

## СОДЕРЖАНИЕ

- 5 Solvatochromic Reichardt's dye in micelles of sodium cetyl sulfate: MD modeling of location character and hydration. **V.S. Farafonov, A.V. Lebed, N.O. Mchedlov-Petrossyan**
- 12 Influence of the ionic and non-ionic additives on the acid strength of neutral red in the aqueous solutions of poly (sodium 4-styrenesulfonate). **A.Yu. Kharchenko, O.G. Moskaeva**
- 24 Свободные энергии гидратации силанольных групп кремнеземов в теории функционала плотности. **Н.О. Онижук, В.В. Иванов, А.В. Пантелеймонов, Ю.В. Холин**
- 30  $L_1$ -регуляризованные решения уравнений теории связанных кластеров. Тестовая система  $F_2$ . **В.В. Иванов**
- 35 Электронно-топологические индексы для нанокластеров SiC и других углеродсодержащих систем. **А.В. Лузанов**
- 44 Синтез и восстановление 6-нитрозо-5,7-диметил-4,7-дигидро[1,2,4]триазоло [1,5-а]пиримидина. **М.А. Колосов, Е.Г. Швец, В.Д. Орлов**
- 48 Несимметричные замещенные этилендиамины. **В.Н. Котляр, Д.В. Николаевский, А.О. Коломойцев, А.В. Буравов, В.Д. Орлов**
- 53 Спектральное исследование форм аскорбиновой кислоты в процессах радикально-цепного окисления в апротонной среде. **О.В. Смирнова, И.В. Ефимова, Й.А. Опейда**
- 59 Синтез функционально замещенных 5-арил-1,2,4-триазол-3-онов. **В.С. Толкунов, О.В. Смирнова, А.С. Толкунов, С.В. Толкунов**
- 64 Циклоприсоединение 2,3-диметил-1,3-бутадиена к производным 1,4-бензохинонмоноимина. **С.А. Коновалова, А.П. Авдеенко, Е.Н. Лысенко**
- 73 Использование ультразвука при электротермическом атомно-абсорбционном анализе хлебопродуктов на токсичные элементы. **О.И. Юрченко, Л.В. Бакланова, Т.В. Черножук, А.Н. Бакланов**
- 80 Удосконалення методики стаціонарної вольтамперометрії на обертовому дисковому електроді шляхом врахування міграції електроактивного компонента. **В.В. Міценчук, М.М. Ткачук, В.Д. Юзькова, В.В. Нечипорук**
- 90 Спектроскопічні дослідження комплексних сполук кобальту(III)-нікелю(III) з моноетаноламіном. **А.О. Зульфїгаров, О.О. Андрійко, С.В. Ковальчук, А.Г. Гребенюк, І.С. Кузеванова, В.А. Потаскалов**
- 96 Мицеллярные эффекты в кинетике реакций взаимодействия малахитового зеленого и бриллиантового зеленого с водой. **А.Н. Лагута, С.В. Ельцов**
- 104 Памяти профессора Ю.В. Холина (4.04.1962 – 1.05.2017)
- 106 Інформація об авторах

## CONTENTS

- 5 Solvatochromic Reichardt's dye in micelles of sodium cetyl sulfate: MD modeling of location character and hydration. **V.S. Farafonov, A.V. Lebed, N.O. Mchedlov-Petrosyan**
- 12 Influence of the ionic and non-ionic additives on the acid strength of neutral red in the aqueous solutions of poly (sodium 4-styrenesulfonate). **A.Yu. Kharchenko, O.G. Moskaeva**
- 24 Hydration free energies of the silica silanol groups in the density functional theory. **M.O. Onizhuk, V.V. Ivanov, A.V. Panteleimonov, Yu.V. Kholin**
- 30  $L_1$ -regularized solutions of coupled cluster theory equations. Test system  $F_2$ . **V.V. Ivanov**
- 35 Electron-topological indexes for SiC nanoclusters and other carbon-containing systems. **A.V. Luzanov**
- 44 Synthesis and reduction of 6-nitroso-5,7-dimethyl-4,7 dihydro[1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidine. **M.A. Kolosov, O.H. Shvets, V.D. Orlov**
- 48 Non-symmetric substituted ethylenediamines. **V.M. Kotlyar, D.V. Nikolaevsky, O.O. Kolomoicev, O.V. Buravov, V.D. Orlov**
- 53 Spectral study of ascorbic acid forms in radical chain oxidation processes in aprotic medium. **O.V. Smirnova, I.V. Efimova, I.O. Opeida**
- 59 Synthesis of functionally substituted of 5-aryl-1,2,4-triazol-3-ones. **V.S. Tolkunov, O.V. Smirnova, A.S. Tolkunov, S.V. Tolkunov**
- 64 Cycloaddition of 2,3-dimethyl-1,3-butadiene to 1,4-benzoquinonemonoimine derivatives. **S.A. Konovalova, A.P. Avdeenko, O.N. Lysenko**
- 73 The use of ultrasound at electrothermal atomic absorption analysis of bakery products on toxic elements. **O.I. Yurchenko, L.V. Baklanova, T.V. Chernozhuk, A.N. Baklanov**
- 80 Improvement of the RDE stationary voltammetry method by consideration the electroactive components migration. **V.V. Mishchenchuk, M.M. Tkachuk, V.D. Yuzkova, V.V. Nechyporuk**
- 90 Spectroscopic study of complex compounds of cobalt(III) - nickel(II) with monoethanolamine. **A.O. Zulfigarov, A.A. Andriiko, S.V. Kovalchuk, A.G. Grebenyuk, I.S. Kyzevanova, V.A. Potaskalov**
- 96 Micellar effects in kinetics of interaction of malachite green and brilliant green with water. **A.N. Laguta, S.V. Eltsov**
- 104 In memoriam: Professor Yu. V. Kholin (4.04.1962 – 1.05.2017)
- 106 Information about authors