

## ЗМІСТ

- 6 Methods for building linear regression equations in the "structure-property" problems.  
***M.I. Berdnyk, M.O. Onizhuk, V.V. Ivanov***
- 18 Quantitative analysis of micellar effect on the reaction rate of alkaline fading of phenolphthalein. ***A.N. Laguta, S.V. Eltsov, N.O. Mchedlov-Petrosyan***
- 27 An MD simulation study of Reichardt's betaines in surfactant micelles: unlike orientation and solvation of cationic, zwitterionic, and anionic dye species within the pseudophase.  
***V.S. Farafonov, A.V. Lebed, N.O. Mchedlov-Petrosyan***
- 36 On accurate high-order numerical derivatives computations for quantum chemistry purposes.  
***A.B. Zakharov and V.V. Ivanov***
- 50 Оцінка можливості ТСХ-розділення стеаринової та олеїнової кислоти з елюентами, що містять ПАР. ***Д.В. Калінін, О.Ю. Коновалова, М.Н. Дояренко***
- 58 Двочастотний ультразвук в підготовці проб природних розсолів для визначення меркурію абсорбцією «холодної пари». ***О.І. Юрченко, Т.В. Черножук, Л.В. Бакланова, О.М. Бакланов, О.А. Кравченко***
- 67 Перевірка адитивності аналітичного сигналу при спектрофотометричному визначенні сумарного вмісту Cu(II), Co(II), Ni(II), Pb(II), Zn(II) з використанням індикаторних плівок.  
***О.О. Решетняк, В.М. Шевченко, Н.М. Лисак, Н.О. Нікітіна***

## CONTENTS

- 6 Methods for building linear regression equations in the "structure-property" problems.  
***M.I. Berdnyk, M.O. Onizhuk, V.V. Ivanov***
- 18 Quantitative analysis of micellar effect on the reaction rate of alkaline fading of phenolphthalein. ***A.N. Laguta, S.V. Eltsov, N.O. Mchedlov-Petrossyan***
- 27 An MD simulation study of Reichardt's betaines in surfactant micelles: unlike orientation and solvation of cationic, zwitterionic, and anionic dye species within the pseudophase.  
***V.S. Farafonov, A.V. Lebed, N.O. Mchedlov-Petrossyan***
- 36 On accurate high-order numerical derivatives computations for quantum chemistry purposes.  
***A.B. Zakharov and V.V. Ivanov***
- 50 The estimation of possibility of stearic and oleic acids' TLC-separation with eluents containing surfactants. ***D.V. Kalinin, O.Yu. Konovalova, M.N. Doyarenko***
- 58 Two frequency ultrasound in preparation of the samples of natural brines to determine mercury by "cold vapor" absorption. ***O.I. Yurchenko, T.V. Chernozhuk, L.V. Baklanova, A.N. Baklanov, O. A. Kravchenko***
- 67 Verification of the analytical signal additivity for the spectrophotometric determination of the total content of Cu(II), Co(II), Ni(II), Pb(II), Zn(II) using indicator films. ***E.A. Reshetnyak, V.N. Shevchenko, N.M. Lysak, N.A. Nikitina***

## СОДЕРЖАНИЕ

- 6 Methods for building linear regression equations in the "structure-property" problems.  
***M.I. Berdnyk, M.O. Onizhuk, V.V. Ivanov***
- 18 Quantitative analysis of micellar effect on the reaction rate of alkaline fading of phenolphthalein. ***A.N. Laguta, S.V. Eltsov, N.O. Mchedlov-Petrossyan***
- 27 An MD simulation study of Reichardt's betaines in surfactant micelles: unlike orientation and solvation of cationic, zwitterionic, and anionic dye species within the pseudophase.  
***V.S. Farafonov, A.V. Lebed, N.O. Mchedlov-Petrossyan***
- 36 On accurate high-order numerical derivatives computations for quantum chemistry purposes.  
***A.B. Zakharov and V.V. Ivanov***
- 50 Оценка возможности ТСХ-разделения стеариновой и олеиновой кислот с элюентами, содержащими пав. ***Д.В. Калинин, О.Ю. Коновалова, М.Н. Дояренко***
- 58 Двухчастотный ультразвук в подготовке проб природных рассолов для определения ртути абсорбцией «холодного пара». ***О.И. Юрченко, Т.В. Черножук, Л.В. Бакланова, О.Н. Бакланов, А. А. Кравченко***
- 67 Проверка аддитивности аналитического сигнала при спектрофотометрическом определении суммарного содержания Cu(II), Co(II), Ni(II), Pb(II), Zn(II) с использованием индикаторных пленок. ***Е.А. Решетняк, В.Н. Шевченко, Н.М. Лысак, Н.А. Никитина***