

ЗМІСТ

- 6 Методи побудови рівнянь лінійної регресії в задачах «структура-властивість».
М.І. Бердник, М.О. Оніжук, В.В. Іванов
- 18 Кількісний аналіз міцелярних ефектів на константу швидкості лужного гідролізу фенолфталеїну. ***А.М. Лагута, С.В. Єльцов, М.О. Мchedlov-Петросян***
- 27 МД моделювання бетаїнів Райхардта у міцелах ПАР: Множинна орієнтація і сольватація катіонних, цвітер-іонних і аніонних форм барвників у псевдофазі.
В.С. Фарафонов, О.В. Лебідь, М.О. Мchedlov-Петросян
- 36 Про точні розрахунки чисельних похідних вищих порядків для потреб квантової хімії.
А.Б. Захаров, В.В. Іванов
- 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-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 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 Методы построения уравнений линейной регрессии в задачах «структура-свойство». **М.И. Бердник, Н.О. Онижук, В.В. Иванов**
- 18 Количественный анализ мицеллярных эффектов на константу скорости щелочного гидролиза фенолфталеина. **А.Н. Лагута, С.В. Ельцов, Н.О. Мchedlov-Петросян**
- 27 МД моделирование бетаинов Райхардта в мицеллах ПАВ: Множественная ориентация и сольватация катионных, цвиттер-ионных и анионных форм красителей в псевдофазе. **В.С. Фарафонов, А.В. Лебедь, Н.О. Мchedlov-Петросян**
- 36 О точных расчетах численных производных высших порядков для нужд квантовой химии. **А.Б. Захаров, В.В. Иванов**
- 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**