Wave attractive potential giving the binding energy $E_{\phi N} \approx 9$ MeV is taken to describe ϕ - N interaction.

Keywords: three-body systems, Faddeev equations, meson-nuclear systems.

Zaytsev S. A., Popov Yu. V., Knyr V. A. Solution of the helium atom double ionization problem by fast projectile electron in the J -matrix approach.

A new version of the J -matrix method for calculation of differential cross sections for helium atom double ionization by a fast projectile electron is formulated. The calculated three-body wave function which describes free movement of two electrons in the nucleus Coulomb field, satisfies the correct boundary condition in the space domain when one electron disposes far from the pair “nucleus+another electron”. The corresponding five-fold differential cross section of the reaction $\text{He}(e,3e)\text{He}^{++}$ well satisfies the experiment both in angular distribution and in the absolute value.

Keywords: three-body Coulomb systems, scattering problem, Faddeev equations, break-up (e,3e) amplitude, Sturmian basis.

Shelyapina M. G., Siretskiy M. Yu., Kharchenko K. A., Skryabina N. E., Fruchart D. Stability of hydrides of intermetallic compounds for hydrogen storage: *ab initio* calculations.

The results of our theoretical study of electronic structure and stability of several Mg-based compounds and their related hydrides carried out within the framework of both bulk (FLAPW, KKR-CPA) and cluster *ab initio* methods are presented. We investigated the impact of different alloying elements (d -metals, Al, Ca) on the stability of magnesium hydride.

Keywords: *ab initio* calculations, magnesium hydride.

Kazarov A. G., Kolos S. E., Ryabov Yu. F., Soloviev I. B. Controlling software organization of ATLAS experiment data collection system.

The ATLAS Trigger and Data Acquisition (TDAQ) system is a distributed system that performs filtering and transferring of the ATLAS experimental data from the detector to the mass storage. Its essential part is an online software system which is responsible for configuring, controlling and monitoring data-taking activity. The paper describes architecture and some implementation aspects of the principal online software components.

Keywords: ATLAS, LHC, CERN, DAQ, software, controls, configuration, monitoring.

Slyusareva I. V., Kozin A. O., Dementiev I. A., Kondratiev Yu. V. Calorimetric determination of enthalpy of sublimation tetratetrafluoroacetate dimolybden(II) and tetraformiate dimolybden(II).

Enthalpies of sublimation of dimolybdenum(II) tetratetrafluoroacetate ($\Delta_{\text{sub}}H^0(420\text{ K}) = 115,3 \pm 1,2$ kJ/mol) and dimolybdenum(II) tetraformiate ($\Delta_{\text{sub}}H^0(483\text{ K}) = 135,0 \pm 1,4$ kJ/mol) have been determined using differential calorimetry.

Keywords: enthalpies of sublimation, calorimetry, dimolybdenum(II) tetratetrafluoroacetate, dimolybdenum(II) tetraformiate.

Morozov P. E., Poretskii M. S., Vlasova M. V., Zemtsova E. G., Tsiganenko A. A., Smirnov V. M. Features of chemical reactions under synthesis by ML-ALD method of quasi-one-dimensional nanostructures on silica surface.

This paper describes features of interaction between propargyl alcohol and iron chloride(III) with surface functional groups of silica that were observed by IR-spectroscopy.

Keywords: ML-ALD method, iron-organic nanostructures, structure, silica, functional groups, surface, IR-spectroscopy.

Arbenin A. Yu., Zemtsova E. G., Mukkonen I. N., Smirnov V. M. Synthesis of ferromagnetic material with arranged array of iron nanoparticles based on meso-porous silica.

The ability of obtaining a composite material with arranged combination of arming ferromagnetic nanoparticles based on meso-porous silica is described. A number of experiments has led to a stable ferromagnetic material synthesis. Electronic microscopy showed metallic particles to stay not on the surface but in pores. The material possesses residual magnetic induction that proves the existence of ferro-magnetic nature.

Keywords: nanoparticles, composite materials, ferromagnetism.

CONTENTS

Physics

<i>Khaidarov G. G., Khaidarov A. G., Mashek A. Ch.</i> The physical nature of liquid surface tension.....	3
<i>Gabdulsadykova G. F., Usol'tseva N. V., Zharova M. A., Sotsky V. V.</i> Mesomorphic properties and supramolecular structure of ct-complexes of benzeneamine derivatives with electron acceptors.....	9
<i>Nikitchenko A. N.</i> Diffraction imaging with cross-well data.....	17
<i>Puchkov A. M.</i> The method of calculating matrix elements for the Dirac equation in the Coulomb field.....	24
<i>Neverov V. S., Komolkin A. V., Volkova T. G.</i> Multiscale molecular dynamics investigation of differences between structure and properties of two liquid crystal isomers.....	34

Chemistry

<i>Bakhshiev N. G., Akopyan S. Kh.</i> To the 50 th anniversary of creation of interchair laboratory of spectrochemistry.....	54
<i>Panov M. Yu.</i> On the use of thermodynamic activities in chemical kinetics.....	67
<i>Kuchek A. E., Vasyutin O. A. Kashkarov A. A., Gribanova E. V., Shutkevich V. V.</i> Surface modification influence on adsorption properties of ferromagnetic Mn–Zn spinel.....	75
<i>Ukolov A. I., Zenkevich I. G.</i> Using additive methods of GC retention indices evaluation in structure elucidation of isomeric alkylarenes.....	83
<i>Moskvin A. L., Melnichenko A. N., Dichenko O. Yu., Moskvin L. N.</i> Influence of structure of mass-transfer units and phase-separating membrane on “memory effect” in chromatomembrane cells during head-space analysis.....	94
<i>Bessonova E. A., Polikarpov N. A., Kartsova L. A., Potolicyna V. E.</i> Investigation of new hyperbranched polymer possibilities as pseudostationary phases in EKC in determination of proteins.....	103

Brief scientific notes

<i>Belyaev V. B., Sandhas W., Shlyk I. I.</i> Few-body meson-nuclear clusters.....	110
<i>Zaytsev S. A., Popov Yu. V., Knyr V. A.</i> Solution of the helium atom double ionization problem by fast projectile electron in the <i>J</i> -matrix approach.....	115
<i>Shelyapina M. G., Siretskiy M. Yu., Kharchenko K. A., Skryabina N. E., Fruchart D.</i> Stability of hydrides of intermetallic compounds for hydrogen storage: <i>ab initio</i> calculations.....	120
<i>Kazarov A. G., Kolos S. E., Ryabov Yu. F., Soloviev I. B.</i> Controlling software organization of ATLAS experiment data collection system.....	124
<i>Slyusareva I. V., Kozin A. O., Dementiev I. A., Kondratiev Yu. V.</i> Calorimetric determination of enthalpy of sublimation tetratrifluoroacetate dimolibden(II) and tetraformiata dimolibden(II).....	129
<i>Morozov P. E., Poretskiy M. S., Vlasova M. V., Zemtsova E. G., Tsiganenko A. A., Smirnov V. M.</i> Features of chemical reactions under synthesis by ML-ALD method of quasi-one-dimensional nanostructures on silica surface.....	133
<i>Arbenin A. Yu., Zemtsova E. G., Mukkonen I. N., Smirnov V. M.</i> Synthesis of ferromagnetic material with arranged array of iron nanoparticles based on meso-porous silica.....	136

Papers	141
---------------------	-----

Abstracts	146
------------------------	-----

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

- Акопян Сурен Хачатурович*: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, заведующий лабораторией; akopyan@inbox.spbu.ru
- Арбенин Андрей Юрьевич*: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант; aua47@yandex.ru
- Бахшиев Николай Григорьевич*: доктор физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор; akopyan@inbox.spbu.ru
- Беляев Владимир Борисович*: доктор физико-математических наук, Объединённый институт ядерных исследований, главный научный сотрудник; belyaev@theor.jinr.ru
- Бессонова Елена Андреевна*: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, доцент; lena_pol@inbox.ru
- Васютин Олег Алексеевич*: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант; oleg_v87@mail.ru
- Власова Мария Владимировна*: Санкт-Петербургский государственный университет, студентка; comitcont@narod.ru
- Волкова Татьяна Геннадьевна*: кандидат химических наук, Ивановский государственный университет, докторантка; tgvolkova@yandex.ru
- Габдулсадыкова Галия Фаритовна*: Ивановская государственная медицинская академия, старший преподаватель; galijag@yandex.ru
- Грибанова Елена Владимировна*: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор; egribanova@yandex.ru
- Дементьев Илья Александрович*: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, проректор по направлениям математика, механика, процессы управления, физика и химия, доцент; aokozi@mail.ru
- Диченко Ольга Юрьевна*: Санкт-Петербургский государственный университет, студентка
- Жарова Марина Алексеевна*: кандидат химических наук, Ивановский государственный университет, научный сотрудник; zharova_ma@mail.ru
- Зайцев Сергей Александрович*: доктор физико-математических наук, Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск), доцент; zaytsev@fizika.khstu.ru
- Зандхас Вернер*: доктор философии (PhD), Боннский университет, Германия, профессор
- Земцова Елена Георгиевна*: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, старший преподаватель; ezimtsova@yandex.ru
- Зенкевич Игорь Георгиевич*: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, заведующий лабораторией; izenkevich@yandex.ru
- Казаров Андрей Геннадьевич*: Петербургский институт ядерной физики, научный сотрудник; andrei.kazarov@cern.ch
- Карцова Людмила Алексеевна*: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор; kartsova@gmail.com
- Кашкаров Арсений Александрович*: Санкт-Петербургский государственный университет студент

Кныр Виктор Андреевич (1948–2010): доктор физико-математических наук, Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск), профессор, заведующий кафедрой

Козин Андрей Олегович: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, доцент; aokozin@mail.ru

Колос Сергей Евгеньевич: Петербургский институт ядерной физики, научный сотрудник; sergei.kolos@cern.ch

Комолкин Андрей Владимирович: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, доцент; komolkin@nmr.phys.spbu.ru

Кондратьев Юрий Васильевич: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор; aokozin@mail.ru

Кучек Анастасия Эдуардовна: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, ассистент; kuchkobrazz@gmail.com

Машек Александр Чеславович: Санкт-Петербургская государственная медицинская академия им. И. И. Мечникова, ассистент; haidarovg@mail.ru

Мельниченко Артём Николаевич: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант; manfi.man@gmail.com

Морозов Павел Евгеньевич: Санкт-Петербургский государственный университет, инженер; comitcont@narod.ru

Москвин Алексей Леонидович: доктор технических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор; moskvin-al@rosanalyt.ru

Москвин Леонид Николаевич: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, заведующий кафедрой

Муккван Иван Николаевич: Санкт-Петербургский государственный университет, инженер; mukkivan@yandex.ru

Неверов Владимир Сергеевич: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант; vladimir@nmr.phys.spbu.ru

Никитченко Андрей Николаевич: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант; andr_nikitchenko@mail.ru

Панов Михаил Юрьевич: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, доцент

Поликарпов Никита Александрович: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант; prolikarov@mail.ru

Попов Юрий Владимирович: кандидат физико-математических наук, Московский государственный университет, доцент, заведующий лабораторией; popov@srd.sinp.msu.ru

Порецкий М. С.: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант; comitcont@narod.ru

Потолицына Вера Евгеньевна: Санкт-Петербургский государственный университет, магистрантка; figly-migly@list.ru

Пучков Андрей Михайлович: Санкт-Петербургский государственный университет, научный сотрудник; putchkov@mail.ru

Рябов Юрий Фёдорович: доктор технических наук, Петербургский институт ядерной физики, профессор, заведующий отделом; ryabov@rpi.nw.ru

Сирецкий Максим Юрьевич: Санкт-Петербургский государственный университет, студент; maxim_sir@list.ru

Скрябина Наталья Евгеньевна: доктор физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор; natskryabina@mail.ru

Слюсарева Ирина Викторовна: кандидат химических наук, ЗАО «Пластполихим», инженер; aokozin@mail.ru

Смирнов Владимир Михайлович: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор; vms11@yandex.ru

Соловьёв Игорь Борисович: Петербургский институт ядерной физики, научный сотрудник;
igor.soloviev@cern.ch

Соцкий Валентин Викторович: кандидат химических наук, Ивановский государственный университет, научный сотрудник; sotsky2005@yandex.ru

Уколов Антон Игоревич: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант

Усольцева Надежда Васильевна: доктор химических наук, Ивановский государственный университет, профессор, проректор по международным связям;
nv_usoltseva@mail.ru

Фрюшар Даниэль: доктор философии (PhD), институт Нееля Национального центра научных исследований (г. Гренобль, Франция), ведущий научный сотрудник; daniel.fruchart@grenoble.cnrs.fr

Хайдаров Андрей Геннадьевич: Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), аспирант; haidarovg@mail.ru

Хайдаров Геннадий Гасимович: кандидат технических наук, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), доцент; haidarovg@mail.ru

Харченко Константин Александрович: Санкт-Петербургский государственный университет, студент; harchenko.k@gmail.com

Цыганенко Алексей Алексеевич: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор; comitcont@narod.ru

Шеляпина Марина Германовна: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, доцент;
marinashelyapina@mail.ru

Шлык Иван Иванович: Объединённый институт ядерных исследований, научный сотрудник;
vshlyk@theor.jinr.ru

Шуткевич Владимир Владимирович: кандидат химических наук, ООО «Сириус», заместитель генерального директора