



**XXI Всероссийская конференция
молодых ученых-химиков
(с международным участием)**

Министерство образования и науки Российской Федерации
Национальный исследовательский
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

**XXI ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
МОЛОДЫХ УЧЁНЫХ-ХИМИКОВ
(С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ)**

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Нижний Новгород, 15-17 мая 2018 г.

Нижний Новгород
Издательство Нижегородского госуниверситета
2018

УДК 54
ББК 24
Д 22

XXI Всероссийская конференция молодых учёных-химиков (с международным участием): тезисы докладов (Нижний Новгород, 15–17 мая 2018 г.). Нижний Новгород: Изд-во ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2018. - 600 с.

ISBN

В сборник включены тезисы докладов XXI Всероссийской конференции молодых учёных-химиков (с международным участием). В ежегодных **конференциях**, проходящих в Университете Лобачевского, участвуют молодые ученые, аспиранты, студенты и школьники. Эти конференции способствуют активизации научно-исследовательской деятельности молодых ученых и специалистов, расширению их научного кругозора и связей между различными научными направлениями, обмену актуальной информацией, выявлению инновационного потенциала молодежи, расширению связей между наукой и производством.

ISBN

УДК 54
ББК 24

*Конференция проводится при финансовой поддержке
Российского фонда фундаментальных исследований,
Проект № 18-33-10005 мол _г.*

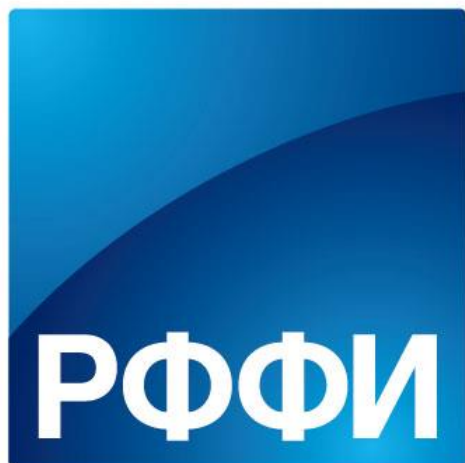
© Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского, 2018

Электронная версия сборника тезисов докладов на сайте:
<http://www.youngchem-conf.unn.ru/>

ОРГАНИЗАТОРЫ КОНФЕРЕНЦИИ



**УНИВЕРСИТЕТ
ЛОБАЧЕВСКОГО**



**РОССИЙСКИЙ
ФОНД
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ**

СПОНСОРЫ



ОРГКОМИТЕТ

Председатель

д.х.н., профессор Князев А.В. (декан химического факультета ННГУ)

Зам. председателя

к.х.н., доцент Асабина Е.А. (ННГУ)

к.х.н. Крашенинникова О.В. (ННГУ)

Ученый секретарь

к.х.н., старший научный сотрудник Буланов Е.Н. (зам. декана химического факультета ННГУ)

Председатели секций

Секция 1: д.х.н., академик РАН Абакумов Г.А. (ИМХ РАН)

д.х.н., профессор Федоров А.Ю. (ННГУ)

Секция 2: д.х.н., академик Чурбанов М.Ф. (ИХВВ РАН)

д.х.н., профессор Князев А.В. (ННГУ)

Секция 3: д.х.н., профессор Дуров В.А. (МГУ)

д.х.н., профессор Крылов В.А. (ННГУ)

Секция 4: д.х.н., профессор Сережкин В.Н. (СамГУ)

д.х.н., профессор Игнатов С.К. (ННГУ)

Секция 5: д.х.н., профессор Гавричев К.С. (ИОНХ РАН)

д.х.н., профессор Маркин А.В. (ННГУ)

Секция 6: д.х.н., профессор Зверева И.А. (СПбГУ)

д.т.н., профессор Воротынцев И.В. (НГТУ)

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Председатель

д.х.н., профессор Князев А.В. (ННГУ)

Зам. председателя

к.х.н., доцент Асабина Е.А. (ННГУ)

к.х.н. Крашенинникова О.В. (ННГУ)

Ученый секретарь

к.х.н., старший научный сотрудник Буланов Е.Н. (ННГУ)

СЕКЦИИ КОНФЕРЕНЦИИ

- 1. Органическая, биомедицинская, элементарорганическая химия и химия высокомолекулярных соединений**
- 2. Неорганическая химия, химия высокочистых веществ**
- 3. Аналитическая химия и экология**
- 4. Теоретическая и квантовая химия, фотохимия и спектроскопия**
- 5. Физическая химия**
- 6. Прикладные исследования и материалы**

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

Секция 1

Новые противоопухолевые конъюгаты для фотодинамической терапии

Нючев А.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: alex.nyuchev@ya.ru*

Новые многофункциональные конъюгаты являются действующими соединениями в фотодинамической терапии. Рассматриваемые вещества относятся к классу противоопухолевых конъюгатов нового поколения, которые одновременно: 1) применимы для комбинированного метода лечения опухолей, включающего фотодинамическую (ФДТ) и таргетную терапию; 2) способны селективно доставляться к опухолевым тканям; 3) имеют фотофизические свойства, позволяющие исследовать их *in vivo* распределение в органах и тканях с применением современных методов визуализации.

Рассматриваемые в настоящем исследовании конъюгаты содержат одну или несколько хлориновых групп (производное природного порфирина), способных эффективно генерировать синглетный кислород, а также несколько 4-ариламинохиназолиновых фрагментов, являющихся лигандами рецепторов к эпидермальному фактору роста (EGFR) и фактору роста эндотелия сосудов (VEGFR). Использование в качестве фотосенсибилизатора производных хлоринов делает возможным проведение эффективной ФДТ, поскольку они обладают высокой фотодинамической активностью. За счет введения в состав конъюгата лигандов, обладающих сродством к EGFR- и VEGFR-рецепторам, конъюгаты будут селективно доставляться непосредственно к опухоли, что значительно повысит терапевтический эффект ФДТ, позволит снизить дозу фотосенсибилизатора, а значит, уменьшить негативное фототоксическое действие фотосенсибилизатора на здоровые ткани;

Взаимодействие конъюгата сразу с несколькими типами рецепторов EGF- и VEGF (мультитаргетность) является залогом его собственного эффективного противоопухолевого действия за счет ингибирования тирозинкиназных каскадов, отвечающих за опухолевую прогрессию. Интенсивная флуоресценция конъюгатов в красной области спектра позволяет исследовать *in vivo* его распределение в органах и тканях животных с применением современных методов визуализации и оценить избирательность накопления в опухоли. В дальнейшем, благодаря этому качеству, станет возможным их использование для диагностики и ФДТ глубоко локализованных опухолей. К настоящему времени создано несколько финальных целевых соединений, которые продемонстрировали высокие показатели ФДТ и селективности накопления.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 16-03-00464).

Современные достижения в области получения особо чистых халькогенидных стекол для инфракрасной волоконной оптики

Вельмузов А.П.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых
Российской академии наук», Нижний Новгород, Россия
E-mail: velmuzhov.ichps@mail.ru*

Халькогенидные стекла представляют собой особую группу неорганических стеклообразных материалов на основе одного или нескольких халькогенов (S, Se, Te), входящих в состав халькогенидов мышьяка, германия, кремния, сурьмы, галлия и других элементов.

Эти материалы перспективны для применения в волоконной оптике среднего ИК диапазона. Они обладают высокой прозрачностью в спектральной области 0.6–25 мкм, низкой склонностью к кристаллизации, значительной нелинейностью оптических свойств, из них могут быть изготовлены волоконные световоды с низкими оптическими потерями. Важнейшей характеристикой халькогенидных стекол, критичной для практического применения, является содержание в них оптически активных примесей, оказывающих негативное влияние на целевые свойства этих материалов. Поэтому актуальной задачей современной волоконной оптики является разработка новых методов получения халькогенидных стекол, обеспечивающих низкое содержание примесей.

В докладе рассмотрены традиционные и новые подходы к получению особо чистых халькогенидных стекол, в том числе разработанные в ИХВВ РАН; основные источники поступления примесей в халькогенидный стеклообразующий расплав (исходные вещества, материал аппаратуры, атмосфера); современные достижения в области получения стекол с минимальным содержанием примесей.

Приведены основные способы изготовления волоконных световодов из халькогенидных стекол с низкими оптическими потерями в спектральном диапазоне 1–15 мкм и лучшие мировые результаты в этом направлении, достигнутые в ИХВВ РАН.

Представлены современные наиболее перспективные области применения халькогенидных стекол и волоконных световодов на их основе, в первую очередь в качестве оптических сенсоров. Обсуждаются дальнейшие пути развития инфракрасной волоконной оптики на основе особо чистых халькогенидных стекол.

Работа выполнялась при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проекты № 16-13-10251 и №15-12-20040).

Микроэкстракционное концентрирование в аналитической химии

Мосягин П.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

Важным этапом любого аналитического процесса является предварительная подготовка образца, которая включает разделение и концентрирование определяемых веществ. Пробоподготовка – наиболее трудоемкий и длительный этап химического анализа, который плохо поддается автоматизации и существенно влияет на надежность и точность определения. Современная аналитическая практика уделяет вопросам развития методов пробоподготовки самое серьезное внимание, выдвигая требования по их миниатюризации, значительному сокращению или полному исключению токсичных растворителей, автоматизации, простоте сочетания с методами анализа.

Жидкофазная и твердофазная экстракция являются основными методами концентрирования примесей и широко применяется в аналитической практике. Жидкофазная экстракция позволяет проводить относительное и абсолютное концентрирование примесей самой различной природы. С помощью метода экстракционного концентрирования достигнуты пределы обнаружения многих органических и неорганических веществ 0.1–100 мкг/л. Тем не менее, традиционная жидкостная экстракция имеет существенные недостатки: использование больших объемов дорогостоящих растворителей, образование эмульсий, трудности автоматизации. Серьезной проблемой является утилизация токсичных экстрагентов, объемы которых могут достигать десятков-сотен миллилитров. Эффективность концентрирования с помощью классической жидкостной экстракции (макроэкстракции) часто недостаточна.

Традиционная твердофазная экстракция также обладает рядом недостатков: необходимостью использования больших объемов проб для достижения высоких коэффициентов концентрирования, трудностью десорбции аналитов из сорбента, сложностью автоматизации.

Недавно разработанный метод микроэкстракции позволяет решить перечисленные проблемы. Микроэкстракция отвечает современным требованиям к пробоподготовке и превосходит классическую жидкостную и твердофазную экстракцию. На сегодняшний день метод микроэкстракции активно развивается, предложен ряд новых технических решений, упрощающих процедуру жидкофазной и твердофазной экстракции и обеспечивающих хорошее сочетание пробоподготовки с современными методами определения (газовой и жидкостной хроматографией, капиллярным электрофорезом, атомной спектроскопией). Жидкофазную (ЖФМЭ) и

твердофазную (ТФМЭ) микроэкстракцию применяют для анализа биологических проб, объектов окружающей среды, пищевых продуктов, высокочистых веществ, лекарственных препаратов, в токсикологии, криминалистическом анализе.

Разработанные методики ЖФМЭ-концентрирования отвечают концепции “зеленой химии”, т.к. позволили уменьшить объем применяемого экстрагента в 5000–30000 раз по сравнению с традиционной жидкостной макроэкстракцией. Высокие темпы развития ЖФМЭ проиллюстрированы гистограммой, помещенной на диаграмме. Видно, что в 2001 г. число публикаций по ЖФМЭ только с УЗ-эмульгированием экстрагентов составляло 18% от работ по ТФМЭ, в 2011 г. – 33%. С учетом всех разновидностей ЖФМЭ ее доля превышает 60%. Дальнейшее совершенствование обоих методов связано с применением новых селективных экстрагентов и сорбционных покрытий, например, хирально активных фаз, новых ионообменников, иммуноаффинных и полимерных сорбентов с применением иммерсионной печати. Решение проблемы микроэкстракции примесей из образцов биологического характера связано с разработкой новых биосовместимых экстрагентов и сорбентов для прямого определения аналитов, минуя стадию очистки проб. Безусловным требованием развития ТФМЭ и ЖФМЭ является полная автоматизация концентрирования примесей от их извлечения до введения в аналитический прибор. Наиболее информативный анализ веществ возможен сочетанием обоих методов концентрирования.

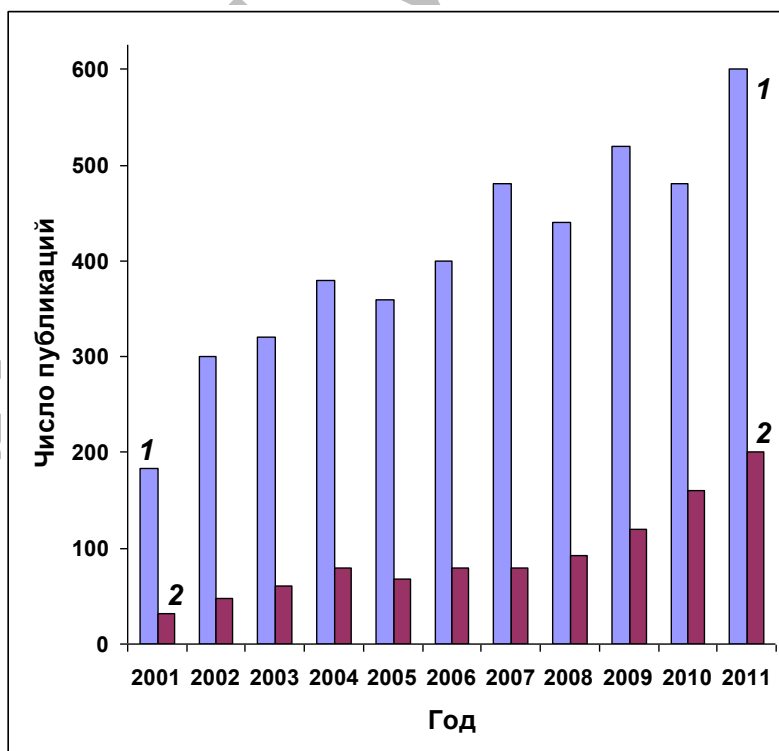


Диаграмма. Число публикаций по ТФМЭ (1) и ЖФМЭ (2) с ультразвуковым эмульгированием экстрагента [Szreniawa-Sztajnert A., Zabiegała B., Namieśnik J. // Trends in Analytical chemistry. 2013.V. 49. P. 45.]

Стереозффект неподеленных электронных пар в структурах кристаллов

Пушкин Д.В., Настенко К.В.

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, Самара, Россия
E-mail: pushkin@samsu.ru

С помощью полиэдров Вороного-Дирихле (ВД) и метода пересекающихся сфер проведен кристаллохимический анализ соединений, содержащих в своей структуре группировки $AХ_n^{z-}$ ($A = Tl(I), Sb(III), S(IV), Se(IV), Te(IV), Bi(III), As(III), Sn(II)$ и $Cl(V)$; X – галоген или халькоген). Показано, что ряд новых количественных характеристик стереозффекта неподеленной электронной пары (**Е-пары**) атомов неполновалентных p -элементов можно получить на основе стереоатомной модели строения кристаллических веществ. Для количественной оценки стереозффекта E -пары использована величина смещения ядра атома A из центра тяжести его полиэдра ВД (D_A). Установлено, что если для атомов A^N (N – номер группы) в структуре изученных соединений D_A в пределах погрешности равно нулю, то для атомов A^{N-2} , имеющих E -пару, $D_A \gg 0$. Рассмотрено влияние природы атомов A и X на стереозффект E -пары, при этом показано, что усиление стереозффекта E -пары, проявляющееся в росте асимметрии координационной сферы центрального атома, т.е. в увеличении значений D_A , приводит к отклонению формы полиэдра ВД от сферической, или, иными словами, к уменьшению равномерности окружения атомов и росту величины безразмерного второго момента инерции полиэдра ВД G_3 .

Установлено существование линейной зависимости между величинами D_A , которые можно рассчитать на основе рентгеноструктурных данных, и значениями констант квадрупольной связи, определяемыми из спектров ядерного квадрупольного резонанса, таким образом показано, что параметр D_A пропорционален градиенту локального электрического поля, созданного в области атома A всеми атомами X , окружающими его в структуре кристалла.

Подтверждена гипотеза В.С. Урусова [1] о схожести телесных углов граней полиэдров ВД и валентных усилий связей, соответствующих этим граням, при этом продемонстрировано, что метод валентных усилий недооценивает невалентные взаимодействия.

Продемонстрировано, что несмотря на значительную вариацию длин связей в координационных полиэдрах $AХ_n$, среднеквадратичные отклонения в значениях радиусов сферических доменов атомов A не превышают 0.07Å , что позволяет, в первом приближении, считать объем полиэдров Вороного-Дирихле (ВД) атомов A постоянным. Учитывая, что объем полиэдров ВД атомов определяется только их валентным состоянием и природой атомов окружения, но практически не зависит от КЧ, атомы A следует моделировать мягкими (деформируемыми) сферами постоянного объема.

Список литературы

[1] Урусов В.С. // Доклады РАН. 2001. Т. 380. № 3. С. 359.

**Application of precise calorimetry in study of materials
based on organic, organoelement and polymeric compounds**

Markin A.V.

Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, Nizhni Novgorod, Russia

E-mail: markin@calorimetry-center.ru

This work is devoted to the fundamental problem, namely the application and development of methods of chemical thermodynamics in study of materials and compositions based on organic, organoelement and polymeric compounds. Among these perspective compounds, the most thoroughly investigated representatives are metal fullerenes, fullerene complexes with organoelement ligands, fullerene-containing polymers, carbosilane and liquid crystalline dendrimers with different nature of the surface layer. The discussion and conclusions are based on the results of complex precision calorimetric determination of the temperature dependences of heat capacities and characteristics of the revealed phase transitions in a wide temperature range.

In the present work, the temperature dependences of heat capacities of the above compounds in different states (amorphous, crystalline, partially crystalline, liquid crystalline) were determined in the temperature interval from 6 to 870 K by precision adiabatic vacuum calorimetry (BCT-3 with discrete heating, Termis, Moscow region, Russian Federation) and differential scanning calorimetry (DSC 204 *F1 Phoenix*, NETZSCH-Gerätebau, Selb, Germany). As a result, the revealed phase, physical and relaxation transformations were detected and discussed. The analysis of the obtained complex of standard thermodynamic and thermochemical characteristics of the investigated objects, the qualitative and quantitative dependences «thermodynamic property – composition», as well as the most general trends of changes in thermodynamic properties of compounds on their structures and physical states are given in detail. The established dependences can be successfully used for the prediction of methods of synthesis of the advanced materials with the required characteristics.

Современные достижения в области сталеплавильного производства

Мялкин И.В., Сафонов В.М.
Выксунский филиал НИТУ "МИСис", Выкса, Россия
E-mail: i.v.myalkin@gamil.com

Современной стратегией сталеплавильного производства является получение стали с низким содержанием неметаллических (как правило, оксидных) включений, для чего концентрация растворенного в стали кислорода должна быть минимальной (не выше 20 - 25 ppm). Обеспечение такой концентрации кислорода в жидком металле в течение внепечной обработки и разливки возможно при содержании растворенного алюминия не менее 0,015 - 0,02%. При этом в условиях производства стали в агрегате ковш-печь (АКП) происходит непрерывное снижение содержания алюминия в стали (вторичное окисление). В результате вторичного окисления может происходить увеличение числа неметаллических включений в стали. Включения эти, как правило, мелкие и потому трудно выводимые.

В настоящем исследовании проведен детальный анализ процессов вторичного окисления стали. В литературных источниках [1, 2] показано, что, основную роль в нем играют межфазные границы ванны металла с фазами, содержащими кислород. Такими поверхностями традиционно считают «металл-воздух» (область «пятна», диспергирование капель шлака и металла в рабочее пространство АКП), а также «шлак-металл». В докладе проанализировано влияние химического состава стали, вязкости, интенсивности ее перемешивания на развитие процесса вторичного окисления. Уточнен механизм окисления алюминия в стали в условиях перемешивания ванны расплава при обработке в АКП.

Показано, что продувка АКП инертным газом сопровождается массопереносом капель металла в шлак. Важность явления эмульгирования металла в шлак заключается в том, что оно способно влиять на скорость переноса кислорода к межфазной поверхности «шлак-металл».

Кроме дисперсии капель металла в шлак, при перемешивании АКП происходит обратное явление – эмульгирование шлака в металл (инверсия). При пневматическом перемешивании системы двух несмешивающихся жидкостей существует критический расход газа, превышение значения которого сопровождается эмульгированием более легкой жидкости в более плотную и как следствие приводит к увеличению скорости экстракции.

Таким образом, в докладе выявлены и детально проанализированы возможные факторы, влияющие на кинетику производства и характеристики получаемой стали.

Список литературы

- [1] Поживанов М.А., Шапазов Е.Х., Свяжин А.Г. Выплавка стали для автолиста М.: Инерконтакт Наука, 2006, 166с.
- [2] Lee K.Y., Park J.M., Park C.W. Rate of reoxidation of ultra-low carbon steel in contact with slag of various compositions. VII International Conference on Molten Slags Fluxes and Salts, The South African Institute of Mining and Metallurgy, 2004.

ПРИГЛАШЕННЫЕ ЛЕКЦИИ

Секция 1

Синтез и свойства октазамещенных металлофталоцианинов, сочетающих бифенилоксизаместители и нитрогруппы или фрагменты 1-бензотриазола

Петлина А.И., Знойко С.А., Шапошников Г.П., Филиппова А.А., Вашурин А.С.
 Ивановский государственный химико-технологический университет,
 Иваново, Россия
 E-mail: znoykosa@yandex.ru

Настоящая работа посвящена синтезу и изучению спектрально-люминесцентных свойств смешанно-замещенных фталоцианинов цинка, алюминия и эрбия, сочетающих на периферии бифенилоксизаместители и нитрогруппы или фрагменты 1-бензотриазола.

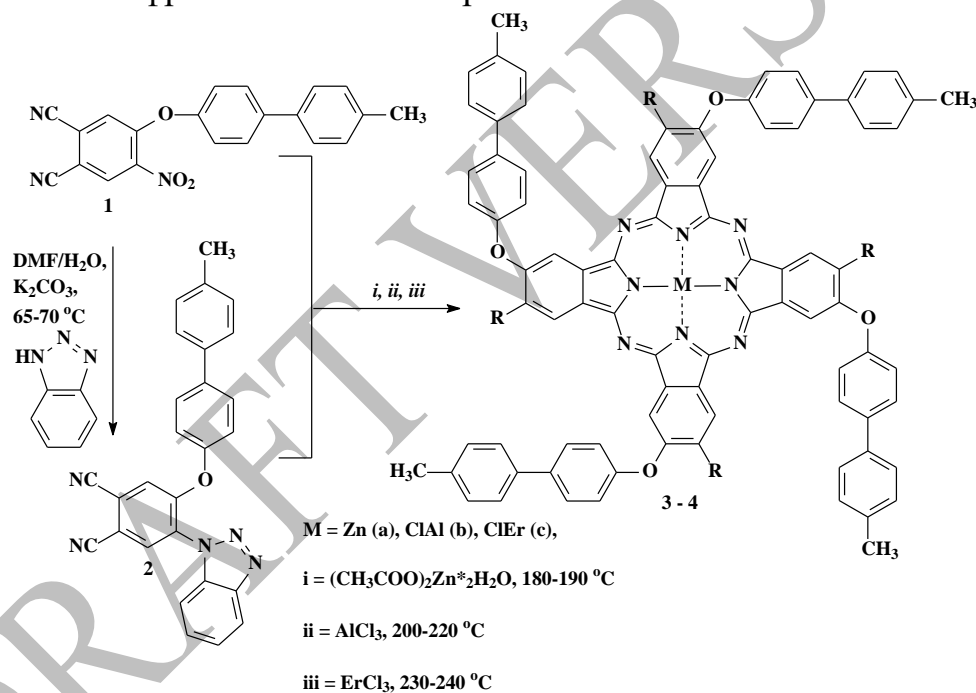


Схема 1.

Целевые металлофталоцианины (3-4) синтезировали на основе предварительно полученных 4,5-дизамещенных фталонитрилов (1-2) (схема), нагреванием последних в присутствии безводных хлоридов алюминия и эрбия или ацетата цинка дигидрата при 180-240 °C в течение 2 часов.

Соединения идентифицировали с привлечением данных элементного анализа, масс-спектрометрии MALDI-TOF, электронной и ИК спектроскопии. Изучены спектрально-люминесцентные свойства синтезированных соединений.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, соглашение № 17-73-20017.

Новые синтетические трансформации кумарина пеурутеницина

Липеева А.В.¹, Захаров Д.О.², Шульц Э.Э.¹

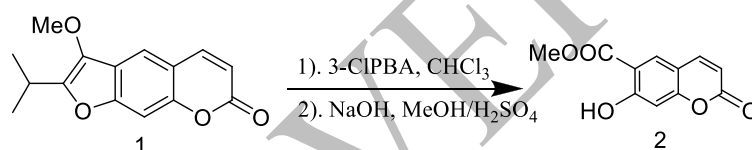
¹Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова,
Новосибирск, Россия

²Новосибирский национальный исследовательский государственный
университет, ул. Пирогова, Новосибирск, 630090, Россия

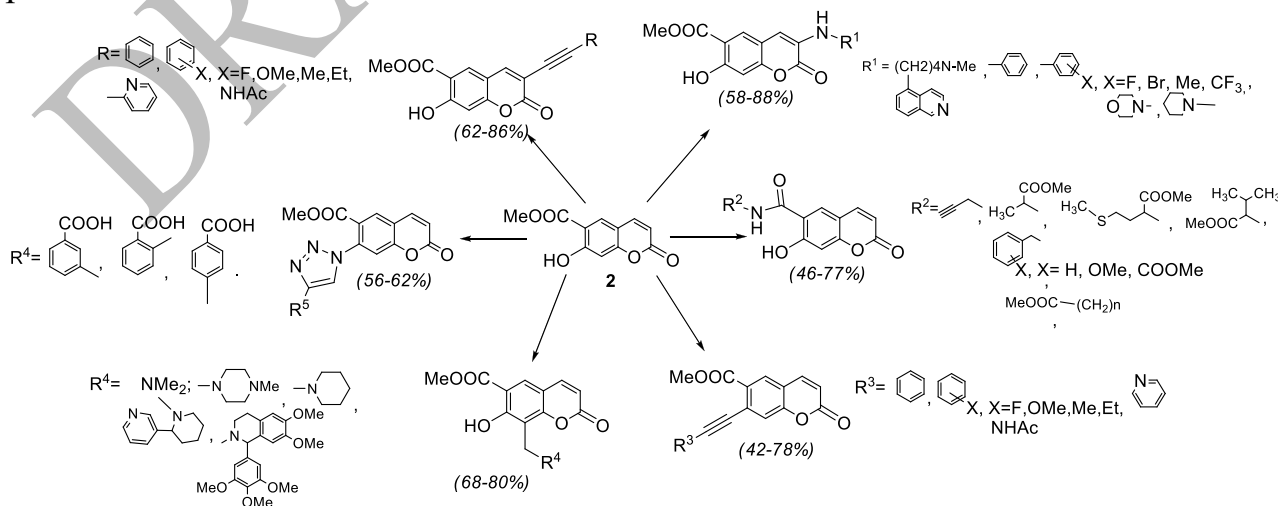
E-mail: mond_05@list.ru

Замещенные кумарины – природные соединения, обладающие разнообразной биологической активностью [1]. Направленные модификации кумаринов с введением новых гетероциклических или ароматических заместителей расширяют синтетический потенциал кумаринов и открывают новые возможности для создания лекарственных агентов.

Ранее в нашей лаборатории предложены методы получения кумарина пеурутеницина (2) из основного метаболита горчицы Морисона пеucedанина (1) [2].



Проводимое нами изучение направленных превращений кумарина пеурутеницина по положениям С-3,6,7,8 позволило разработать методы синтеза большого ряда оригинальных функционально замещенных соединений, в том числе гибридных структур. В качестве основных методов модификации использованы реакция Манниха, реакция Соногаширы, реакции каталитического аминирования, нуклеофильного замещения, а также CuAAC-реакции.



В докладе будут обсуждены выявленные закономерности изученных химических превращений, особенности строения и возможности дальнейшей модификации полученных продуктов, а также представлены данные о фармакологической активности синтезированных соединений.

Работа выполнена при поддержке РФФ (грант № 17-73-10099).

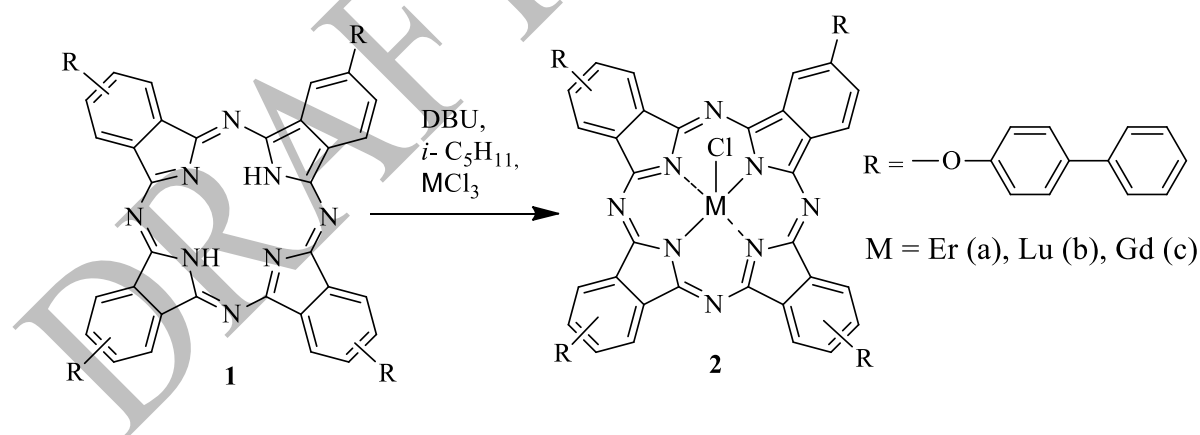
Список литературы

- [1] Saeed, E.; Sakineh, D. Eur. J. Med. // Chem. 2015. V. 102. P. 611-630
 [2] Осадчий С.А., Шульц Э.Э., Шакиров М.М., Толстиков Г.А. // Изв. АН Сер. Хим. 2006. С. 362-365.

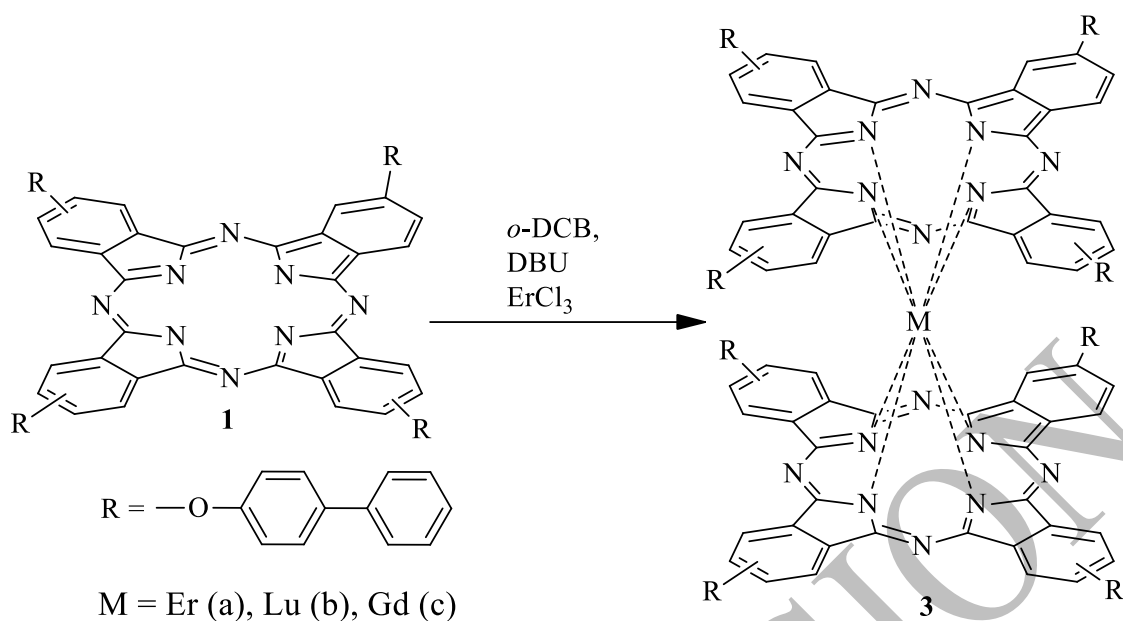
Синтез и свойства тетра-4-{{(1,1'-бифенил)-4-ил}окси}фталоцианинов с редкоземельными металлами

Тихомирова Т.В., Говорова Д.К., Шапошников Г.П., Вашурин А.С.
 Ивановский государственный химико-технологический университет,
 НИИ МГЦ, Иваново, Россия
 E-mail: tararjkina@mail.ru

Металлокомплексы фталоцианинов с лантанидами как планарного, так и сэндвичевого строения интересны в качестве материалов молекулярной электроники и нелинейной оптики. В настоящем сообщении представлены данные по синтезу и спектральным свойствам металлокомплексов тетра-4-{{(1,1'-бифенил)-4-ил}окси}фталоцианина с эрбием, лютецием и гадолинием, а также двухпалубных комплексов на их основе.



Кипячением 4-{{(1,1'-бифенил)-4-ил}окси}фталонитрила с ДБУ в *изо*-амиловом спирте получен тетра-4-{{(1,1'-бифенил)-4-ил}окси}фталоцианин (1). Далее в реакционную массу добавляли пятикратный избыток соли редкоземельного металла и продолжали кипятить в течении 5 часов. Образование однопалубного комплекса (2а-с) контролировали с привлечением электронной спектроскопии и ТСХ.



Синтез двухпалубных комплексов (**3a-c**) осуществляли взаимодействием лиганда-фталоцианина (**1**) в *o*-ДХБ в присутствии ДБУ с хлоридом соответствующего металла. Изучены спектральные свойства синтезированных фталоцианинов (**1-3**) в органических растворителях.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, соглашение 17-73-20017.

Кристаллохимическая роль сукцинат-ионов в структурах кристаллов и первый пример сукциinatoуранилата с N-координированными лигандами

Рогалева Е.Ф., Сережкина Л.Б.

*Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия**E-mail: tishariel@gmail.com*

С помощью комплекса программ TOPOS-InterMol проведен кристаллохимический анализ соединений, содержащих в своей структуре 262 кристаллографически неэквивалентных сукцинат-иона и атомы любых лантанидов или актинидов. Установлено, что сукцинат-ионы проявляют по отношению к атомам f-металлов 10 типов координации. С учетом литературных данных [1] обнаружено, что рост числа метиленовых групп в гомологическом ряду $[\text{O}_2\text{C}-(\text{CH}_2)_n-\text{CO}_2]^{2-}$ сопровождается резким уменьшением склонности дикарбоксилат-иона координироваться к металлу атомами кислорода одновременно обеих карбоксильных групп с образованием соответственно пяти- (оксалат), шести- (малонат) и семичленного (сукцинат) цикла. Выяснено, что тип координации дианиона влияет на выбор его предпочтительной конформации (трансоидной ϕ^3 или скошенной ϕ^1) в структурах кристаллов.

Методом рентгеноструктурного анализа (РСА) изучено строение кристаллов впервые полученного координационного полимера состава $[\text{UO}_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4)(\text{C}_2\text{H}_4\text{N}_4)_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (I), где $\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4^{2-}$ – сукцинат-анион, $\text{C}_2\text{H}_4\text{N}_4$ – цианогуанидин. Координационные числа всех атомов в структуре определены с помощью метода пересекающихся сфер. Установлено, что координационный полиэдр (КП) атома урана представляет собой гексагональную бипирамиду состава UO_6N_2 , а ион уранила имеет линейное и равноплечное строение. В экваториальной плоскости КП находятся четыре атома кислорода двух сукцинат-ионов, координированных бидентатно-циклически (Q^{02}) с каждым из двух атомов урана с образованием четырехчленных металлоциклов, и два атома азота, принадлежащие двум молекулам дициандиамида, которые координированы монодентатно с типом координации M^1 . Структурными единицами кристаллов являются электронейтральные цепочки состава $[\text{UO}_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4)(\text{C}_2\text{H}_4\text{N}_4)_2]$, относящиеся к кристаллохимической группе $AQ^{02}M^1$ комплексов уранила, где $A = \text{UO}_2^{2+}$, $Q^{02} = \text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4^{2-}$, $M^1 = \text{C}_2\text{H}_4\text{N}_4$. Цепочки объединены в каркас за счет системы водородных связей с участием внешнесферных молекул воды и групп $-\text{NH}_2$. Кристаллы были исследованы методом ИК спектроскопии. Полученные результаты хорошо согласуются с данными РСА.

Список литературы

[1] Сережкин В.Н., Медведков Я.А., Сережкина Л.Б., Пушкин Д.В. // Журн. физич. химии. 2015. Т. 89. № 6. С. 978–988.

Переработка метанола на оксидных железомолибденовых катализаторах

Румянцев Р.Н., Дао К.К., Ильин А.А., Ужевская У.С., Горянская В.А.
Ивановский государственный химико-технологический университет
Иваново, Россия
E-mail: rn86@ya.ru

Большая часть производимого на сегодняшний день метанола перерабатывается в формальдегид и карбамидо-формальдегидный концентрат. Технологии получения данных продуктов основаны на каталитическом окислении метанола на нанесенных серебряных или оксидных железомолибденовых катализаторах. Каждая из рассматриваемых технологий имеет свои преимущества и недостатки. Так, например, использование серебряных катализаторов предполагает высокие расходные коэффициенты по сырью и температуры проведения процесса. Кроме того, получаемый формальдегид содержит большое количество примесей (метанол, муравьиная кислота и т.д.). Оксидные катализаторы позволяют избежать недостатков металлических контактов, так как обладают высокой селективностью и позволяют проводить процесс при более низких температурах. К недостаткам их использования можно отнести сложность конструкции каталитического реактора и небольшой срок службы, который составляет 1-1,5 года. Кроме того, нельзя не упомянуть и то, что технологии производства данного вида катализаторов в России отсутствуют, а на химических предприятиях используются зарубежные контакты производств таких фирм как Perstorp (Швеция) и Haldor Topsøe (Дания).

Обобщая вышеизложенное, можно сделать вывод, что одним из перспективных направлений является разработка научных основ и опытно-конструкторских разработок, направленных на создание российской технологии получения оксидных катализаторов для синтеза формальдегида.

В представленном докладе обобщены сведения по получению железомолибденовых катализаторов с помощью ресурсо- и энергосберегающих методов, позволяющих исключить образование больших количеств сточных вод и газовых выбросов. Приведены данные по активности, селективности и влиянию модифицирующих добавок на каталитические и физико-химические свойства разрабатываемых катализаторов. Представлены данные, подтверждающие сопоставимость свойств разработанных катализаторов с их аналогами ведущих зарубежных производителей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (проект 3.1371.2017/4.6). Исследование проведено с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ФГБОУ ВО «ИГХТУ».

Синтез никелотеллуридов щелочных металлов

Рыжакова А.П., Налбандян В.Б.

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

E-mail: a.ryzhakova@mail.ru

Слоистые теллуриды щелочных и переходных металлов представляют большой интерес своими магнитными свойствами, катионной проводимостью и возможностью обратимого извлечения-внедрения щелочных катионов в роли электродных материалов химических источников тока.

Структура $\text{Na}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ (пр. гр. $R\bar{3}m$) основана на бруситоподобных слоях $(\text{Ni}_2\text{Te}_2\text{O}_6)^{2-}$ с упорядочением Ni/Te по типу пчелиных сот, между которыми в треугольно-призматическом окружении находятся ионы натрия [1]. Калиевый аналог синтезирован впервые М.А. Евстигнеевой [2], но из-за быстрой гидратации на воздухе остался практически не исследованным. В данной работе эта фаза воспроизведена и изучена благодаря защите от атмосферы: синтез фазы проводили в закрытом тигле, затем резко охлаждали и хранили в эксикаторе; для рентгеновского исследования керамику перетирали в боксе с сухим воздухом, порошок упаковывали в кювету дифрактометра и герметизировали полуцилиндрической крышкой из полимерной пленки. Выявлены следующие особенности:

- $\text{K}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ строго изоструктурен натриевому аналогу, но резко отличается гигроскопичностью, что объясняется существенно увеличенным межслоевым расстоянием: 6,21 против 5,57 Å; при гидратации симметрия сохраняется, но межслоевое расстояние возрастает до 6,93 Å;

- $\text{K}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$, в отличие от натриевого соединения, легко окисляется. При нагревании выше 830-850°C зеленые образцы быстро чернеют, превращаясь в катиондефицитный $\text{K}_{2-x}\text{Ni}_2\text{TeO}_6$; мы объясняем это сильным отталкиванием калий-калий вдоль короткой псевдотрансляции $a_0=3,03$ Å;

- стехиометрический $\text{K}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ – преимущественно ионный проводник (6 мСм/см при 300°C), окисление же приводит к преобладанию у образца электронной проводимости (22 мСм/см при 300°C).

Мы отметили, что ранее описанный $\text{Li}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$, полученный ионным обменом из натриевого аналога [2], содержал примесь посторонней фазы (предположительно из-за того, что натриевый прекурсор был смесью политипов). В данной работе $\text{Li}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ получен в однофазном виде из калиевого прекурсора кратковременным выдерживанием в расплаве LiNO_3 при 330°C. В отличие от обоих прекурсоров, симметрия литиевого соединения понижается до орторомбической (пр.гр. $Cmca$), однако остается слоистой. Нагревание или продолжительное хранение приводит к деградации фазы.

Список литературы

- [1] Evstigneeva M.A., Nalbandyan V.B., Petrenko A.A., Medvedev B.S., Kataev A.A.// Chem. Mater. 2011. V.23(5). P.1174–1181.
[2] Евстигнеева М.А.. Дисс. ... канд. хим. наук. Ростов-на-Дону. ЮФУ. 2013.

Повышение эффективности очистки нефтесодержащих сточных вод

Дремичева Е.С.

Казанский государственный энергетический университет, Казань, Россия

E-mail: lenysha@mail.ru

При добыче, переработке и транспортировке нефтепродуктов образуется большое количество нефтесодержащих вод с малым содержанием нефтепродуктов. Наиболее простым и распространенным способом выделения из сточных вод нефтепродуктов, которые под действием гравитационной силы оседают на дне аппарата или всплывают на его поверхность, является процесс отстаивания. Однако эффективность метода отстаивания обычно не превышает 40–60%. В работе были проведены исследования кинетики осаждения нефтепродуктов из сточных вод, а также возможность интенсификации данного процесса путем добавления химических реагентов – деэмульгаторов аналогично методам разрушения эмульсий в условиях добычи нефти.

Эксперимент проводился на модельной водонефтяной эмульсии. Для ее создания бралась дистиллированная вода и нефть Ромашкинского месторождения. В качестве интенсификатора разделения эмульсии гравитационным осаждением использовали добавление ПАВ следующего состава: вода, лауретсульфат натрия, оксид лаурамина, полипропиленгликоль. Эксперимент проводился с замером времени осаждения и толщины слоя нефти.

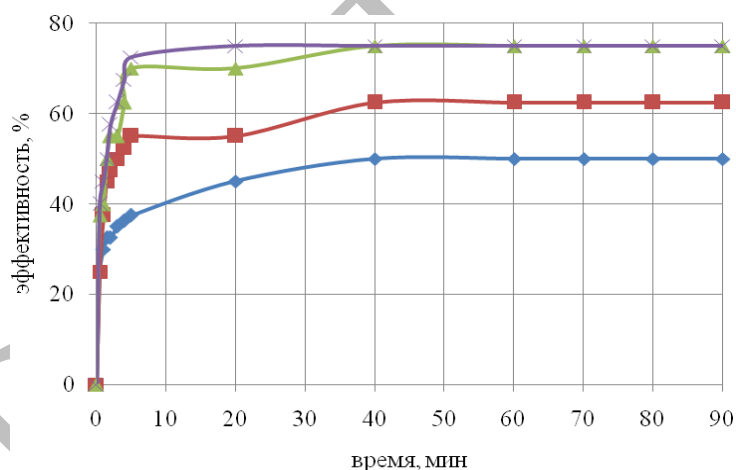


Рис. 1. Зависимость эффективности разделения водонефтяной эмульсии: ♦ – «холостое» испытание, ■ – ПАВ 1,25 мг/дм³, ▲ – ПАВ 1,8 мг/дм³, × – ПАВ 2,5 мг/дм³

Как видно, добавление ПАВ интенсифицирует разделение водонефтяной эмульсии, эффективность процесса увеличивается с 50 до 63% и 75% при добавлении ПАВ в концентрации 1,25 и 2,5 мг/дм³. Причем увеличение количества добавляемых ПАВ с 1,8 до 2,5 мг/дм³ на скорость разделения водонефтяной эмульсии не влияет.

Данные результаты в дальнейшем могут быть использованы для расчетов отстойников сточных вод различных типов для выделения нефтепродуктов.

Экстракция катионов металлов в системах на основе синергетических смесей бис(алкилполиоксиэтилен)фосфата калия и хлорида алкилбензилдиметиламмония

Елохов А.М.^{1,2}, Богомолов Н.В.¹

¹*Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия*

²*Естественнонаучный институт Пермского государственного национального исследовательского университета, Пермь, Россия*
E-mail: elhalex@yandex.ru

В последние годы широкое распространение получила экстракция смесями ионных ПАВ. Однако расслаивание в указанных системах существует лишь в узком концентрационном интервале, отличном от эквимолярного, что ограничивает применимость подобных систем. Увеличение размеров полярных групп молекул ПАВ, в первую очередь за счет введения оксиэтиленовых фрагментов, препятствует фазовому разделению вследствие ослабления притяжения между ионными группами. Представляло интерес изучить возможность экстракции катионов металлов в системах на основе смесей бис(алкилполиоксиэтилен)фосфат калия (оксифос Б, $[C_nH_{2n+1}O(C_2H_4O)_6]_2POOK$, $n=8-10$) и алкилбензилдиметиламмоний хлорид (катамин АБ, $[C_nH_{2n+1}N^+(CH_3)_2CH_2C_6H_5]Cl^-$, $n=10-18$).

На основании изучения растворимости в системах катамин АБ – оксифос Б – вода и $(NH_4)_2SO_4$ – катамин АБ – оксифос Б – вода установлены оптимальные температурно-концентрационные параметры экстракции смесями ПАВ без высаливателя и в присутствии сульфата аммония.

Исследовано распределение ряда катионов металлов в присутствии серной и хлороводородной кислоты. Ионный ассоциат, образующийся в экстракте, в отсутствие кислоты выступает катионообменным экстрагентом и концентрирует катионы металлов за счет образования труднорастворимых в воде соединений с анионом оксифоса Б. Введение в систему кислот приводит к разрушению ассоциата и протонированию оксиэтиленовых фрагментов молекул оксифоса Б. Образующиеся катионные ПАВ способны экстрагировать катионы металлов в виде хлоридных ацидокомплексов по анионообменному механизму. Для катионов металлов, экстрагирующихся преимущественно по анионообменному механизму, наблюдается постепенное увеличение степени извлечения с ростом кислотности. Для металлов, которые способны экстрагироваться по обоим механизмам, наблюдается характерный минимум на кривых зависимости степени извлечения от кислотности.

Таким образом, показано, что использование в экстракции смесей катионного и оксиэтилированного анионного ПАВ позволяет получить расслаивающиеся смеси при температурах ниже, чем температура расслаивания водных растворов индивидуальных ПАВ, а также синергетические эффекты при осуществлении экстракции катионов металлов.

Межионные взаимодействия в солевых расплавах при учете поляризационных эффектов

Давыдов А.Г., Ткачев Н.К.

*Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН,
Екатеринбург, Россия*

E-mail: A.Davydov@ihte.uran.ru

Информация о термодинамических свойствах и фазовых диаграммах является ключевой при обсуждении задач, связанных со стабильностью и границами существования фаз. Диаграммы плавкости галогенидов щелочных металлов (ГЦМ) представляют большой интерес в различных технологических отраслях, в том числе в электрохимии, металлургии, энергетике, ядерных технологиях и т.д. Данное исследование направлено на решение актуальной для физической химии задачи, связанной с изучением свойств и фазовых равновесий в солевых расплавах.

К настоящему времени накоплен достаточно большой объем экспериментальных данных по диаграммам плавкости галогенидных смесей щелочных металлов [1]. Однако теоретические методы изучения менее развиты. До сих пор разрабатываемые теоретические подходы к описанию фазовых равновесий в солевых системах имели в основном полуэмпирический характер [2-5], в то время как статистическая теория не была приложена для расчета поверхности ликвидус даже в бинарных смесях галогенидов щелочных металлов.

В докладе будет представлена статистико-термодинамическая модель плавления галогенидов щелочных металлов на базе термодинамической теории возмущений. Будет описано влияние поляризационного вклада в парные межионные взаимодействия на равновесие жидкость-твердое тело в солевых расплавах, а также представлены результаты расчетов термодинамических характеристик и ликвидуса в расплавах чистых ГЦМ. Будет сделан вывод о роли поляризационных взаимодействий в статистической теории расплавленных галогенидов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-33-01234 мол_а.

Список литературы

- [1] Посьпайко В.И. и др. // Диаграммы плавкости солевых систем. М.: Металлургия. В 6 т.
- [2] Dessureault Y., Pelton A.D. // J. Chim. Phys. 1991. V. 88. P. 1811-1830.
- [3] Pelton A.D., Sharma R.A. // Calphad. 1996. V. 20. N. 2. P. 231-246.
- [4] Chartrand P., Pelton A.D. // Canadian Metallurgical Quarterly. 2000, V. 39, N. 4, p. 405-420.
- [5] Pelton A.D., Degterov S.A., Eriksson G., Robelin C., Dessureault Y. // Metallurgical and Materials Transactions B. 2000. V. 31. N. 4. P. 651-659.

Влияние различных типов структурной модификации
BF₂-дипиррометенов на их спектрально-люминесцентные свойства
и фотостабильность

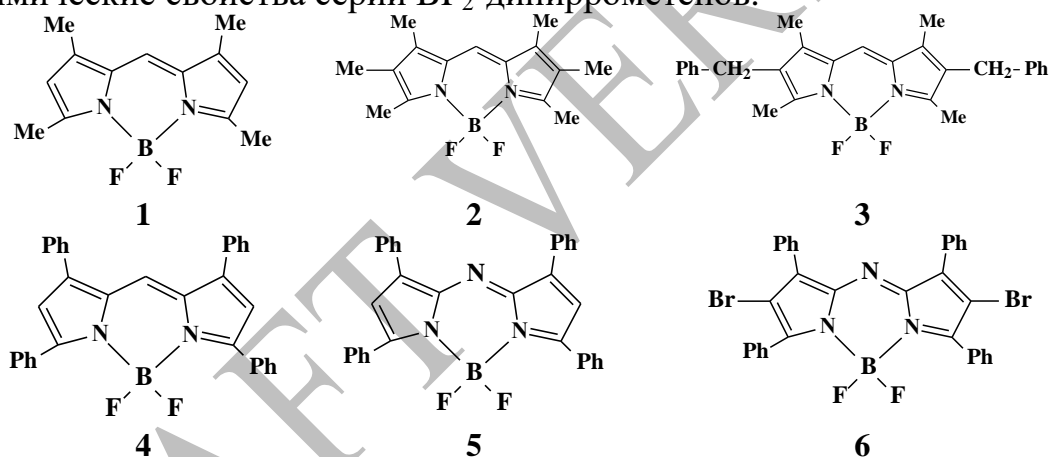
Критская А.Ю., Березин М.Б., Антина Е.В.

Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук,
Иваново, Россия

E-mail: AYNikonova@mail.ru

В настоящее время семейство красителей на основе 4,4-дифтор-4-бор-3а,4а-диаза-*s*-индацена (известных под торговой маркой BODIPY) является предметом активных исследований. Преимущества BODIPY люминофоров – регулируемые в широком диапазоне за счет структурных и сольватационных факторов характеристики спектров поглощения и испускания, значения квантового выхода (до 100%), что позволяет расширить диапазон применения люминофоров, в том числе для решения современных задач аналитической химии, медицины, биологии, лазерной техники и др.

Нами предпринято исследование влияния различных типов структурной модификации дипиррометенового остова на спектрально-люминесцентные и фотохимические свойства серии BF₂-дипиррометенов.



Интенсивная полоса в электронных спектрах поглощения BODIPY 1–6 располагается в диапазоне 503–654 нм ($\lg \epsilon = 4.88–4.98$). Спектры флуоресценции BODIPY 1–6 (512–686 нм) зеркально отражают ЭСП со стоксовыми сдвигами от 5 до 37 нм. Алкилирование β -позиций пиррольных циклов вызывает значительный до 22–24 нм батохромный сдвиг интенсивных полос спектров поглощения и флуоресценции 2, 3 по сравнению с незамещенным аналогом 1. Сочетание мезо-аза-замещения с заменой пиррольных атомов водорода на арильные группы позволяет добиться красного сдвига до 140 и 160 нм интенсивных полос поглощения и флуоресценции соответственно, но сопровождается 4–5-ти кратным уменьшением квантового выхода флуоресценции тетрафенил-аза-BODIPY 5 в сравнении с аналогами 1–6. Бромирование β -позиций пиррольных циклов тетрафенил-аза-BODIPY в 10 раз понижает квантовый выход флуоресценции BODIPY 6. Показано, что BODIPY 1–6 генерируют вынужденное излучение. В докладе также обсуждаются результаты исследования фотостабильности BODIPY 1–6 в растворах под действием УФ излучения.

**Фазовый комплекс стабильного тетраэдра LiF–KI–KF–K₂CrO₄
четырёхкомпонентной взаимной системы Li,K||F,I,CrO₄**

Бурчаков А.В.

*Самарский государственный технический университет,
Самара, Россия*

E-mail: turnik27@yandex.ru

Квазичетверная система LiF–KI–KF–K₂CrO₄ является объединенным стабильным тетраэдром четырехкомпонентной взаимной системы Li,K||F,I,CrO₄ вследствие образования соединения K₃FCrO₄ [1]. Экспериментальное изучение системы проведено дифференциальным термическим анализом, снимали кривые охлаждения образцов составов с фиксацией термоэффектов. Выбор и изучение рациональных политермических разрезов в фазовых областях кристаллизации LiF и KF позволил определить координаты неинвариантных точек: концентрацию компонентов в эквив. % и температуру превращения в °С. Неинвариантные равновесия системы описываются следующими фазовыми реакциями: E[□] 488: ж \rightleftharpoons LiF+KF+KI+ α -K₂CrO₄ и P[□] 510: ж+K₃FCrO₄ \rightleftharpoons KI+ α -K₂CrO₄+KF. Сконструирована 3D-модель фазового комплекса системы в виде концентрационного тетраэдра в программе КОМПАС-3D (рис. 1), позволившая спрогнозировать фазовые превращения для произвольной композиции системы.

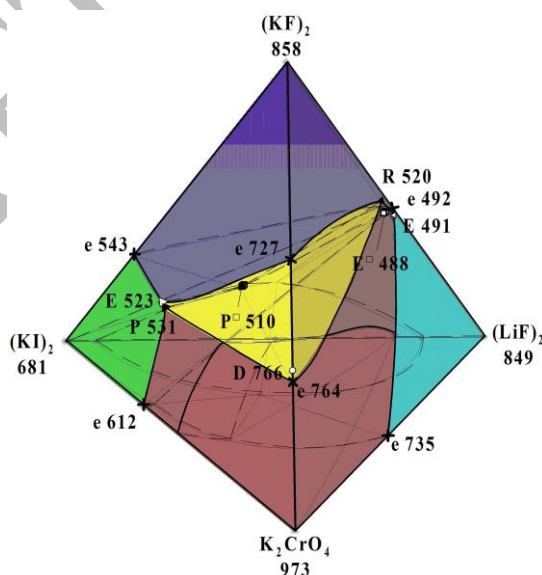


Рис. 1. Фазовый комплекс стабильного тетраэдра LiF–KI–KF–K₂CrO₄.

Список литературы

[1] Бурчаков А.В., Дворянова Е.М., Кондратюк И.М. // Журнал неорганической химии. Т. 61, № 4, 2016, С. 519–529.

Определение давления насыщенного пара и энтальпий испарения
сложных эфиров молочной кислоты

Портнова С.В., Ямщикова Ю.Ф.

Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

E-mail: kinterm@samgtu.ru

В настоящее время наблюдается ухудшение экологической ситуации в связи с трудоемкостью утилизации традиционных видов пластмасс. Решением данной проблемы является производство и применение полимеров, способных при соответствующих условиях биodeградировать на безвредные компоненты. Одним из самых перспективных пластиков является полилактид, получаемый из лактида или сложных эфиров молочной кислоты.

В нашей работе были получены эфиры молочной кислоты спиртов $C_1 - C_5$. Синтез продуктов осуществлялся этерификацией без применения катализатора с использованием мольного избытка спирта в соотношении спирт:кислота 4:1. Анализ полученных эфиров молочной кислоты проводился методом ГЖХ с использованием газового хроматографа «Кристалл-2000М» с пламенно-ионизационным детектором на капиллярной колонке с привитой неполярной фазой DB – 1. Чистота полученных образцов составила 98 – 99 % масс.

В работе экспериментально были определены давления паров сложных эфиров молочной кислоты методом переноса. На данный момент получены значения давлений паров для пропилактата и пентилактата в интервале температур от 299,3 до 330,3 К и от 303,4 до 343,2 К соответственно. Полученные p - T -зависимости описывались уравнением вида:

$$R \cdot \ln\left(\frac{p}{p_{aw}}\right) = A_f - \frac{B_f}{T} + \Delta_{ж}^n C p^o \cdot \ln\left(\frac{T}{T_{aw}}\right),$$

где p – давление паров при T ; p_{aw} – давление паров при средней температуре исследования T_{aw} ; A_f и B_f – эмпирические коэффициенты, полученные обработкой p - T -данных методом наименьших квадратов; $\Delta_{ж}^n C p^o$ – разность мольных теплоемкостей газовой и жидкой фаз.

Величину энтальпии испарения $\Delta_{vap} H_m^o$ при 298.2 К определяли по уравнению:

$$\Delta_{vap} H_m^o (298.2) = -B_f + \Delta_{ж}^n C p^o \cdot 298.2$$

Для пропилового эфира молочной кислоты энтальпия испарения составила 55,21 кДж/моль, для пентилового – 62,54 кДж/моль.

На данный момент проводится экспериментальные исследования по получению давлений насыщенных паров и энтальпий испарения для метилактата, этилактата и бутилактата.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, номер проекта 17-08-00967_а.

Разработка конверсионного способа получения формиата кальция в системах Ca^{2+} , Na^+ // HCOO^- , An^- – H_2O

Елохов А.М.^{1,2}, Лукманова Л.М.¹, Горденчук А.Д.¹

¹Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия

²Естественнонаучный институт Пермского государственного национального исследовательского университета, Пермь, Россия
E-mail: elhalex@yandex.ru

Формиат кальция применяется в различных отраслях промышленности: в качестве ингибирующих добавок в бетонных изделиях, компонентов противогололедных реагентов, как антикоррозийная добавка к дезинфицирующим средствам для воды. В пищевой промышленности он используется в качестве консерванта и заменителя соли. В сельском хозяйстве входит в состав композиций для профилактики и лечения дефицита кальция у животных, а также применяется как компонент комплексных удобрений.

Наиболее экологически безопасным и простым способом получения водорастворимых солей является конверсионный. Формиат кальция можно получить по реакции обменного разложения формиата натрия и водорастворимых солей кальция:



Впервые изучена растворимость в четырехкомпонентных взаимных системах Ca^{2+} , Na^+ // HCOO^- , Cl^- – H_2O и Ca^{2+} , Na^+ // HCOO^- , NO_3^- – H_2O при 25°C. На диагональных разрезах $\text{HCOONa} - \text{CaAn}_2 - \text{H}_2\text{O}$ обнаружены области кристаллизации солей, образующих системы и $\text{Ca}(\text{HCOO})_2$, следовательно, NaHCOO и $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ (или CaCl_2) являются нестабильной парой солей. Диагональные разрезы $\text{Ca}(\text{HCOO})_2 - \text{NaAn} - \text{H}_2\text{O}$ являются системами простого эвтонического типа, соответственно формиат кальция и нитрат натрия (или хлорид натрия) – стабильная пара солей. Большую часть диаграммы растворимости четырехкомпонентных систем занимают области кристаллизации безводных формиата кальция и хлорида или нитрата натрия; хлорид кальция кристаллизуется в виде гексагидрата, нитрат кальция – в виде тетрагидрата, а формиат натрия – в виде дигидрата.

Полученные экспериментальные данные позволили оптимизировать соотношение солей и концентрацию воды в исходном растворе для получения максимального выхода формиата кальция. Чистота полученного в лабораторных опытах формиата кальция после промывания насыщенным раствором 99,5–99,9%. Показано, что в качестве сырья могут использоваться растворы формиата натрия, получаемые при производстве пентаэритрита или хлороформа, раствор хлорида кальция – побочный продукт содового производства или растворы нитрата кальция, образующиеся при переработке фосфорных руд.

**Оценка миграционной способности выделения
акарицидно-репеллентных веществ**

Липина А.А., Авакова Е.О.

*«Ивановский государственный химико-технологический университет»,
Иваново, Россия*

E-mail: prohorova.a94@yandex.ru

В настоящее время синтез микро- и нанокапсул привлекает к себе особое внимание исследователей всего мира в связи с широким спектром их практического применения [1].

Особую актуальность приобретает метод микрокапсулирования для репеллентной отделки текстильных материалов. Костюмы с такой отделкой являются необходимым средством защиты для геологов, спасателей, военнослужащих [2]. Приобретают необходимость разработки экспресс-метода оценки влияния условий получения и состава эмульсионной композиции на возможную миграцию репеллента из текстильного материала.

Для решения данной задачи, был проведен модельный эксперимент, в котором бесцветный альфациперметрин в составе эмульсий был заменен окрашенным соединением. В качестве такого модельного соединения был использован жирорастворимый краситель Судан IV. В качестве полиэлектролитов были использованы: полидиаллилдиметиламмоний хлорид (ПДАДМАХ) производства ОАО «Башкирская содовая компания», город Стерлитамак - синтетический органический высокомолекулярный катионный водорастворимый полимер линейно-циклической структуры и Акремоны (ЗАО «Оргполимерсинтез», город Санкт-Петербург) – анионные полиэлектролиты на основе поликарбоновых кислот, их солей и эфиров, а также неиногенные оксиэтилированные алкилфенолы.

Исследовано влияние состава композиции и условий обработки на степень иммобилизации АРВ на текстильном материале. Методом спектрофотометрии оценено влияние концентрации катионного полиэлектролита на скорость выделения красителя из оболочки капсулы. Проанализировано влияние способа иммобилизации полиэлектролитов на интенсивность выделения красителя из текстильного материала. Изучено влияние плотности заряда катионного полиэлектролита на интенсивность выделения красителя. Таким образом, разработан эффективный экспресс-метод, позволяющий исследовать и оценить миграционную способность бесцветных капсулированных акарицидно-репеллентных веществ в окружающую среду.

Список литературы

[1] De Geest, B.G., Sukhorukov, O. Kreft, W.J. // *Soft Matter*. 2009. № 5. P. 282-291.

[2] Одинцова О.И., Прохорова (Липина) А.А, Владимирцева Е.Л., Петрова Л.С.. // *Изв. Вузов. Технология текстильной промышленности*. 2017. № 1. С.332-336.

**СЕКЦИОННЫЕ
ДОКЛАДЫ**

DRAFT VERSION

СЕКЦИЯ 1

Органическая, биомедицинская, элементарганическая химия и химия высокомолекулярных соединений

Synthesis of alkyl rare earth complexes supported by diphenylmethanido ligands and their application in stereospecific isoprene polymerization

A. Fayoumi, D. Lyubov and A. Trifonov

Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, Nizhni Novgorod, Russia

G. A. Razuvaev Institute of organometallic Chemistry, Nizhny Novgorod, Russia

E-mail: adfu_87@hotmail.com

An impressive progress has been made in the chemistry of σ -bonded rare earth metal alkyls, which proved to be highly active species that exhibit unique reactivity and catalytic activity in a wide range of conversions of unsaturated substrates. Alkyl rare earth complexes until recently remained poorly explored due to their limited thermal stability and tendency to undergo ligand redistribution and C–H bond activation reactions. Currently this class of compounds is in the focus of interest as potential precursors to cationic alkyl species that are found to be efficient catalysts of homo and copolymerization of dienes. On the other hand the preparation of polymers with desired microstructures and properties by controlling the regio- and stereoselectivity of olefin polymerization is an important research area. One of the possibilities to govern the metal complex selectivity in diene polymerization is rational design of its coordination sphere by using of polydentate spectator ligands. In our study, it was suggested to use substituted diphenylmethane fragments containing donor imidazolyl groups in the ortho-positions of the phenyl rings and it was obtained by the cross-coupling reaction of Stille between bis (2-bromo-4- (tert-butyl) phenyl) methane, or bis (2-iodo-4- (tert-butyl) phenyl) methane and tributylimidazolite in the presence of 5% Pd [PPh₃]. In next step it was synthesized a series of imidazolyl substituted diphenylmethyl bis(alkyl) rare-earth complexes of Sc, Y and Nd.

It was found out that in the first stage the coordination of nitrogen atoms of the imidazolyl fragments to the rare earth metal center takes place. In the second stage of the reaction, a slow intramolecular activation of the CH-diphenylmethane bond goes with elimination of SiMe₄ and formation of the mixed-alkyl derivative of [(4-*t*Bu-2-(C₃H₂N₂Me)C₆H₃)₂CH]Ln(CH₂SiMe₃)₂(THF)_n (Ln = Sc, n = 0, Y, Nd, n=1). The catalytic activity of complexes in isoprene polymerization was evaluated in composition of ternary systems Ln–borate ([Ph₃C][B(C₆F₅)₄] or [PhNHMe₂][B(C₆F₅)₄])–AlR₃ in toluene at room temperature. The influence of the metal nature on the activity and selectivity also as borate nature was found out.

**Synthesis of copolymers based on unsaturated polyester resin
with methacrylic acid**

Kudaibergen G.K., Burkeev M.Zh., Tazhbaev E.M., Tovstukha K.V.
Karaganda State University named after E.A. Buketov, Karaganda Kazakhstan
E-mail: gulshahar90@mail.ru

Suitable objects for the production of materials whose physico-chemical properties can be controlled are swollen polymers, polymer swells [1]. Polymer hydrogels are a unique class of high-molecular compounds with a three-dimensional structure.

The development of science and technology raises issues of obtaining new polymer materials with a given set of properties at the present stage. Among the various polymer products, polyesters occupy an important place. In particular, unsaturated polyesters due to the simplicity of production, availability of raw materials are increasingly used in a variety of areas [2].

Polyethylene glycolulfumarate ("unsaturated polyester") was obtained by polycondensation of ethylene glycol with fumaric acid in a nitrogen stream at 100 ° C for 7-8 hours, at 150-160° C - up to a given acid number.

To obtain a polymer hydrogel with a high degree of swelling, it is necessary to introduce vinyl comonomer units into the macromolecule forming it. One of these comonomers is a well-studied and already used in many areas methacrylic acid - vinyl monomer, which has a high activity in radical polymerization reactions.

As a result of copolymerization, we obtained insoluble polymers of the network structure in six different ratios 10:90; 15:85; 25:75; 50:50; 75:25; 90:10. The kinetics of the copolymerization rate, with high conversion degrees, without an induction period was studied. The yield was 46-87%, depending on the composition of the copolymer. The composition of the copolymers is proved by IR and NMR-spectroscopy. The degree of swelling varied in the range of 352-1450%, depending on the composition of the copolymer.

Thus, the presence of unsaturated double bonds in the polyethylene glycolulfumarate molecules makes it possible to use the latter as a polymer matrix for the preparation of spatially cross-linked polymers by copolymerization with methacrylic acid, at various ratios of the monomer mixture, in order to study the physico-chemical properties of the copolymers obtained.

References

- [1] Benig G. Unsaturated polyesters. Chemistry. 1968. P.254
- [2] Nishiyama J., Saton M. J.Polymer Sci. B. 2000. V. 38 № 2. P. 2791-2800.

Synthesis and study of copolymers based on unsaturated polyester resin and vinyl monomer

Kudaibergen G.K., Burkeev M.Zh., Tazhbaev E.M., Tovstukha K.V.
Karaganda State University named after E.A. Buketov, Karaganda Kazakhstan
E-mail: gulshahar90@mail.ru

Among the polyfunctional monomers of particular practical interest is a separate cluster compounds represented by unsaturated polyester resins, because of their wide application in various fields. The search for new applications of unsaturated polyesters is an urgent task of modern scientific society [1].

Polyethylene glycolulfumarate (p-EGF) is one of the unsaturated polyesters, the product of polycondensation of fumaric acid with ethylene glycol. P-EGF was used by us to produce crosslinked copolymers capable of absorbing and retaining large amounts of water, which determines a wide range of their applications [2]. Introduction of polyethylene glycolulfumarate units containing carboxyl groups by copolymerization with acrylic acid should give the resulting copolymers with high sorption properties, besides varying the content of the latter, it allows to regulate the size of the spatial grid.

The results of a study of the synthesis of copolymers of polyethylene glycolulfumarate with acrylic acid at different initial ratios of comonomers, the properties of the obtained copolymers.

As a result of copolymerization we obtained insoluble polymers of the network structure in six different ratios such as 10:90; 15:85; 25:75; 50:50; 75:25; 90:10. The rate of kinetics of copolymerization without an induction period with high rates was studied. The synthesized copolymers swell in non-polar solvents. The ratios of 15: 85 and 10:90 show greatest and the smallest degree of swelling respectively. Which make up 1600% and 436%.

The properties of the cross-linked polyethylene glycolulfumarate with acrylic acid copolymers are primarily due to the presence of carboxyl groups in the gel structure. The presence of carboxyl groups provides the swelling process, and the polymer network tends to distribute the solvent-water throughout the volume.

References

- [1] Loch K. P. // *Ungesattigte Poliesterharra (UR)* 1995. V.85. №10. P.1622-1630.
- [2] Benig G. V. // *Chemistry*. 1968. P. 253.

**Synthesis of homopolymers and block copolymers
in the presence of switchable raft-agents**

Polozov E.Yu., Zaitsev S.D., Grigoreva A.O.

Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, Russia, Nizhny Novgorod

E-mail: yegor.polozov@mail.ru

The search of routes to produce new materials by combination of known polymers is extremely interesting and important tendency in modern macromolecular chemistry. So creating block copolymers is one of the most interesting ways, which allows polymer scientists to expand modification possibilities of polymer properties. For example, amphiphilic block copolymers draw scientists' attention, because of their properties such as nanostructured aggregating and micelle forming in water solution via self-assembly. These polymers can be successfully used in different applying in food and pharmaceutical industries and e.t. Reversible-addition chain transfer radical polymerization (RAFT) has been shown to be the simplest and the most effective and versatile technique to produce polymers with predetermined molecular-weight characteristics and different architecture. However, synthesis of amphiphilic block copolymers via RAFT is limited by selection of certain conditions for monomers. It especially relates to block copolymers, which contain block of units a more activated monomer (for example, methyl methacrylate, styrene) and block of units a less activated monomer (for example, vinylacetate, N-vinylpyrrolidone). New type of chain agent transfer, named switchable RAFT-agent, have been found to be effective in synthesis of amphiphilic block copolymers via RAFT process. In dependence of media conditions, switchable RAFT-agents can be successfully applied to polymerization of more activated monomers or less activated monomers. It result in expanded possibilities in synthesis of amphiphilic block copolymers. The aim of our study is investigation of control/living radical polymerization of range more activated monomers and less activated monomers with the use of some switchable chain agent transfers. Also, we have determined optimal conditions to produce low polydispersity homopolymers and block copolymers. Finally, we have studied influence of polymerization conditions, such as a temperature, a type of solvent, on stability of used switchable RAFT-agents and synthesized on their base macro-RAFT-agents.

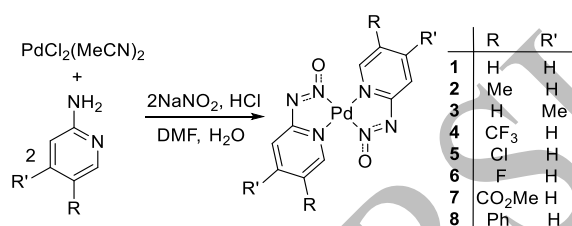
Metal-stabilized pyridinediazotates: synthesis and in vitro studies

Tskhovrebov A.G.

Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg, Russia

E-mail: a.g.tshovrebov@spbu.ru

Well-defined diazotates are scarce. Here we describe the synthesis of unprecedented homoleptic Pd^{II} diazotate complexes. The Pd^{II}-mediated nitrosylation of 2-aminopyridines with NaNO₂ results in the formation of metal-stabilized diazotates (fig. 1), which were found to be cytotoxic to human ovarian cancer cells (table 1).

Fig. 1. Synthesis of homoleptic Pd^{II} diazotates.Table 1. Cytotoxicity (IC₅₀, μM) of **1**, **2**, **4** and **5** following incubation for 72 h with non-cancerous human ovarian carcinoma A2780 and A2780R (cisplatin-resistant) cell lines and human embryonic kidney HEK293 cells.

	A2780	A2780cisR	HEK293
1	7.4 ± 3.8	2.8 ± 2.2	4.8 ± 2.8
2	5.6 ± 0.7	8.6 ± 1.2	13.0 ± 0.8
4	71.5 ± 3.2	58.8 ± 3.2	58.1 ± 8.0
5	0.9 ± 0.1	1.4 ± 0.2	1.7 ± 0.6
cisplatin	1.0 ± 0.2	25 ± 1	7.3 ± 0.6

This work was supported by the Ministry of Education of the RF (MK-676.2017.3)

References

- [1] Tskhovrebov A. G., Solari E., Wodrich M. D., Scopelliti R., Severin K. // *Angew. Chemie Int. Ed.* 2012. V. 51, P. 232–234.
- [2] Tskhovrebov A. G., Vuichoud B., Solari E., Scopelliti R., Severin K. // *J. Am. Chem. Soc.* 2013. V. 135. P. 9486–9492.
- [3] Tskhovrebov A. G., Solari E., Scopelliti R., Severin K. // *Inorg. Chem.* 2013 V. 52. P. 11688–11690.
- [4] Tskhovrebov A. G., Solari E., Wodrich M. D., Scopelliti R., Severin K. // *J. Am. Chem. Soc.* 2012, V. 134. P. 1471–1473.
- [5] Tskhovrebov A. G., Naested L. C. E., Solari E., Scopelliti R., Severin K. // *Angew. Chemie Int. Ed.* 2015. V. 54. P. 1289–1292.

Exploring Selective Inhibition of the First Bromodomain of the Human Bromodomain and Extra-terminal Domain (BET) Proteins

Voitovich Yu.V.^{1,2}, Fedorov A.Yu.¹, Combes S.², Morelli X.²

¹Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, Nizhni Novgorod, Russia

²Centre de Recherche en Cancérologie de Marseille (CRCM), Marseille, France

E-mail: voitovich_25@mail.ru

BET-family of proteins (BRD2, BRD3, BRD4 and BRDT) plays a central role in chromatin biology controlling gene expression in inflammation, viral infection, and cancer [1]. However, pan-BET inhibition might remain an issue regarding the impact on numerous transcriptional pathways and the individual tissue specific functions of BET members [2].

In this study, by midthroughput screening targeting the first bromodomain of the human BRD4 protein, BRD4(BD1), we identified the first low micromolar selective BRD4(BD1) inhibitor, yet presenting low but dose-response down regulation of c-Myc levels in cell-based assay [3].

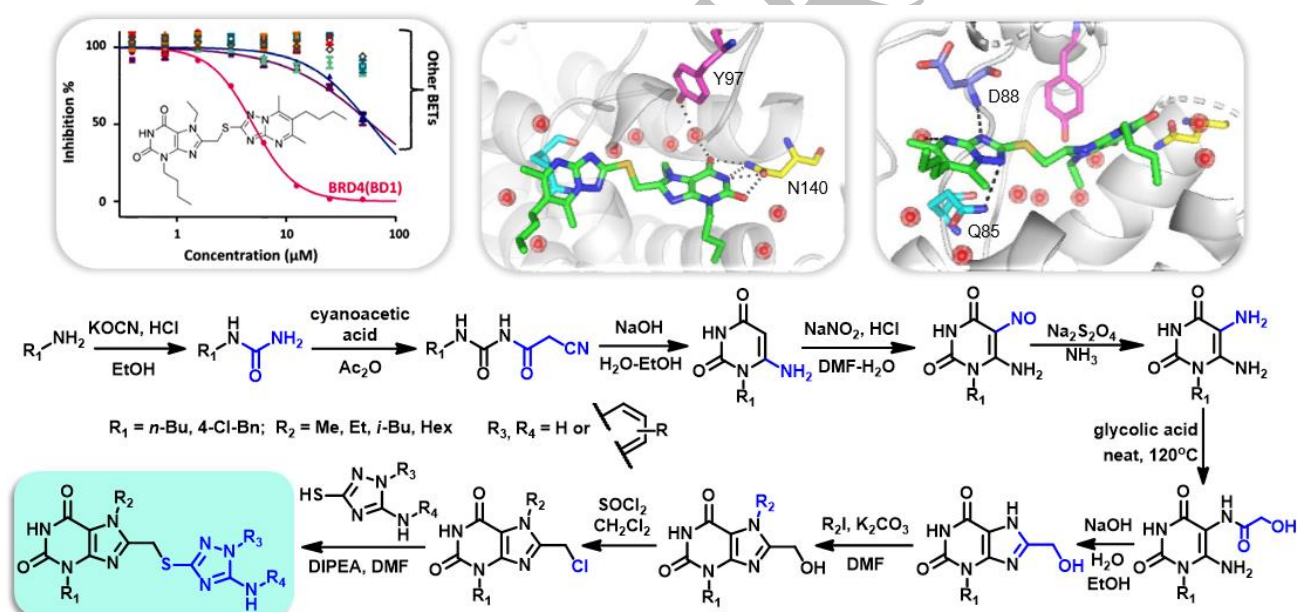


Fig. 1. Molecular mode of action and synthesis of discovered inhibitors.

A structure-based investigation program aiming to define key structural features responsible for the unique selectivity profile toward BRD4(BD1) vs all the other BET proteins was undertaken. These findings propose a potential mechanism for the selectivity of BET bromodomains.

References

- [1] A.Belkina *et al.* // Nat.Rev.Cancer, 2012, 12, p.465.
- [2] G.Andrieu *et al.* // Drug Discovery Today: Technologies, 2016, 19, p.45.
- [3] Yu.Voitovich *et al.* // J.Med.Chem, 2016, 59, p.1634.

**Механизмы формирования структуры продуктов реакции Майяра
в этанольных средах**

Абдуллина Г.М., Черепанов И.С.

Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия

E-mail: cherchem@mail.ru

Закономерности образования продуктов начальных, промежуточных и конечных стадий реакции Майяра в последнее время изучаются особенно интенсивно, поскольку независимыми методами получены достоверные данные о наличии у меланоидинов как положительных, так и негативных, в частности, мутагенных свойств [1]. К настоящему времени можно с уверенностью утверждать, что структура полимерных продуктов реакций неферментативного окрашивания в углевод-аминных системах определяется природой реагентов и растворителя, при этом в значительной степени изучены механизмы формирования продуктов реакций в водных растворах, тогда как поведение неводных систем детального исследования не получило.

В настоящей работе представлены результаты исследования механизмов формирования продуктов различных стадий реакций неферментативного окрашивания в кислых водно-этанольных углеводных системах в присутствии ариламинов методами спектроскопии ультрафиолетовой и видимой области, ИК-спектроскопии и масс-спектрометрии с пиролитической деструкцией.

На ранних стадиях вслед за реакцией гликозирования следует перегруппировка Амадори, затрудненная для ариаминов пониженной основности; дальнейшие процессы в подобных системах могут интенсивно протекать в присутствии ионов металлов [2]. Продукты перегруппировки Амадори, претерпевая элиминирование ариламина, далее подвергаются ретро-альдольному, либо α -дикарбонильному распаду, при этом показано, что в этанольной среде наряду с общеизвестными циклическими и ациклическими редуктонами [1] формируется ряд новых интермедиатов, в частности установлено образование оксиметилфуранов как результат гетероциклизации 3-дезоксипентазонов. Поздние стадии меланоидинообразования подчиняются закономерностям, характерным для процессов карбонильных конденсаций, спектральные данные показывают наличие сопряженных систем эндо- и экзоциклических кратных связей в полимерной структуре конечных «браун»-продуктов, при этом из систем на основе моносахаридов (*D*-ксилоза, *D*-глюкоза) выделяются преимущественно псевдомеланоидины с малым содержанием азота, тогда как из систем на основе *D*-лактозы были получены азотсодержащие гетероароматические производные. Дальнейшее направление исследований будет связано с подбором условий синтеза, обеспечивающих оптимальные выходы целевых продуктов, в том числе с применением замещенных углеводов.

Список литературы

- [1] Nursten H. The Maillard reaction: chemistry, biochemistry and implication. The Royal Society of Chemistry: Cambridge, 2005. 228 p.
[2] Черепанов И.С., Сергеева К.А. // Вестник МГТУ. 2017. Т. 20. С. 528-532.

5,15-диазпорфирин в реакции Ag-катализируемого фосфорилирования

Абсалимова Э.А.¹, Киселёв А.Н.², Сырбу С.А.²

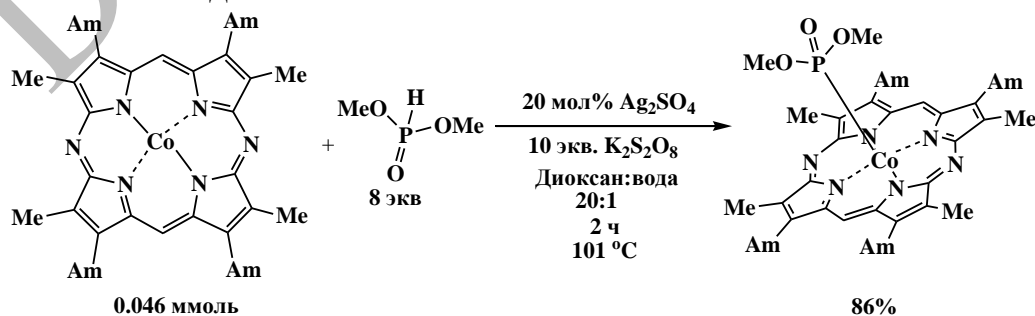
¹Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия

²Институт химии растворов Российской академии наук, Иваново, Россия
E-mail: absaliamova97@mail.ru

5,15-Диазпорфирины с β -алкильными заместителями являются интересными макрогетероциклическими соединениями, т.к. могут стать перспективной платформой при создании новых материалов для сенсоров, фотовольтаических устройств, а также потенциальных фотосенсибилизаторов в фотодинамической терапии. Однако, на данный момент, их практическое применение ограничено из-за трудной доступности и малой изученности их свойств. В связи с этим перспективной задачей является синтез и изучение свойств этих соединений.

Нами впервые проведён синтез 3,7,13,17-тетраметил-2,8,12,18-тетраамил-5,15-диазпорфирината кобальта в котором остаток диметоксифосфила аксиально связан с атомом кобальта. Исходный 3,7,13,17-тетраметил-2,8,12,18-тетраамил-5,15-диазпорфиринат кобальта получали в несколько этапов. Сначала 2+2 конденсацией соответствующего дипирролилметена с азидом натрия в пиридине с добавкой ацетата свинца получали свинцовый комплекс 3,7,13,17-тетраметил-2,8,12,18-тетраамил-5,15-диазпорфирина, который лабилен и при хроматографической очистке даёт безметалльный диазпорфирин. Затем кипячением безметалльного диазпорфирина с ацетатом кобальта в ДМФА получали кобальтовый комплекс 3,7,13,17-тетраметил-2,8,12,18-тетраамил-5,15-диазпорфирина.

Полученный диазпорфиринат кобальта использовали в качестве сустрата в Ag-катализируемой C-P-функционализации. Реакцию проводили с диметилфосфитом и персульфатом калия с добавкой сульфата серебра. Продукт реакции был охарактеризован и выделен с хорошим выходом. Установлено, что замещение по *мезо*-атомам водорода не протекает, что, видимо, связано с дезактивацией макрокольца, а идёт окисление кобальта с присоединением аксиального лиганда.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (соглашение № 16-13-10453).

**Получение и свойства динамических термоэластопластов
на основе полиизопренового каучука и полипропилена
с использованием смоляной вулканизирующей системы**

Алатырева О.В., Насертдинова А.Д., Кашапова Л.Р., Хусаинов А.Д.,
Вольфсон С.И.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия
E-mail: 756597@mail.ru*

Благодаря своей относительно низкой стоимости и достаточно высоким эксплуатационным характеристикам динамические термоэластопласты (ДТЭП) являются в настоящее время одними из самых перспективных классов полимерных композиционных материалов. Наибольшее распространение нашли композиции на основе смеси этиленпропилендиенового каучука и полипропилена, для которых отмечена двухфазная структура, как в расплаве, так и после охлаждения.

Значительное влияние на свойства ДТЭП оказывает тип и концентрация вулканизирующей системы. По этой причине, представляло интерес исследовать влияние типа вулканизирующей системы на динамику вулканизации и структуру ДТЭП полученных на основе полиизопренового каучука (СКИ-3) и полипропилена (ПП).

Композиции, полученные с использованием серной вулканизирующей системы, не обладают достаточной стойкостью к высокотемпературной переработке и подвергаются процессу подвулканизации при переработке и к тому же они имеют более продолжительное время достижения оптимума вулканизации. Поэтому в связи с тем, что смоляные вулканизирующие системы обладают высокой стойкостью к воздействию повышенных температур при вулканизации различных каучуков, нами проведено исследование влияния алкилфенолформальдегидных смол на свойства динамически вулканизованных термоэластопластов.

Для определения оптимального содержания вулканизирующего агента в первую очередь проводились исследования вулканизационных характеристик резиновых смесей с последующим исследованием упруго-прочностных характеристик получаемых ДТЭП. В качестве вулканизирующего агента использовали алкилфенолформальдегидную смолу марки SP- 1045.

Анализ физико-механических свойств ДТЭП показал, что образцы со смоляной вулканизационной системой, содержащей 6 мас.ч. смолы, обладают наиболее оптимальным уровнем физико-механических свойств.

Исследование процесса термодеструкции карбаматов

Алекбаев Д.Р., Самуилов А.Я., Самуилов Я.Д.

*Казанский Национальный Исследовательский Технологический Университет,
Казань, Россия*

E-mail: alekbaevd@gmail.com

Полиуретаны представляют собой класс полимеров с чрезвычайно универсальным диапазоном свойств и возможностью применения. Однако эти материалы имеют относительно низкую термическую устойчивость. Для решения данной проблемы, необходимо знать, какие реакции протекают при низкотемпературной диссоциации полиуретана.

Изучение термодеструкции полиуретана проводилось на примере модельного карбамата: N-фенил-O-бутилкарбамат. Этот карбамат был подвергнут термостарению, при температуре 100°C. Данный опыт проводился в запаянной ампуле, на протяжении 24 часов. После охлаждения содержимое ампулы представляло собой бесцветную жидкость. При длительном выдерживании (2 недели при комнатной температуре) содержимое ампулы частично закристаллизовалось. Содержимое ампулы по отдельности подвергалось хромато-масс-спектрометрическому исследованию.

Результаты анализа свидетельствуют, что продуктами термического разложения N-фенил-O-бутилкарбамата являются фенилизоцианат и бутиловый спирт, а так же присутствуют следы анилина, фенилкарбаминовой кислоты, N-фенил-O-бутилгидроксиламина, бензальдегида, N,N1-дифенилмочевины. Показано, что термический распад модельного карбамата при температуре 100°C сопровождается рядом последовательных и параллельных превращений. Поскольку главными продуктами деструкции модельного карбамата являются спирты и изоцианаты, было сделано предположение, что наличие в составе реакционной смеси фенолов, которые позволили бы уменьшить концентрацию спиртов и изоцианатов, приведет к меньшей выраженности процессов термической деструкции карбаматов.

Механизм катализа эфирами муравьиной кислоты реакции аминов с диметилкарбонатом

Алекбаев Д.Р., Самуилов А.Я., Самуилов Я.Д.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия*

E-mail: alekbaevd@gmail.com

Одним из важнейших синтетических полимерных материалов в настоящее время являются полиуретаны. Технология их получения основана на взаимодействии ди- и полиизоцианатов с многоатомными спиртами. На данный момент в России нет собственного производства изоцианатов. Разложение карбаматов на изоцианаты и спирты является одним из способов бесфосгенного получения изоцианатов. Это экологически чистый метод получения

изоцианатов. Основной проблемой получения карбаматов из ароматических аминов является их мало изученный механизм химической реакции.

В работе проведен ряд опытов по получению карбаматов из простейших ароматических аминов – анилина, *p*-толуидина, *p*-анизидина и *p*-нитроанилина. Реакция проводилась в две стадии: на первой стадии из ароматических аминов получали формамиды, на второй, получившиеся вещества взаимодействовали с диметилкарбонатом.

Квантово-химическим методом ВЗЛУР установлен стадийный механизм взаимодействия диметилкарбоната с метилформамидом. Присоединение диметилкарбоната происходит к енольной форме формамида. Последующее отщепление метилформиата приводит к получению карбаматов.

Стадией, лимитирующей скорость реакции формамидов с диметилкарбонатом, является взаимодействие енола с диметилкарбонатом.

Все стадии реакции формамидов с диметилкарбонатом катализируются ассоциатами спиртов.

Роль динитронов в синтезе полистирола и полиметилметакрилата

Альева А.Б., Колякина Е.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: alisa.ssr@yandex.ru

Контролируемая радикальная полимеризация является перспективным методом синтеза полимеров с заданными молекулярно-массовыми характеристиками и свойствами. В последние десятилетия использование различных подходов синтеза полимеров на основе нитронов позволяет получать как мультиблок-сополимеры, так и целенаправленно проводить модификацию концевых звеньев полимерной цепи.

Исследованы процессы полимеризации стирола (СТ) и метилметакрилата (ММА) в присутствии нитроксильных радикалов, формируемых *in situ* на основе динитронов различного строения (N,N-диметилглиоксаль динитрон (МДН), N,N-дитрет.-бутилглиоксаль динитрон (БДН) и N,N-дифенилглиоксаль динитрон (ФДН)), инициируемые динитрилом азоизомасляной кислотой в широком температурном интервале 50-130°C. Установлено, что на процесс полимеризации виниловых мономеров и молекулярно-массовые характеристики полимеров оказывают влияние ряд параметров: строение динитронов, природа мономера, а также температурные условия полимеризации. Выявлено, что независимо от природы мономеров процессы полимеризации реализуются до глубоких конверсий, а по влиянию на молекулярно-массовые характеристики полимеров нитроны можно расположить в следующий ряд: БДН>МДН>ФДН. Так в присутствии БДН

возможно получение полиметилметакрилата с полидисперсностью 2.2 и узкодисперсного полистирола ($M_w/M_n=1.4$) при 90°C . Реализация контроля над молекулярно-массовыми характеристиками полимеров в присутствии МДН наблюдается только в высокотемпературном режиме (130°C). В целом контроль кинетики полимеризации ММА и молекулярно-массовых характеристик полимеров с участием динитронов менее выражен, по сравнению с полимеризацией стирола.

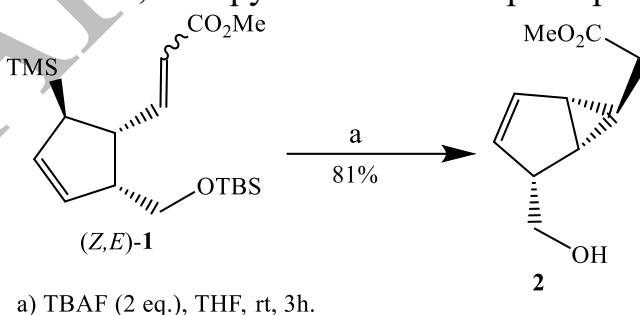
Показано, что полистирол, синтезированный на основе БДН, способен выступать в качестве макроинициатора, при этом введение новой порции мономера приводит к увеличению молекулярной массы ПС относительно исходного полимера. Нами проведена модификация высокомолекулярных алкоксиаминов, синтезируемых *in situ*, в присутствии ряда агентов: ДАК, CBr_4 , $\text{C}_{12}\text{H}_{25}\text{SH}$. Анализ молекулярно-массовых характеристик исходных и модифицированных полимеров показал, что лабильная связь С-ОН в высокомолекулярных алкоксиаминах находится в середине цепи.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №17-03-00498).

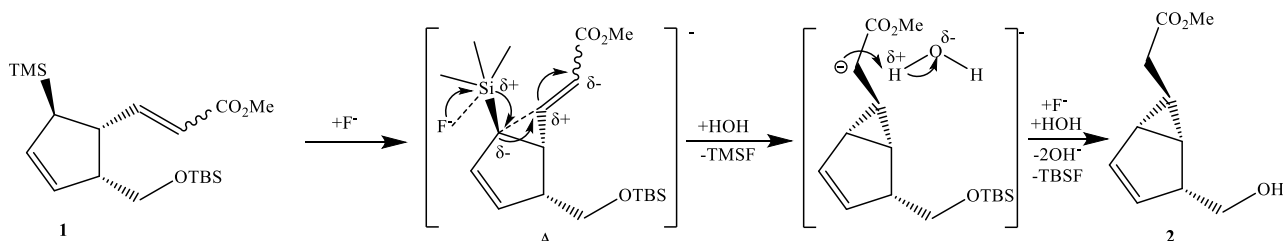
Внутримолекулярное циклопропанирование аллилсиланов, индуцированное фторид-анионом

Альмухаметов А.З., Гимазетдинов А.М., Мифтахов М.С.
Уфимский институт химии РАН, Уфа, Россия
E-mail: aydar.almuhametov@gmail.com

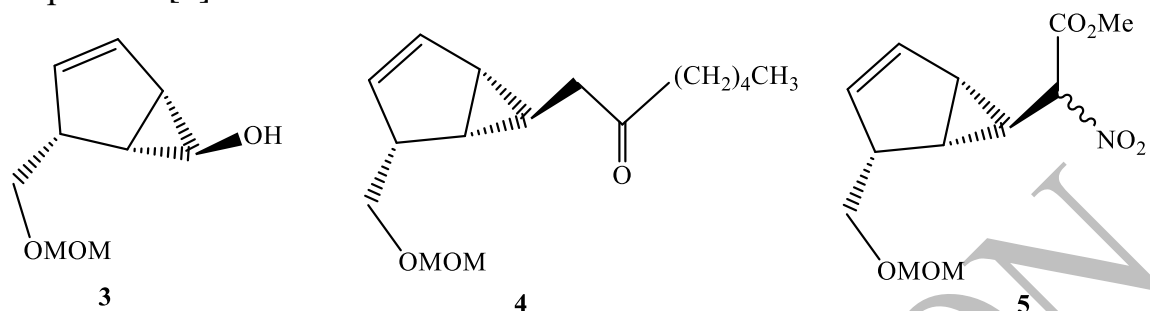
Данная работа посвящена изучению внутримолекулярной карбоциклизации аллилсиланов, обнаруженной нами при обработки **1** ТВАФ [**1**].



Для данной реакции нами предложено согласованное превращение, протекающее по «пушпульному» механизму, как показано ниже.



Для подтверждения предложенного механизма, а также для доказательства общности данного превращения нами был синтезирован ряд производных циклопропана [2].



Список литературы

- [1] Gimazetdinov A.M., Almukhametov A.Z., Spirikhin L.V., Miftakhov M.S. // Russian Journal of Organic Chemistry. 2017. V. 53. № 6. С. 836-845.
 [2] Gimazetdinov A.M., Almukhametov A.Z., Spirikhin L.V., Miftakhov M.S. // Tetrahedron: letters. 2017. 58. С. 3242-3245.

Взаимодействие бис(дикарболлида никеля) (IV) с фенантролином и бипиридилем.

Андрейчук Е.П.^{1,2}, Сиваев И.Б.¹

¹Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, ВХК РАН, Москва, Россия

²Институт элементоорганических соединений имени А.Н. Несмеянова, Москва, Россия

E-mail: appleinchocolate16@gmail.com

Бис(дикарболлид) никеля(IV) [3,3'-Ni(1,2-C₂B₉H₁₁)₂] предложен в качестве структурного элемента для создания поворотных молекулярных переключателей [1,2]. Поэтому представляет интерес изучение устойчивости этого комплекса по отношению к различным лигандам. Нами было изучено взаимодействие бис(дикарболлид) никеля с 2,2'-бипиридилем и 1,10-фенантролином. Было найдено, что реакция с 2,2'-бипиридилем приводит к образованию комплекса [3-Vipy-3,1,2-NiC₂B₉H₁₁] [3] и неизвестного ранее 3-этокси производного *нидо*-карборана [3-EtO-7,8-C₂B₉H₁₁], охарактеризованного методами спектроскопии ЯМР и рентгеноструктурного анализа (рис. 1). Взаимодействие с 1,10-фенантролином протекает аналогично.

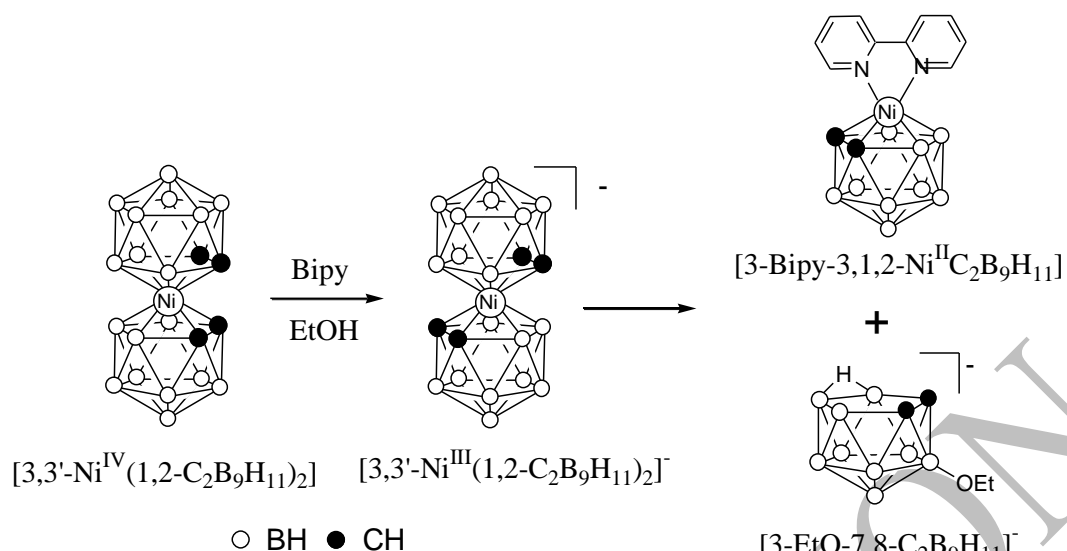


Рис. 1. Взаимодействие бис(дикарболлид) никеля (IV) с бипиридилом

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ (16-13-10331).

Список литературы

- [1] Hawthorne M.F., Zink J.I., Skelton J.M., Bayer M.J., Liu C., Livshits E., Baer R., Neuhauser D. // *Science*. 2004. V. 303. P. 1849-1851.
- [2] Shlyakhtina N.I., Safronov A.V., Sevryugina Yu.V., Jalisatgi S.S., Hawthorne M.F. // *J. Organomet. Chem.* 2015. V. 798, P. 234-244.
- [3] Эрдман А.А., Зубрейчук З.П., Прокопович В.П., Поляков А.В., Яновский А.И., Стручков Ю.Т., Майер Н.А., Ольдекоп Ю.А. // *Коорд. химия*. 1989. Т. 15. С. 122-129.

Синтез металлоорганических соединений висмута и сурьмы и исследование их фоторазложения методом ЭПР

Аристархова Д.В.¹, Гуцин А.В.²

¹ Школа юного исследователя Института прикладной физики РАН, Нижний Новгород

² ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород

Современные детекторы радиоактивных лучей, ускорители элементарных частиц используют пластиковые полистирольные сцинтилляторы с ограниченной радиационной стойкостью. Для лучшей работы устройств необходимо ввести в пластик чистое металлоорганическое соединение с сохранением прозрачности. Соединение за счет металла переменной валентности может обеспечить увеличение радиационной стойкости пластика.

Цели данной работы – синтез соединений Ph_3Sb , Ph_3BiX_2 (X – хлор, бром, ацетат, пропионат), синтез спиновой ловушки – 2-метил-2-нитропропана и исследование данных веществ методом спектроскопии ЭПР.

Образцы трифенилвисмута (V) с радикалами: ацетат-, пропионат-, бром-, хлор проверены на чистоту и перекристаллизованы [1]. Чистоту веществ после перекристаллизации определяли по температуре плавления, методом ЯМР, титриметрическим анализом на содержание висмута.

Синтезировали спиновую ловушку, в роли которой выступал 2-метил-2-нитропропан [2]. Провели реакцию фотораспада металлоорганического соединения висмута с выделением радикалов. Получили прозрачный металлосоодержащий пластик в результате реакции органического соединений висмута и сурьмы в присутствии толуола как растворителя.

Синтезированные соединения Ph_3BiX_2 могут быть использованы в качестве радикальных инициаторов полимеризации взамен традиционных пероксидов в случаях, когда не допускается выделение газа при полимеризации [3]. Помимо этого, практическую значимость составляет получение радиационно-стойкого прозрачного пластикового стекла.

Список литературы

1. Верховых В.А., Калистратова О.С., Гришина А.И., Артемова В.Г., Гуцин А.В. Синтез бис(2-метилпропаноата) трифенилвисмута // Вестник ЮУрГУ. Серия: Химия. 2015, № 3. С.61 – 65.
2. Гуцин А.В., Калистратова О.С., Малеева А.И., Куропатов В.А. decomposition of triphenylbismuth dicrotonate in light in the presence of 2-methyl-2-nitrosopropane // Вестник ЮУрГУ. Серия: Химия. 2016, № 1. С. 51 – 56.
3. Бусев А.И. Аналитическая химия элементов: висмут. – М.: Академии наук СССР, 1953. – 383с.

Реакция фосфин-катализируемого [3+2] - циклоприсоединения алленоата с дитерпеновым фрагментом к фуллерену C_{60}

Атангулов А.Б.¹, Маликова Р.Н.², Валиуллина К.А.¹

¹ФГБОУ ВПО "Башкирский государственный университет", г. Уфа, Россия

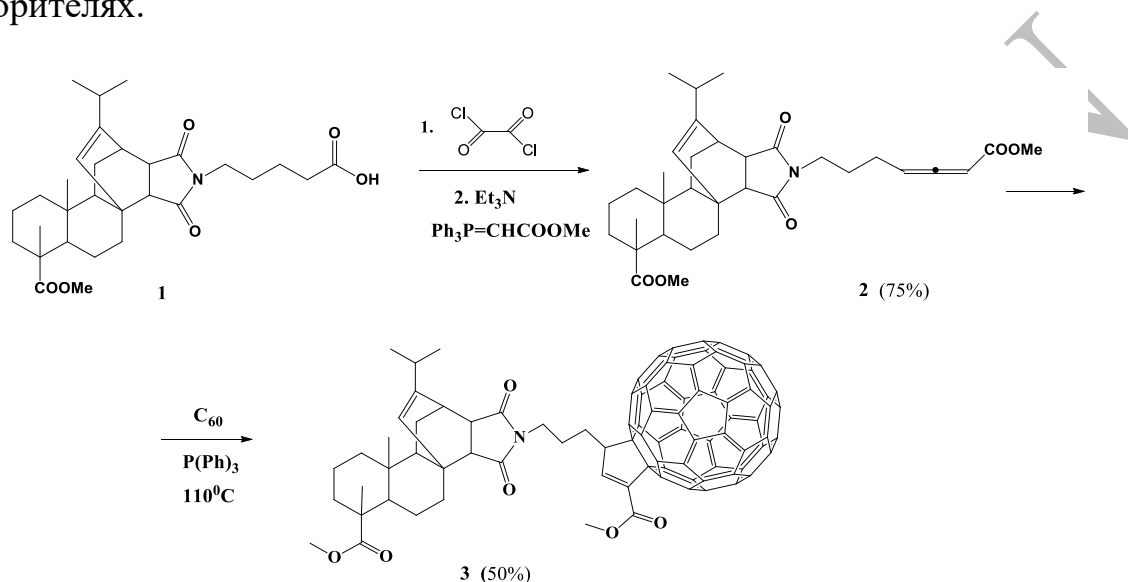
²ФГБУН Уфимский Институт химии РАН, г. Уфа, Россия

E-mail: lowen96@yandex.ru

Из литературных источников известно, что аллеонаты, активированные нуклеофильной атакой фосфина по центральному *sp*-гибризованному атому, успешно применяются как трехатомные строительные блоки в реакциях циклоприсоединения к электронодефицитным алкенам с образованием ненасыщенных пятичленных циклов [1]. С целью синтеза алленового соединения на первой стадии получили хлорангидрид N-

малеопимаримидзамещенной аминокислоты **1**, который взаимодействуя с метил(трифенилфосфоранилиден)ацетатом в присутствии триэтиламина образует алленоат **2** с выходом 75%.

В результате фосфин-катализируемого [3+2] - присоединения алленоата **2** к фуллереновому каркасу, как диполярофилу, нами получен циклопентенофуллерен **3**. Наличие дитерпенового фрагмента позволило увеличить растворимость фуллеренсодержащего продукта в органических растворителях.



Список литературы

[1]. R. M. Girón, S. Reboredo, J. Marco-Martínez, S. Filippone and N. Martín. // Faraday Discuss. 2014. V. 173. P. 311.

Получение реактивных термоплавких герметиков на основе бутадиен-нитрильных каучуков

Ахмедгораева А.Р., Насыбуллина Г.Ф., Минибаева Л.А.,
Муртазина Л.И., Галимзянова Р.Ю., Закирова Л.Ю.,
Хакимуллин Ю.Н.

ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский
технологический университет», г. Казань, Россия

E-mail: a_akhmedgoraeva@mail.ru

Неотверждаемые герметики на основе полимеров нашли широкое применение в различных областях деятельности человека. Особое распространение получили герметики на основе бутилкаучука (БК), а также этилен-пропиленового каучука. Используются также неотверждаемые герметики на основе фторкаучука, обладающего высокой маслостойкостью. Они применяются в строительстве для герметизации разъемных и неразъемных соединений и конструкций, а также различного рода

стыков и швов (межпанельных стыков, в стеклопакетах и т.д.); для изоляции нефтегазопроводов и теплосетей, в машиностроении для шумо- и виброизоляции и т.д. Однако стоит отметить, что неотверждаемые герметики на основе эластомеров имеют ряд недостатков, ограничивающих их области применения, а именно недостаточную прочность. Поэтому повышенный интерес представляют реактивные термоплавкие герметики, включающие в состав, как правило, кроме эластомера и термопласта, еще и реакционно-способные олигомеры (PCO). За счет использования реакционно-способных олигомеров улучшаются технологические (снижается температура переработки) свойства, а также повышается прочность и адгезия герметизирующих композиций.

Изучалась возможность получения реактивных термоплавких герметиков на основе бутадиен-нитрильного каучука (БНК).

В качестве объектов исследования были выбраны бутадиен-нитрильный каучук марки БНКС-18, сополимер этилена с винилацетатом и форполимер на основе лапрола 3003 с концевыми изоцианатными (-NCO) группами. Композиции изготавливались на лабораторном смесителе марки «Брабендер». Для ускорения отверждения олигомера с концевыми -NCO группами водой герметик погружался в воду при 80 °С и выдерживался 24 часа. Было установлено, что отверждение форполимера позволяет повысить прочностные и адгезионные свойства герметика в 2 и более раз.

Сравнение антибактериальной активности гуанидин пектина с антисептическим средством хлоргексидин

Ахмедов О.Р., Шомуротов Ш.А., Тураев А.С.

*Институт Биоорганической химии АН РУз им. акад. А.С. Садыкова,
Ташкент, Республика Узбекистан*

E-mail: Oliy86@bk.ru

В последние годы ведутся широкие исследования по созданию антисептических и дезинфицирующих средств, заменяющих хлорактивные препараты. Однако, большинство получаемых средств дорогостоящие, не растворимые в воде, имеют низкий спектр антимикробного действия или являются токсичными. Традиционными антисептическими средствами являются хлоргексидин, йодиол, тозилхлорамид натрия, салициловая кислота, метилтиониния хлорид, бензододециния бромид и т.д. Данные препараты наряду с достоинствами имеют и ряд недостатков (недостаточная растворимость в воде, токсичность, отсутствие пролонгированного действия, низкая стабильность, замедляют заживление ран, резкий запах, способность раздражать слизистые оболочки глаз и верхних дыхательных путей).

В связи с этим, необходимость поиска новых антимикробных средств, обладающих выраженным бактерицидным либо бактериостатическим

эффектом, приобрела особую актуальность. В целях пополнения класса антимикробных препаратов новыми соединениями, нами получены водорастворимые производные пектина, содержащие в структуре гуанидиновые группы. Проведенные исследования показали, что гуанидин содержащие производные пектина являются катионными полиэлектролитами и обладают антибактериальным действием. В продолжение наших исследований, нами проведено сравнение антибактериальной активности гуанидин пектина с широко применяемым антисептическим средством хлоргексидин биглюконат.

Антибактериальную активность гуанидин содержащих производных пектина и хлоргексидина изучали в условиях *in vitro* методом лунок в агаре. Для постановки этого метода исследования были взяты (24 часовые) культуры клинических штаммов микроорганизмов *Pseudomonas aeruginosa* и *Staphylococcus aureus*. В микробиологических исследованиях использовали 0,1 % растворы гуанидин пектина и хлоргексидина.

В результате проведенных исследований было установлено, что 0,1 % растворы гуанидин пектина и хлоргексидина проявляют выраженное антибактериальное действие в отношении *Pseudomonas aeruginosa* и *Staphylococcus aureus*.

Таким образом, проведенные микробиологические исследования показали, что гуанидин содержащие производные пектина обладают эффективным антибактериальным действием. При этом, эффективность антибактериального действия гуанидин пектина сопоставима с широко применяемым антисептическим средством хлоргексидин.

Влияние показателя pK_a на величину антибактериального действия гуанидин содержащих производных пектина

Ахмедов О.Р., Шомуротов Ш.А., Тураев А.С.

Институт Биоорганической химии АН РУз им. акад. А.С. Садыкова, г.

Ташкент, Республика Узбекистан

E-mail: Oliy86@bk.ru

Известно, что некоторые поликатионы синтетического или природного происхождения обладают широким спектром антибактериального и фунгицидного действия. Согласно литературным данным, последовательность элементарных актов летального действия поликатионов на бактериальные клетки происходит следующим образом: адсорбция на поверхности бактериальной клетки; диффузия через клеточную стенку; связывание с цитоплазматической мембраной; выделение из клетки компонентов цитоплазмы [1]. Соответственно, электростатическое взаимодействие мембраны микроорганизма и поликатиона при прохождении полного летального действия будет зависеть от плотности и распределения

положительного заряда в макромолекуле, молекулярных параметров, природы противоиона, показателя pK_a и pH среды [2].

Исходя из вышеизложенного, нами проведены микробиологические исследования, целью которых являлось определение влияния показателя pK_a гуанидин содержащих производных пектина на величину их антибактериального действия в отношении *Pseudomonas aeroginoza*. Для проведения исследований предварительно готовили 0,5 % растворы гуанидин содержащих производных пектина с показателями pK_a 8,8 и 9,5. Антибактериальную активность препаратов изучали в условиях *in vitro* методом лунок в агаре.

Проведенные микробиологические исследования показали, что 0,5% раствор, приготовленный на основе гуанидин пектина с показателями pK_a 8,8 обладает слабой антибактериальной активностью в отношении *Pseudomonas aeroginoza* (зона задержки роста составила 15 мм). Однако, 0,5 % раствор образца с показателем pK_a 9,5 показал выраженную активность в отношении *Pseudomonas aeroginoza* (зона задержки роста составила 20 мм).

Таким образом, проведенные микробиологические исследования подтверждают, что величина антибактериального действия гуанидин содержащих производных пектина, которые по свойствам относятся к катионным полимерам, зависит от показателя pK_a .

Список литературы

- [1] Афиногенов Г.Е., Панарин Е.Ф. Антимикробные полимеры - СПб. Гиппократ, 1993. - 264 с.
[2] Timofeeva. L., Kleshcheva N. Antimicrobial Polymers: Mechanism of Action, Factors of Activity, and Applications. Appl. Microbiol. Biotechnol. 2011. Vol. 89. P.475-492.

Об изменениях коэффициентов диффузии пленочных образцов при увеличении толщины полимерной пленки

Багаева А.Н.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

E-mail: nastifanka@mail.ru

Изучение процессов диффузии в полимерах имеет научный и практический интерес. Данные о диффузии воды необходимы как для прогнозирования поведения полимерных материалов во влажных средах и оценки их работоспособности [1]. Особое значение исследование диффузионных процессов имеет в двух случаях. Во-первых, для исследования свойств и процессов старения стеклообразных полимеров. Во-вторых, изучение процесса диффузии воды в полимерную матрицу является первостепенным для создания пленок медицинского назначения из полимеров.

В качестве объекта исследования были выбран хитозан (ХТЗ), натриевая соль сукцинамида хитозана (СХТЗ) и натриевая соль карбоксиметилцеллюлозы-β (КМЦ) производства ЗАО «Биопрогресс» (г. Щелково, Россия). Пленки из предварительно приготовленного раствора полимера формировались на поверхности чашки Петри методом полива. Толщину высушенных пленок определяли толщиномером покрытий – от 30 до 120 мкм. Изучение сорбционных свойств проводили при $T = 25^{\circ}\text{C}$. В качестве сорбата использовали дистиллированную воду и ее пары. Относительное количество воды m_t , которое поглощает образец до момента времени t , определяли весовым методом, поддерживая образцы пленки в эксикаторе водяного пара в течение некоторого времени t . Степень сорбции полимером паров сорбата определяли весовым методом на аналитических весах.

В ходе проделанной работы было установлено, что процессы сорбции паров воды в пленочные материалы на основе ХТЗ, СХТЗ и КМЦ проходят в аномальном режиме диффузии, вследствие чего проявляют зависимость коэффициентов диффузии от толщины пленочного образца. Из этого можно сделать вывод, что пленки одного и того же полимера различающиеся по толщине, не равнозначны со структурно-физической точки зрения. Более того, поскольку увеличение толщины пленки приводит к увеличению коэффициента диффузии, мы предполагаем, что именно в пленках с большей толщиной формируется структура, приближенная к равновесной, очевидно более рыхлая и с большим количеством пор.

Список литературы

- [1] Чалых, А. Е. Диффузия в полимерных системах.- М.: Химия, 1987, -312с.

Реакции металлокомплексов на основе dpp-bian лиганда с соединениями, содержащими подвижный атом водорода

Базанов А.А.¹, Лукина Д.А.²

¹Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

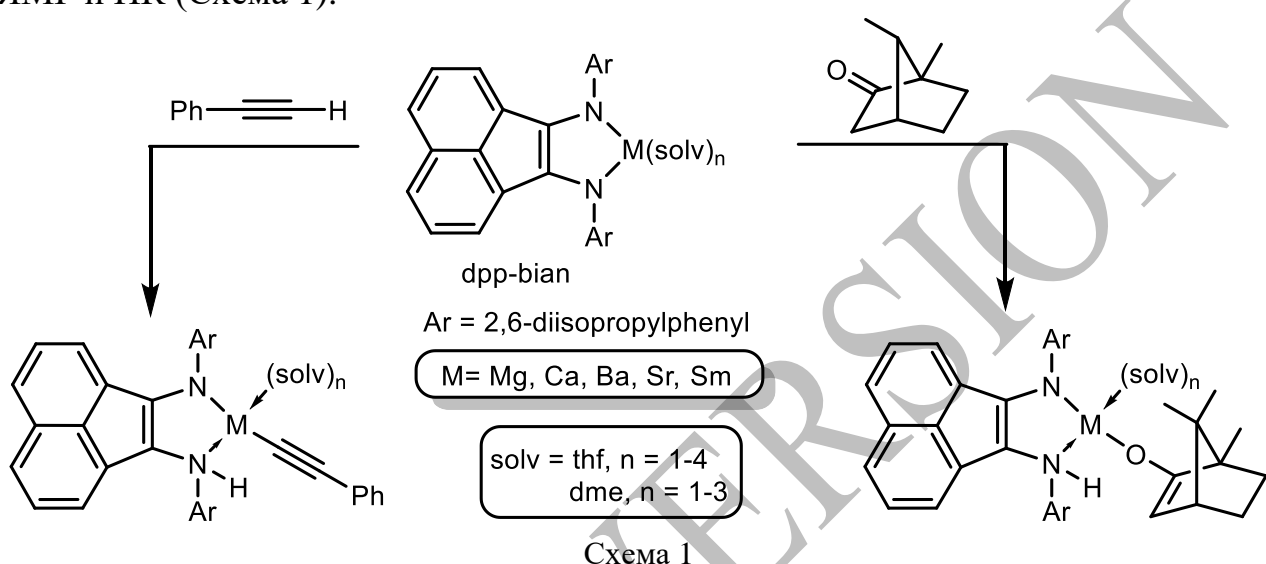
²Институт металлоорганической химии им. Г. А. Разуваева,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: V.Andrey2010@yandex.ru

Ранее было установлено [1], что в реакции присоединения к комплексу $[(\text{dpp-bian})\text{Mg}(\text{thf})_3]$ (dpp-bian = 1,2-бис[(2,6-ди-изо-пропилфенил)имино]аценафтен) органических веществ, содержащих подвижный атом водорода, таких как: терминальные алкины и енолизуемые кетоны, атом водорода присоединяется к одному из атомов азота дииминового лиганда, а органический фрагмент - к атому магния (Схема 1). Стоит заметить, что в случае комплексов $[(\text{Hdpp-bian})\text{Eu}(\text{camphor})(\text{dme})_2]$ и $[\text{H}(\text{dpp-}$

bian)Eu(CSPh)(dme)₂] происходит обратимое таутомерное превращение в координационной сфере европия (перенос протона с амидоаминного лиганда [dpp-bianH]⁻ на фрагмент субстрата) [2] при изменении температуры.

В продолжении исследования нами были проведены реакции присоединения камфоры и фенилацетилена к комплексам кальция, бария, стронция и самария с dpp-bian. Полученные продукты присоединения были выделены в индивидуальном состоянии и охарактеризованы спектроскопией ЯМР и ИК (Схема 1).



Список литературы

- [1] Fedushkin I. L., Skatova A. A., Fukin G. K., Hummert M., Schumann H., // Eur. J. Inorg. Chem., 2005, 12, 2332-2338.
 [2] Ямбулатов Д. С., Скатова А. А., Черкасов А. В., Федюшкин И. Л., // Изв. А.Н. Сер. хим., 2017, 1, 1187-1195.

Физико-механические свойства полимерных композитов на основе вторичного полипропилена и древесной муки

Бакирова Э.Р., Садритдинов А.Р.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

E-mail: elina_bakirova@mail.ru

Применение композиционных материалов на основе вторичного полимерного сырья и растительных наполнителей требует особого внимания к параметрам технологического процесса переработки в связи с тем, что такие материалы имеют нестабильные реологические свойства, вследствие протекания деструкции не только в ходе переработки, но и под действием факторов внешней среды. Введение наполнителя в полимерную матрицу приводит к возникновению фазовой гетерогенности. При увеличении

содержания наполнителя увеличивается вероятность контакта частиц наполнителя и агломерация частиц наполнителя, что сопровождается существенным изменением перерабатываемости композиции и ее деформационно-прочностных характеристик. В результате биодеструкции фазовая структура полимерного материала изменяется, что скажется на механических свойствах образцов.

В качестве компонентов композитов использовали вторичный ПП, соответствующий ПП марки Н-350FF/3, представляющий собой материал из некондиционных изделий, производимых на ООО "ЗПИ Альтернатива" (г. Октябрьский) и древесную муку марки 180 хвоя (г. Дзержинск). Переработку полимерных материалов осуществляли в расплаве на пластографе "PlastographEC" (Brabender, Германия) при температуре 180°C. Физико-механические свойства полимерных композитов при разрыве определяли на разрывной машине "Shimadzu AGS-X" (Shimadzu, Япония) при температуре 20 °С и скорости движения подвижного захвата разрывной машины 1 мм/мин.

Установлено, что процессы биодеструкции могут сказаться на эластических свойствах полимерной матрицы. Так, после 3-х месяцев контакта с почвенными микроорганизмами образцы исследованных композиций характеризуются меньшим модулем упругости по сравнению с образцами, не контактировавшими с почвой (рис. 1).

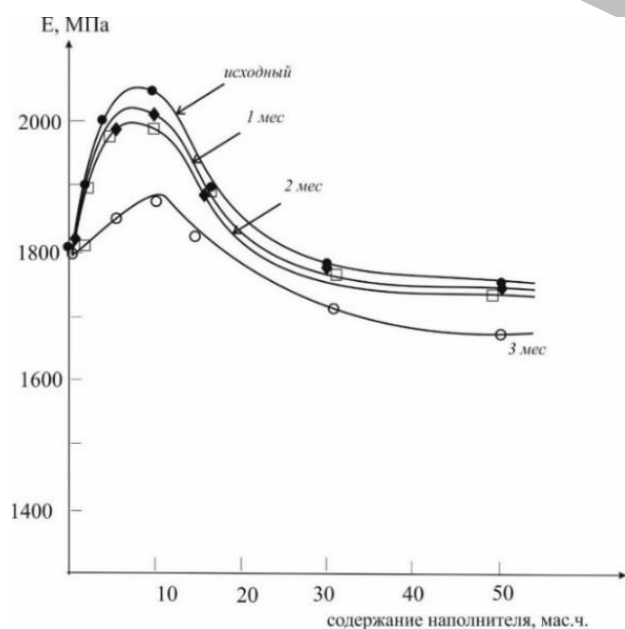


Рисунок 1. Зависимость модуля упругости композиции на основе вторичного полипропилена от содержания древесной муки после разных периодов контактирования с почвой (0, 1, 2, 3 месяцев).

Свойства полиамида-6 различного вида после его переработки

Баранников М.В., Ильичев Д.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия*

E-mail: newmichael2014@gmail.com

При подготовке гранулята полиамида-6 к процессам переработки нормируют такие его свойства, как содержание низкомолекулярных соединений (НМС) и относительная вязкость. Существуют 2 альтернативных способа подготовки гранулята к процессам переработки: экстракция НМС и совмещенная сушка-демономеризация.

Нами были исследованы образцы высоковязкого и низковязкого полиамида-6 промышленного производства. Изменение его свойств в процессе подготовки с помощью процесса совмещенной сушки-демономеризации к переработке представлены таблице 1.

Таблица 1

Гранулят	[КЛ],%	[НМС],%	[ОЛ],%	$\eta_{отн}$
Высоковязкий	Исходный образец			
	8,11± 0,03	10,81± 0,10	2,70± 0,10	2,87; 2,89
Низковязкий	Образец после совмещенной сушки-демономеризации			
	0,50± 0,03	1,61± 0,05	1,11± 0,05	3,15; 3,16
Высоковязкий	Исходный образец			
	8,44± 0,05	11,40± 0,10	2,96± 0,10	2,31; 2,32
Низковязкий	Образец после совмещенной сушки-демономеризации			
	0,48± 0,02	1,56± 0,13	1,08± 0,13	2,65; 2,67

Подготовленные образцы подвергли переработке в виде повторного плавления при $T=270^{\circ}\text{C}$, $\tau=15$ мин. Свойства образцов гранулята ПА-6 после проведения повторного плавления представлены в табл. 2.

Таблица 2

Гранулят	[КЛ],%	[НМС],%	[ОЛ],%	$\eta_{отн}$
Высоковязкий	После повторного плавления			
	1,09± 0,06	2,57; 2,55	1,48; 1,46	3,23; 3,25
Низковязкий	После повторного плавления			
	1,07±0,06	2,50; 2,57	1,96; 1,51	2,79; 2,81

Полученные свойства свидетельствуют о том, что совмещенная сушка-демономеризация является оптимальным процессом подготовки гранулята ПА-6 к процессам переработки, т.к. содержание НМС в подготовленном и готовом продукте является практически одинаковым вне зависимости от вида гранулята, а его относительная вязкость повышается до необходимых значений.

Отверждение покрытий из композиции для катодного электроосаждения
МОЛ-110

Баранов А.П., Беспалова Г.Н., Филиппова Е.В

Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия

E-mail: baranovandrew95@mail.ru

В качестве объекта исследования использовалась композиция МОЛ-110 и МОЛ-110, модифицированная некоторыми солями металлов переменной валентности.

Задача настоящих исследований заключалась в снижении температуры или продолжительности отверждения электроосаждённых покрытий. Нами было исследовано влияние температуры и времени отверждения покрытий при 2-х режимах 100 и 120°C. Результаты исследования представлены на рис. 1, 2.

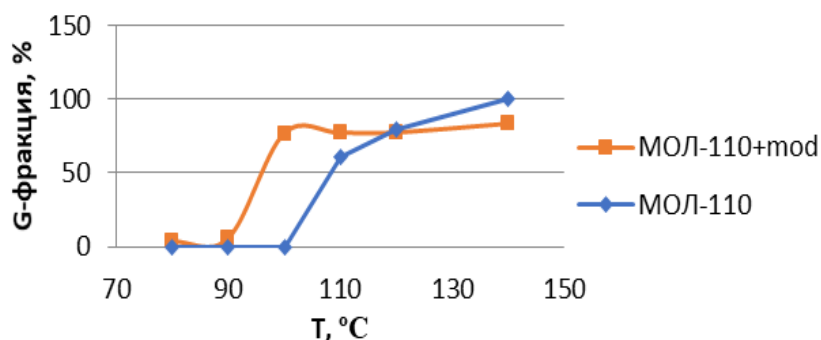


Рис. 1. Влияние температуры отверждения на содержания G-фракции покрытий. Время отверждения 30 мин.

Из рис. 1 видно что процесс отверждения покрытий из модифицированной композиции начинается значительно быстрее и достигает значений порядка 80 % уже при 100°C, тогда как из базовой композиции аналогичные значения получены при 120°C.

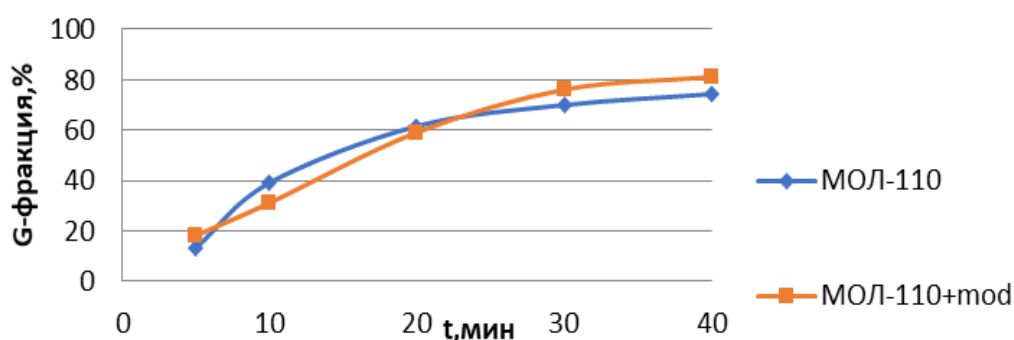


Рис. 2. Кинетическая зависимость содержания G-фракции от времени отверждения. Температура отверждения покрытий: МОЛ-110+mod – 100°C; МОЛ-110 – 120°C.

Результаты свидетельствуют, что снижение температуры отверждения на 20°C не влияют на скорость отверждения покрытий. Исходя из проведенных исследований, можно сделать вывод об эффективности действия предлагаемого модификатора и рекомендовать следующий режим отверждения покрытий: $T=100^{\circ}\text{C}$, $\tau_{\text{отв}}=30$ мин.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ. Соглашение №14-23-00204-П.

Влияние многостенных углеродных нанотрубок на процессы получения гуминовых кислот и гуминоминеральных композиций в условиях ультразвукового воздействия

Жакина А.Х., Василец Е.П., Рапиков А.Р., Арнт О.В., Бейсенбаев А.Р.
ТОО «Институт Органического Синтеза и Углекими РК»,
Караганда, Казахстан
E-mail: vassilets88@mail.ru

Многостенные углеродные нанотрубки (МУНТ) являются перспективными объектами, позволяющими создавать материалы с принципиально новыми свойствами. Нанотрубки обладают высокой прочностью, упругостью, электропроводностью, теплопроводностью.

МУНТ, обладая большой поверхностной энергией, проявляют повышенную склонность к агломерированию, что создает проблемы при создании нанокомпозитов

Усовершенствовать технологию синтеза нанокомпозиционных материалов позволяет использование ультразвука. Этот способ позволяет значительно ускорить гетерогенные реакции на поверхности гуминоминеральных композитов с активированными формами углеродных нанотрубок.

Для осуществления разрабатываемых процессов иммобилизации использован ультразвуковой диспергатор марки ИЛ-100-6/2 с рабочей частотой 22 кГц. В качестве модифицирующего объекта исследования использованы многостенные углеродные нанотрубки марки «Таунит» (производство – ООО «Нанотехцентр», Тамбов).

Для получения наногуминовых композитов была наработана партия гуминовой кислоты из окисленных углей Шубаркольского месторождения. Синтез гуминовых кислот (ГК) осуществлялся щелочной экстракцией угля Шубаркольского месторождения с дальнейшим кислотным высаживанием из раствора гумата натрия и промывкой полученной кислоты до $\text{pH}=7$.

Процессы иммобилизации гуминовых кислот, модифицированных активированными МУНТом, на горелую породу шахты им. Горбачева (г. Караганда) осуществлены в водных суспензиях при воздействии ультразвука, в течение 3-15 минут, соотношении исходных компонентов ГП:ГК:МУНТ =

50:20:1 и 50:10:1. Полученные композиты имели серо-коричневый цвет и однородную структуру. Выход продуктов составил 94-97%. Наибольший содержание кислых групп наблюдается у гуминоминеральных композитов с активированными формами углеродных нанотрубок при времени УЗО равном 10 минут. Количество кислых групп в образцах находится в интервале 2,07-2,38 ммоль-экв/г.

Работа выполнена при поддержке программы 0004ПЦФ-14 МОН РК.

Инклюзионное комплексообразование кверцетина с гидроксипропил-β-циклодекстрином в водно-этанольном растворителе

Берегова Д.А., Кабиров Д.Н., Усачёва Т.Р.

Ивановский химико-технологический университет, Иваново, Россия

E-mail: oxt@isuct.ru

Кверцетин (QCT; 3,5,7,3',4'-пентагидроксифлавоон) является важным биоактивным соединением с широким спектром возможного фармакологического применения благодаря антиоксидантным свойствам. Однако использование QCT в фармакологии ограничено низкой растворимостью в воде и, как следствие, низкой биодоступностью. Расширить применение QCT можно за счёт повышения его растворимости с помощью образования комплексов по типу «гость-хозяин» с циклодекстринами в неводных средах. С этой целью в данной работе калориметрическим методом исследованы взаимодействия QCT с гидроксипропил-β-циклодекстрином (НРβCD) в растворителе H₂O-EtOH (рис. 1).

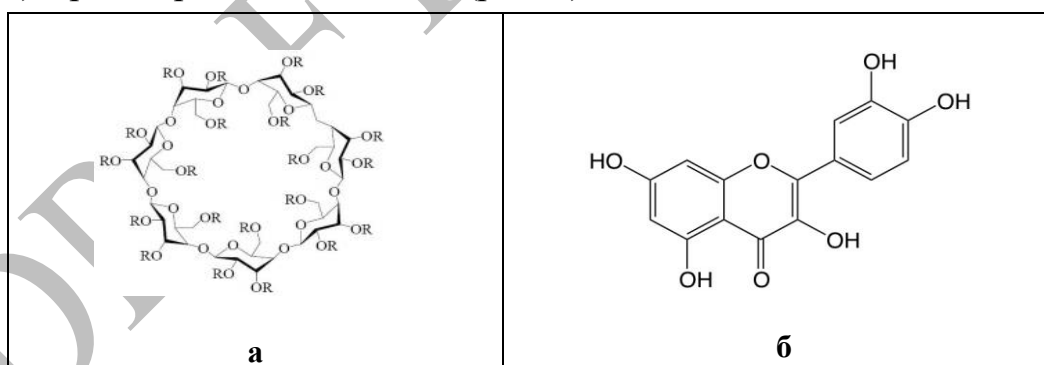


Рис. 1. Структурные формулы НРβCD (а) и QCT (б).

Термохимические измерения выполнены на калориметре ТАМ III (TA Instruments), снабжённом ячейкой титрования объемом 20 мл, при T = 298.15 К. При проведении эксперимента в ячейку калориметра помещали раствор QCT с концентрацией QCT 10⁻⁴ моль/л, шприц заполняли раствором НРβCD с концентрацией 10⁻² моль/л. Соотношение реагентов в ячейке N_{QCT}/N_{НРβCD} варьировалось от 0.4 до 4. В водном растворе (фосфатный буфер, pH = 7)

установлено образование комплекса состава 1:1 между QCT и HP β CD ($\lg K = 4.1 \pm 0.3$, $\Delta_r H = -4.4 \pm 1.9$ кДж/моль). Полученные данные согласуются с термодинамическими параметрами, определёнными в воде при pH=8.02 ($\lg K = 4.9$, $\Delta_r H = -2.9$ кДж/моль) [1]. Установлено, что при переходе от воды к растворителям H₂O-EtOH с содержанием $X_{\text{EtOH}}=0.1$ устойчивость молекулярного комплекса незначительно уменьшается. Однако экзотермичность комплексообразования растёт за счёт уменьшения энтропийного вклада в изменение энергии Гиббса комплексообразования.

Список литературы

[1] D'Aria F. et al // J Therm Anal Calorim. 2017. DOI 10.1007/s10973-017-6135-5.

Самоорганизация пиридиновых производных *трис*-(пентафторфенил)германа в монослоях Ленгмюра

Блинова Л.С.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
 Нижний Новгород, Россия
 E-mail: Lusik3456@mail.ru

В настоящее время возрастает интерес к фторированным органическим соединениям. С целью получения функциональных фторированных материалов с регулируемыми свойствами в настоящее время разрабатываются новые методы синтеза органических соединений, позволяющие конструировать молекулы, состоящие из различных по природе фрагментов.

Ранее по реакции гидрогермирования *трис*-(пентафторфенил)германа с 4-винилпиридином и 2-винилпиридином получены новые соединения [1] (рис.1, 2):

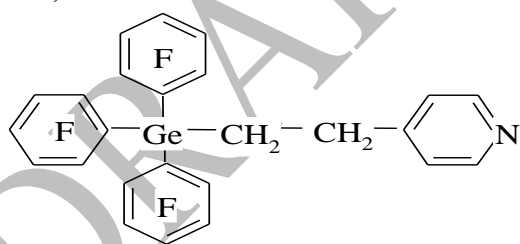


Рис.1. *трис*-(пентафторфенил)-4-пиридилэтилгерман

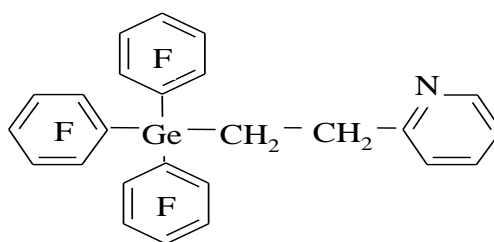


Рис.2. *трис*-(пентафторфенил)-2-пиридилэтилгерман

Изучено поведение *трис*-(пентафторфенил)-4-пиридилэтилгермана и *трис*-(пентафторфенил)-2-пиридилэтилгермана в монослоях Ленгмюра и факторы, влияющие на самоорганизацию молекул на границе раздела вода-воздух (pH субфазы, концентрация раствора растекания). Показано, что положение атома азота в пиридиновом кольце изученных соединений оказывает существенное влияние на значение площадей, приходящихся на 1

молекулу в плотном монослое. Например, при $V_{\text{раст.}} = 50$ мкл *трис*-(пентафторфенил)-2-пиридилэтилгермана наблюдаются максимальные значения $A_0 = 25$ А²/молек. при рН = 4.0. В то время как для *трис*-(пентафторфенил)-4-пиридилэтилгермана при рН ~ 4.0 наблюдается минимум значения $A_0 = 40$ А²/молек. Можно было ожидать, что при малых концентрациях раствора молекулам будет проще упаковываться на границе раздела вода – воздух. Но полученные результаты показывают, что чем меньше молекул на единице площади, тем сильнее проявляются силы отталкивания между фторированными группами, что приводит к увеличению A_0 .

Список литературы

[1] Патент на изобретение РФ № 2591958. Трис-(пентафторфенил)-4-пиридилэтилгерман / Замышляева Ольга Георгиевна, Лаптева Ольга Сергеевна, Блинова Людмила Станиславовна, Фукин Георгий Константинович.- № 2015124720/04; Заявлено 23.06.2015; Оpubл. 20.07.2016. Бюл. № 20.

Получение полиэтилентерафталата из полиэтилена

Боровой В.Ю.

*Национальный исследовательский томский политехнический университет,
Томск, Россия*

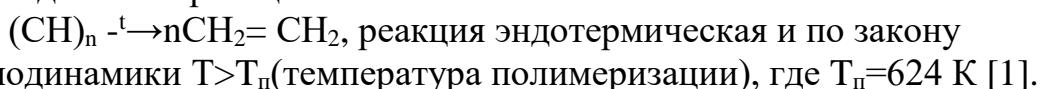
E-mail: borovoy-1995@mail.ru

На сегодняшний день получение продуктов химической отрасли из вторичного сырья становится все более актуальным, поскольку вторичное сырье, как правило, является отходами большинства сфер промышленности и наносит вред окружающей среде.

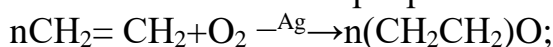
Цель данной работы заключается в получении полиэтилентерафталата из полиэтилена. Для этого были изучены химические свойства обоих полимеров, особенности их получения в промышленности и реакционная способность функциональных групп макромолекул.

Методика получения. Основными компонентами реакции является полиэтилен $(\text{CH}_2)_n$ и терефталетовая кислота $\text{C}_8\text{H}_6\text{O}_4$, но большая часть операции составляет работа с полиэтиленом так, как его необходимо довести до реакционной способности.

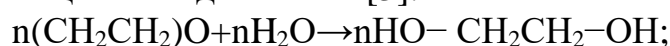
1) Реакция деполимеризации полиэтилена:



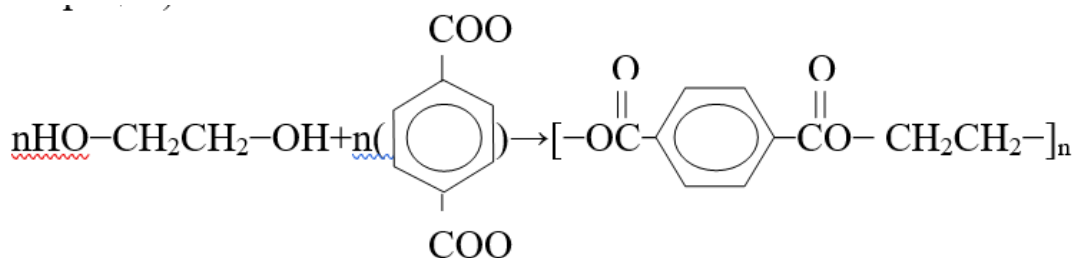
2) Реакция прямого окисления этилена на серебряном катализаторе[2]:



3) Реакция гидратации оксида этилена[3]:



- 4) Реакция поликонденсации этиленгликоля с кислотой (завершающая операция):



Список литературы

- [1] Сутягин В.М., Бондалетова Л.И. С 90 Химия и физика полимеров: Учебное пособие. – Томск: Изд-во ТПУ, 2003. – 208 с.
 [2] ГОСТ 7568-88. Этилена окись. Технические условия. — Издание официальное. — М.: Государственный комитет СССР по стандартам, 1988. — 54 с.
 [3] Органическая химия: Учеб. Для вузов: В 2 кн./ В.Л. Белобородов, С.Э. ЗуО-64 рабян, А.П. Лузин, Н.А. Тюкавкина; Под ред. Н.А. Тюкавкиной. – 2-е изд., стереотип. – М.: Дрофа, 2003. – Кн. 1: Основной курс. – 640 с.

Получение имидазолина из гидрохлорида имидата

Букова И. В., Аникеева С. В.

Волгоградский государственный технический университет

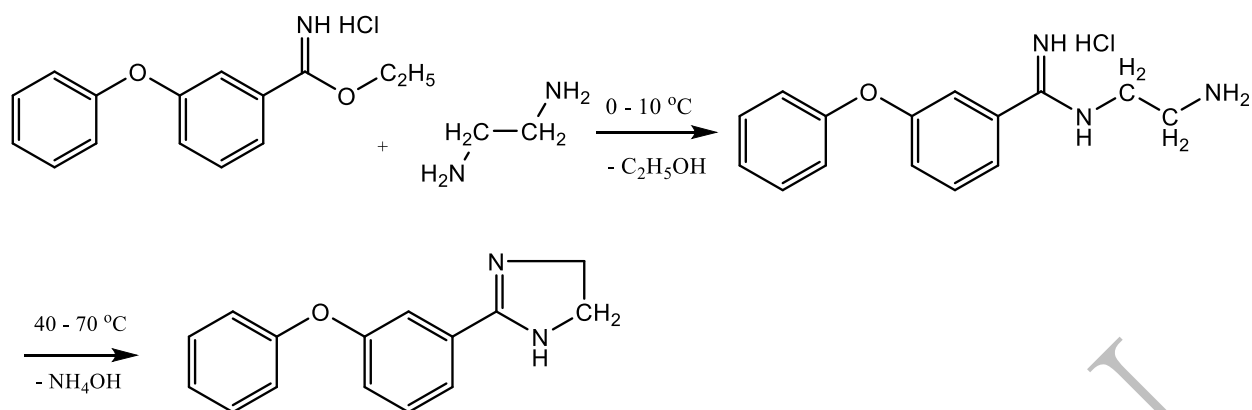
Волгоград, Россия

E-mail: inna.bukova@yandex.ru

2,3 – имидазолины являются производными имидазола – гетероциклического соединения, содержащего два атома азота. Они отличаются высокой биологической активностью, а именно воздействуют на систему кровообращения как сосудорасширяющие или сосудосуживающие препараты [0, с. 194].

Было установлено, что при взаимодействии гидрохлоридов иминоэфиров и 1,2 – диаминов в присутствии растворителя можно получить Δ² – имидазолины [0, с. 342].

На основе гидрохлорида иминоэфира дифенилоксида и этилендиамина в присутствии этанола реакцию проводят: вначале охлаждая смесь – так как реакция экзотермическая и протекает с выделением тепла, а затем для дальнейшей циклизации при нагревании до 70 °С по реакции:



Список литературы

[1] Гетероциклические соединения / под ред. Р. Эльдерфилда, Н. К. Кочеткова. – Москва : Издательство иностранной литературы, 1961. – 602 с.

Келарев, В. И. Синтез пяти- и шестичленных азотсодержащих гетероциклических соединений на основе иминоэфиров карбоновых кислот / В. И. Келарев, В. Н. Кошелев // Успехи химии. – № 64. – 1995. – С. 339-372.

Особенности контролируемой полимеризации виниловых мономеров в условиях фотоконтролируемой радикальной полимеризации под действием производных фенотиазина

Буренкова Е.А., Князева Н.А., Гришин И.Д.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: ekburenkova@gmail.com

В настоящее время активно развивающимся направлением химии высокомолекулярных соединений является фотоконтролируемая радикальная полимеризация с переносом атома на основе органических каталитических систем (Metal-Free ATRP). Большим классом эффективных катализаторов процессов данного типа являются производные фенотиазина [1]. В данной работе получен ряд новых производных фенотиазина и исследована их эффективность в процессе полимеризации ряда мономеров метакрилового ряда в условиях Metal-Free ATRP.

Синтез производных фенилфенотиазина проводили в растворе N,N-диметилформамида (DMF) при 150-190°C по схеме 1:

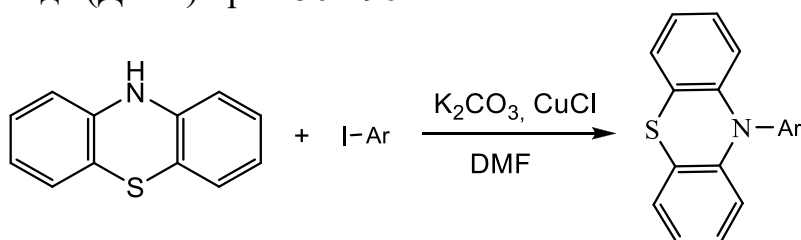


Схема 1

Полимеризацию проводили в дегазированных ампулах в массе мономера или растворе ДМФ. В качестве инициатора использовали этил- α -бромизобутират (ЕВiВ). Процесс протекал при температуре 25-30°C под действием УФ-облучения с длинами волн ~254 нм, ~360 нм и ~400 нм.

Результаты проведенных экспериментов свидетельствуют о том, что синтезированные производные фенотиазина способны выступать в качестве катализаторов контролируемой радикальной полимеризации метакриловых мономеров. Протекание полимеризации сопровождается ростом молекулярной массы образцов в соответствии с механизмом Metal Free ATRP. Установлено влияние строения арильного лиганда на эффективность использования его производного в качестве катализатора процесса.

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента Российской Федерации (проект № МК-1142.2017.3).

Список литературы

[1] J.T. Trotta, V.P. Fors // Georg Thieme Verlag Stuttgart. 2016, 27, 702-713.

Взаимодействие N-(арил)-o-иминобензохинонов с цианизопропильными радикалами в различных средах

Лизякина О.С.¹, Ваганова Л.Б.¹, Чегерев М.Г.², Пискунов А.В.², Гришин И.Д.¹

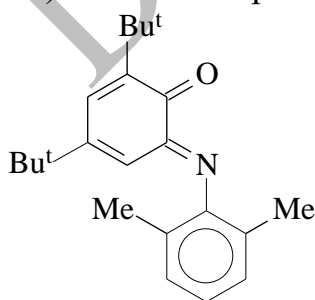
¹ Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

² Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева,
Нижний Новгород, Россия

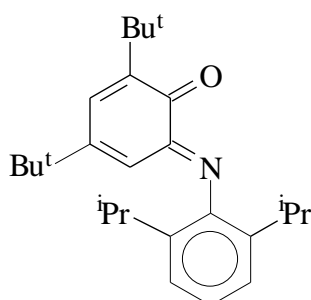
E-mail: vaganova_lb@mail.ru

N-(арил)-o-иминобензохиноны являются перспективными регуляторами молекулярно-массовых характеристик полиметилметакрилата [1]. При этом эффективность соединений в данном качестве зависит от их состава и температуры проведения полимеризации [2].

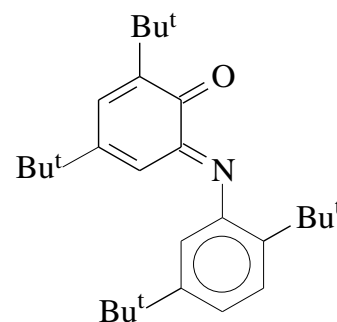
Для определения основных механизмов реакций в данной работе изучены продукты реакции соединений **1-3** с динитрилом азоизомасляной кислоты (ДАК) в немомономерных средах.



1



2



3

С помощью времяпролетной масс-спектрометрии показано, что в толуоле при 90-110°C продуктами взаимодействия соединений **1-2** с ДАК являются только соответствующие *o*-аминофенолы.

При анализе продуктов реакции **1-2** с избытком ДАК в среде бензола при 90°C в спектре MALDI-TOF обнаружены по 4 пика. Первые из них также относятся к 4,6-ди-*трет*-бутил-(2,6-диалкилфенил)-*o*-аминофенолам, а остальные - к их эфирам, содержащим один, два или три цианизопропильных радикала в своем составе. Аналогичное сочетание продуктов зафиксировано и при повышении температуры.

В случае **3** вне зависимости от соотношения **3** / ДАК и природы среды обнаружен только продукт его циклизации.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект №17-03-00498).

Список литературы

[1] Ваганова Л.Б., Лизякина О.С., Малеева А.В., Пискунов А.В., Гришин Д.Ф. Патент RU2604538.

[2] Ваганова Л.Б., Лизякина О.С., Чегерев М.Г., Пискунов А.В., Гришин Д.Ф. // ВМС, 2017, Т.59Б, №5, С.326-336.

Влияние добавок углеродных нанотрубок на селективность образования 4,4-диметилдиоксана-1,3 по реакции Принса с участием *трет*-бутанола

Валиев Р.И., Овчинников Г.А., Тухватшин В.С., Талипов Р.Ф.
ФГБОУ ВО Башкирский государственный университет, Уфа, Россия
E-mail: vadimtukhvatshin@yandex.ru

Одним из основных способов получения изопрена является каталитическое разложение 4,4-диметил-1,3-диоксана (ДМД), синтезируемого конденсацией 2-метилпропена и водного формальдегида по реакции Принса в присутствии минеральных кислот [1].

Однако описанный метод синтеза изопрена имеет существенный недостаток: на первой стадии наряду с ДМД, наблюдается образование гидрированных пиранов в качестве побочного продукта.

Поэтому нами исследовано влияние добавок углеродных нанотрубок на селективность образования ДМД при конденсации *трет*-бутанола и формальдегида.

С этой целью нами установлены значения констант скоростей накопления ДМД для реакции Принса с добавками углеродных нанотрубок (Таблица). Кинетику реакции накопления ДМД изучали хроматографическим методом (внутренний стандарт - 4,4,5-триметил-1,3-диоксан). Реакцию проводили в присутствии 5% мас. фосфорной кислоты и 5% мас. углеродных нанотрубок с диаметром пор 7-11 Å при 120°C.

Таблица 1. Значения констант скоростей накопления ДМД и его содержание при конденсации *трет*-бутанола и формальдегида в присутствии углеродных нанотрубок (5% мас., 120°C).

	Константа скорости реакции накопления ДМД, $k \times 10^{-3} \text{ с}^{-1}$	Соотношение ДМД/гидрированные пираны
Фосфорная кислота	2,50±0,09	3/2
Углеродные нанотрубки	3,20±0,11	–

Согласно представленным данным, добавка углеродных нанотрубок приводит к увеличению скорости образования ДМД и повышению селективности его образования по реакции Принса с участием *трет*-бутанола.

Список литературы

[1] Огородников С.К., Идлис Г.С. // Производство изопрена, Л.: Химия, 1973., 296 с.

Разработка фосфоразотсодержащего модификатора для повышения огнетеплостойкости полимерных композиций

Каблов В.Ф., Кейбал Н.А., Варфоломеева С.П., Агеев П.А.

Волжский политехнический институт (филиал)

ФГБОУ «Волгоградский государственный технический университет»

Волжский, Россия

E-mail: sveta.varfolomeeva.95@mail.ru

С позиции современных тенденций развития химической технологии актуальным является разработка таких модификаторов и модификация полимера, которые исключали бы выделение вредных побочных продуктов и протекали при нормальных температурных условиях [1].

Наиболее эффективными, с точки зрения обеспечения огнезащиты в твердой фазе и при тлении, являются фосфорсодержащие соединения, способные при нагревании разлагаться с образованием фосфорной кислоты.

При сочетании в модифицирующих добавках атомов фосфора и азота можно говорить об усилении коксообразующей способности модификатора за счет эффекта синергизма [2].

Целью настоящей работы является разработка фосфоразотсодержащих модификаторов для полимерных композиций и исследование их свойств.

Нами был проведен синтез и изучены некоторые свойства фосфоразотсодержащей модифицирующей добавки (ФАМ) на основе диметилфосфита (ДМФ), эпоксидной диановой смолы ЭД-20 и анилина при различных массовых соотношениях.

В ходе проведения исследований выявлены наиболее оптимальные рецептуры полученных модифицирующих добавок, позволяющие их применять в резинах и полимерных покрытиях с целью повышения огне- и теплостойкости.

Установлено, что разработанные модифицирующие добавки обладают невысокой температурой плавления и низким содержанием летучих веществ. Указанные характеристики — высокая стойкость к термоокислительной деструкции, большая коксообразующая способность, и способность к растворению в некоторых органических растворителях, а также наличие реакционноспособных функциональных групп показало эффективность их дальнейшего применения в качестве модифицирующих добавок для резин, клеевых составов и защитных покрытий в качестве тепло-, огнезащитной добавки. Также установлено, что полученные продукты могут быть использованы для улучшения адгезионных свойств эластомерных композиций.

Список литературы

- [1] Михайлин Ю.Н. // Строение полимера и его огнестойкость, книга тепло-, термо- и огнестойкость полимерных материалов. Научные основы и технологии. 2011. С.255.
- [2] Кочнев А.М., Галибеев С.С. // Модификация полимеров: монография. Казань. 2008.С.419.

Ферментативная деструкция биоразлагаемых композиционных материалов на основе вторичного полипропилена и растительных наполнителей

Васюкова А.С., Базунова А.А.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

E-mail: nastiavasyukova@rambler.ru

Решением проблемы накопления полимерных отходов является создание полимеров, способных при соответствующих условиях подвергаться биodeградации. Считается, что полимерные материалы на основе растительного сырья – зерновых, древесины, полисахаридов – разлагаются на полностью безопасные компоненты: воду, CO₂, биомассу и др., кроме того, запасы растительного сырья легко могут возобновляться. Наполнение синтетического полимера природными компонентами повышает межфазную границу контакта, через которую в полимер могут проникать влага и агрессивные химические вещества, что приводит к улучшению биоассимиляции материала [1, 2].

Полипропилен (ПП) является одним из наиболее распространенных крупнотоннажных полимеров. Учитывая, что в мировых масштабах производство ПП выражается показателем в 20 %, соответственно, отходы ПП составляют те же 20 % от всех имеющихся твердых отходов полимеров. В связи

с этим, в качестве связующего компонента биоразлагаемых композитов является актуальным использование вторичного ПП, например вторичного сырья под названием «Полипропилен PP 8348 SM». В качестве наполнителя использован растительный наполнитель п рисовая шелуха (РШ). Получение биоразлагаемых полимерных композитов на основе ВПП и растительных компонентов осуществляли в расплаве на лабораторной станции (пластограф) "PlastographEC" (Brabender, Германия) в течение 15 мин при нагрузке 200 Н при температуре 180°C.

С целью изучения кинетики гидролитической деструкции образцы композитов выдерживались в среде ферментного препарата «Целлюлаза» длительное время, в течение которого определялась потеря массы образцов.

Таким образом, разрушение целостности образцов вызывается протекающим процессом биодеструкции.

Работа подготовлена в рамках выполнения научно-исследовательской работы в ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет» при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации.

Список литературы

[1] Бабунова М.В., Прочухан Ю.А. Способы утилизации отходов полимеров. // Вестник Башкирского университета. 2008. Т.13. № 4. С. 142-156.

[2] Панова Л.Г. Наполнители для полимерных композиционных материалов. М.: Химия, 1981. 736 с.

Полимеризация стирола в присутствии трифенилсурьмы

Верховых В.А., Гуштин А.В., Малеева А.И., Лаханина Е.А.
*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: irver0905@gmail.com*

В последнее время широкое применение находят композиционные материалы на основе металлонаполненных полимеров. Они обладают рядом таких ценных свойств, как прочность, термическая стабильность, негорючесть, хорошая электропроводность, устойчивость к действию микроорганизмов, способность задерживать ультрафиолетовое и рентгеновское излучение.

Целью работы было получить полимеры, содержащие в своём составе трифенилсурьму и стирол. Трифенилсурьма обладает хорошей растворимостью в стироле, может обеспечить высокое содержание металла, не поглощает в видимой части УФ-спектра, по литературным данным способна стабилизировать полимер в отношении термоокислительной деструкции [1]. В качестве мономера выбран стирол как основной компонент прозрачных

пластиковых сцинтилляторов. Использовали стирол, освобождённый от ингибитора пара-трет-бутил-пирокатехина.

Нами было высказано предположение, что термополимеризация стирола с трифенилсурьмой может происходить и без инициатора. Осуществлена полимеризация 6 образцов, из которых 3 были с 17.5% трифенилсурьмы, 3 – чистый полистирол как образец для сравнения.

Путем сравнения образцов, заполимеризованных при одинаковых условиях, установлено, что трифенилсурьма снижает скорость полимеризации. Проведённый анализ на остаточное содержание мономера 1%-ных растворов полимеров в хлороформе газовой хроматографией позволил определить массовую долю остаточного мономера. В образцах с добавкой трифенилсурьмы он составил от 0.2 до 0.6%, что в 2 раза больше, чем в образцах, не содержащих добавок металлорганического соединения.

Важным результатом является высокий процент конверсии (>99.4%), что является одним из необходимым условием качества органического стекла для применения в сцинтилляторах.

Таким образом, получены прозрачные бесцветные Sb-содержащие полистирольные стёкла с высокой степенью конверсии и с высоким содержанием металлорганического соединения (17.5%).

Список литературы

[1] Кочнева Л.С., Терман Л.М., Семчиков Ю.Д., Разуваев Г.А. // Высокомолекулярные соединения. Сер. Б. 1981. Т. 23. № 7. С. 531-535.

Мультимодальная система для терапии злокачественных новообразований: технология получения, исследование высвобождения IN VITRO

Власов С.С.^{1,2}, Куртуков В.В.¹, Швыркова А.С.¹

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Томск, Россия

²Сибирский государственный медицинский университет, Томск, Россия
E-mail: unreal800@gmail.com

Одной из основных проблем терапии онкологических заболеваний являются многочисленные побочные эффекты химиотерапии, вызываемые противоопухолевыми препаратами. Применение мультимодальных систем открыло новые возможности как для клинической, так и для диагностической практики в онкологии.

В основе разрабатываемой мультимодальной системы лежат микрочастицы железа (0) валентного с модифицированной поверхностью. Технология получения мультимодальной системы заключается в присоединении лекарственного препарата – доксорубицина к поверхности

частиц за счет электростатического взаимодействия, и дальнейшее покрытие полученной системы низкомолекулярным хитозаном, для стабилизации. Данная система обеспечивает таргетную доставку терапевтического агента.

Одним из механизмов воздействия на опухоль является локальная гипертермия, которая вызывается за счет воздействия на частицы переменного магнитного поля. Вызванное МГТ повышение внутренней температуры оказывает определенное воздействие на раковые клетки [1].

В данной работе исследовалось высвобождение из системы в фосфатном буфере с pH=6,5 при 37°C. Данное значение pH соответствует кислотности внутреннего микроокружения опухоли. В ходе эксперимента было установлено, что высвобождение доксорубина из мультимодальной системы спустя 72 часа достигло 12,2% без воздействия магнитного поля.

Полученные данные свидетельствуют о том, что система является стабильной при данных условиях. Это необходимо, как для обеспечения доставки терапевтического агента к цели в полном объеме, так и для предотвращения высвобождения доксорубина вне опухоли, что уменьшит степень его воздействия на здоровые клетки организма.

В результате проведенной работы была разработана оптимальная технология получения мультимодальной системы, а также проведены исследования по изучению высвобождения терапевтического агента.

Список литературы

[1] Arruebo M., Fernández-Pacheco R., Ibarra M. R., Santamaría J. // Nano Today. 2007. V. 2. № 3. P. 22-32.

Высокоселективный безотходный синтез бензилметакрилата

Воробьев И.И.

МБОУ школа №27, Дзержинск, Россия

E-mail: vorobey152@yandex.ru

Ввиду быстрого развития медицины и, как следствие, наращивающего объема производства таких важных материалов, как искусственные глазные хрусталики, противоожоговые пленки и искусственная кожа, бензилметакрилат становится все более востребован в качестве компонента данных материалов. Актуальность исследования процессов его синтеза обуславливается трудностью получения этого соединения привычным путем – реакцией этерификации. В связи с тем, что метакриловая кислота – это непредельное соединение, а бензиловый спирт содержит ароматическое кольцо, в присутствии протонного катализатора, необходимого для протекания реакции этерификации, будет протекать преимущественно реакция Фриделя-Крафтса (реакция алкилирования ароматических соединений) [1], и выход целевого продукта, согласно экспериментальным данным, составляет порядка 20%.

Цель данной работы – разработать методику высокоселективного синтеза бензилметакрилата.

За основу была взята распространенная в промышленности технология получения глицидилметакрилата взаимодействием солей щелочных металлов метакриловой кислоты и эпихлоргидрина [2]. По аналогии, решено было получать бензилметакрилат взаимодействием метакрилата калия и хлористого бензила, а в качестве катализатора межфазного переноса использовать четвертичное аммониевое основание, содержащее бензольное кольцо.

Как оказалось, в результате реакции выход продукта составил порядка 95%, а сам продукт содержал лишь около 1% примесей. Помимо бензилметакрилата в ходе процесса также был получен хлорид калия, который затем возможно использовать как удобрение. Таким образом, была найдена методика высокоселективного безотходного синтеза бензилметакрилата.

Список литературы

- [1] Химическая энциклопедия / Редкол.: Зефирова Н.С. и др. — М.: Большая Российская энциклопедия, 1998. — Т. 5 (Три-Ятр). — 783 с.
[2] Пакен А.М. Эпоксидные соединения и эпоксидные смолы. — Л.: Госхимиздат, 1962. — 964 с.

Исследование устойчивости полимер-коллоидных дисперсий на основе золя гидроксида магния и N-поливинилпирролидона

Газизов Э.Р.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

E-mail: Emil2596@mail.ru

При создании полимерных материалов биомедицинского назначения часто существует необходимость использования низкотоксичных компонентов с заданными размерами частиц и регулируемой морфологией элементов структуры. Данная проблема может быть решена путём создания стабильных полимерных наноструктурированных систем за счёт самосборки элементов, обусловленной межмолекулярной ассоциацией через нековалентные связи макромолекул полимера и заряженных частиц, например, частиц золь неорганических веществ [1]. В данном случае исследуется применение низкотоксичных частиц золя гидроксида магния. В качестве полимерной основы выбран N-поливинилпирролидон (ПВП), который обладает дезинтоксикационными, адсорбционными свойствами, является инертным по отношению к организму. Полученные полимер-коллоидные дисперсии (ПКД) исследовали методом спектра мутности.

Как следует из данных, представленных на рисунке 1, присутствие макромолекул ПВП в золе приводит к однозначному увеличению его агрегативной устойчивости, о чём свидетельствует отсутствие увеличения

размеров частиц в течение более длительного времени, чем в случае золя без полимерного стабилизатора. Устойчивость ПКД возрастает с ростом концентрации ПВП. Так, система ПВП-золь гидроксида магния является устойчивой в течении 10 суток в случае концентрации ПВП 3 % мас., и в течение 11 суток - в случае концентрации ПВП 3 % мас.

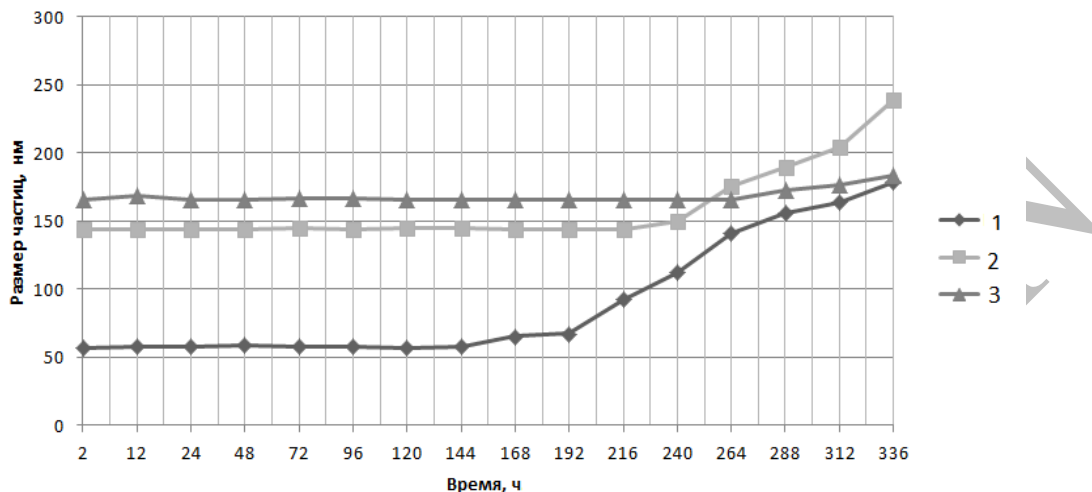


Рис. 1. Зависимость радиуса частиц золя гидроксида магния от времени в отсутствии и в присутствии ПВП; 1 – золь гидроксида магния, 2 – золь гидроксида магния в присутствии 3 % ПВП, 3 – золь гидроксида магния в присутствии 5 % ПВП.

С помощью УФ-спектроскопии определено, что значительный вклад в образование ПКК на основе ПВП и мицелл золь Mg(OH)₂ вносит специфическая адсорбция.

Список литературы

[1] Базунова М.В., Валиев Д.Р., Чернова В.В., Кулиш Е.И. // Высокомолекулярные соединения. 2015. № 6. С. 475-480.

О проявлении конформационно-надмолекулярного эффекта при взаимодействии некоторых полисахаридов с антибиотиками

Галина А.Р., Шуршина А.С., Кулиш Е.И.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

E-mail: alfiya.galina.chem@gmail.com

Проблема устойчивости различных микроорганизмов к терапии антибиотиками в последнее время получает всё большее распространение. Одним из вариантов её решения является синтез новых лекарственных веществ (ЛВ), что, однако, не является самым эффективным способом: микроорганизмы вырабатывают резистентность к вновь полученным антибиотикам. Более перспективным направлением представляется разработка новых лекарственных форм, в частности, модификация полимерами применяющихся в медицинской практике и хорошо себя зарекомендовавших антибиотиков. Среди полимеров,

которые могут быть использованы для этой цели, особняком стоят полисахариды, например, пектин (ПК), натриевая соль карбоксиметилцеллюлозы (КМЦ), хитозан (ХТЗ) и натриевая соль сукцинамида хитозана (СХТЗ). В качестве объекта исследования были выбраны хитозан и натриевая соль сукцинамида хитозана производства ЗАО «Биопрогресс» (г. Щелково, Россия), а также антибиотики – некоторые представители цефалоспоринового и аминогликозидного ряда. Растворителем в случае ПК, КМЦ, СХТЗ и ЛВ служила вода, в случае ХТЗ – 1% уксусная кислота. Изучение взаимодействия ЛВ с полисахаридами проводили методами вискозиметрии, УФ- и ИК-спектроскопии. УФ-спектры индивидуальных соединений, а также их смесей записывали на спектрофотометре "UV- VISSpecord M-40"; ИК-спектры записывали на спектрофотометре "Specord M-80"; характеристическую вязкость полимеров определяли с помощью вискозиметра Убеллоде.

В результате проведенных исследований выяснилось, что увеличение концентрации полимера в растворе неодинаково влияет на количество аддукта реакции, что объясняется полиэлектролитной природой исследуемых полимеров. При приближении мольного соотношения компонентов смеси к равновесному составу комплекса во всех случаях происходит закономерное увеличение количества комплексно связанного ЛВ. Однако, количество аддукта реакции нарастает с приближением к равновесному составу комплекса значительно медленнее, чем это можно было бы ожидать. Обнаружено, что чем меньше размер макромолекулярного клубка, тем меньше вероятность взаимодействия между полимером и антибиотиком. Наблюдаемые явления могут быть объяснены с учетом конформационно-надмолекулярного эффекта.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках базовой части государственного задания в сфере научной деятельности проект №4.5032.2017/БЧ.

Реакционная способность диалкилоксалатов в реакциях аминолита

Герасимова Т.С., Самохвалова М.В., Калистратова А.В., Ощепков М.С.

*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
Москва, Россия*

E-mail: a.kalistratova@inbox.ru

Щавелевая кислота и ее производные являются широко используемыми реагентами в органическом синтезе. Тем не менее, ее реакционная способность в условиях наиболее распространенных реакций алкоголиза [1] и аминолита изучена мало, а методы синтеза производных, как правило, основаны на использовании ее хлорангидрида.

Нами была изучена реакционная способность эфиров щавелевой кислоты в условиях аминолита с участием первичных и вторичных аминов.

Эфиры щавелевой кислоты легко подвергаются аминолитису с участием моноаминов (Рисунок 1). Реакция проходит легко при температуре около 0°C, при этом в качестве побочного продукта образуется N,N'-бис(2-гидроксиэтил)оксамид, выход которого растет с увеличением температуры. Природа эфира практически не оказывает влияния на ход реакции.

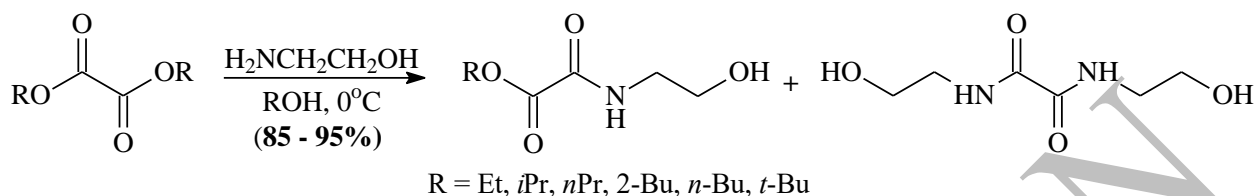


Рисунок 1. Реакция эфиров щавелевой кислоты с моноаминами.

При переходе ко вторичным аминам реакционная способность диалкилоксалатов резко снижается (Таблица 1, Рисунок 2). Это выражается в увеличении времени реакции, необходимости повышения температуры, отсутствии побочных диамидов, а также существенном влиянии природы эфира.

Таблица 1. Выходы реакций аминолитиса диалкилоксалатов вторичными аминами.

Alk	Условия реакции		
	0°C	20°C	55°C
Me	50-60 %	70-75 %	80-85 %
Et	-	40-43 %	70-81 %

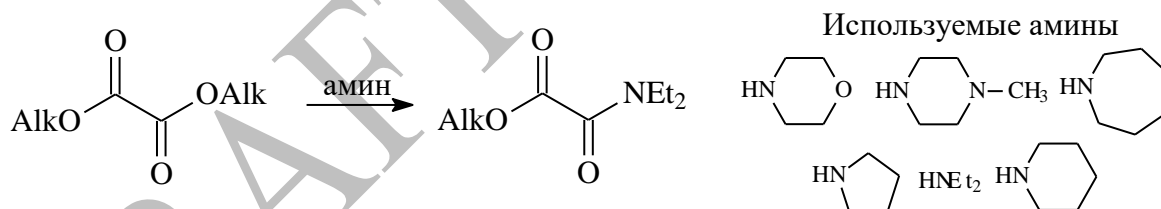


Рисунок 2. Реакция эфиров щавелевой кислоты с вторичными аминами.

Таким образом, установлено наличие влияния вида используемого амина и условий реакции на выход амида в процессе аминолитиса.

Список литературы

[1] Получение эфиров щавелевой кислоты / Д. З. Суярембитова, А. В. Калистратова, М. С. Ощепков, Л. В. Коваленко // *Успехи в химии и химической технологии*. — 2016. — Т. 30, № 11. — С. 85–87.

Реакция трифенилсурьмы и трифенилвисмута с ацетилсалициловой кислотой и трет-бутилгидропероксидом

Гиричева М.А., Гуцин А.В., Малеева А.И.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

Органические производные сурьмы и висмута(V), представляют большой интерес из-за их устойчивости, а также возможности точной настройки как на активность, так и на токсичность соединения посредством варьирования лигандов и органических фрагментов [1,2].

В работе был проведен синтез ацетилсалицилатов трифенилсурьмы и трифенилвисмута. Для синтеза продуктов был использован метод окислительного присоединения, основанный на взаимодействии Ph_3M с трет-бутилгидропероксидом и ацетилсалициловой кислотой в эфире при комнатной температуре [3]:



В результате реакции были получены $\text{Ph}_3\text{Sb}(\text{AcO-C}_6\text{H}_4\text{-COO})_2$ с $t_{\text{пл}}=163^\circ\text{C}$ и $\text{Ph}_3\text{Bi}(\text{AcO-C}_6\text{H}_4\text{-COO})_2$ с $t_{\text{пл}}=161^\circ\text{C}$. Полученные вещества были перекристаллизованы из хлороформа и петролейного эфира. Строение продуктов подтверждено методами ЯМР и ИК спектроскопии.

Также в работе изучено геометрическое строение синтезированных соединений Ph_3MX_2 , для всех структур выполнена геометрическая оптимизация и расчет частот колебаний методом DFT/B3LYP/CEP-31G.

Рассчитанные ИК спектры (распределение потенциальной энергии нормальных колебаний по внутренним колебательным координатам определено с помощью программы Shrink [4]) были сопоставлены с практическими; теоретические значения частот оказались близки к экспериментальным величинам.

Список литературы

- [1] H. Barucki, S.J. Coles, J.F. Costello, T. Gelbrish and M.B. Hursthouse // J. Chem. Soc., Dalton Trans., - 2000. – P. 2319–2325. DOI: 10.1039/b002337j.
- [2] A. Islam, J.G. Da Silva, F.M. Berbet, S.M. Da Silva // Molecules, - 2014. – V. 19. – P. 6009-6030; DOI:10.3390/molecules19056009.
- [3] А.В. Гуцин, Н.В. Соколова, М.А. Гиричева, Ю.А. Грачёва // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия», – 2017. – Т. 9. - № 2. – С. 45–49.
- [4] V.A. Sipachev // J. Mol. Struct., - 2001. – P. 567-568.

Синтез производных 7,8-дигидроксифлавонов – нового поколения терапевтических агентов для лечения нейродегенеративных заболеваний

Голубчиков Д.О.¹, Терехина А.В.²

¹МАОУ Лицей №8, Нижний Новгород, Россия

²Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: goldan2000@yandex.ru

Нейродегенеративные заболевания – медленные и прогрессирующие процессы, характеризующиеся потерей нейронов центральной нервной системы, что приводит либо к расстройству координации движений (атаксии) или сенсорной дисфункции (слабоумию). Потеря нейронов или их дегенерация проявляется в виде нарушения памяти, локомоторной дисфункции, когнитивных дефектах, эмоциональных и поведенческих проблемах. По данным Всемирной организации здравоохранения, общее число людей с деменцией во всем мире в 2015 году оценивается в 47,5 млн.

Цель работы – синтез молекул, на основе которых могут быть созданы фармакологические препараты для лечения нейродегенеративных заболеваний. Таковыми являются производные 7,8-дигидроксифлавонов, которые, согласно новейшим исследованиям, проявляют в несколько раз большую активность, чем используемые сейчас в клинической практике препараты. Задачи данной работы – разработка схемы получения и полный синтез соединений общей формулы (рис. 1), исходя из коммерчески доступных исходных реагентов.

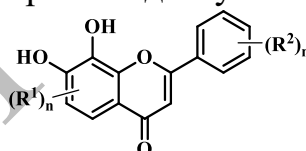


Рис.1

По результатам ретросинтетического анализа целевого соединения разработана схема синтеза различных производных 7,8-дигидроксифлавонов. Ключевой стадией получения данных соединений является перегруппировка Бейкера-Венкатарамана – простой и изящный способ синтеза флавонового скелета. Осуществлён синтез ряда производных 7,8-дигидроксифлавонов, предложена оптимизация условий каждой стадии синтеза.

По итогам данной работы были сделаны следующие выводы: предложена схема синтеза целевых молекул, а также был получен ряд производных 7,8-дигидроксифлавонов – потенциальных терапевтических агентов фармакологических препаратов против нейродегенеративных заболеваний.

Список литературы

- [1] I. Solanki, P. Parihar, M.S. Parihar. Neurodegenerative diseases: From available treatments to prospective herbal therapy. *Neurochemistry International*, **2015**, 1-9.
- [2] M. Menichincheri, D. Ballinari, A. Bargiotti, L. Bonomini. Catecholic Flavonoids Acting as Telomerase Inhibitors. *J. Med. Chem.* **2004**, 47, 6466-6475.

Коагуляция смеси латексов натурального каучука и поливинилхлорида

Горковенко Д.А., Фам Ким Дао, Навроцкий В.А.
*Волгоградский государственный технический университет,
Волгоград, Россия*
E-mail: phamkimdao@gmail.com

Натуральный каучук (НК) – один из важных промышленных эластомеров, обладающий превосходными механическими свойствами, однако из-за своей неполярной природы и реакционно-способных двойных связей в его структуре масло-, бензо- и озоностойкость находятся на низком уровне, что ограничивает возможности его применения, а потому нуждается в модификации.

Одним из способов модификации НК является его смешение с полярными термопластами, в частности с поливинилхлоридом. Однако НК и ПВХ несовместимы и такие смеси обладают низкими физико-механическими свойствами. Смеси НК с термопластами получают различными методами, например, смешением в расплаве, в растворе и смешением латексов с их последующей коагуляцией.

Высокие прочностные свойства достигаются, в том числе, благодаря равномерному распределению частиц дисперсной фазы в матрице полимера и получение смесей совместной коагуляцией латексов позволяет этого добиться.

Обычно выделение полимеров из латексов осуществляют с применением органических кислот, которые необходимо удалить из каучука после коагуляции, что требует большого количества воды и способствует увеличению коррозии, что наносит значительный ущерб производственному оборудованию, поэтому замена органических кислот в промышленности является перспективна.

Альтернативой кислотным коагулянтам являются полиэлектролиты, в частности, полимерные четвертичные соли аммония, например, поли-N,N'-диаллил-N,N'-диметиламмонийхлорид (ПДАДМАХ).

Целью данной работы является оценка возможности применения ПДАДМАХ для коагуляции смеси латексов НК и ПВХ.

Объектами исследования служили латекс натурального каучука по ГОСТ 29081-91 (сухой остаток – 61,8 %, pH – 10) и ПВХ-ЕП-6602С по ГОСТ 14039-78 (сухой остаток – 42,0 %).

В качестве коагулянтов использовали муравьиную кислоту или ПДАДМАХ (концентрация основного вещества – 35,9 %, характеристическая вязкость – 0,79 дл/г, концентрация NaCl – 9,8 %). Время коагуляции составляло 6 – 10 часов.

Установлено, что ПДАДМАХ позволяет получать полимеры с выходом, достигающим 97,4%, при этом расход коагулянта и количество сточных вод уменьшаются в 5-8 и 15 раз соответственно, по сравнению с коагуляцией латекса НК муравьиной кислотой.

**Синтез амфифильных сополимеров акриловой кислоты
и 2,2,3,3,4,4,5,5-октафторпентилакрилата в условиях
обратимой передачи цепи**

Григорьева А.О., Зайцев С.Д., Полозов Е.Ю.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: alexx.grigoreva@gmail.com

Одним из приоритетных направлений развития химии полимеров является получение материалов с заданными свойствами. С разработкой методов псевдоживой радикальной (со)полимеризации стало возможным получение сополимеров с заданной макромолекулярной архитектурой и узким молекулярно-массовым распределением. Среди этих методов ОПЦ-(со)полимеризация имеет ряд преимуществ, связанных с универсальностью, эффективностью и простотой. Особый интерес представляет синтез амфифильных сополимеров, способных к самоорганизации.

В данной работе был проведен синтез сополимеров акриловой кислоты (АК) и 2,2,3,3,4,4,5,5-октафторпентилакрилата (ОФПА) с различной микроструктурой цепи двумя способами: непосредственно сополимеризацией АК и ОФПА, а также модификацией сополимеров ОФПА и трет-бутилакрилата (ТБА).

На первом этапе исследования было показано, что гомополимеризация ОФПА в присутствии дибензилтретиокарбоната (БТК) в качестве агента обратимой передачи цепи протекает в контролируемом режиме. Эффективность использования БТК при ОПЦ-полимеризации АК и ТБА была изучена ранее [1,2]. Получены статистические сополимеры АК-ОФПА и ТБА-ОФПА в присутствии БТК, рассчитаны относительные активности мономеров. Показана эффективность полимерных ОПЦ-агентов на основе ПОФПА, ПАК и ПТБА, полученных в присутствии БТК, в гомо- и блок-сополимеризации.

Исследовано влияние микроструктуры цепи и параметра полидисперсности амфифильных сополимеров АК-ОФПА на поверхностные свойства в монослоях Ленгмюра с помощью пластинки Вильгельми.

Список литературы

- [1] Nicolas Gaillard, Alain Guyot, Jerome Claverie. // Journal of Polymer Science: Part A: Polymer Chemistry. 2003. Vol. 41, pp. 684–698.
- [2] D. V. Vishnevetskii, A. V. Plutalova, V. V. Yulusov, O. S. Zotova, E. V. Chernikova, S. D. Zaitsev. // Vysokomolekulyarnye Soedineniya, Ser. B. 2015. Vol. 57, No. 3, pp. 188–197.

**Молекулярные f-d люминофоры на основе комплексов Ce(III)
с органосульфидными лигандами**

Гришина А.И.^{1,2}, Блинова Л. И.^{1,2}, Ильичев В.А.², Бочкарев М.Н.^{1,2}

¹Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

²Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: agriii927@gmail.com

Возникновение интереса к молекулярным люминофорам на основе комплексов церия связано с недавно обнаруженной высокой фотокаталитической активностью этих соединений [1, 2]. В отличие от Ln³⁺ ионов других лантаноидов церий проявляет специфические люминесцентные свойства, связанные с переходом при возбуждении единственного 4f электрона на 5d орбиталь. Соответственно, при d-f релаксации генерируется излучение в диапазоне от ближнего УФ до красного цвета. В отличие от f-f переходов, энергии f-d переходов не являются табулированными, так как 5d орбитали металла смешиваются с электронами лигандного окружения. На неорганических материалах установлено, что люминесценцию с наибольшей длиной волны ионы Ce³⁺ проявляют в сульфидных матрицах. По этой причине, для получения орвано-цериевых ИК-люминофоров были выбраны органосульфидные лиганды, представленные на рис. 1.

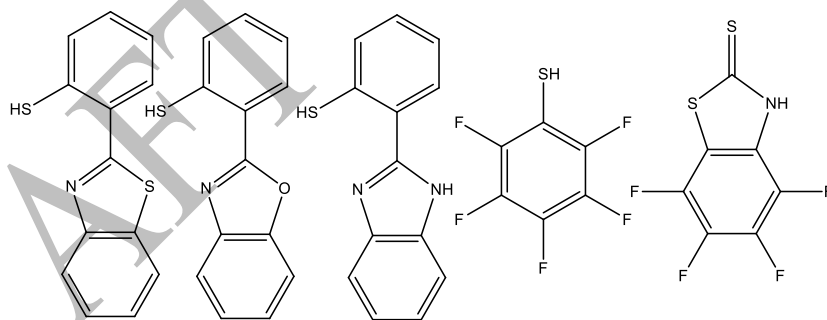


Рис. 1. Протонированные формы органосульфидных лигандов.

Синтезированы нейтральные и ate-комплексы церия с этими лигандами общей формулы Ce(L)₃ и NaCe(L)₄. Строение трех комплексов установлено методом РСА. Некоторые комплексы при возбуждении видимым светом проявили фотолюминесценцию в области 580-650 нм, обусловленную 4f-5d переходом на ионе Ce³⁺.

Список литературы

- [1] Guo J.-J., Hu A., Chen Y., Sun J., Tang H., Zuo Z. // *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016. V. 55. P. 15319-15322.
[2] Yin H., Carroll P.J., Manor B.C., Anna J.M., Schelter E.J. // *J. Am. Chem. Soc.* 2016. V. 138. P. 5984-5993.

Новый подход к синтезу производных 1,2,4-селенадиазола

Гришина М.М.¹, Лукьянова Ю.М.², Мацулевич Ж.В.², Хрусталеv В.Н.¹,
Борисов А.В.²

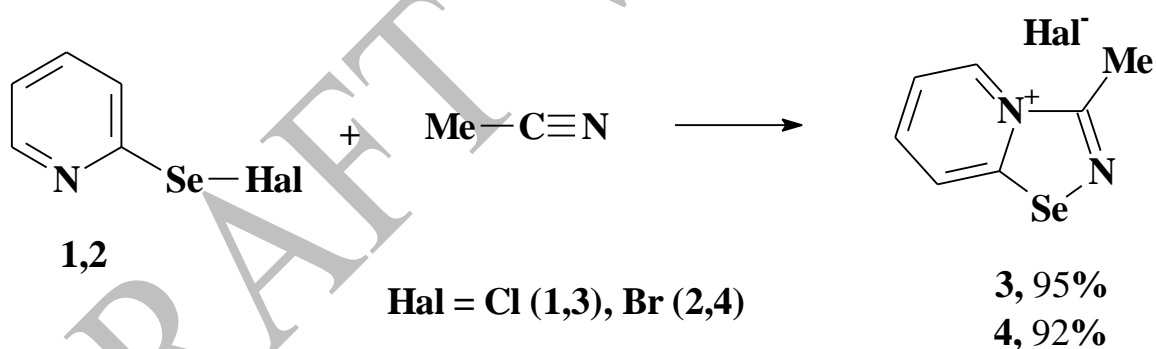
¹Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

²Нижегородский государственный технический университет
им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия

E-mail: mmgri@yandex.ru

Химия селенсодержащих гетероциклов претерпевает в настоящее время чрезвычайно бурное развитие, что связано с выявлением у значительного ряда представителей этого класса соединений различных видов высокой биологической активности [1,2].

В настоящей работе предложен новый подход к синтезу пока еще труднодоступных селен-,азотсодержащих гетероциклов - производных 1,2,4-селенадиазола [3], основанный на полярном циклоприсоединении гетаренселененилгалогенидов по кратной связи азот-углерод. Нами показано, что при взаимодействии 2-пиридинселененилгалогенидов (**1,2**) с ацетонитрилом с высокими выходами образуются соответствующие галогениды 3- метил[1,2,4]селенадиазола[4,5-а] пиридиния (**3,4**).



Структура солей **3** и **4** установлена методом РСА.

Список литературы

- [1] Banerjee B., Koketsu M. // Coord. Chem. Rev. 2017. V. 339. P. 104-127.
 [2] Ninomiya M., Garud D.R., Koketsu M. // Coord. Chem. Rev. 2011.V. 255. P. 2968-2990.
 [3] Todress Z. V. Chalcogenadiazoles: Chemistry and Applications, CCR Press—Taylor & Francis, London, 2012.

Исследование полимеризации глицидилметакрилата под действием систем на основе карборановых комплексах рутения

Грушин П.Н., Гришин И.Д.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: pavel.gru@mail.ru

В последнее десятилетие контролируемая радикальная полимеризация с переносом атома (ATRP) стала универсальным инструментом для получения полимеров с заданными значениями молекулярных масс и узким молекулярно-массовым распределением. Важным достоинством данного метода является возможность введения в процесс полимеризации мономеров с различными функциональными группами, приводящая к образованию новых полимерных материалов с ценными свойствами.

В данной работе были исследованы особенности полимеризации глицидилметакрилата (ГМА) по механизму контролируемой полимеризации с переносом атома (ATRP). Выбор данного мономера обусловлен наличием реакционноспособной эпоксидной группой, способной к химическим модификациям. С целью синтеза узкодисперсных полимеров с желаемыми молекулярно-массовыми характеристиками нами была проведена полимеризация под действием системы на основе 3-Cl-3,3,8-(k²-Ph₂(CH₂)_nPPh)-μ-(C₆H₄-o)-κлозо-3,1,2-C₂B₉H₁₀ как катализатора, CCl₄ как инициатора и изопропиламина как активатора при 60°C.

Процесс полимеризации характеризуется равномерным ростом молекулярной массы от конверсии, при этом полученные образцы имеют унимодальные кривые молекулярно-массового распределения. Коэффициенты полидисперсности находятся на уровне 1.6-1.7. Также нами была проведена блок-сополимеризация с использованием в качестве макроинициатора полиметилметакрилат, полученный с использованием той же каталитической системы ($M_n = 9200$, $PDI = 1.45$). Полученные образцы блок сополимеров ПММА-б-ГМА характеризуются узким молекулярно-массовым распределением, а мода полученного сополимера равномерно смещена в область больших молекулярных масс относительно макроинициатора.

Таким образом, было показано, что ранее разработанные системы на основе металлакарборановых комплексов рутения могут быть успешно применены для полимеризации функциональных мономеров, таких как глицидилметакрилат.

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента Российской Федерации (проект № МК-1142.2017.3).

**Каталитическое окисление кислородом воздуха
1-н-хлоргексадекана и н-гексадекана**

Зотов Ю.Л., Губанов А.Н., Масленникова А.П.

Волгоградский государственный технический университет, Волгоград, Россия

E-mail: 14gubanov@mail.ru

Изучен процесс жидкофазного окисления н-гексадекана и 1-н-хлоргексадекана кислородом воздуха в присутствии трех каталитических систем: кобальтсодержащего катализатора, N-гидроксифталимида и смеси N-гидроксифталимида со стеаратом кобальта. Было установлено, что наиболее эффективной каталитической системой для окисления указанных углеводородов является каталитическая система, состоящая из N-гидроксифталимида и стеарата кобальта. Окисление на данной каталитической системе проходит без индукционного периода, сокращается время проведения процесса.

Окисление смесей хлорзамещенных алканов кислородом воздуха описано в литературе [1]. Однако информация о процессе жидкофазного окисления индивидуальных длинноцепочных хлорпарафинов воздухом в литературе отсутствует. Поэтому актуальной задачей является исследование основных закономерностей окисления высших галогеналканов. Был изучен процесс окисления 1-н-хлоргексадекана и н-гексадекана в жидкой фазе в реакторе барботажного колонного типа (l:d=10:1) в присутствии трех каталитических систем:

- 1) N-гидроксифталимид (NHPI) и стеарат кобальта (St₂Co);
- 2) N-гидроксифталимид (NHPI);
- 3) стеарат кобальта (St₂Co).

Контроль процесса окисления на данных катализаторах, проводили по накоплению гидропероксидов по методике [2] и кислотного числа по методике [3]. В результате установлено, что каталитическая система из N-гидроксифталимида и стеарата кобальта, наиболее эффективна для окисления 1-н-хлоргексадекана и н-гексадекана в кислоты.

Список литературы

- [1] Зотов Ю. Л. Окисление промышленных хлорпарафинов кислородом воздуха: монография / Ю. Л. Зотов, Н. А. Бутакова, Ю. В. Попов ; ВолгГТУ. – Волгоград : Волгогр. науч. изд-во, 2014. – 147 с.
- [2] Одабашян, Г. В. Лабораторный практикум по химии и технологии основного орг. синтеза / Г. В. Одабашян. – Москва : Химия, 1982. – 240 с.
- [3] ГОСТ 22386-77. Кислоты и спирты жирные синтетические. Метод определения кислотного числа ; изм. 13.07.17. – Москва : Стандартинформ, 2017. – 48 с. – (Межгосударственный стандарт).

Диалкильные комплексы редкоземельных элементов в качестве селективных катализаторов полимеризации изопрена

Гурина Г.А.¹, Кисель А.А.¹, Любов Д.М.¹, Трифонов А.А.^{1,2}

¹Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева,
Нижегород, Россия

²Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова,
Москва, Россия

E-mail: live_love_peace@mail.ru

Алкильные производные РЗЭ, содержащие связь М-С, являются чрезвычайно реакционноспособными, что открывает большой потенциал для разработки каталитических систем реакций полимеризации. Известно, что реакционная способность производных редкоземельных металлов определяется электрофильностью и координационной ненасыщенностью центрального атома и может в существенной мере контролироваться путем дизайна его координационного окружения.

По реакции $\text{Ln}(\text{CH}_2\text{SiMe}_3)_3(\text{THF})_2$ ($\text{Ln} = \text{Y}, \text{Lu}$) с эквимольными количествами **NCP** (1(3-(ди-трет-бутилфосфино)метил)фенил)-1H-пиразол) и **NNP** (2-((ди-третбутилфосфино)-метил)-6-(1H-пиразол-1-ил)пиридин) в толуоле при 0°C была получена серия диалкильных комплексов иттрия и лютеция, содержащих объемные тридентатные пинцерные лиганды (Схема 1). Соединения $[\text{2}-(\text{N}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-\text{N})\text{C}_6\text{H}_3-6-(\text{CH}_2\text{P}(\text{tBu}_2))] \text{Ln}(\text{CH}_2\text{SiMe}_3)_2(\text{THF})$ ($\text{Ln} = \text{Y}$ (**1Y**), Lu (**1Lu**)) и $[\text{2}-(\text{N}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-\text{N})\text{C}_5\text{H}_3\text{N}(4-\text{CH}_2\text{SiMe}_3)-6-(\text{CH}_2\text{P}(\text{tBu}_2))] \text{Ln}(\text{CH}_2\text{SiMe}_3)_2(\text{THF})$ ($\text{Ln} = \text{Y}$ (**2Y**), Lu (**2Lu**)) были охарактеризованы спектроскопией ЯМР.

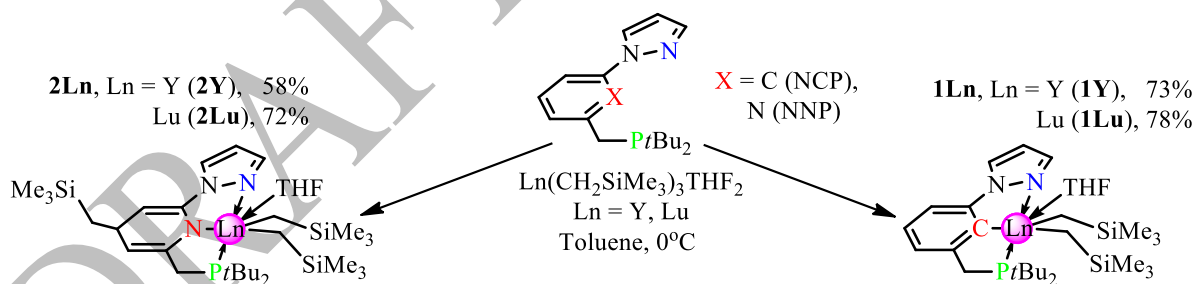


Рис 1. Синтез диалкильных комплексов иттрия и лютеция с пинцерными лигандами.

Было установлено, что трехкомпонентные каталитические системы, состоящие из диалкильных комплексов **1-2Ln**, алюминийорганического соединения ($i\text{Bu}_3\text{Al}$ и $i\text{Bu}_2\text{AlH}$) и бората, проявляют чрезвычайно высокую каталитическую активность (количественная конверсия 1000 эквивалентов мономера всего за 5 минут) и превосходную селективность (до 97.7% 1,4-цис-присоединения) в полимеризации изопрена. Полученные образцы полиизопрена обладают высокой молекулярной массой и средним индексом полидисперсности.

Синтез и антиоксидантная активность новых тиосесквитерпеноидов

Гырдымова Ю.В.¹, Судариков Д.В.¹, Шевченко О.Г.², Рубцова С.А.¹, Кучин А.В.¹

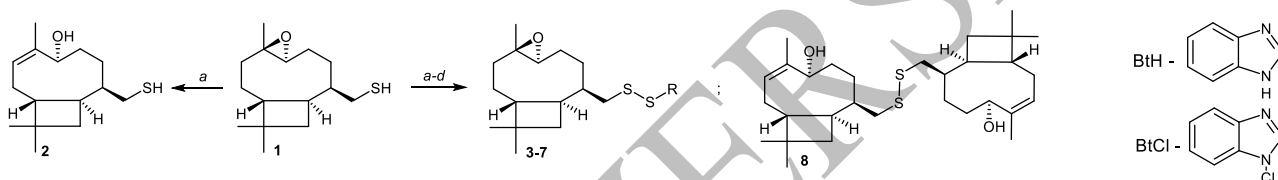
¹Институт химии Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, Россия

²Институт биологии Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, Россия

E-mail: gyrdymova-jw@chemi.komisc.ru

Серосодержащие соединения играют важную роль в формировании антиоксидантной системы организма, защищающей последний от воздействия свободных радикалов [1, 2]. Перспективными антиоксидантами могут служить серосодержащие производные природных соединений, а именно сесквитерпеноидов.

В настоящей работе на основе синтезированного ранее 4,5-эпоксикариофилланил-15-тиола [3] получен ряд производных: тиол и симметричные и несимметричные дисульфиды (схема 1).



a- TsOH·H₂O, PhH, reflux; b- THF, NCS; c- BtCl, BtH, DCM, -78 °C, Ar; d- I₂, K₂CO₃, EtOH

R: 2-benzimidazolyl-, 4-methoxyphenyl-, 2-aminophenyl-, 5-nitropyridinyl-, 4,5-epoxycaryophyllanyl-

Схема 1. Синтез некоторых тиосесквитерпеноидов.

По результатам биоиспытаний все соединения в концентрациях 10 и 100 мкМ проявляют антиоксидантную активность в тестах с использованием липидов головного мозга и эритроцитов крови лабораторных мышей. Наибольшую мембранопротекторную активность показал 4,5-эпоксикариофилланил-15 тиол **1**, который практически полностью ингибирует гемолиз эритроцитов крови лабораторных мышей.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 16-03-01064).

Список литературы

- [1] Song M., Kim J.-S, Liu L., Husain M. and Vazquez-Torres A. // Cell Reports. 2016. 14. P. 2901–2911.
 [2] Jacob C., Giles G.I., Giles N.M. und Sies H. // Angewandte Chemie. 2003. 115. S. 4890–4907.
 [3] Gyrdymova Yu.V., Sudarikov D.V., Rubtsova S.A., Slepukhin P.A., Kutchin A.V. // Chemistry of Natural Compounds. 2017. Vol. 3. № 17. P. 463–467.

**Реологические свойства анионных сополимеров акриламида
в концентрированных солевых растворах**

Давлюд Д.Н., Воробьёва Е.В., Буча С.В.

Институт общей и неорганической химии Национальной академии наук

Беларуси, Минск, Республика Беларусь

E-mail: davlud.d@tut.by

Несмотря на широкое использование акриламидных сополимеров в различных областях (очистка природных и промышленных сточных вод, флокуляция глинисто-солевых шламов рудообогатительных производств, обработка бумаги), реологические свойства их солевых растворов изучены мало. Исследование поведения анионных сополимеров акриламида в солевых растворах представляет интерес как для получения теоретических закономерностей, описывающих поведение полиэлектролитов с различным содержанием ионогенных групп, так и в связи с применением данных полимеров в качестве флокулянтов для солевых дисперсий.

В работе методом капиллярной вискозиметрии исследовали водно-солевые растворы анионных сополимеров акриламида с акриловой кислотой с молекулярной массой $1,4 \cdot 10^7$ D, содержащих 20 и 40 мольных процентов ионогенного компонента, соответственно обозначенных как ПС₂₀ и ПС₄₀. Полимеры растворяли в растворах хлоридов калия и натрия с концентрацией соли 3,4 моль/л.

Установлено, что эффективный объем макромолекул сополимеров в 1,4 и 1,2 раза выше соответственно для ПС₂₀ и ПС₄₀ в растворах хлорида натрия по сравнению с растворами хлорида калия. Влияние катиона на эффективный объем макромолекул уменьшается с ростом содержания анионных групп. Природа катиона соли оказывает заметное влияние на конформацию макромолекул: положительная гидратация ионов натрия способствует образованию более рыхлых и развернутых макромолекулярных клубков, а отрицательно гидратированные ионы калия усиливают гидрофобные взаимодействия неполярных групп. В концентрированном растворе хлорида калия область неперекрывающихся клубков (C) между концентрацией кроссовера (C^*) и концентрацией образования флуктуационной сетки зацеплений (C_e) составляет для ПС₂₀ $1,2 < C < 1,3$ и для ПС₄₀ $1,4 < C < 1,7$. В растворах хлорида натрия для ПС₂₀ обнаружена достаточно протяженная область неперекрывающихся клубков $0,8 < C < 1,5$. Показано, что изменение механизма массопереноса макромолекул анионных сополимеров акриламида в концентрированных растворах хлорида калия происходит вблизи концентрации кроссовера, как и в солевых растворах неионогенного полиакриламида. Результаты исследований использованы на практике для разработки способа повышения эффективности флокулянтов глинисто-солевых дисперсий, образующихся в процессе обогащения калийной руды.

Влияние природы носителя на катализ процессов диспропорционирования аминов субмикро- и наночастицами никеля

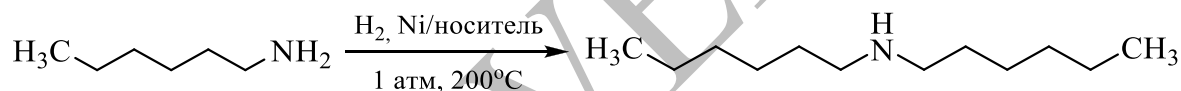
Давыдова Т.М.

*Волгоградский государственный технический университет, Волгоград, Россия
E-mail: davydovatanya1995@yandex.ru*

Симметричные амины находят широкое применение в различных областях промышленности. Однако существующие способы производства диалкиламинов подразумевают применение высоких температур и давления (до 300°C и 50 атм). Таким образом, цель данной работы – разработать новый технологичный способ получения симметричных аминов, не требующий применения специальных условий.

Нами было сделано предположение, что катализаторы на основе субмикро- и наночастиц никеля, стабилизированных на поверхности носителя, позволят проводить данный процесс в реакторе проточного типа в более мягких условиях по сравнению с имеющимися аналогами.

Для более подробного исследования влияния носителя наночастиц никеля на реакцию диспропорционирования аминов была выбрана реакция получения дигексиламина:



В качестве носителя использовались активированный уголь марки БАУ-А, оксид алюминия Al_2O_3 и алюмосиликатный катализатор крекинга Цеокар-2 (фракция носителей 1-1,5 мм).

Лучшие показатели выхода целевого продукта, конверсии гексиламина и селективности основной реакции были получены при проведении реакции с применением катализатора $\text{Ni}^0/\text{Al}_2\text{O}_3$. Достигается практически полная конверсия амина – 95%.

При использовании катализатора $\text{Ni}^0/\text{C}_{\text{акт}}$ были получены низкие технологические показатели синтеза, поэтому применение его в реакциях диспропорционирования нецелесообразно.

Таблица. Исследование процесса диспропорционирования гексиламина в присутствии наночастиц никеля, нанесенных на различные носители.

Катализатор	X_A , %	Φ_R , %	f, %
$\text{Ni}^0/\text{C}_{\text{акт}}$	10	55	6
$\text{Ni}^0/\text{цеокар-2}$	64	69	19
$\text{Ni}^0/\text{Al}_2\text{O}_3$	95	90	88

Установлено, что реакция диспропорционирования аминов при катализе частицами никеля в реакторе вытеснения в газовой фазе или в системе газ-жидкость-твёрдый катализатор протекает при атмосферном давлении водорода при оптимальной температуре 180-230 °C с образованием симметричных вторичных аминов.

Синтез неионогенных поверхностно-активных веществ на основе карданола

Демидов П.А., Демидова Ю.В.

*Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), Санкт-Петербург, Россия*

E-mail: pavel-a-demidov@rambler.ru

В последние годы за рубежом происходит значительное снижение производства и потребления оксиэтилированных продуктов бензоидного строения, получаемых из синтетических алкилфенолов. Связано это в первую очередь с их плохой биоразлагаемостью, обусловленной изостроением углеводородной боковой цепи.

В то же время в ряде стран Азии и Южной Америки организовано промышленное производство алкилфенола природного происхождения – карданола, получаемого декарбоксилированием анакординовой кислоты – основного компонента жидкости скорлупы орешков кешью. Карданол представляет собой смесь замещенных фенолов, содержащих в м-положении линейный C₁₅ алкильный заместитель различной степени ненасыщенности в следующем соотношении: насыщенные – 2,2-3,0%, моноеновые – 25,0-33,3%, диеновые – 17,8-32,1%, триеновые – 36,3-50,4% [1]. Имеющиеся данные свидетельствуют о меньшей токсичности карданола по сравнению с синтетическими алкилфенолами.

В настоящей работе были получены образцы неионогенных поверхностно-активных веществ оксиэтилированием карданола. В качестве сырья был использован карданол Cardolite NX 2023. Степень оксиэтилирования определялась из материального баланса и дополнительно контролировалась по спектрам ЯМР 1H.

Постоянство соотношения интегралов сигналов протонов соответствующих групп в карданоле и получаемом продукте позволило сделать вывод об отсутствии структурных изменений углеродного скелета в ходе реакции. Установлено влияние типа катализатора и температурного режима на качество получаемого продукта. Было показано, что с ростом концентрации щелочного катализатора происходит увеличение содержания в конечном продукте полиэтиленгликолей, которые являются нежелательными примесями, так как не проявляют поверхностно-активных свойств. Полученные образцы неионогенных поверхностно-активных веществ были испытаны на моющую способность. Исходя из полученных результатов была установлена зависимость моющей способности от степени оксиэтилирования карданола.

Список литературы

[1] Tyman J.H., Kiong L.S., Long chain phenols: Part XI. Composition of natural cashew nutshell liquid (*Anacardium occidentale*) from various sources // *Lipids*. - 1978. - V. 13. – Is. 8. - P. 525–532.

Синтез 4-(5-п-нитрофенилфур-2-ил)-1,2,3-тиадиазола

Дмитерко В.В., Певзнер Л.М., Степанова О.В..

Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), Санкт-Петербург, Россия

E-mail: vasilina290797@mai.ru

В последние годы активно изучаются соединения, содержащие гетероциклические фрагменты. Примером таких систем могут служить 1,2,3-тиадиазолы и их производные. Данные соединения находят широкое применение среди лекарственных препаратов, средств. Большое значение имеет область исследований, направленных на получение электроактивных органических материалов. Гетероциклические соединения широко распространены в природе: многие из них служат ключевыми компонентами в биологических процессах. Ввиду этого большое значение приобретает поиск новых удобных методов целенаправленного синтеза гетероциклических систем заданной структуры.

Ранее нами синтезирован 4-(3-метил-5-нитрофенилфур-2-ил)-1,2,3-тиадиазол [1], и дальнейшая функционализация метильной группы не привела к желаемому соединению [2]. Поэтому принято решение получить другое производное 1,2,3-тиадиазола, чтобы при действии на него основания можно было раскрыть тиадиазольное кольцо с дальнейшим получением 5-(2-метилтиоэтинил)-2-п-нитрофенилфурана [3]. Арилированием ацетилфурана п-нитрофенилдиазонием по реакции Гомберга-Бахмана в водно-ацетоновой среде синтезирован 5-п-нитрофенил-2-ацетилфуран **1**. Далее при действии карбэтоксигидразина на соединение **1** получен карбэтоксигидразон 5-п-нитрофенил-2-ацетилфурана **2** и по реакции Хурда-Мори превращен в 4-(5-п-нитрофенилфур-2-ил)-1,2,3-тиадиазол (рис. 1). В настоящее время изучаются возможности синтеза 1,2,3-тиадиазолов с о-/м-нитрофенильными акцепторными заместителями в фурановом кольце.

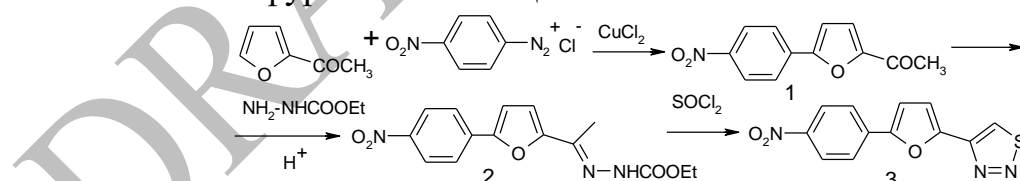


Рис.1. Схема получения 4-(5-п-нитрофенилфур-2-ил)-1,2,3-тиадиазола.

Строение полученных соединений подтверждено данными ЯМР ^1H и ^{13}C .

Список литературы

- [1] Дмитерко В.В., Певзнер Л.М. Сборник тезисов VII Научно-технической конференции «Неделя науки-2017» - СПб.: 2017. – С. 64.
 [2] Дмитерко В.В., Певзнер Л.М., Петров М.Л., Соколова Н.Б. Сборник тезисов научной конференции «Традиции и Инновации». 2017 г. – СПб.: 2017. – С. 44.
 [3] Маадади Р., Певзнер Л.М., Петров М.Л. ЖОХ. 2017. Т. 87, Вып. 2. С. 284-290.

Синтез замещенных карбэтоксигидразон 2-бромфенилкетонов

Степанова О.В., Певзнер Л.М., Дмитерко В.В.

Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)

Санкт-Петербург, Россия

E-mail: olvstep@mail.ru

В последнее время возрос интерес к ароматическим гидразонам из-за возможности использования их в качестве лекарственных средств.

Был синтезирован хлорангидрид 2-бром-5-метоксибензойной кислоты **1** действием хлористого тионила в бензоле на 2-бром-5-метоксибензойную кислоту. Кетон **2** был получен из хлорангидрида **1** магниорганическим синтезом с диэтилмалонатом в абсолютном эфире и дальнейшим расщеплением кетоэфира в кислой среде. Действием карбэтоксигидразина в присутствии следов кислоты из кетона получили гидразон **3**. Изучается влияние метокси-группы в бензольном кольце на реакционную способность соединения **3**.

Аналогичным образом был синтезирован хлорангидрид 2-бром-5-трет-бутилбензойной кислоты **4** из соответствующей 2-бром-5-трет-бутилбензойной кислоты. Магниорганическим синтезом из хлорангидрида **4** получили кетон **5**. Действием карбэтоксигидразина в присутствии следов кислоты из кетона **5** получили гидразон **6**. Изучается влияние объемного заместителя — трет-бутильной группы в бензольном кольце, который является сигма-донором. А так же сравнение реакционной способности молекулы с метильной группой и с трет-бутильной.

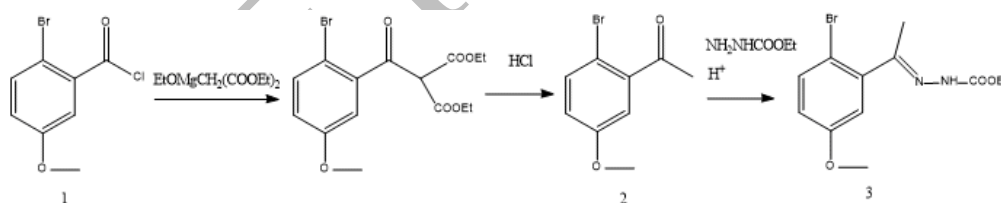


Рис.1. Синтез карбэтоксигидразон 2-бром-5-метоксифенилкетона.

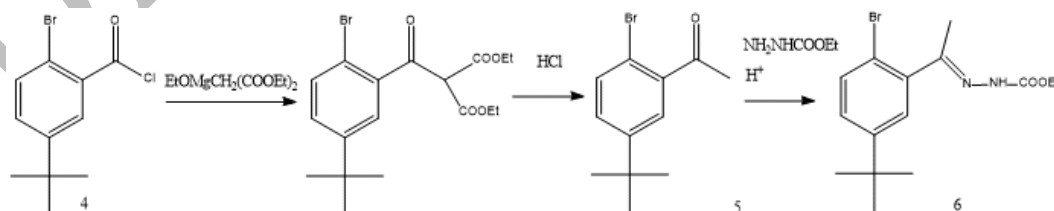


Рис.2. Синтез карбэтоксигидразон 2-бром-5-трет-бутилфенилкетона.

Строение полученных соединений подтверждено данными ЯМР ^1H и ^{13}C .

Список литературы

[1] Певзнер Л.М. ЖОХ. 2015. Т. 85, Вып. 1. С.67-76.

О химических свойствах дигаллана

Додонов В.А., Скатова А.А., Федюшкин И.Л.
Институт металлургической химии им. Г.А. Разуваева РАН, 603950
Тропинина, 49, Нижний Новгород, Россия
E-mail: dodonov@iomc.ras.ru

Редокс-активные лиганды, принимающие непосредственное участие в химических процессах, придают металлическим центрам совершенно новую реакционную способность, а иногда позволяют осуществить превращения, которые невозможно провести иначе.

Настоящая работа посвящена исследованию химических свойств дигаллана, (dpp-bian)Ga–Ga(dpp-bian), содержащего редокс-активный лиганд dpp-bian = 1,2-бис[(2,6-ди-*изо*-пропилфенил)имино]аценафтен. Данный комплекс обнаруживает редокс-дуализм (реакции с участием лиганда или связи металл–металл) [1, 2], взаимодействует с оксидом серы (IV) [3], способен к двухэлектронному окислительному присоединению [4] и лиганд-сопряженному присоединению.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 14-13-01063-П)

Список литературы

- [1] Fedushkin I. L., Skatova A. A., Dodonov V. A., Chudakova V. A., Bazyakina N. L., Piskunov A. V., Demeshko S. V., Fukin G. K. // *Inorganic Chemistry*. 2014. Т. 53, № 10. С. 5159-5170.
- [2] Dodonov V. A., Skatova A. A., Cherkasov A. V., Fedushkin I. L. // *Russian Chemical Bulletin*. 2016. Т. 65, № 5. С. 1171-1177.
- [3] Fedushkin I. L., Skatova A. A., Dodonov V. A., Yang X.-J., Chudakova V. A., Piskunov A. V., Demeshko S., Baranov E. V. // *Inorganic Chemistry*. 2016. Т. 55, № 17. С. 9047-9056.
- [4] Fedushkin I. L., Dodonov V., Skatova A., Sokolov V., Piskunov A., Fukin G. // *Chemistry – A European Journal* DOI: 10.1002/chem.201704128.

5'-Метил-2,2',5',2''-тертиофен как структурный блок в синтезе ряда органических люминофоров, содержащих 1,3,4-оксазольный фрагмент

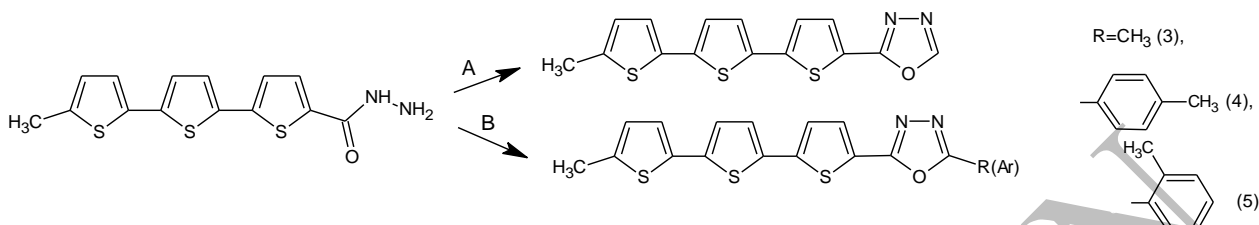
Долибожко Н.В., Юдашкин А.В.
Самарский государственный технический университет, Самара, Россия
E-mail: ayudashkin@mail.ru

Полициклические гетарилы цепочечного строения на основе 1,3,4-оксазола являются известным классом высокоэффективных люминофоров и лазерных красителей.

Введение алкильного заместителя в структуру оксадиазолилтертиофенов приводит не только к смещению λ_{CT} , но и повышению растворимости [1,2].

Синтез 5'-метил-(1''', 3''', 4'''-оксадиазол-2'''-ил)-2,2',5',2''-тертиофе-на (2) проведен конденсацией гидразида тертиофенкарбоновой кислоты (1),

полученного известными способами, с ортомуравьиным эфиром (направление А). Ацилированием гидразида (1) соответствующими хлорангидами уксусной или 4- и 2-толуиловых кислот в условиях реакции Робинсона-Габриэля синтезированы оксадиазолы (3,4,5) (направление В).



Введение CH_3 -группы вдоль длинной цепи молекулы приводит к стоксовому сдвигу длинноволновой полосы флуоресценции, характерному для метильной группы, повышению квантового выхода и растворимости.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 15-43-02565.

Список литературы

- [1] Красовицкий Б.М., Болотин Б.М. // Органические люминофоры. 1984. М.: Химия. 336 с.
 [2] Андриюшкина Н.М. // Автореферат диссертации канд. хим. наук. 1992. Москва. 16 с.

Твердые дисперсии производного 1,2,4-тиадиазола с полимерами: получение и исследование свойств

Доманина Е.Н.^{1,2}, Терехова И.В.², Прошин А.Н.³

¹Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия

²Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук,
Иваново, Россия

³Институт физиологически активных веществ Российской академии наук,
Черноголовка, Россия

[E-mail: domanina-kate@yandex.ru](mailto:domanina-kate@yandex.ru)

Биофармацевтические исследования лекарственных веществ служат научной основой для поиска и создания высокоэффективных препаратов. Как правило, эффективность лекарств зависит от биологической доступности лекарственных веществ, входящих в его состав. Известно, что биодоступность можно повысить при введении в состав лекарственных форм полимеров, которые способствуют улучшению растворимости и ускоряют процесс высвобождения лекарственного вещества в системный кровоток.

В данной работе были получены и исследованы новые водорастворимые лекарственные формы производного 1,2,4-тиадиазола на основе полимеров (поливинилпирролидон К29-32, полиэтиленгликоль 6000, полуксамер Р407).

Производное 1,2,4-тиадиазола, рассматриваемое как новое лекарственное соединение для предупреждения и лечения болезни Альцгеймера, относится к 4 классу по биофармацевтической классификационной системе, т.к. обладает низкой растворимостью в водной среде, плохой мембранной проницаемостью, как следствие, невысокой биодоступностью. Повышение этих параметров является крайне необходимым. С этой целью, механохимическим способом были получены и охарактеризованы методами дифференциальной сканирующей калориметрии и термомикроскопии твердые дисперсии производного 1,2,4-тиадиазола с полимерами. Растворимость и скорость высвобождения тиадиазола из твердых дисперсий были определены в буферных растворах с физиологическим значением pH. Проницаемость лекарственного вещества через фосфолипидную мембрану PermeaPad была изучена на ячейке Франца при температуре 37°C. Было выявлено, что наибольшей солюбилизующий эффект по отношению к производному 1,2,4-тиадиазолу проявляет полоксамер P407, а наименьший – полиэтиленгликоль (ПЭГ 6000). Повышение растворимости и скорости растворения в присутствии полоксамера обусловлено включением тиадиазола в мицеллы, которые он образует в водном растворе. Доказано, что солюбилизующее действие полимеров сопровождается понижением коэффициентов проницаемости производного 1,2,4-тиадиазола через мембрану, и эта закономерность проявляется в большей степени с ростом концентрации полимеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №15-13-10017).

Полимерные сорбенты для извлечения липопротеидов низкой и очень низкой плотности из плазмы

Дорская Е.В.¹, Лейкин Ю.А.¹, Пестов С.М.²

¹*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
Москва, Россия*

²*Московский технологический университет,
Москва, Россия*

E-mail: edrhtu@mail.ru, leykinya@mail.ru, pestov@mirea.ru

Сердечно-сосудистые заболевания заняли первое место среди причин смертности в Российской Федерации по данным Росстата в 2015-2016 г. Фактором риска возникновения данных патологий является повышенное содержание холестерина липопротеидов низкой и очень низкой плотности (ЛПНП и ЛПОНП) в плазме крови. Эффективным методом лечения в этом случае является экстракорпоральная очистка аутоплазмы от данных компонентов или обменное переливание донорской плазмы с их пониженным содержанием. Современные медицинские технологии позволяют вполне успешно проводить коррекцию биологических жидкостей с многоуровневой

защитой пациента, однако селективность используемых сорбентов к ЛПНП и ЛПОНП достаточно невысока. Данное исследование направлено на разработку плазмсорбентов с улучшенными характеристиками – высокими селективностью и емкостью по ЛПНП и ЛПОНП, а также минимумом побочных эффектов. Был проведен скрининг широкого спектра сорбентов различных типов: нейтральных, анионитов, катионитов, полиамфолитов и специфических сорбентов. Эксперимент проводился путем выдерживания донорской плазмы в контакте с сорбентом в течение 3 часов *in vitro* и последующим определением содержания компонентов липидного спектра в исходной плазме и плазме, подвергшейся сорбции. Далее рассчитывались емкости по каждому компоненту и селективность к ЛПНП и ЛПОНП.

По результатам полученных данных был предложен ряд сорбентов, обладающих теми или иными преимуществами для целей плазмсорбции. Наибольшая избирательность к атерогенным липопротеидам отмечалась у анионитов с группами моноэтаноламмония (АМГ-2-2), триметиламмония (А-500) и трипропилфосфония (ЧФО), для которых коэффициент селективности, равный отношению суммарной емкости по ЛПНП и ЛПОНП к емкости по ЛПВП, составил соответственно 19,0; 11,5 и 11,0. Высокую суммарную емкость по ЛПНП и ЛПОНП показал нейтральный сорбционный нетканый материал на основе полипропилена (Н-ПП) – 11,0 мкмоль/г. Для анионита ЧФО изучено влияние его формы (хлоридная, гидроксильная, бикарбонатная) на сорбционные свойства. Установлено, что его емкость по ЛПНП и ЛПОНП и селективность к данным компонентам возрастают в ряду форм: $\text{HCO}_3 < \text{Cl} < \text{OH}$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России. Уникальный идентификатор прикладных научных исследований (проекта) RFMEFI58015X0004.

Полимерные сорбенты для коррекции гипериммунных состояний

Дорская Е.В.¹, Лейкин Ю.А.¹, Пестов С.М.²

¹*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
Москва, Россия*

²*Московский технологический университет,
Москва, Россия*

E-mail: edrhtu@mail.ru, leykina@mail.ru, pestov@mirea.ru

При некоторых психических и нейроонкологических заболеваниях, а также при нейроинфекциях и черепно-мозговых травмах отмечаются высокие концентрации антител (иммуноглобулинов) к нейроспецифическим белкам. Эффективным методом лечения при подобных состояниях является удаление из организма больного циркулирующих антител с помощью процедур

экстракорпоральной очистки плазмы. При этом, как правило, возникает необходимость селективного извлечения одного из видов глобулинов.

В современной эфферентной медицине широко используется метод иммуноадсорбции. Однако достигнутые на сегодняшний день характеристики плазмосорбентов оставляют желать лучшего. Данная работа направлена на поиск и создание сорбентов, способных наиболее полно и избирательно извлекать данные компоненты.

В результате проведенных экспериментов определены сорбенты, обладающие высокими значениями емкости и селективности к фракциям глобулинов.

Установлено, что наибольшую емкость по α 1-глобулинам имеют сульфокатионит, заряженный этонием, СБЭС и катионит с группами тион- и тиолфосфоновых кислот К-2-9 (7,5 и 7,1 мг/г соответственно); по α 2-глобулинам – нетканые материалы на основе акрилонитрилового волокна с группами первичного и вторичного аминов Н-АН-3 и на основе полипропилена Н-ПП (50,2 и 48,4 мг/г соответственно); по β -глобулинам – анионит с группами моноэтаноламмония АМХ-1 в хлоридной форме (30,9 мг/г); по γ -глобулинам – К-2-9 и анионит с группами моноэтаноламмония, модифицированный уксусным ангидридом, АМХ-1-У (64,3 и 53,7 мг/г соответственно).

Наибольший коэффициент селективности, рассчитанный как отношение емкости по данной фракции глобулинов к суммарной емкости по глобулинам, отмечается у следующих сорбентов: для α 1-глобулинов – у анионита с группами триэтаноламмония АМХ-3 (0,23), для α 2-глобулинов – у катионита группами метилфосфоновой кислоты К-2-6 (0,67), для β -глобулинов – у анионита с группами моноэтаноламмония А-300 (0,67), для γ -глобулинов – у эпоксидированного акрилового сополимера, обработанного диэтаноламином, П-3-2 (0,81).

Настоящее исследование позволит усовершенствовать используемые иммуноадсорбционные технологии и, как следствие, сократить частоту постсорбционных осложнений, связанных с неспецифическим извлечением компонентов крови, а также снизить стоимость лечения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России. Уникальный идентификатор прикладных научных исследований (проекта) RFMEFI58015X0004.

**Синтез новых жирорастворимых циклопентенофуллеренов
фосфин-катализируемой реакцией [3+2]-циклоприсоединения
2, 3-диеноатов к фуллерену C₆₀**

Досниязова А.Г.¹, Мухаметьянова А.Ф.², Ишбаева С.М.¹, Атангулов А.Б.¹,
Биглова Ю.Н.¹, Сахаутдинов И.М.²

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение ВПО
Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Уфимский
Институт химии РАН, Уфа, Россия
E-mail: dosniyazova.a@mail.ru

Один из наиболее удобных путей аннелирования к молекуле C₆₀ пятичленных гомо- и гетероциклических фрагментов – использование процессов [3+2]-циклоприсоединения разнообразных 1,3-диполей. Фосфин-катализируемое [3+2] - циклоприсоединение различных алленоатов к фуллереновому каркасу как диполярофилу приводит к образованию новых циклопентенофуллеренов. Полученные 2, 3-диеноаты из жирных кислот **1a-c** в присутствии эквимольного количества трифенилфосфина и фуллерена C₆₀ приводят к образованию новых циклопентенофуллеренов C₆₀ **2a-c**.

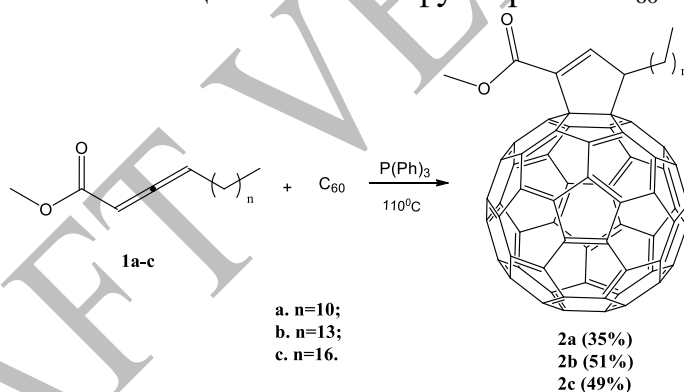


Рис. 1. Синтез циклопентенофуллеренов.

Полученные пятичленные карбоциклические фуллерены C₆₀ хорошо растворимы в органических растворителях. Демонстрируют неплохую растворимость в ТВИН 60, в оливковом и подсолнечном маслах, что позволяет утверждать об их липофильности в отличие от самого фуллерена C₆₀. Липофильность полученных продуктов **2a-c** может быть полезна при создании антиоксидантов нейрозащитного действия, поскольку фуллерен эффективно улавливает свободные радикалы. Продукты реакции выделяли с помощью колоночной хроматографии на силикагеле «Сметарол» с размером частиц 40/100 мкм. Строение полученных соединений доказано комплексом физико-химических методов, включающим ЯМР 2D эксперименты HSQC и HMBC. Информационная поддержка - грант РФФИ 13-00-14056. Спектральная часть исследования проведена на оборудовании ЦКП «Химия» ФГБУН УФИХ РАН.

Изучение ранозаживляющей активности производных фуллерена C₆₀ с дитерпеновым блоком на модели термического ожога у крыс

Досниязова А.Г.¹, Маликова Р.Н.², Габдрахманова С.Ф.², Ишбаева С.М.²,
Хисамутдинова Р.Ю.², Сахаутдинов И.М.¹

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение ВПО
Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Уфимский
Институт химии РАН, Уфа, Россия

E-mail: dosniyazoiva.a@mail.ru

В поиске биологически активных средств нами синтезированы конъюгаты фуллерена C₆₀, имеющие природный дитерпеноидный остаток в своем составе и способные растворяться в подсолнечном масле.

В данной работе эксперименты проведены на 11 белых беспородных крысах обоего пола массой 240-260 г. Термические ожоги воспроизводили путем контакта эпилированного левого бока крысы с горячей водой (100 ° С) в течение 6 секунд [1]. Ожог наносили в условиях уретанового наркоза. В качестве препарата сравнения использовали левомеколь (мазь для наружного применения, Нижфарм). Соединения **1** и **2** применяли в виде 2% растворов на основе подсолнечного масла. Масла наносили на раневую поверхность ежедневно в течение 7 дней. Раны контрольных животных обрабатывали подсолнечным маслом. Сравнивали среднюю площадь поверхности ран опытных групп по отношению к контролю. Результаты выражали в процентах.

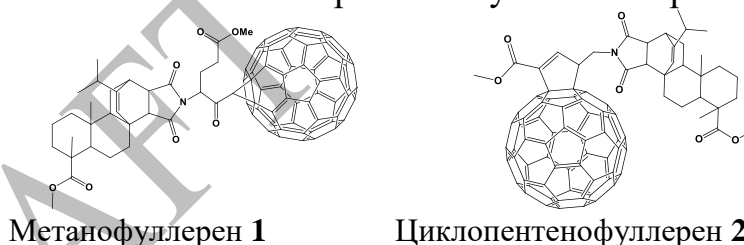


Рис. 1. Структуры конъюгатов фуллерена 1 и 2.

К 7-му дню лечения фуллереновый конъюгат **1** проявил тенденцию к сокращению площади поверхности ожоговых ран на модели термического ожога у крыс. Соединение фуллерена с циклопентеновым кольцом **2** ранозаживляющую активность не проявило (табл. 1).

Таблица 1. Влияние масляных растворов на заживление ожоговых ран у крыс (n=3).

Соединение	Ранозаживляющая активность, %
1 , 2%	13,7
2 , 2%	0
Подсолнечное масло	0
Левомеколь, 4%	18,9

n=количество животных в группе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта РНФ № 14-13-01307.

Синтез новых представителей оксимов с трифторметильной группировкой

Дробков А.В.¹, Алексанян Д.Р.¹, Дутов М.Д.², Русина О.Н.³, Кошелев В.Н.¹

¹Российский Государственный Университет нефти и газа
имени И. М. Губкина, Москва, Россия.

²Институт Органической Химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия.

³Российский Химико-Технологический Университет им. Д. И. Менделеев,
Москва, Россия.

E-mail: dutov@ioc.ac.ru

Данная работа проводилась в рамках синтеза новых соединений класса кетоксимов, которые были получены путем нуклеофильного замещения нитрогруппы в производных ди- и тринитробензола. Интерес к данной реакции заключается в том, что эти вещества являются промежуточными продуктами при синтезе большого количества соединений, в частности индолов, обладающих фунгицидной активностью.

Методика синтеза представителей данного класса соединений была разработана ранее [1] и представляет собой нуклеофильное замещение нитрогруппы производных 1,3-динитробензола на оксимы кетонов или альдегидов в присутствии основания. К смеси оксима и K_2CO_3 в 1-метил-2-пирролидоне добавляют производные 1,3-динитробензола (Схема 1). Реакционную смесь нагревают до 65-70°C и перемешивают при данной температуре 4-10 часов. Выход продуктов реакции составил от 62 до 69%.

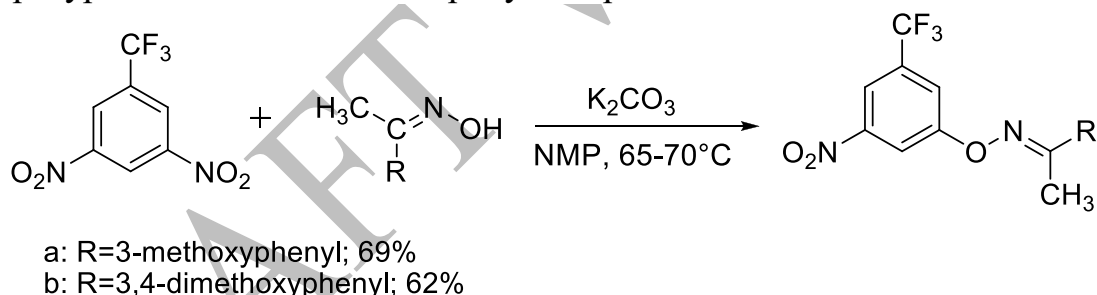


Рис.1. Нуклеофильное замещение в производном 1,3-динитробензола.

Фунгицидная и противовирусная активность индолов зависит от его строения, в частности от функциональных групп, замещенных в молекулах оксимов.

Таким образом, получив кетоксимы **a-b**, с разными заместителями в бензольном кольце, мы можем синтезировать новые индолы.

Список литературы

[1] G. V. Kokurkina, M. D. Dutov, S. A. Shevelev, S. V. Popkov, A. V. Zakharov, V. V. Poroikov, Eur. J. Med. Chem.2011, 46, 4374-4382.

Фармацевтические сокристаллы 4-аминобензойной кислоты

Дрозд К.В.

*Институт химии растворов им Г.А. Крестова Российской академии наук,
Иваново, Россия*

E-mail: ksdrozd@yandex.ru

Поиск инновационных лекарственных препаратов для борьбы с различными заболеваниями без ущерба для их безопасности и эффективности – серьезная проблема современности. По оценкам, около 40% выпускаемых и свыше 80% новых разрабатываемых препаратов состоят из плохо растворимых или практически нерастворимых лекарственных соединений. Сегодня все больше исследований направлены не на разработку новых лекарственных соединений, а на их модифицирование.

Супрамолекулярная химия, а точнее – кристаллоинженерия, предлагает перспективный подход для решения проблемы низкой эффективности лекарственных соединений без изменения их химической структуры, который заключается в создании фармацевтических смешанных кристаллов (сокристаллов). Сокристалл – это многокомпонентный молекулярный кристалл, состоящий, по меньшей мере, из 2-х нейтральных молекул, связанных вместе в кристаллической решетке посредством нековалентных взаимодействий [1].

Цель данной работы заключалась в исследовании процесса сокристаллизации 4-аминобензойной кислоты с производными пиримидина. 4-аминобензойная кислота – противовирусное и антигистаминное лекарственное средство, обладающее широким спектром физиологического действия на организм.

Для подтверждения образования сокристаллов были использованы дифференциальная сканирующая калориметрия и рентгеноструктурный анализ поликристаллов. Далее для двухкомпонентных систем с положительным результатом были выращены монокристаллы методом медленной кристаллизации и расшифрованы их кристаллические структуры, что позволило рассчитать энергии кристаллических решеток и провести оценку влияния различных производных пиримидина в сокристалле на энергию межмолекулярных взаимодействий. Для оценки влияния сокристаллизации на растворимость исследуемого соединения была изучена кинетика растворения сокристаллов в сравнении с индивидуальными компонентами в водных растворах с физиологическими значениями pH.

Список литературы

[1] Yadav A.V., Shete A.S., Dabke A.P., Kulkarni P.V. Indian J. Pharm. Sci., 2009, 71, 359-370.

Гомо- и сополимеризация метакриловой кислоты со стиролом в условиях обратимой передачи цепи

Дукова С.В., Зайцев С.Д.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

E-mail: kurakina_svetlan@mail.ru

Контролируемый синтез полимеров с заданной молекулярной массой, низким параметром полидисперсности, а также сополимеров с определенным строением цепи является приоритетным направлением в современной химии полимеров.

В этой работе мы исследовали гомо- и сополимеризацию метакриловой кислоты и стирола по механизму обратимой передачи цепи. Было обнаружено, что гомополимеризация метакриловой кислоты и стирола протекала в контролируемом режиме, на что указывают узкое молекулярно-массовое распределение, отсутствие гель-эффекта и линейное увеличение средней молекулярной массы с конверсией. Затем была проведена полимеризация метакриловой кислоты и стирола в присутствии полимерных агентов обратимой передачи цепи (полистирола и полиметакриловой кислоты).

Установлено, что параметр полидисперсности гомополимеров, полученных в присутствии ПМАК и ПСт в качестве полимерных ОПЦ-агентов, меньше, чем у гомополимеров, полученных в присутствии низкомолекулярного ОПЦ-агента, следовательно, использование полиОПЦ более выгодно с точки зрения молекулярно-массовых характеристик. На следующем этапе была проведена сополимеризация МАК ($f_{\text{МАК}}$ составила 0.15, 0.3 и 0.5 соответственно) со стиролом в массе в присутствии ЦПДТ в качестве ОПЦ-агента. На всем интервале конверсий наблюдалось отсутствие гель-эффекта, узкое молекулярно-массовое распределение полученных полимеров, линейное увеличение средней молекулярной массы с конверсией.

Кроме того, проведена сополимеризация МАК ($f_{\text{МАК}} = 0.3$) со стиролом в присутствии двух ОПЦ - агентов: бензилдитиобензоата (БТБ) и 2-циано-2-пропилдодецил тритиокарбоната (ЦПДТ) до глубокой конверсии ($\approx 98\%$), а также «обычная» радикальная сополимеризация в присутствии передатчика цепи додецилмеркаптана (ДДМ). Из синтезированных сополимеров приготовили плёнки, физико - механические свойства которых изучались на разрывной машине. Оказалось, что сополимеры, полученные в присутствии ОПЦ - агентов обладают существенно лучшими физико - механическими показателями по сравнению с сополимером, полученным классической радикальной полимеризацией. Полученные в работе полимеры представляют значительный интерес ввиду своей способности к самоорганизации на наноуровне.

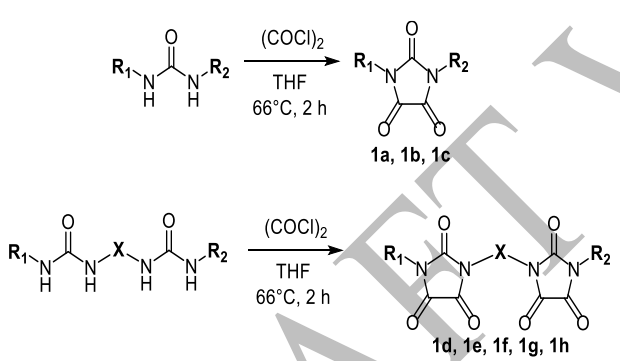
Синтез и свойства адамантилсодержащих моно- и диимидазолидин-2,4,5-трионов

Дьяченко В.С., Рассказова Е.В., Икрянникова В.В.,
Бурмистров В.В., Бутов Г.М.

Волжский политехнический институт (филиал) Волгоградского государственного технического университета, Волжский, Россия

E-mail: v.s.dyachenko@mail.ru

Синтезирована серия 1,3-(адамантан-1(2)-ил)имидазолидин-2,4,5-трионов и 3,3'-(адамантан-1-ил)бис(1-алкилимидазолидин-2,4,5-трионов) циклизацией 1,3-бис(адамантан-1(2)-ил)мочевин и 1,1'-(алкил-1,п-диил)бис(3-(адамантан-1-ил))мочевин оксалилхлоридом в мягких условиях и с высокими выходами. Все синтезированные соединения были испытаны *in vitro* как ингибиторы растворимой эпоксидгидролазы человека (sEH). Для ряда соединений установлена высокая ингибиторная активность (IC_{50} 1.6 ÷ 650 нмоль/л), что делает их перспективными ингибиторами растворимой эпоксидгидролазы человека [1].



№	R ₁	R ₂	X	Выход, %
1a			—	77
1b			—	91
1c			—	64
1d				74
1e				78
1f				82
1g				90
1h				95

Рис. 1. Схема синтеза 1,3-(адамантан-1(2)-ил)имидазолидин-2,4,5-трионов и 3,3'-(адамантан-1-ил)бис(1-алкилимидазолидин-2,4,5-трионов).

Строение полученных соединений подтверждали с помощью ЯМР ¹H спектроскопии и хромато-масс-спектрометрии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках базовой части государственного задания на 2017–2019 гг. (проект 4.7491.2017/БЧ) на оборудовании, приобретенном по программе стратегического развития ВолГТУ на 2012–2016 гг.

Список литературы

[1] Бурмистров В.В., Бутов Г.М., Дьяченко В.С. //Журнал органической химии. 2016. Т. 54, №4. С. 594-596.

**Оптически прозрачные полимерные материалы
на основе эпоксидных смол**

Чигорина Т.М., Егоров Д.И.

*Северо-Осетинский государственный университет им. К.Л. Хетагурова,
Владикавказ, Россия*
tmchigorina@mail.ru

Эпоксидные компаунды для герметизации оптоэлектронных приборов до настоящего времени не утратили актуальности и применяются на всех крупнейших предприятиях отрасли [1]. В данной работе проведены исследования по созданию оптически прозрачных композиций ($d=1,68$) на основе эпоксидной смолы (диглицидиловый эфир D,L-камфорной кислоты), содержащих в своем составе добавки цианвинильных производных 2,6-ди-трет.-бутилфенола.

4-(1,2,2-Трициановинил)-2,6-ди-трет-бутил-фенол синтезирован по реакции 2,6-ди-трет-бутилфенола с тетрацианоэтиленом в среде ДМФА. Общепринятый механизм окисления фенолов протекает по механизму $-e, -H^+$. При взаимодействии даже со слабыми нуклеофилами происходит образование свободных феноксильных радикалов. Это свойство использовано для получения окрашенных оптически прозрачных эпоксидных композиций, отверждаемых в присутствии полиаминов (диэтилентриамин - ДЭТА). Эпоксидный полимер служит матрицей. Образование радикалов происходит на молекулярном уровне и приводит к хорошей совместимости с матрицей полимера [2, 3].

Проведена работа по выбору режима отверждения разрабатываемых композиций. Выбран ступенчатый режим отверждения: первоначально образец выдерживается при 20°C в течение 24 часов. Затем, для полного отверждения, дополнительно прогревается при 80°C – 6 часов.

Предлагаемые нами материалы могут найти применение в оптоэлектронике для герметизации отдельных светодиодов либо кластеров светодиодов, работающих в условиях температурных перепадов.

Список литературы

- [1] Годосийчук Т.Т., Яровая Н.В., Менжерес Г.Я., Косянчук Л.Ф. Особенности формирования оптически-прозрачного фотоотверждаемого клея-компаунда с высоким показателем преломления. //Клеи. Герметики. Технологии. №10. 2009. С. 2-8.
- [2] Горбунов А.И., Чигорина Т.М. Синтез радикальных красителей ряда пространственно-затрудненных фенолов. //Матер. тез. докл. XVII Российской молодежной научной конференции. Екатеринбург. 2007. С. 267.
- [3] Т.М.Чигорина, Е.А.Чигорина и др. Органосилоксановые клеи-герметики с повышенными физико-механическими свойствами. //Сб. научн. трудов Международ. конф. «Пластмассы со специальными свойствами». – Под ред. д.х.н., проф. Н.А.Лаврова. – СПб.: ЦОП «Профессия». Санкт-Петербург. 2011. С. 245-247.

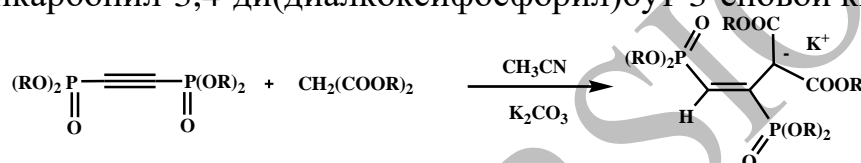
Фосфорилирование амидодиэтилмалоната тетраметилэтиндифосфонатом

Петросян А.А.¹, Егоров Д.М.^{1,2}, Питерская Ю.Л.¹, Догадина А.В.¹

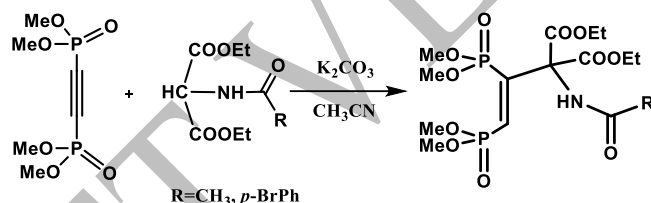
¹Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), Санкт-Петербург, Россия

²Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет
информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия
e-mail: diavoly@mail.ru

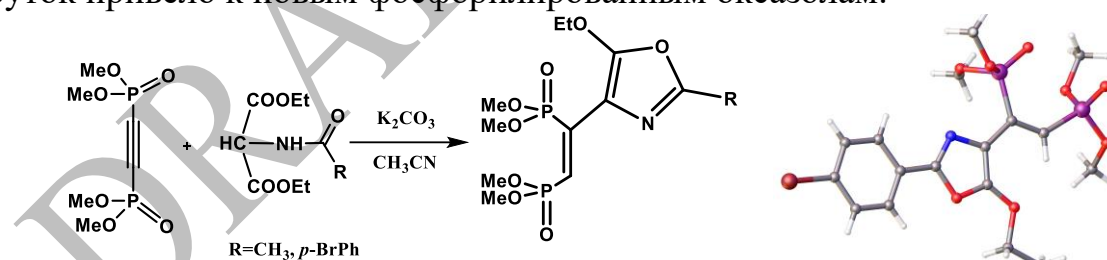
Ранее было показано, что взаимодействие хлорэтиндифосфонатов с диалкилмалонатами проходит региоселективно и стереоспецифично, с последующим образованием *E*-изомеров алкендифосфонатов-эфиров *E*-2-калий-2-алкоксикарбонил-3,4-ди(диалкоксифосфорил)бут-3-еновой кислоты^[1].



Нами была исследована в аналогичных условиях реакция этиндифосфоната с диэтиламидомалонатами. Было установлено, что реакция схоже и приводит к продуктам присоединения:



Кипячение полученных соединений в этиловом спирте в течении двух суток привело к новым фосфорилированным оксазолам.



Структура полученных соединений установлена по данным ЯМР спектроскопии на ядрах ¹H, ¹³C, ³¹P, гетероядерной корреляционной спектроскопии, масс-спектрометрии высокого разрешения и однозначно подтверждена результатами рентгено-структурного анализа.

Список литературы

[1] Шехадэ А., Дидковский Н.Г., Догадина А.В., Ионин Б.И. ЖОХ. 2005. Т. 75. Вып. 1. С. 11.

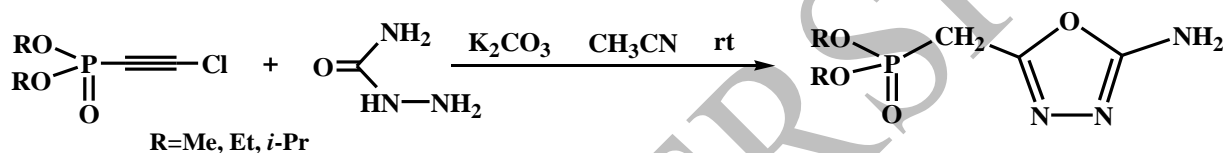
Особенности взаимодействия хлорацетиленфосфоната с мочевиной

Карцев Д.Д.¹, Чернов И.С.¹, Егоров Д.М.^{1,2}, Питерская Ю.Л.¹, Догадина А.В.¹

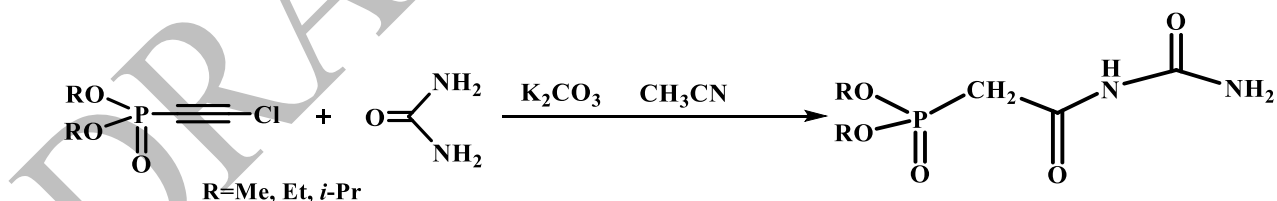
¹Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), Санкт-Петербург, Россия

²Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет
информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия
e-mail: diavoly@mail.ru

Ранее нами были изучены реакции хлорацетиленфосфонатов с семикарбазидом в полярном апротонном растворителе (абсолютном CH₃CN) в присутствии избытка карбоната калия. Было установлено, что реакция протекает хемо- и региоселективно с образованием диалкиловых эфиров (5-амино [1,3,4]оксодиазол-2-ил)метилфосфоновых кислот:



Основываясь на полученных данных исследовано, взаимодействие хлорацетиленфосфоната с мочевиной в ацетонитриле в присутствии поташа. Контроль протекания реакции осуществлялся методом спектроскопии ЯМР на ядрах ³¹P. Данный подход позволил установить, что на первом этапе реакция протекает, предположительно, с образованием ацетиленового продукта замещения атома хлора в исходном хлорацетиленфосфонате аминной группой мочевины. Однако выделить его не удалось, так как образующееся промежуточное соединение неустойчиво и при контакте с влагой воздуха гидратируется с образованием соответствующих фосфорилированных уреидов.



Строение полученных соединений установлено по данным ЯМР спектроскопии на ядрах ¹H, ¹³C, ³¹P, а также подтверждено масс-спектрометрией высокого разрешения.

Работа выполнена в рамках базовой части государственного задания Министерства образования (№4.554.2017/8.9) с использованием оборудования ИЦ СПбГТИ(ТУ) при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-03-00474).

Изучение влияния катализаторов на окисление таллового пека

Зотов Ю. Л., Ежова К. А.

Волгоградский государственный технический университет, Волгоград, Россия

E-mail: KristinaYezhova@yandex.ru

Актуальной проблемой на сегодняшний день является поиск более широких областей применения побочных продуктов и отходов переработки биомассы дерева. В процессе переработки древесины одним из наиболее важных продуктом является талловое масло, которое в результате обработки делится на другие значимые продукты, а именно: жирные кислоты, талловую канифоль, дистиллированное талловое масло, легкое талловое масло и пек. Талловый пек используется в дорожном строительстве для приготовления асфальтовой смеси. Разработан ряд продуктов, применяемых в рецептуре камерных резин, а также средства для повышения клейкости и т.д. В настоящее время пек в основном сжигается [1].

Нами проводятся исследования по улучшению качества битума, полученного на основе таллового пека окислением. Для получения битумов с улучшенными характеристиками нами изучается окисление таллового пека с использованием катализаторов. Этим решаются две важные задачи, разрабатывается способ утилизации таллового пека и расширяется ассортимент высококачественных битумных вяжущих. Ниже приведено сравнение процессов каталитического и некаталитического окисления таллового пека кислородом воздуха. Катализатором в данном случае является стеарат кобальта (St_2Co), выбор которого обусловлен сравнительной доступностью.

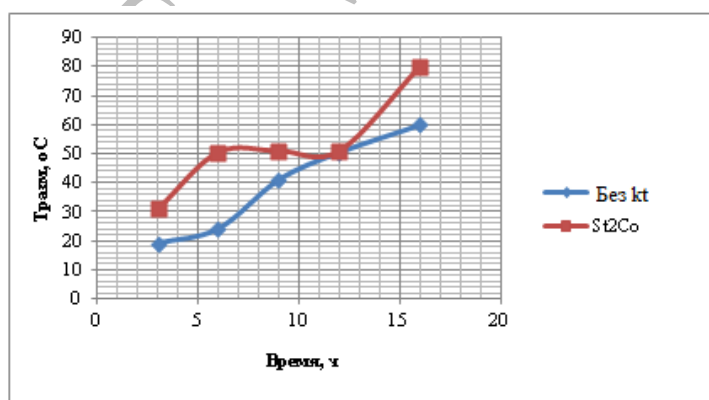


Рис. 1. Изменение температуры размягчения битума от времени окисления на катализаторе St_2Co и без катализатора кислородом воздуха.

Установлено, что использование катализатора St_2Co для окисления таллового пека позволяет получить продукт, битумное вяжущее. Из графика видно, что применение данного катализатора позволяет значительно увеличить температуру размягчения продукта по методике "кольцо и шар" (КИШ).

Список литературы

[1] Акимова Г.С., Курчин А.В., Павлова О.С., Евдокимов А.П. Химия и технология компонентов сульфатного мыла: учебное пособие / ГОУВПО СПбГТУРП. - СПб., 2008. - 104 с.

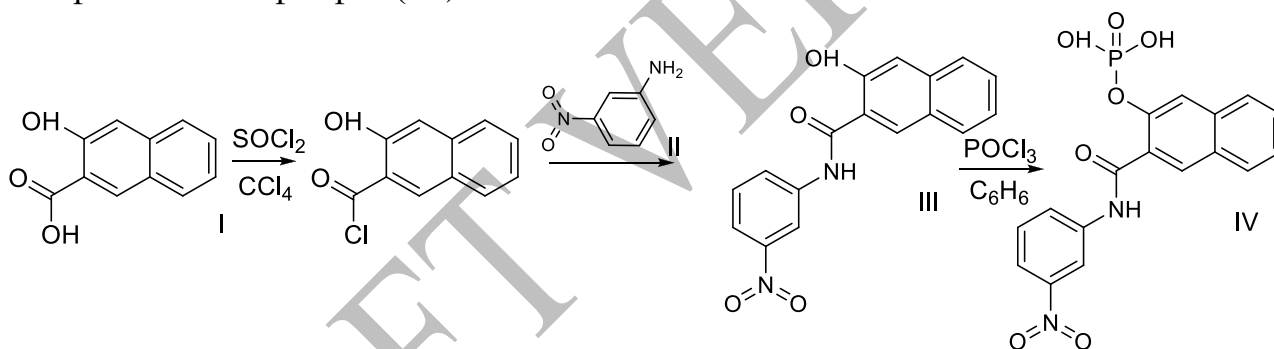
Исследования по синтезу нафтола AS-BS фосфата

Жила М.Ю., Глушко В.Н.

Федеральное государственное унитарное предприятие
«Институт химических реактивов и особо чистых химических веществ
национального исследовательского центра «Курчатовский институт»
(НИЦ «Курчатовский институт» - ИРЕА), Москва, Россия
E-mail: margo.yu@gmail.com

Азотолы – арилиды гидроксикарбоновых кислот, главным образом 2-гидрокси-3-нафтойной кислоты. Особый интерес представляют фосфорные эфиры азотолов, которые нашли применение в качестве чувствительных субстратов для выявления и определения ферментов в прикладной гистохимии, а также для изучения локализации ферментов на цитологическом уровне для выявления активности фосфатаз [1]. Одним из самых трудно воспроизводимых является способ получения нафтола AS-BS фосфата.

Нами исследован метод получения нафтола AS-BS (III) конденсацией 2,3-оксинафтойной кислоты (I) с м-нитроанилином (II) с дальнейшей переработкой в нафтол AS-BS фосфат (IV):



Разработан препаративный метод определения наличия примесей в техническом продукте (нафтол AS-BS фосфат) с применением метода тонкослойной хроматографии на пластинах TLC Silica gel 60 F₂₅₄. Соединения II и III имеют R_f 0,7 и 0,8 соответственно в системе хлороформ-ацетон (2:1). Соединения I и IV в данной системе остаются на линии старта. Для определения их R_f использовали систему хлороформ-ацетон-метанол (2:1:1). Соединение I: R_f = 0,42; соединение IV: R_f = 0,56.

Полученный продукт был охарактеризован методом элементного анализа на CHN, а также методом атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно-связанной плазмой на приборе iCAP 6300 duo определено содержание фосфора.

Найдено, %: С 53.07; Н 3.57, N 7.73; Р 6.69. Вычислено, %: С 52.58; Н 3.35; N 7.21; Р 7.99.

Список литературы

[1] Меньшиков В.В. Клиническая лабораторная аналитика. М.: Лабинформ-РАМЛД. 1999. Т. 2. С. 50-53.

**Рефрактометрическое исследование систем
карбоксилсодержащий сополимер – вода**

Жукова Л.Ю., Суханов А.И., Колобова П.А., Комин А.В.

Ярославский государственный технический университет, Ярославль, Россия

E-mail: lyu.zhukova@yandex.ru

В настоящее время большое внимание уделяется получению и изучению свойств карбоксилсодержащих полимеров, в связи с возможностью их использования для создания новых систем доставки лекарственных средств, обладающих адресным типом действия и (или) модифицированным высвобождением [1, 2, 3].

Объектом настоящего исследования являются водные системы синтетических, карбоксилсодержащих, карбоцепных, линейных полимеров со статистическим распределением карбоксильных групп в макромолекулах. Содержание карбоксильных групп составляет 29 % (масс.). Относительно невысокое содержание карбоксильных групп позволило сделать предположение о склонности полимеров к ассоциации в водных средах.

Одним из известных методов исследования самоорганизации молекул в растворах является метод рефрактометрии, который и применен в работе. Исследования растворов полимера с концентрациями от 0,02 до 1% с шагом 0,02% в 0,9%-ном растворе хлорида натрия при рН=7,4 (физиологические условия) и в отсутствии низкомолекулярной соли при рН=10,5 показали, что с ростом концентрации полимера увеличиваются значения показателя преломления. На зависимостях показателя преломления от концентрации наблюдается два перегиба, что дает возможность предположить об изменении в структуре водных полимерных систем, а именно об образовании надмолекулярных ассоциатов. Обнаружено, что с увеличением ионной силы ассоциатообразование происходит при меньших концентрациях полимера. Это может быть связано с уменьшением полярности полимера вследствие экранирования полярных групп ионами Na^+ и увеличением его склонности к ассоциации. Наряду с этим, установлено уменьшение склонности полимера к ассоциации с повышением значений рН до 10,5.

В ходе работы установлено, что исследуемые карбоксилсодержащие сополимеры в водных средах образуют надмолекулярные структуры.

Список литературы

- [1] Дженкинс М.Дж. Полимеры в биологии и медицине, М.: Научный мир. 2011. 247 с.
- [2] Лампрехт А. Нанолечения. Концепции доставки лекарств в нанонауке, М.: Научный мир. 2010. 232 с.
- [3] Штильман М.И. Полимеры в биологически активных системах // Соросовский образовательный журнал. 1998. № 5. С. 48-53.

Синтез и биологическая активность производных
2-селенопиридин-1-оксида

Залепкина С.А.¹, Смирнов В.Ф.¹, Мацулевич Ж.В.², Борисов А.В.²

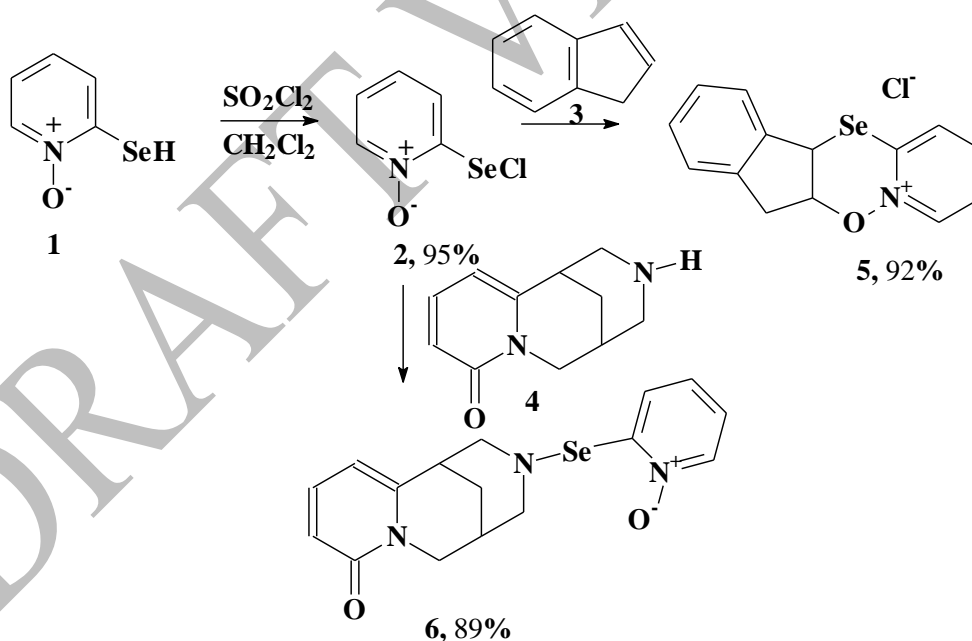
¹Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

²Нижегородский государственный технический университет
им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия

E-mail: svetlanazalapkina@gmail.com

В последние годы наблюдается повышенный интерес к химии селеноорганических соединений, обусловленный высоким синтетическим потенциалом и все более и более широким применением соединений этого класса в различных сферах.

В настоящей работе в результате хлорирования 2-селенопиридин-1-оксида (1) синтезирован 2-хлорселанилпиридин-1-оксид (2), который, судя по данным РСА, является уникальным представителем органилселененилгалогенидов, стабилизированным за счет внутримолекулярного Se...O взаимодействия в мономерной форме. В результате реакций селанилхлорида 2 с природными соединениями – инденом (3) и цитизином (4) получены производное пиридо[1,2-*b*][1,4,2]-оксаселеназиния-5 (5) и селенениламид (6) соответственно.



Исследования биологической активности показали, что соединение 5 обладает значительным фунгицидным эффектом. Фунгицидный эффект соединения 6 выражен в меньшей степени, а в небольших концентрациях (1 мг/л) данного соединения в среде культивирования была отмечена активация роста *A. oryzae* (на 64% по сравнению с контролем), что представляет определенный интерес для биотехнологических производств.

**Синтез 2,2':6',2''-терпиридина и некоторых его интермедиатов
конденсацией Поттса**

Замалютин В.В., Безденежных В.А., Флид В.Р., Ничуговский А.И.
*Московский технологический университет,
Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова,
Москва, Россия
E-mail: zamalyutin@mail.ru*

Азотсодержащие гетероциклические соединения на основе 2,2':6',2''-терпиридина известны достаточно давно [1]. Однако за последнее десятилетие интерес к таким системам значительно возрос. Это связано с возможным широким спектром применения 2,2':6',2''-терпиридина в различных областях науки и техники [2, 3].

Трехстадийная конденсация Поттса [4] является одним из наиболее распространенных способов получения этого вещества, поскольку используются достаточно доступные растворители и реагенты. Однако конденсацией Поттса [4] удастся получить загрязненный примесями 2,2':6',2''-терпиридин с общим выходом около 40%. В литературе отсутствуют подробные методики синтеза 2,2':6',2''-терпиридина и его дальнейшей очистки с более высокими общими выходами. Разработка такой методики способствовала бы более детальному изучению свойств этого вещества и значительному расширению области его применения.

В нашей работе мы разработали новую двухстадийную методику синтеза химически чистых 2,2':6',2''-терпиридина и некоторых интермедиатов, основанную на конденсации Поттса, с общим выходом целевого продукта до 70%.

Чистота полученного 2,2':6',2''-терпиридина и интермедиатов подтверждалась спектроскопией ¹H-ЯМР, элементным анализом и сравнением измеренных температур плавления с литературными данными.

Нами было показано, что для достижения высоких выходов установка во время эксперимента должна продуваться сухим азотом. Показано, что выход продуктов конденсации сильно зависит от чистоты исходных реагентов.

Список литературы

- [1] Morgan S.G., Burstall F.H. J. Chem. Soc. 1932, 1, 20.
- [2] Манжелей Е.А. Дис. на соискание ученой степени канд. хим. наук. М. 2014.
- [3] Allan J.T.S., Quaranta S., Ebralidze I.I., Egan J.G., Poisson J., Laschuk N.O., Gaspari F., Easton E.B., Zenkina O.V. ACS Appl. Mater. Interfaces. 2017, 9, 40438.
- [4] Potts K.T., Ralli P., Theodoridis G., Winslow P. Org. Synth. 1986, 64, 189.

**Разработка методов синтеза многофункциональных добавок
для ПВХ-композиций**

Зотов Ю.В., Заправдина Д.М., Зотова Н.Ю., Вершигора Г.К.,
Волгоградский Государственный Технический Университет,
Волгоград, Россия
E-mail: ylzotov@mail.ru

Поливинилхлорид (ПВХ) занимает одно из ведущих мест по объему производства в мире среди термопластичных полимеров. Существенным ингредиентом ПВХ-композиций являются добавки, обеспечивающие нужный комплекс свойств ПВХ-изделий. В связи с ростом потребления добавок и поставленной задачей государства об импортозамещении необходимы разработки и поставки на рынок отечественных добавок взамен импортным.

Разработан малоотходный способ получения новых высокоэффективных многофункциональных добавок [1,2]. На основе разработанного совместного способа получения глицеридов высших карбоновых кислот и карбоксилата кальция, разработан способ получения многофункциональных добавок содержащие смешанные карбоксилаты [3]. Найдено соотношение компонентов, позволяющее получить наиболее эффективные многофункциональные добавки.

Образцы многофункциональных добавок прошли испытания в трех видах рецептур: мягких типа ПЛ, полужестких и кабельного пластиката. Полученные многофункциональные добавки обладают улучшенными свойствами по сравнению с существующими аналогами, в частности, проявляют повышенные термостабилизирующие и пластифицирующие свойства, а также позволяют улучшить гибкость материала на холоде. С использованием продукции предприятий Волгоградской области, в частности АО Каустик, были получены магнийсодержащие добавки полифункционального действия.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта молодых ученых Волгоградского государственного технического университета.

Список литературы

- [1] Способ получения пластификатора для ПВХ-композиции: заявка на пат. РФ: МПК С 08 К 5/09, С 07 С 67/03, С 07 С 69/30/ Ю.Л. Зотов, Д.М. Заправдина; заявитель и патентообладатель ВолгГТУ. - № 2017100414; заявл. 09.01.2017
- [2] Способ получения металсодержащей смазки для ПВХ-композиции: заявка на пат. РФ: МПК С 08 К 5/09, С 07 С 67/03, С 07 С 69/30/ Ю.Л. Зотов, Д.М. Заправдина, К.А. Ежова; заявитель и патентообладатель ВолгГТУ. - № 2017100744; заявл. 10.01.2017
- [3] Способ получения металсодержащей смазки для ПВХ-композиции: заявка на пат. РФ: МПК С 08 К 5/09, С 07 С 67/03, С 07 С 69/30/ Ю.Л. Зотов, Д.М. Заправдина, Н.Ю. Зотова; заявитель и патентообладатель ВолгГТУ. - № 2017108007; заявл. 10.03.2017.

Гидрогели на основе крахмала и акриламида

Зейналова С.З., Смирнова Л.А.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Нижний Новгород, Россия

E-mail: sakina3@mail.ru

Создание биоразлагаемых материалов на основе синтетических и природных полимеров – одна из приоритетных задач полимерной химии. Среди природных биodeградируемых полимеров одним из наиболее перспективных является крахмал, сырьевые источники которого являются дешевыми и непрерывно возобновляемыми. Однако крахмал является органо- и водонерастворимым и поэтому нуждается в модификации. Одним из направлений использования модифицированных производных крахмала являются гидрогели [1].

Целью работы являлся синтез сополимеров крахмала с акриламидом трёхмерной структуры и изучение свойств гидрогелей на их основе. Привитые сополимеры получали методом радикальной полимеризации в водном растворе (рН=9-11) с использованием иницирующей системы $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$. Процесс характеризуется высокой скоростью превращения АА и эффективностью прививки 90%. Полученные сополимеры являются водорастворимыми (рН=7), что определило создание на их основе гидрогелей. Сшитые сополимеры трёхмерной структуры получали введением в процессе синтеза N,N' – метиленбисакриламида. Изучена зависимость набухания сополимера трёхмерной структуры от различных факторов: состава сополимера, содержания сшивающего агента, рН и температуры. Степень набухания существенно зависит от содержания сшивающего агента, изменяясь от 15000% до 6000% при уменьшении содержания N,N' – метиленбисакриламида от 1% от АА до 0.5%. Лучшие результаты показали образцы состава АА:КР (2.5:1) + 1% N,N' – метиленбисакриламида: T=281K $\alpha=16000\%$, T=298K $\alpha=20000\%$, T=333K $\alpha=25500\%$, таким образом гидрогели проявляют термочувствительность. Их степень набухания мало зависит от рН среды. Предельно набухшие образцы отдают всю воду в течение 6 суток. Образцы с содержанием АА $\leq 50\%$ от общей массы получают хрупкими и результаты исследования их сорбционных свойств являются невозпроизводимыми.

Полученные гидрогели, в составе которых АА $\geq 50\%$ перспективны для создания композиций, увеличивающих нефтеотдачу скважин, для очистки вод от ионов металлов, в гидропонике и как водоудерживающий агент во впитывающих средствах гигиены.

Список литературы

[1] Кряжев В.Н., Романов В.В., Широков В.А. Последние достижения химии и технологии производных крахмала. // Химия растительного сырья. 2010. №1. С.5-12.

**Термодинамические характеристики взаимодействия пектина
с натриевой солью цефазолина**

Зидиханова Л.Ф., Шуршина А.С.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

zidihanovaliliya@mail.ru

Одним из направлений, интенсивно развивающихся в химии, является синтез полимерных лекарственных соединений пролонгированного действия, осуществляемый путем присоединения к полимеру ионными, координационными или ковалентными связями низкомолекулярных лекарственных веществ (ЛВ).

Среди полимеров, которые могут быть использованы для этой цели, значительный интерес представляют полимеры природного происхождения, например пектины.

В качестве объектов исследования использовали полимер – пектин (ПК) и антибиотик цефалоспоринового ряда – натриевая соль цефазолина (ЦФЗ).

Для выяснения механизма взаимодействия между полимерами и ЛВ важное значение имеют термодинамические характеристики реакции. При нескольких температурах (22, 30 и 37 °С) методом оптической спектроскопии с использованием метода ММО рассчитаны константы устойчивости для комплекса ПК с ЦФЗ. Тепловой эффект реакции образования аддукта вычислен по уравнению Вант-Гоффа в интегральной форме:

$$\Delta H = 4,575 (\lg K''/K') / (1/T_1 - 1/T_2) \quad (1)$$

Изменение энтропии и энергии Гиббса в процессе образования соединения ЛВ с ПК вычислено по формулам:

$$\Delta S = (\Delta H - \Delta G) / T \quad (2)$$

$$\Delta G = - RT \ln K \quad (3)$$

Из вычисленных значений термодинамических функций можно сделать ряд выводов. Во-первых, поскольку значения ΔH и $\Delta G < 0$, то процесс взаимодействия ПК с ЛВ протекает самопроизвольно, происходит с выделением тепла и идет в направлении образования продуктов реакции. Во-вторых, значение $\Delta S < 0$, что, вероятно, связано со значительным упорядочиванием в результате организации молекул полимера и ЦФЗ в аддукте.

Таким образом, комплексообразование ПК с ЦФЗ определяется энтальпийной составляющей.

**Синтез и свойства амфифильного блок-сополимера
на основе N-изопропилакриламида и 2,2,3,3-тетрафторпропилметакрилата
в монослоях Ленгмюра и пленках Ленгмюра-Блоджетт**

Зилигаева З.А.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

E-mail: ziligaevaz@mail.ru

Поскольку поли-N-изопропилакриламид (ПИПАА) обладает гидрофильной природой, его сополимеризация с мономерами различной природы является способом модификации свойств полученных материалов. Этот процесс приводит к изменению значения его нижней критической температуры растворения (32-33°C), что позволяет использовать его, например, как растворимый носитель ферментов для гомогенных процессов, для получения термочувствительных мембран и коллоидно стабильных мицелл при повышенных температурах. В качестве гидрофобного сомономера интерес представляют фторированные соединения, для которых характерны низкие значения поверхностной энергии и повышенная склонность к самоорганизации макромолекул в растворе.

За счет реакции передачи цепи на бис-(пентафторфенил)герман (ДГ) при полимеризации N-изопропилакриламида получен функциональный полимер ПИПАА-Ge(C₆F₅)₂H (C_s = 2.2) [1]. Показана возможность синтеза блок-сополимера на основе ПИПАА и 2,2,3,3-тетрафторпропилметакрилата (ФМА) за счет двойной последовательной реакции передачи цепи на группы ДГ. В результате выделен амфифильный блок-сополимер (N-изопропилакриламид)_n-Ge(C₆F₅)₂-(2,2,3,3-тетрафторпропилметакрилат)_m с молекулярной массой M_w = 3.69×10⁵. Изучены монослои Ленгмюра ПИПАА-Ge(C₆F₅)₂H и амфифильного блок-сополимера (ПИПАА-Ge(C₆F₅)₂-ПФМА), установлено влияние условий формирования пленок на самоорганизацию макромолекул на границе раздела вода-воздух (объем раствора растекания, pH субфазы). Выявлено, что на кислой субфазе (pH = 1.3) образуются монослои с высокими значениями поверхностного давления ($\pi = 33-53$ мН/м) и коэффициента жесткости пленки ($\beta = (4.4-7.8) \times 10^{14}$ Н/м³), что говорит об ионизации гидрофильного звена макромолекулы блок-сополимера на границе раздела фаз вода-воздух. Установлено влияние метанола на самоорганизацию фторированных звеньев в монослоях Ленгмюра, который способен образовывать водородные связи со звеньями -C(O)NH- макромолекулы. Перенесены мономолекулярные пленки по технологии Ленгмюра-Блоджетт на подложки различной природы (кварц и кремний). Определена поверхностная энергия Гиббса монослойных пленок методом смачивания в условиях натекания: $\gamma_s = 41-64.2$ мДж/м².

Список литературы

[1] О.Г. Замышляева, Е.А. Смирнов, Н.С. Захарычева. // Высокомолекулярные соединения. Серия Б. 2017. Т. 59. № 6. С. 1-11.

**Изучение влияния оксидов редкоземельных металлов
на кинетику отверждения полиорганосилоксанов**

Зуева Ж.В.

*Владимирский государственный университет имени А. Г. и Н. Г. Столетовых,
Владимир, Россия*

E-mail: zueva.v2011@yandex.ru

Полиорганосилоксаны представляют большой интерес для развития и совершенствования процессов в важнейших областях техники. Интерес к этому соединению обусловлен рядом ценных свойств и, в первую очередь, его высокой тепло- и морозостойкостью, влагостойкостью, малым изменением физических характеристик в широком диапазоне температур, УФ - излучения и ряду других факторов [1].

Для повышения эксплуатационных свойств в полисилоксановые полимеры вводятся наполнители. В виде наполнителей используем оксиды редкоземельных металлов, такие как оксид галлия Ga_2O_3 [2] и оксид индия In_2O_3 .

В качестве связующего использовался низкомолекулярный диметилсилоксановый каучук СКТН-1 с концевыми гидроксильными группами. В качестве отвердителя использовался катализатор К-18 (смесь диэтилдикаприлата олова и тетраэтоксисилана). В качестве наполнителя использовался оксид галлия (III) и оксид индия (III) [3].

Кинетику отверждения прослеживаем изменением физико-механических свойств материала, в данном случае определялась твердость с помощью маятникового прибора М-3.

Результат исследования показывает, что добавление катализатора в количестве 4 м.ч. позволяет добиться достаточно высокой степени отверждения 90%, дальнейшее повышение массовых частей при добавлении катализатора не приводит к увеличению отверждающего агента.

Влияние оксида галлия на кинетику отверждения незначительное и степень отверждения снижается с повышением концентрации оксида галлия. Аналогичные результаты наблюдаются при введении оксида индия: с увеличением содержания оксида происходит снижение кинетической кривой.

Введение наполнителей в небольших количествах не приводит к изменению кинетических параметров.

Результаты данного исследования могут быть использованы в важных областях техники, медицине, радиоэлектронике и других отраслях народного хозяйства.

Список литературы

[1] Bazant V., Chvalovsky J.// Silikony organokremicite slouceniny, jejich priprava, vlastnosti a pouzitiv Praha, 1954. P. 710

[2] Chukhlanov V.Yu., Tereshina E.N. // Polymer Science, Ser. C. 2007. V. 49. № 3. P. 288

[3] Chukhlanov V.Yu. Kireev V.V. // Dielectric Properties of Syntactic Plastic Foams With Poliorganosiloxane Binder In The Ultrahigh Frequency Region. Journal International Polymer Science and Technology I., 2003. V..30. №.12. P.62-65.

ЭПР характеристики стеарата гадолиния и его гетеролигандного комплекса с дибензоилметаном

Иванин С.Н., Бузько В.Ю., Панюшкин В.Т.

Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия

E-mail: Ivanin18071993@mail.ru

Стеарат гадолиния ($GdSt_3$) и его гетеролигандные металлокомплексы перспективны в качестве основы для создания нового поколения тонкопленочных магнитных материалов. Нами было изучено влияние дибензоилметана на характеристики спектров ЭПР синтезированного стеарата гадолиния и его гетеролигандных металлокомплексов с дибензоилметаном.

Для синтеза $GdSt_3$ и его гетеролигандных металлокомплексов с дибензоилметаном использовался метод из работы [1]. При синтезе гетеролигандных комплексов гадолиния с дибензоилметаном использовали соотношение $HSt/DBM=2/1$ и два значения pH среды с учетом процесса депротонизации дибензоилметана при $pH > 8$.

Анализ спектров ЭПР полученных металлокомплексных соединений (рис. 1), снятых в X-диапазоне на спектрометре JEOL JES-FA300, свидетельствует, что вхождение молекул дибензоилметана в координационную сферу акваиона гадолиния(III) приводит к заметному возрастанию его магнитных свойств.

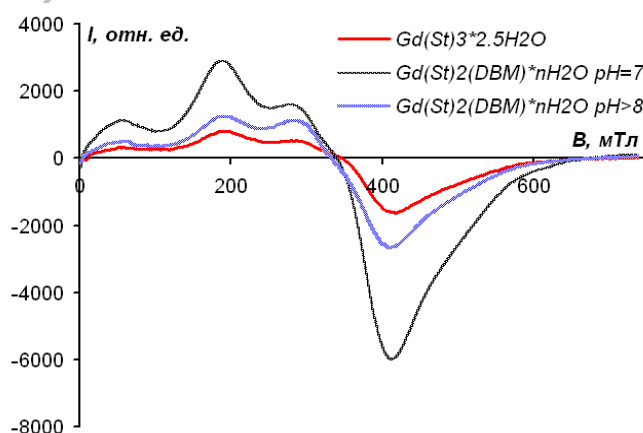


Рис. 1. Спектр ЭПР стеарата гадолиния и его гетеролигандные металлокомплексы с дибензоилметаном.

Обнаружено, что вхождение дибензоилметана в енольной форме в координационную сферу стеаратного металлокомплекса гадолиния(III) придает полученному металлокомплексу наибольшие магнитные свойства.

Список литературы

[1] Li J., Sun X., Liu S., Huo D., Li X., Li J.G., Zhu Q., Zhang M. Synthesis of Dispersed Y_2O_3 Nanopowder from Yttrium Stearate. // Key Engineering Materials, 2013, Vol. 544, P. 3-7.

Гидрогели на основе крахмала и акриламида

Иванова Д.¹, Зейналова С.З.

¹ Школа юного исследователя Института прикладной физики РАН,
Нижний Новгород, Россия

² ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

Создание биоразлагаемых полимерных материалов, которые могли бы под действием факторов окружающей среды распадаться на безвредные вещества, является одной из актуальных задач современной химии.

Одним из наиболее перспективных видов сырьевых источников для создания таких материалов является крахмал. Однако его использование ограничивается низкими физико-химическими свойствами данного источника сырья, что и определяет необходимость его модификации.

Настоящая работа посвящена модификации крахмала методом блок- и привитой сополимеризации с акриламидом с целью получения гидрогелей и изучения их физических свойств.

Проведена модификация крахмала путем привитой сополимеризации акриламида на крахмал, получены сополимеры трехмерной структуры.

Определены: степень превращения акриламида, состав сополимера, молекулярная масса сополимера, сорбционная способность сополимера. Так же исследована степень набухания гидрогеля и отдача воды.

В результате проведенной работы установлено, что полученные сшитые сополимеры с трехмерной структуры обладают большой степенью набухания, что делает их перспективным материалом для производства суперабсорбентов.

Синтез 2-азабицикло[3.2.0]гепта-2,6-диенов при фотоиндуцированной гетероциклизации арилазидов

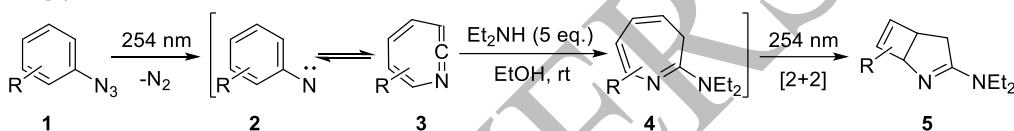
Ипатов Д.О., Будруев А.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: silentshuxov@mail.ru

В работе предложен метод препаративного синтеза 2-азабицикло[3.2.0]гепта-2,6-диенов.

На стадии фотохимического инициирования арилазид **1** под действием УФ-излучения элиминирует азот с образованием арилнитрена **2**, который перегруппировывается с расширением цикла до 1,2-дидегидроазепина **3**. Этот интермедиат в ходе 1,2-нуклеофильного присоединения и Н-сдвига образует 2-замещенный 3Н-азепин **4**. Далее, в результате фотохимического внутримолекулярного [2+2]-циклоприсоединения, азепин **4** изомеризуется в азабицикл **5**.



Метил 3-(диэтиламино)-2-азабицикло[3.2.0]гепта-2,6-диен-6-карбоксилата **5** синтезирован из метил 4-азидобензоата в этаноле

Подобраны оптимальные условия синтеза и методом препаративной колоночной хроматографии выделен метил 3-(диэтиламино)-2-азабицикло[3.2.0]гепта-2,6-диен-6-карбоксилата **5**. Строение полученного соединения подтверждено масс- и ЯМР-спектроскопией.

Взаимодействие хлор - и бромметил-6-оксогептоноата с фуллереном C_{60}

Мухаметьянова А.Ф.¹, Ишбаева С.М.², Досниязова А.Г.², Биглова Ю.Н.²,
Сахаутдинов И.М.¹

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Уфимский Институт химии РАН, Уфа, Россия

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение ВПО
Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

E-mail: ioh039@mail.ru

В условиях реакции Арндта-Эйстера из карбоновых кислот через соответствующие хлорангидриды получили хлорметилкетоны и бромметилкетоны. В результате взаимодействия хлор- и бромметилкетонов **1, 2** с фуллереном C_{60} в присутствии ДБУ в толуоле получены конъюгаты фуллерена C_{60} **3** и **4** с выходами 45% и 38% соответственно.

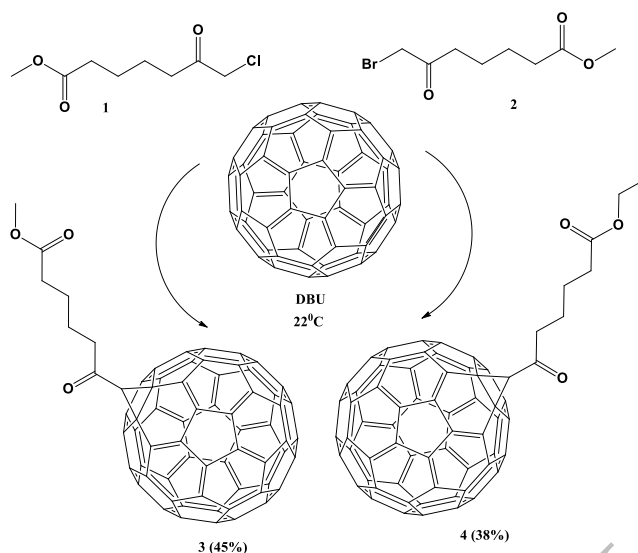


Рис. 1. Взаимодействия хлор- и бромметилкетонов 1, 2 с фуллереном C₆₀.

Обнаружено, что реакция Бингеля лучше протекает при использовании хлорметилкетонов. Полученные конъюгаты фуллерена C₆₀ с дитерпеновым фрагментом обладают способностью растворяться в растительных маслах, в которых содержание производных C₆₀ достигает 6%.

Продукты реакции выделяли с помощью колоночной хроматографии на силикагеле «Сhemarol» с размером частиц 40/100 мкм. Строение полученных соединений доказано комплексом физико-химических методов, включающим ЯМР 2D эксперименты HSQC и HMBSC.

Информационная поддержка - грант РФФИ 13-00-14056. Спектральная часть исследования проведена на оборудовании ЦКП «Химия» ФГБУН УФИХ РАН.

Взаимодействие 8-метил и 8-этил-1-метилокта-2,3-диеноата с фуллереном C₆₀

Мухаметьянова А.Ф.¹, Ишбаева С.М.², Досниязова А.Г.², Атангулов А.Б.¹

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Уфимский Институт химии РАН, Уфа, Россия

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение ВПО Бакирский государственный университет, Уфа, Россия

E-mail: ioh039@mail.ru

Высокая способность фуллеренов улавливать свободные радикалы может быть использована при создании антиоксидантов нейрозащитного действия. В результате фосфин-катализируемого [3+2] - присоединения алленоатов к фуллереновому каркасу, как диполярофилу, образуются новые циклопентенофуллерены. Используя обозначенную методику, из алленоатов 1а, в синтезированы новые, хорошо растворимые в типовых органических растворителях моноаддукты фуллерена C₆₀ 2, 3 с выходами 54% и 52% соответственно.

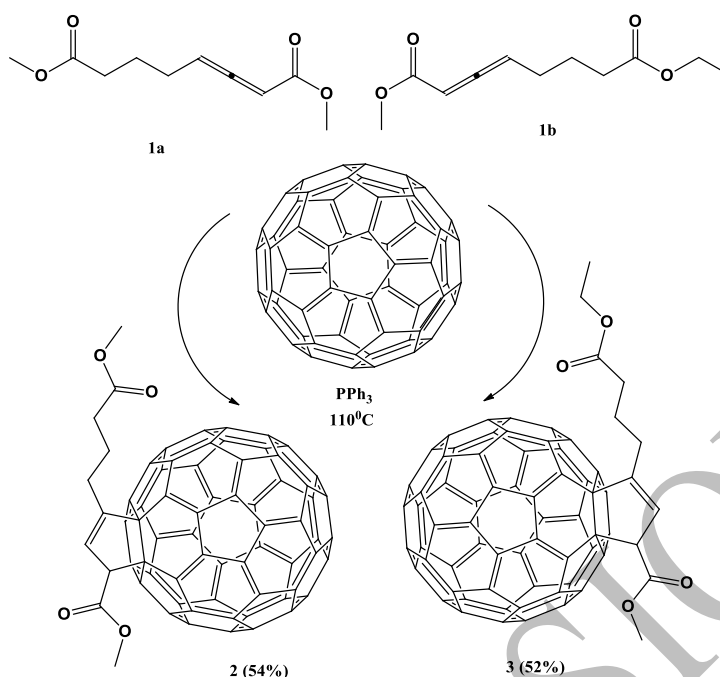


Рис. 1. Синтез циклопентенофуллеренов.

Структуры полученных соединений доказаны физико-химическими методами анализа.

Информационная поддержка - грант РФФИ 13-00-14056. Спектральная часть исследования проведена на оборудовании ЦКП «Химия» ФГБУН УФИХ РАН.

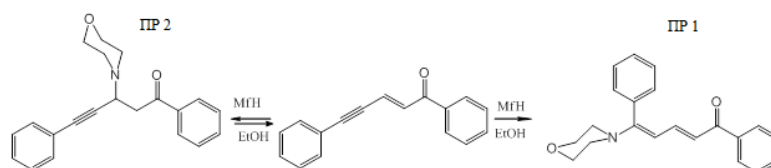
Хроматографический контроль реакции морфолина с 1,5-диарилпент-2-ен-4-ин-1-онами

Калачанова Е.П., Образцова Д.М., Григорьева О.Б.

Тольяттинский государственный университет, г. Тольятти, Россия

E-mail: groly@yandex.ru

В работе исследованы 1,5-дифенилпент-2-ен-4-ин-1-он, и продукты его замещения 3-морфолинил-1,5-дифенилпент-4-ин-1-он, 5-морфолинил-1,5-дифенилпента-2,4-диен-1-он. Диарилпентенионы представляют интерес в качестве потенциальных биологически активных веществ, а продукты их нуклеофильного присоединения имеют довольно широкий диапазон практического применения в качестве инсектицидных и противогрибковых препаратов. Присоединение морфолина к 1,5-диарилпент-2-ен-4-ин-1-онам идёт по двум направлениям: 4,5-присоединения и 2,3-присоединения [1,2]:



Нами проведено определение количественного содержания термодинамического и кинетического контролируемых продуктов данной реакции, в том числе определение степени превращения кетона методом обращенно-фазовой ВЭЖХ, а также изучение влияния на протекание реакции температуры и природы растворителя.

Ход реакции контролировали в трех растворителях (этанол, ДМФА и бензол) в течение недели и при четырех значениях температуры: 0°C, 40°C, 50°C, 60°C.

Показано, что степень превращения кетона выше в ДМФА и бензоле, по сравнению с этанолом, но превращение кинетически контролируемого продукта в термодинамически контролируемый быстрее всего происходит в этаноле, медленнее - в бензоле. С ростом температуры закономерно растут скорости всех процессов, как превращения исходного кетона, так и перехода в термодинамический продукт.

Разработанная методика хроматографического контроля может использоваться для дальнейшего изучения влияния природы заместителей в исходном кетоне на протекание реакции.

Список литературы

- [1] Бекин В.В. Нуклеофильное присоединение гетероциклических аминов к сопряженным ениновым кетонам / В. В. Бекин, А. А. Голованов, О.Б. Григорьева, И.С. Один, В.С. Писарева, А.Ю. Чертов // Журнал органической химии. – 2015. – Т. 51, № 12. – С. 1723.
- [2] Голованов А.А. Синтез 5-амино-1,5-диприллипта-2,4-диен-1-онов / А.А. Голованов, И.С. Один, А.В. Вологжанина, В.В. Бекин, А.Е. Небритова // Журнал органической химии. – 2014. – Т.50, № 7. – С. 963.

Извлечение хлорофиллов из оливкового масла под действием органоинеральных сорбентов

Калугин Д.А., Шишкина Ю.О., Разговоров П.Б., Нагорнов Р.С.

Ивановский государственный химико-технологический университет,

Иваново, Россия

E-mail: razgovorov@isuct.ru

Оливковое масло – ценный продукт, содержащий витамины А, D, E, K, богатый олеиновой кислотой и множеством других ценных биологически активных веществ. Потребление оливкового масла в пищу предотвращает развитие желчнокаменной болезни, заболеваний сердечно-сосудистой системы, способствует очистке печени.

Цель исследования заключалась в извлечении хлорофиллов из оливкового масла на зеленой, розовой, голубой и черной глинах [1], активированных 6%-м раствором янтарной кислоты ($K_{\text{дис}} = 1.6 \cdot 10^{-5}$). Из рис. 1 видно, что на

активированной черной глине извлекается 0.40 мг хлорофиллов/кг масла (кривая 4), что составляет 65% от общего их содержания в масле.

Менее удачный результат получен с использованием органоминерального сорбента из зеленой глины (0.2 мг/кг, рис. 1, кривая 1), что отвечает 32% от исходного содержания. На порошках активированных розовой и голубой глин (рис. 1, кривые 2,3), действие которых рассмотрено ранее [2], достигнуты удовлетворительные результаты извлечения – до 0.36 мг/кг масла (58%). Таким образом, извлечение ценных хлорофиллов из оливкового масла наиболее эффективно протекает при введении в него активированной черной глины, а наименее активно – при использовании активированной зеленой глины.

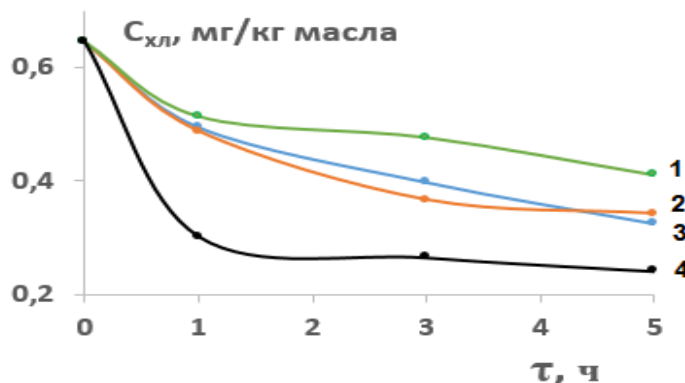


Рис. 1. Выделение хлорофиллов из оливкового масла на органоминеральных сорбентах – зеленой (1), розовой (2), голубой (3), черной (4) глинах, активированных янтарной кислотой.

Список литературы

- [1] Нагорнов Р.С., Разговоров П.Б., Смирнова Е.А., Разговорова М.П. Сравнительный анализ действия природных алюмосиликатов в отношении сопутствующих ингредиентов льняного масла // Изв. вузов. Сер.: Химия и хим. технология. 2015. Т. 58, вып 8. С. 63-66.
- [2] Нагорнов Р.С., Разговоров П.Б., Гулевич В.А., Строганова Ю.И., Ефимова Е.С. Выделение каротиноидов и хлорофиллов из растительных масел на органоминеральных сорбентах // Новые достижения в химии и хим. технологии растительного сырья: мат. VII Всерос. конф. с межд. участием. Барнаул: Алт. гос. ун-т, 2017. С. 308-310.

Влияние природы растворителя на процесс эпексидирования метиловых эфиров жирных кислот пероксидом водорода

Канаков Е.А., Есипович А.Л., Белоусов А.С., Миронова В.Ю., Отопкова К.В., Щегутова Е.Н.

Дзержинский политехнический институт (филиал) Нижегородского государственного технического университета им. Р.Е. Алексеева,

Дзержинск, Россия

E-mail: kan-evg@mail.ru

В настоящее время растительные масла представляют собой один из наиболее дешевых и доступных видов возобновляемого сырья. Одним из наиболее перспективных видов переработки растительных масел является его эпексидирование. Продукт реакции находит широкое применение в промышленности в качестве стабилизаторов ПВХ. В последние годы в качестве исходного сырья для получения стабилизаторов ПВХ предлагается

использовать метиловые эфиры жирных кислот (МЭЖК), что связано с резким ростом объемов производства биодизельного топлива.

В ходе проведенного исследования было изучено влияние природы растворителя на процесс эпоксицирования МЭЖК пероксидом водорода в присутствии промышленного катализатора TS-1.

Наши исследования показали, что на основные показатели процесса оказывает существенное влияние полярность и протонно-донорно-акцепторные свойства растворителя. Наилучшие результаты были получены при проведении процесса эпоксицирования МЭЖК пероксидом водорода на катализаторе TS-1 в среде ацетонитрила (таблица 1).

Таблица 1. Влияние природы растворителя на процесс эпоксицирования МЭЖК*.

Растворитель	ϵ^{**}	Et, кДж/моль***	Суммарная конверсия МЭЖК, %	Суммарная селективность образования эпоксидов, %
Растворители, являющиеся донорами водородных связей				
Метанол	32,7	231,904	26,20	20,90
Этанол	24,3	217,253	17,57	39,27
<i>n</i> -Пропанол	20,1	212,230	16,62	45,28
<i>n</i> -Бутанол	17,8	208,044	15,97	36,97
<i>n</i> -Пентанол	13,9	205,533	11,22	40,89
Растворители, не являющиеся донорами водородных связей				
Ацетонитрил	37,5	190,882	72,94	50,97
Ацетон	20,7	176,649	85,06	21,01
Метилацетат	6,7	162,835	68,35	43,12
Этилацетат	6,0	159,487	66,67	44,68
<i>n</i> -Пропилацетат	6,3	156,975	61,39	45,07
<i>n</i> -Бутилацетат	5,1	161,161	37,59	44,17

* температура – 50 °С, мольное соотношение МЭЖК:H₂O₂=1:8, содержание катализатора – 15.5 г/л, время – 6 ч.

** диэлектрическая проницаемость.

*** энергия Димрота-Райхардта, характеризующая полярность растворителя.

Октазамещенные фталоцианины кобальта(II), содержащих 4-сульфофенилсульфанильные заместители и фрагменты малых гетероциклов

Каналош А.А., Знойко С.А., Майзлиш В.Е., Шапошников Г.П., Вашурин А.С.

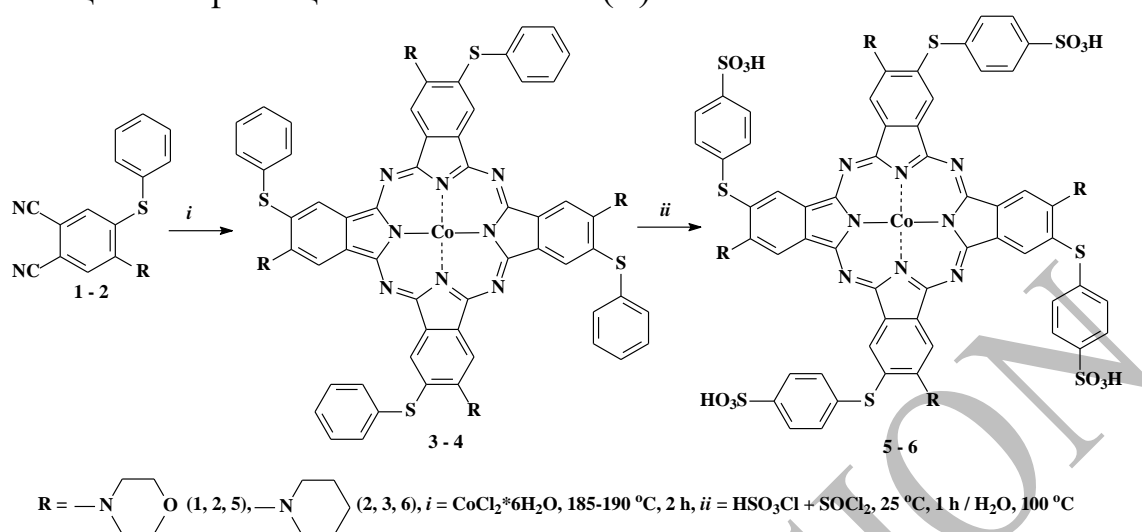
Ивановский государственный химико-технологический университет,

Иваново, Россия

E-mail: sznoyko@mail.ru

Сульфопроизводные фенилсульфанилзамещенных фталоцианинов кобальта(II), обладающие растворимостью в воде и водно-щелочных средах, проявляют каталитическую активность в реакции гомогенного жидкофазного окисления серосодержащих органических соединений. Как правило, в современной литературе представлены либо тетразамещенные, либо октазамещенные фталоцианины с одинаковыми заместителями, а данные о смешанно-замещенных фталоцианинах, содержащих в орто-положении к 4-сульфофенилсульфанильным заместителям фрагменты малых гетероциклов

полностью отсутствуют. Поэтому представляет интерес получение указанных октазамещенных фталоцианинов кобальта(II).



Схема

Синтез металлокомплексов (3-4) с кобальтом(II) фталоцианинов осуществляли нитрильным методом на основе предварительно синтезированных 4,5-замещенных фталонитрилов (1-3) (схема). Далее указанные соединения подвергали взаимодействию со смесью тионилхлорида и хлорсульфоновой кислоты, а полученные в результате сульфохлориды гидролизовали до соответствующих сульфокислот (5-6). Изучены их спектральные свойства и каталитическая активность в реакции гомогенного окисления диэтилдитиокарбамата натрия.

Работа выполнена при поддержке государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашение № 4.1929.2017/4.6.

Синтез сорбента на основе эпихлоргидрина

Касимов Ш.А.¹, Джалилов А.Т.², Тураев Х.Х.¹, Бекназаров Х.С.²,
Пардаев О.Т.¹, Гелдиев Ю.А.¹, Холназаров Б.А.¹

¹Термезский государственный университет, Термез, Узбекистан

²ГУП Ташкентский научно-исследовательский институт химической технологии, Ташкент, Узбекистан

E-mail: sh_kasimov@rambler.ru

Известны образцы сорбентов, обладающие ионообменными и комплексообразующими свойствами, синтезированные на основе эпихлоргидрина и различных аминов. Несмотря на большой ассортимент промышленных марок сорбентов, многие из них обладают рядом недостатков, которые ограничивают возможности и сферы их применения. Для улучшения кинетических и сорбционных свойств сорбентов целесообразно осуществлять

их синтез из многофункциональных соединений, содержащих электронодонорные функциональные группы [1].

Таким образом, целью исследования является синтез и исследование сорбента на основе ди-(2-аминоэтила)-дитиофосфата калия (Д2АЭДФК) и эпихлоргидрина (ЭХГ) и изучение его сорбционных свойств.

В трёхгорлую колбу, снабжённую обратным холодильником и механической мешалкой помещали 8 г (0,0315 моль) ди-(2-аминоэтила)-дитиофосфата калия и прикапывали 5,8 г (0,063 моль) эпихлоргидрина при температуре 40⁰С. Затем температуру повышали до 85-90 °С и при этой температуре через 1,5-2 часа образовывалась смолообразная масса, которую переносили в фарфоровую чашку и сушили в сушильном шкафу при 80-90 °С в течение 24 часов. Высушенный полимер измельчали, отмывали от низкомолекулярных веществ 5%-ным раствором КОН, затем дистиллированной водой до нейтральной реакции. Полученный продукт представляет собой гелеобразные серовато коричневые гранулы. Выход 87%.

Таблица. Соотношения исходных компонентов и физико-химические свойства полученного сорбента (t=80 °С, τ=2,5-3 ч.)

Мольное соотношение Д2АЭДФК:ЭХГ	Выход, %	Насыпной вес, г/мл	Удельный объем, мл/г	Статическая обменная емкость по 0,1н растворам, мг-экв/г		
				CuSO ₄	NiSO ₄	AgNO ₃
1:2	87	0,43	2,7	3,7	3,5	4,5

Список литературы

[1] Ергожин Е.Е. Полиэлектролиты и комплексоны. - Алматы: -Print-S.- 2010. - 164 с.

Флокулирующие свойства органо-органических гибридных нанокompозитов

Кашина Е.С., Фаткуллина Э.Д., Проскурина В.Е., Галяметдинов Ю.Г.

*ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия
E-mail: shabrova.93@mail.ru*

Модификация природных полисахаридов является перспективным методом молекулярного дизайна, открывающим возможность для получения новых органо-органических гибридных нанокompозитов с уникальными специфическими свойствами. Синтетические полимеры, отличаются высокой флокулирующей способностью, однако они не биоразлагаются и могут обладать высокой токсичностью, что ограничивает их применение. В последнее время исследования, направленные на получение биodeградируемых

флокулянтов на основе полисахаридов (амилопектин, крахмал, хитин), содержащих различные функциональные группы являются актуальными.

В настоящей работе проведен синтез модифицированного пектина и гибридных органо-органических систем на основе природных и синтетических полимеров. В режиме свободного оседания на модельной дисперсной системе (ДС) – суспензии охры (со средним размером частиц $R_{cp}=0,9\cdot 10^{-6}$ м и $\zeta=-38$ мВ) при различных концентрациях полимерных добавок оценены их флокулирующие показатели. Полимерными объектами служили желатин ($M = 138\cdot 10^3$ и $\beta = 10$ мол.% при рН = 5), амилопектин ($M = 23\cdot 10^3$ и $\beta = 10$ мол.%), модифицированный пектин ($M = 30\cdot 10^3$ и $\beta = 5$ мол.%), синтезированный взаимодействием амилопектина и катионного мономера – (1,2-эпоксипропил) триэтиламмоний хлорида в присутствии водорастворимой окислительно-восстановительной системы.

При флокуляции суспензии охры желатином и гибридом на основе желатина и катионного сополимера акриламида (АА) отмечен рост флокулирующей способности. При сравнении индивидуального амилопектина, модифицированного пектина и гибрида на основе амилопектина и катионного сополимера АА установлены стабилизирующие свойства исходного амилопектина, а для модифицированного пектина и гибридного образца усиливается процесс флокулообразования и наблюдается рост флокулирующего эффекта, обусловленный спецификой механизма флокуляции. Таким образом, синтезированные органо-органические гибридные наноконпозиты обладают большим флокулирующим действием относительно ряда коммерческих полимеров, применяемых при очистке сточных вод.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (№15-03-01399).

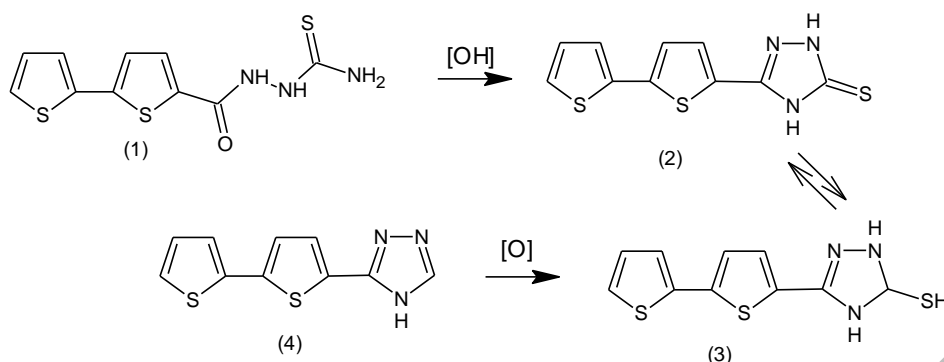
1-(2,2'-битеноил-5)-тиосемикарбазид в реакции циклодегидратации

Кечина Е.В., Юдашкин А.В.

Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

E-mail: ayudashkin@mail.ru

Пятичленные полиазольные гетероциклы обладают выраженными противовирусной и противоопухолевой активностью [1]. Спектрально-люминисцентные свойства арил производных 1,2,4-триазола и тетразола мало изучены [2]. Циклизация тиосемикарбазида 5-2,2'-битиофенкарбоновой кислоты в серной кислоте приводит к образованию 5-(2,2'-битиен-5-ил)-(1,3,4-тиадиазол-2-ил)амин. Щелочная циклодегидратация тиосемикарбазида с дальнейшей обработкой уксусной кислотой позволяет выделить 3-(2,2'-битиен-5-ил)-1,4-(дигидро-1Н-1,2,4-триазол-5-ил)тион, способный к тион-тиольной



таутомерии. Окисление тион-тиола (2,3) перекисью водорода сопровождается образованием триазолилбитиофена (4).

Производные 2,2'-битиофена высвечиваются в синей и голубой области видимого спектра.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 15-43-02565.

Список литературы

- [1] Шелал И.Л. Синтез 4-(3-пиридил)-1,2,4-триазолилтиона-3 // Известия вузов. 1997. Т. 40. №3. С. 125-128.
 [2] Красовицкий Б.М., Болотин Б.М. // Органические люминофоры. 1984. М.: Химия. 336 с.

Синтез метакрилата тетрафенилсурьмы для получения прозрачного металлосодержащего органического стекла

Кипелкин Е.В.¹, Малеева А.И.², Гущин А.В.²

¹Школа юного исследователя Нижегородского научного центра РАН, Нижний Новгород, Россия

²Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
 E-mail: vfvfvs02@mail.ru

Полимерные материалы на основе металлоорганических соединений сурьмы представляют большой интерес для прикладной и фундаментальной науки. Они имеют ряд интересных свойств, таких как: термическая стабильность, способность задерживать ультрафиолетовое и рентгеновское излучение, что позволяет использовать их в качестве сцинтилляционных детекторов, устойчивых в условиях мощных излучений в современных ускорителях.

Цель работы – синтез метакрилата тетрафенилсурьмы, изучение его свойств, а также получение на его основе растворимого металлосодержащего оргстекла.

Синтез проводился по методике, применявшейся ранее для аналогичных ацилатов тетрафенилсурьмы [1] по уравнению:



В круглодонную колбу емкостью 100мл последовательно поместили 5 г (0.01 моль) пентафенилсурьмы, 34 мл толуола и 0.84 г (0.01 моль) метакриловой кислоты. Колбу заполнили аргоном и оставили при комнатной температуре на 7 дней. После этого жидкую часть отконденсировали в ловушку. Твердый остаток метакрилата тетрафенилсурьмы ($m=4.5$ г, $T_{пл}=144^{\circ}\text{C}$) перекристаллизовывали из системы гексан-хлороформ в объемном соотношении 3:1. Осадок отфильтровали на фильтре Шотта и промыли гексаном (3 раза по 5 мл).

Строение полученного метакрилата тетрафенилсурьмы подтверждено ^1H -ЯМР спектроскопией.

Продукт был использован для синтеза сурьмасодержащего оргстекла.

Список литературы

[1] Кочешков К.А., Сколдинов А.П., Землянский Н.Н. Методы элементоорганической химии. Сурьма, висмут. М.: Наука, 1976. 483 с.

Изучение свойств допированного полианилина

Киреева Ю.Г.

*Владимирский государственный университет имени А. Г. и Н. Г. Столетовых,
Владимир, Россия*

E-mail: yulia.kireeva.96@mail.ru

Электропроводящие полимеры — органические полимеры, которые могут быть как полупроводниками, так и проводниками (как металлы). Проводящие полимеры совмещают в себе гибкость и прочность пластиков с электропроводящими свойствами, характерными для металлов, и обладают гигантским потенциалом для практического применения.

Полимером, способным проводить электрический ток является полианилин [ПАНИ]. Одним из наиболее существенных недостатков ПАНИ, значительным образом затрудняющих его практическое применение, является сложность переработки, обусловленная неплавкостью, хрупкостью и нерастворимостью ПАНИ в органических и неорганических растворителях [1]. Одним из способов регулирования свойств полианилиновых композиций является введение допирующих добавок. Использование допантов позволяет направленно изменять структуру полианилина, которая в значительной степени определяет электрические характеристики [2].

Предложенный способ получения ПАНИ заключается в том, что растворяют окислитель в чистом растворителе и при перемешивании добавляют анилиновый мономер по каплям. Далее реакционную смесь выдерживают при температуре от 10°C до 35°C в течение периода времени от 4 часов до 10 часов. Полученный проводящий ПАНИ осаждают погружением в дистиллированную воду и отделяют. Этот метод позволяет разработать

безопасный для окружающей среды не коррозионный способ получения ПАНИ.

Таким образом, полианилин можно синтезировать в лабораторных условиях электрохимическим, химическим и ферментативным методами; эффект стабилизации электропроводящих свойств достигается при введении не менее 20 % допанта; наибольший допирующий эффект обеспечивается использованием соляной кислоты.

Список литературы

- [1] Межуев Я.О., Коршак Ю.В., Штильман М.И., Осадченко С.В., Страхов И.С. /Гетерогенный катализ в процессе окислительной полимеризации анилина //Вестник ННГУ. 2012. № 6(1), С. 69 – 75.
- [2] Межуев Я.О., Коршак Ю.В., Штильман М.И., Пискарева А.И., Осадченко С.В./Некоторые аспекты окислительной полимеризации анилина в водных растворе поли-(N-винилпирролидона)// Пластические массы. 2012. № 11.С. 27 – 31.

Синтез и координационные свойства ряда фосфорилпорфиринов

Киселёв А.Н.¹, Горнухина О.В.², Шарапов М.Ф.²,
Вершинина И.А.¹, Сырбу С.А.¹

¹Институт химии растворов Российской академии наук, Иваново, Россия

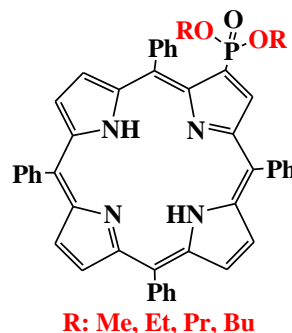
²Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия

E-mail: Scatol@yandex.ru

В последнее время наблюдается рост количества работ в сфере получения и исследования новых многофункциональных материалов. Фосфорилпорфирины можно иммобилизовать на поверхность оксидов металлов и тканей, создать координационные конъюгаты, которые могут обладать сенсорными, каталитическими и другими полезными свойствами.

В данной работе представлен синтез ряда фосфорилпорфиринов с помощью Ag-катализируемой C-P-функционализации, которые отличаются между собой длиной алкильной цепи в фосфорильном остатке. Безметалльные фосфорилпорфирины получали смешением их растворов в дихлорметане с соляной кислотой с последующей хроматографической очисткой.

Проведено исследование кинетики реакций комплексообразования фосфорилпорфиринов с ацетатами Co, Cu и Zn в среде неводных органических растворителей (ледяная уксусная кислота и пиридин). В зависимости от природы катиона соли скорость реакции комплексообразования в уксусной кислоте растет в ряду



Co < Zn < Cu. Несмотря на высокую степень димеризации ацетата меди, реакция образования комплексов меди протекает уже при сливании растворов соли и лиганда, в отличие от комплексов цинка и кобальта. Минимальная скорость комплексообразования наблюдается в реакции с ацетатом кобальта. В пиридине наблюдается обратная зависимость, что может быть обусловлено его сильными электронодонорными свойствами. В ходе исследования выявлено, что удлинение алкильного остатка не влияет существенным образом на изменение кинетических параметров процесса комплексообразования. Наблюдается лишь зависимость от природы соли комплексообразователя и природы растворителя.

Исследования проведены с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ФГБОУ ВО «ИГХТУ». Исследование проведено в рамках выполнения государственного задания (базовая часть) проект № 4.7305.2017/8.9.

5-(Тетразол-5-ил)-2,2'-битиофен как структурный блок в синтезе 2,5-дигетарилпроизводных 1,3,4-оксадиазола

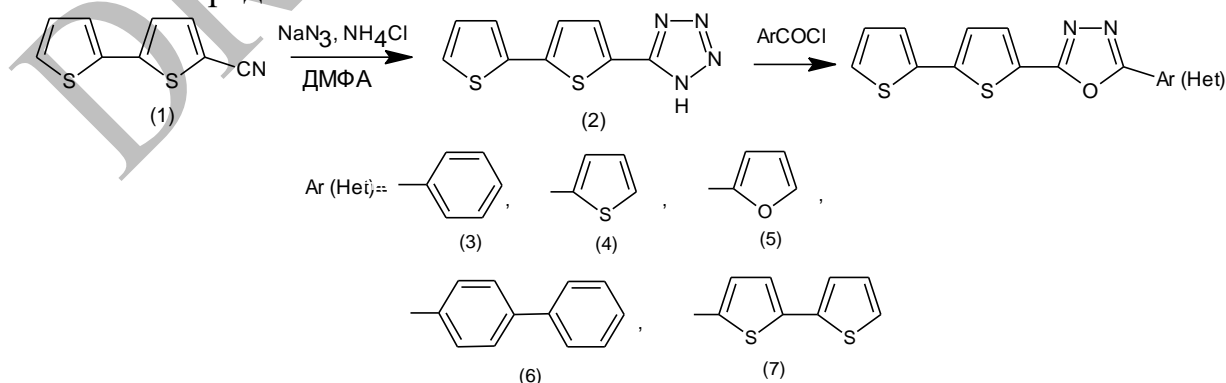
Ковалева О.В., Юдашкин А.В.

Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

E-mail: ayudashkin@mail.ru

Арилпроизводные 1,3,4-оксадиазолы известны как эффективные органические люминофоры, активные среды перестраиваемых лазеров и активирующие компоненты жидких и пластомассовых сцинтилляторов. Понижение квантового выхода флуоресценции в 2,5-дितिенилоксадиазолах связывают с усилением спин-орбитального взаимодействия «тяжелых» атомов серы [1,2].

Синтез 5'-(1'', 3'', 4''-оксадиазол-2''-ил)-2,2'-битиофена, содержащего в положении 5'' оксадиазольного кольца различные арильные и гетарильные заместители представлена на схеме:



Исследуемый ряд производных оксадиазолилбитиофенов является эффективными люминофорами с квантовыми выходами в пределах $0.5 < \gamma < 0.8$.

Интенсивные длинноволновые полосы поглощения $1 < f_e < 3$ и достаточно большие стоксовы сдвиги от 5700 см^{-1} до 6500 см^{-1} показывают перспективность в качестве активных сред для ОКГ. По характеру ВПЗ 2,5-бис-(2,2'-битиенил-5')-1,3,4-оксадиазол близок к высокоэффективному люминофору РОРОР.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект 15-43-02565.

Список литературы

- [1] Красовицкий Б.М., Болотин Б.М. // Органические люминофоры. 1984. М.: Химия. 336 с.
- [2] Meshkovaya V.V., Yudashkin A.V., Klimochkin Yu.N. // Dyes and pigments. 2015. V. 113. P. 435-446.

Рыбный коллаген как основа получения биологически активных материалов

Козина М.А., Корокин В.Ж.

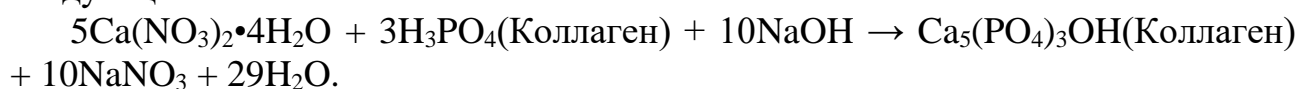
Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского.

Нижний Новгород, Россия

E-mail: kozinamarina1@yandex.ru

В настоящее время большое внимание уделяется созданию биокомпозитных материалов, предназначенных для использования в медицине, косметологии, пищевой и легкой промышленности¹. В частности, в последнее время большое внимание уделяется материалам с рыбным коллагеном, который имеет целый ряд преимуществ по сравнению с аналогом животного происхождения: в первую очередь, это большее структурное сходство с коллагеном человека, обеспечивающее более высокий уровень биосовместимости². Кроме того, поиск новых способов повышения эффективности приживаемости костных имплантатов является одной из важнейших задач в ортопедии, хирургии и стоматологии.

В рамках данной работы на основе аналитического обзора и систематизации современной мировой литературы разрабатывали методику получения на основе рыбного коллагена биополимеров с синтетическими фрагментами и биосовместимого композита наногидроксиапатита на основе коллагена и коллагенсодержащий полимеров, анализ и усовершенствование свойств полученных образцов. Процесс получения композита проводили по следующей схеме:



Полученный композит представляет собой интерес в хирургии и стоматологии³. Подобный материал может выступать в роли костного

имплантата. Все процессы данной работы проводятся в технически доступных условиях.

В данной работе опирались на запатентованные методики получения исходного материала изучения. (Патент №2614772 и патент №2567171).

Список литературы

- [1]. Воробьев В.И. Использование рыбного коллагена и продуктов его гидролиза // Известия КГТУ. Казань, 2008. №13.
 [2] Novikova I.S., Storublevtsev S.A. Collagen application in the medical purposes // Успехи современного естествознания.- № 6.- Воронеж, 2012.
 [3]. Lee C.H., Singla A., Lee Y. Int. J. Pharm. 2001.

Полимеризация алкилакрилата с винилбутиловым эфиром по механизму «живых» цепей

Козина Т.А., Часова Ю.О., Маткивская Ю.О.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

E-mail: kozina.tanya.t98@gmail.com

Исследование механизма роста полимерных цепей «живой» полимеризации в системах, иницируемых боросильными радикалами, остается актуальным в современном научном мире. Одной из отличительной особенностью псевдоживой полимеризации является способность системы к постполимеризации.

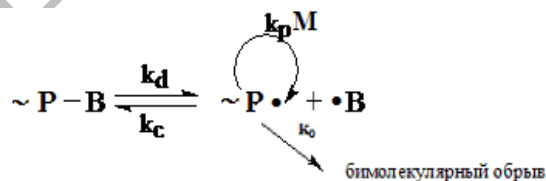


Рис.1. Схема образования радикалов роста цепи и их рекомбинации.

Целью данной работы было изучение особенностей псевдоживой (со)полимеризации алкилакрилата с винилбутиловым мономером.

Синтез проводили в присутствии триэтилборана, который согласно литературным данным, [1] является источником стабильных боросильных радикалов, способных контролировать образование макромолекул по механизму обратимого ингибирования «живых» цепей. Варьировали время и условия дозирования, а также изучали процесс постполимеризации. В ходе исследования был выявлен ряд закономерностей протекания сополимеризации и постполимеризации от условий синтеза, прямым или косвенным образом указывающие на псевдоживой процесс.

Определили состав и строение всех образцов с использованием методов ИК и ЯМР ¹³C спектроскопии. Оказалось, что все образцы имеют практически эквивалентный состав и близкое к чередующемуся строение сополимера, как наблюдалось и ранее. [2]

Таким образом, было установлено и подтверждено, что полимеризация идет по механизму «живых» цепей с характерной ему способностью к постполимеризации.

Список литературы

- [1] Заремский, М. Ю. Высокомолекулярные соединения, Серия Б, 2013, том 55, № 5, с. 601–624
 [2] Маткивская Ю.О. Дисс. канд.хим.наук. 2017. г.165 с.

Теоретическое изучение взаимодействия 2,6-добензилиденциклогексан-1-она и 3,5-бис(бензилиден)-пиперидин-4-онов с гексакарбонилвольфрамом(0)

Колпакова Е.В., Курамшин А.И., Галкин В.И.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

E-mail: argironet@gmail.com

Для выяснения причин, приводящих к различию в характере связывания двух диенонов, мы провели квантово-химический анализ термодинамической благоприятности взаимодействия диенонов с гексакарбонилвольфрамом. Для расчетов использовался метод функционала плотности (DFT), функционал B3LYP, в качестве расчетного базисной функции была выбрана хорошо зарекомендовавшая себя в расчетах структуры и свойств металлоорганических соединений переходных металлов базис LANL2DZ. Полученные результаты согласуются с наблюдавшимися нами экспериментальными данными.

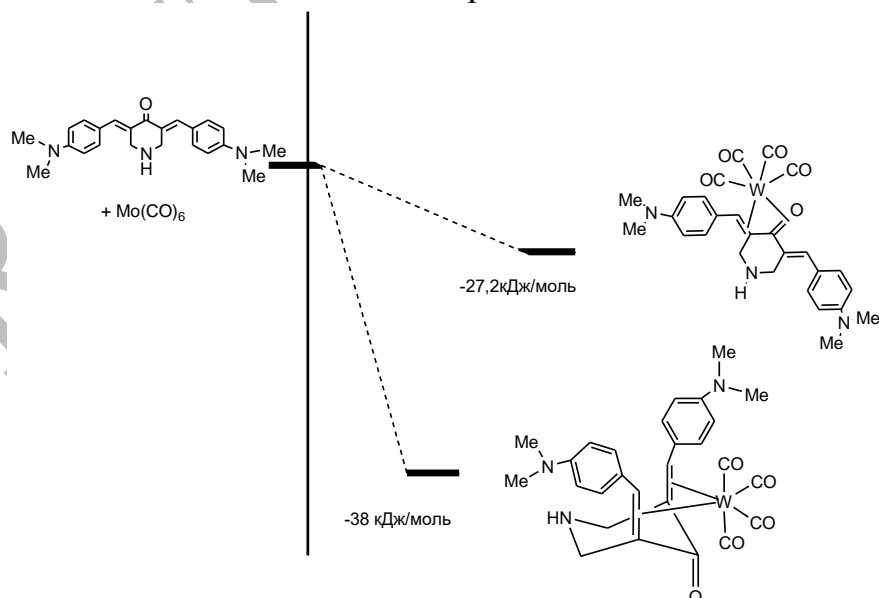


Рис. 1. Рассчитанные значения (LANL2Z/B3LYP) ΔG модельных реакций 3,5-бис(4-(диметиламино)бензилиден)пиперидин-4-она с гексакарбонилвольфрамом.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского федерального университета.

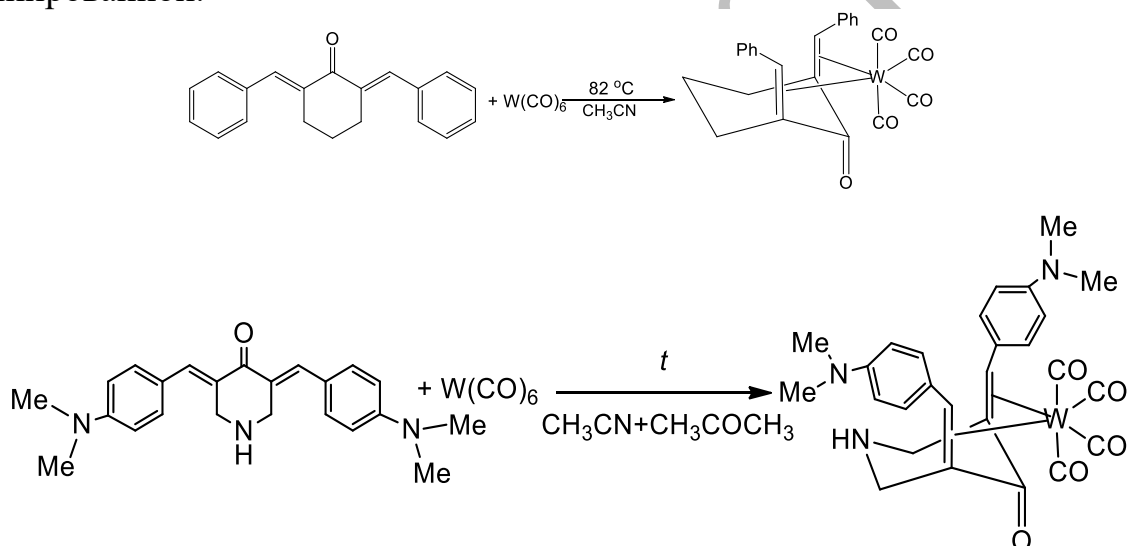
Экспериментальное изучение
взаимодействия 2,6-дибензилиденциклогексан-1-она
и 3,5-бис(бензилиден)-пиперидин-4-онов с гексакарбонилвольфрамом(0)

Колпакова Е.В., Курамшин А.И., Галкин В.И.

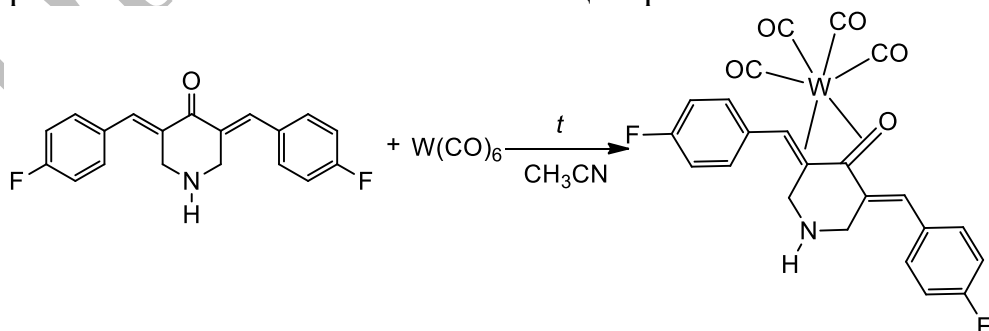
Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

E-mail: argironet@gmail.com

Во всех случаях наблюдается бидентатное связывание диенона с металлом. Причем координация 2,6-дибензилиденциклогексан-1-она и 3,5-бис(4-(диметиламино)бензилиден)пиперидин-4-она с вольфрамом осуществляется через π -системы обеих $C=C$ связей диенона. А координация 3,5-бис(4-фторбензилиден)пиперидин-4-она с вольфрамом осуществляется через π -системы связей $C=C$ и $C=O$, вторая $C=C$ связь диенона при этом остается не координированной.



Анализ спектральных данных, полученных для продукта взаимодействия 3,5-бис(4-фторбензилиден)пиперидин-4-она с гексакарбонилвольфрамом также указывает на образование комплекса состава (диенон)вольфрам(CO)₄. Однако в этом случае бидентатная координация диенон-вольфрам обусловлена участием π -электронов связей $C=C$ и $C=O$ с металлоцентром.



Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского федерального университета.

Взаимодействие гидрида алюминия [(dpp-bian)AlH(Cl)] с фенилацетиленидом натрия

Копцева Т.С.^{1,2}, Соколов В.Г.²

¹Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

²Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН, Нижний Новгород, Россия
E-mail: ezhillo@mail.ru

Органические соединения алюминия нашли широкое применение в различных отраслях промышленности. Сочетание их с хелатирующими N-донорными лигандами позволило получить соединения, которые также проявляют себя в качестве эффективных катализаторов в ряде реакций.

В 2017 году нами был получен алкильный комплекс алюминия с аценафтен-1,2-дииминным лигандом [(dpp-bian)AlBu(Et₂O)] в результате реакции [(dpp-bian)AlH(Cl)] с *трет*-бутиллитием в диэтиловом эфире. При этом происходит восстановительное элиминирование водорода, а дииминный лиганд восстанавливается с анион-радикала до дианиона. [1] В связи с вышесказанным, представлялось интересным исследование взаимодействия гидрида алюминия [(dpp-bian)AlH(Cl)] с фенилацетиленидом натрия.

Установлено, что реакция [(dpp-bian)AlH(Cl)] с PhCCNa приводит к образованию трех продуктов: [(dpp-bian)AlCCPh(DME)] (**1**), [(dpp-bian)Al(CCPh)₂][Na(Et₂O)₂] (**2**) и [(dpp-bian(H))Al(CCPh)₃][Na(Et₂O)₂] (**3**).

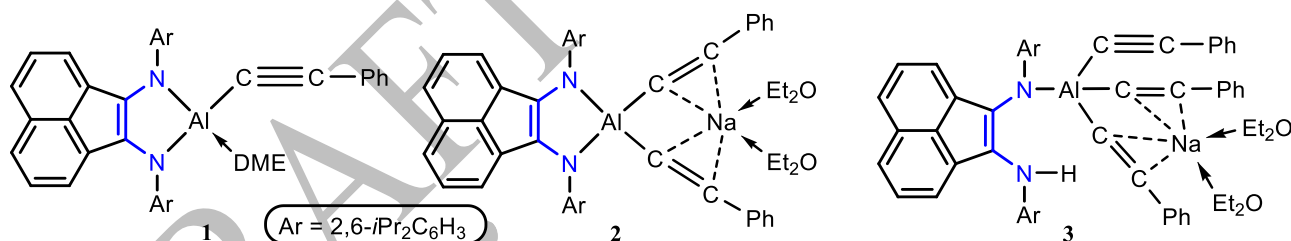


Рис. 1. Структура соединений **1-3**.

Все полученные комплексы выделены в виде неустойчивых в отношении кислорода и влаги воздушных кристаллических веществ, охарактеризованы ИК- и ЯМР-спектроскопией. Молекулярные структуры соединений **2** и **3** установлены методом рентгеноструктурного анализа.

Список литературы

[1] В. Г. Соколов, Т. С. Копцева, М. В. Москалев, А. В. Пискунов, М. А. Самсонов, И. Л. Федюшкин. // Изв. АН. Сер. Хим., 2017, 9, 1569 – 1579.

**Синтез наночастиц висмута и их стабилизация
в смеси β-циклодекстрина с поливинилпирролидоном**

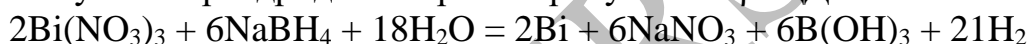
Коротких Е.М.¹, Боровикова Л.Н.², Писарев О.А.^{1,2}

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

²Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: kkorotkith@mail.ru

Наночастицы металлов используются для создания полифункциональных лекарств. Цель работы – разработка методов синтеза и стабилизации наночастиц висмута (Ві) в смеси β-циклодекстрина с поливинилпирролидоном (ПВП). Циклодекстрины (ЦД) - это циклические олигосахариды с внутренней гидрофобной полостью, способной к образованию соединений включения типа «гость-хозяин» с органическими субстратами.

Синтез наночастиц Ві проводился на при использовании реакции между нитратом висмута и боргидридом натрия в присутствии β-ЦД:



Полученная система была агрегативно неустойчива, наночастицы Ві выпадали в осадок через 24 часа. Гидроксильные группы в составе ЦД препятствуют захвату образующихся наночастиц Ві, ситуацию может улучшить селективная модификация молекул ЦД [1].

С целью получения стабильных наночастиц в среду синтеза был добавлен ПВП с M_w 55 000. Это позволило получить стабильные растворы наночастиц Ві с концентрацией 0.001М. Оптический спектр наночастиц Ві, стабилизированных β- ЦД в присутствии ПВП, приведен на рис.1. В спектре присутствует плечо с максимумом поглощения при 253 нм, соответствующее оптическому поглощению наночастиц Ві, где ни β-ЦД, ни ПВП не поглощают.

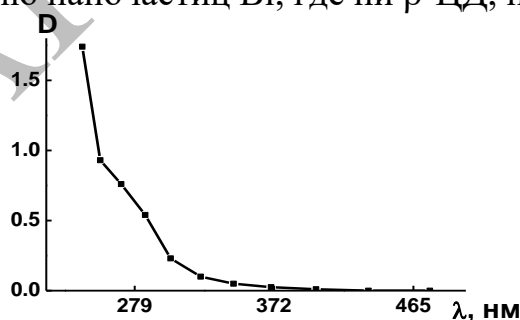


Рис.1 Оптический спектр наночастиц висмута, стабилизированных β- ЦД ($C_{\text{Ві}}=0.001\text{M}$, $C_{\beta\text{-ЦД}}=1\text{масс.}\%$, $C_{\text{ПВП}}=0,01\text{масс.}\%$).

Таким образом, ПВП служит дополнительным стабилизатором, «обеспечивающим» гидрофобные взаимодействия наночастиц висмута с внутренней полостью β-ЦД.

Список литературы

[1] Croft A.P., Bartsch R.A. / Synthesis of chemically modified cyclodextrins // Tetrahedron. 1983. V. 39. N 9 P. 1417-1474.

Новые структуры N,N'-замещенных C-фосфорилированных
малонодиимидатов

Шишкин В.Е., Анищенко О.В., Шевченко М.А., Кошелева И.А., Соколов Н.А.

Волгоградский государственный технический университет,

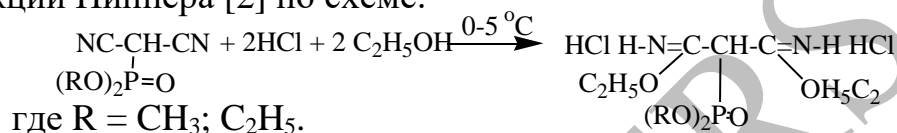
Волгоград, Россия

E-mail: Lady.I.K@yandex.ru

Известно большое число фосфорорганических соединений, проявляющих биологическую активность. Многие из них широко используются в сельском хозяйстве и медицине [1].

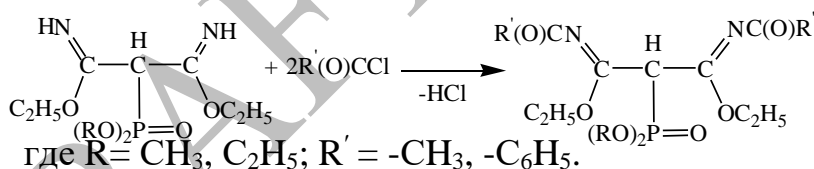
Был разработан способ получения новых структурных соединений N,N'-замещенных C-фосфорилированных малонодиимидатов, полученных из C-фосфорилированных дигидрохлоридов малонодиимидатов.

C-фосфорилированные дигидрохлориды малонодиимидаты получали по реакции Пиннера [2] по схеме:



В смесь диалкоксифосфорилмалонодинитрила, абсолютного этилового спирта в соотношении динитрил : спирт = 1 : 2 барботировали хлористый водород. Полноту протекания реакции определяли по привесу реактора. Выдерживали полученные C-фосфорилированные дигидрохлориды малонодиимидатов 12 часов для полноты протекания реакции при температуре -5 °С.

Далее синтезированные соединения вводили в реакцию ацилирования с образованием N,N'-замещенных C-фосфорилированных малонодиимидатов по схеме:



Полученные соединения представляют собой прозрачные окрашенные в рыжий цвет жидкости, хорошо растворимые в диоксане, хлороформе, ЧХУ и не растворимые в воде. Относятся к малотоксичным веществам. Для них прогнозируется высокая потенциальная антипсориазная активность, выступают в роли различных ингибиторов и проявляют некоторые другие виды активности, что свидетельствует о перспективности дальнейшего поиска новых структур в классах C-фосфорилированных диимидатов малоновой кислоты и изучение их свойств.

Список литературы

- [1] Машковский М. Д., Лекарственные средства. Издание шестнадцатое. / Новая волна. Москва, 2016. – 1260с.
[2] Pinner A., Klein F. Unwandlung der Nitrile in Imide. // Berlin. – 1877. – В. 10. – S. 1889-1897.

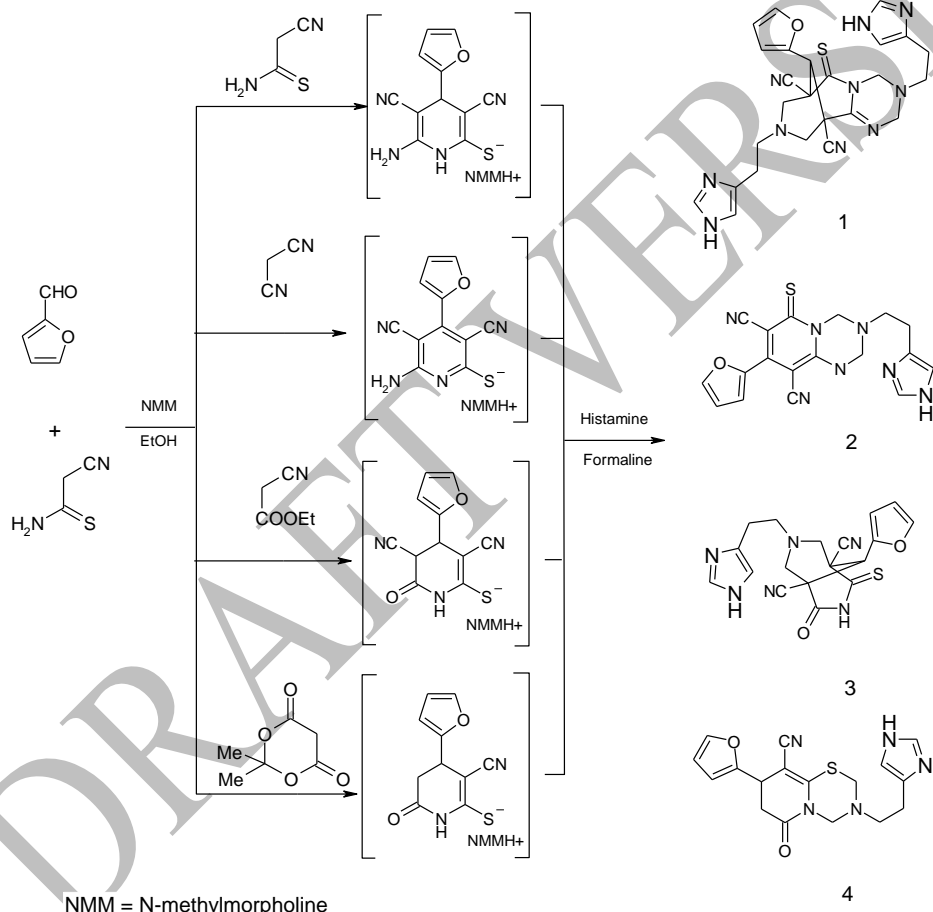
Многокомпонентный синтез новых производных гистамина

Кривоколыско Б.С.¹, Доценко В.В.², Кривоколыско С.Г.¹

¹Луганский государственный медицинский университет им. Святителя Луки,
Луганск, Луганская народная республика

²Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия
E-mail: ksg-group-lugansk@mail.ru

Гистамин обладает высокой биологической активностью, является одним из эндогенных факторов, участвующих в регуляции жизненно важных функций организма и играющих важную роль в патогенезе ряда болезненных состояний [1, 2]. В настоящей работе представлены многокомпонентные методы синтеза производных пиридинонов и их гидрированных аналогов, содержащих фрагмент гистамина (**1-4**) (выходы 39-61%):



Полученные образцы (**1-4**) были охарактеризованы комплексом спектральных методов, а также ВЭЖХ-МС и результатами элементного анализа.

Список литературы

- [1] Salem A., Rozov S., Al-Samadi A., Stegajev V., Listyarifah D., Kouri V.-P., Han X., Nordström D., Hagström J., Eklund K.K. // British Journal of Dermatology. 2017. Vol. 176. Issue 5. PP. 1213-1223. DOI: 10.1111/bjd.14995.
[2] <https://chem.nlm.nih.gov/chemidplus/rn/51-45-6>.

Солюбилизирующее действие мономерных, димерных и полимерных циклодекстринов: исследование методом капиллярного электрофореза

Критский И.Л.¹, Терехова И.В.¹, Шипилов Д.А.², Курочкина Г.И.², Грачев М.К.²

¹*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия*

²*Московский государственный педагогический университет, Москва, Россия*

E-mail: ilk@isc-ras.ru

Биодоступность лекарственных соединений при пероральном приеме определяется возможностью их проникновения в системный кровоток. Этот процесс лимитируют две стадии: растворимость в ЖКТ и проницаемость через эпителиальную стенку кишечника. Одним из путей увеличения биодоступности лекарственных препаратов является использование солюбилизаторов, позволяющих увеличить растворимость липофильных лекарств в водной среде.

Циклодекстрины в фармакологии зарекомендовали себя как прекрасные биосовместимые солюбилизаторы, позволяющие за счет образования комплексов включения увеличить растворимость липофильных молекул, а также усилить проницаемость лекарств через мембраны.

Молекулу циклодекстрина можно приближенно представить в виде тора, с полярной внешней и неполярной внутренней поверхностями. Таким образом, неполярным частям молекулы-гостя в полярной среде растворителя энергетически выгодно образовать комплекс включения с циклодекстрином. Именно процесс комплексообразования, когда неполярные фрагменты лекарственного соединения, заходят в макроциклическую полость растворимого в воде циклодекстрина, обеспечивает увеличение растворимости.

В работе исследовано влияние димерных и полимерных β -циклодекстринов в сравнении с мономерными α -, β - и γ -циклодекстринами на растворимость метотрексата — перспективного противоревматоидного препарата, обладающего невысокой биодоступностью.

Методом капиллярного электрофореза установлено влияние добавок циклодекстринов на растворимость метотрексата в буферных растворах с физиологическим значением рН. Показано, что повышение растворимости метотрексата в присутствии циклодекстринов обусловлено образованием комплексов включения. Получены термодинамические параметры комплексообразования различных ионизированных форм метотрексата с мономерными, димерными и полимерными циклодекстринами. Проанализировано влияние размера макроциклической полости и усложнения строения молекул циклодекстринов, а также рН среды на термодинамику комплексообразования.

Исследование комплексообразования димерных β -циклодекстринов выполнено при финансовой поддержке РФФИ (грант №16-03-00444).

Синтез фосфорилированных имидазо[1,2-*a*]пиридинов

Крылов А.С.¹, Эрхитуева Е.Б.^{1,2}, Свинцицкая Н.И.¹, Догадина А.В.¹

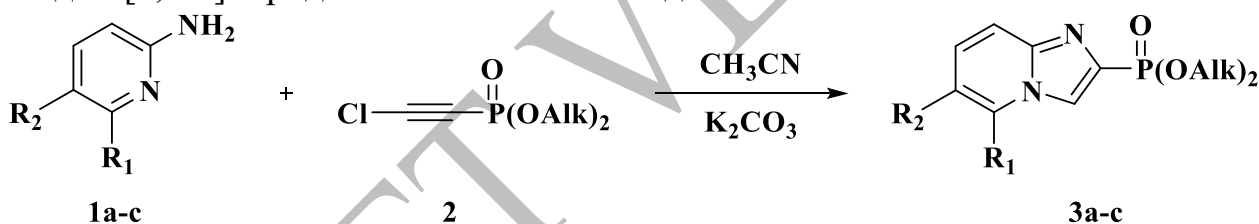
¹Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), Санкт-Петербург, Россия

²Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: alexandr_krylov@bk.ru

Основным направлением взаимодействия хлорэтинфосфонатов с первичными ароматическими аминами является образование симметричных фосфорилированных амидинов.

Нами установлено, что при взаимодействии первичных 2-аминопиридинов **1a-c** с хлорэтинфосфонатами преимущественно реализуется другое направление реакции – образование фосфорилированных имидазопиридинов. Хемоселективность этой реакции зависит от природы заместителя в положении **6** исходного 2-аминопиридина. Так, наличие атома брома в положении **6** приводит к преимущественному образованию соответствующего амидина. Напротив, реакция хлорэтинфосфонатов с 2-аминопиридином **1a** и 2-амино-6-метилпиридином **1b** проходит с образованием соответствующих имидазо[1,2-*a*]пиридинов с высоким выходом:



$\text{R}_1 = \text{H}, \text{R}_2 = \text{H}$ (**1a**); $\text{R}_1 = \text{Me}, \text{R}_2 = \text{H}$ (**1b**); $\text{R}_1 = \text{H}, \text{R}_2 = \text{Cl}$ (**1c**); Alk = Me, Et, *i*-Pr

Стоит отметить, что исследуемая реакция образования имидазо[1,2-*a*]пиридинов **3a-c** проходит с иной регионаправленностью, нежели было показано в литературе [1]. Фосфонатная группа, вопреки ожиданиям, оказывается в положении **2**, а не **3**.

По-видимому, механизм образования имидазо[1,2-*a*]пиридина включает первичную нуклеофильную атаку хлорэтинфосфоната на пиридиновый атом азота 2-аминопиридина с промежуточным образованием пиридиниевой соли и последующей циклизацией.

Структура полученных соединений установлена по данным спектроскопии ЯМР на ядрах ¹H, ¹³C, ³¹P, ¹⁵N, масс-спектрометрии высокого разрешения, а также однозначно подтверждена результатами рентгеноструктурного анализа.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-03-00474).

Список литературы

[1] Wu Z., Pan Y., Zhou X. // *Synthesis*. 2011. Vol. 2011, № 14. P. 2255–2260.

Физико-химические свойства препаратов на основе природных L-α-аминокислот

Крымский Е.А.¹, Васина Я.А.²

¹11«А» класс МБОУ «школа № 29», Нижний Новгород, Россия

²ФГБОУ ВО «Нижегородский государственный архитектурно-строительный университет», г. Нижний Новгород, Россия

Фармпрепараты на основе природных L-α-аминокислот используют для спортивного и лечебного питания. Например, больным, страдающим пищевой аллергией, некоторыми неврологическими патологиями, беременным женщинам, недоношенным новорожденным детям. Цель работы состояла в изучении физических и химических свойств препаратов на основе природных L-α-аминокислот. Изучив литературу, провели обзор по описанию фармакологического действия и показания к применению аминокислот, выпущенных различными производителями. Объекты исследования - 1.биотредин на основе L-треонина, 2.аспаркам – магний-калийная соль аспарагиновой кислоты, 3.метионин, 4.глицин, 5.глутаминовая кислота, 6.аргинин, 7.таурин – серосодержащая аминокислота, образующаяся в ходе превращения цистеина; 8.комплекс для спортивного питания - лейцин, валин, изолейцин. Кристаллические аминокислоты во всех опытах использовали, как эталон сравнения. Измеряли кислотность, электропроводность суспензий на приборе Анион 4100.

Объект	1	2	3	4	5	6	7	8
pH	4,5	6,3	6,5	6,4	3,4	9,7	6,8	6,3
Электропроводность, мкСм/см	64	616	19	15	185	107	16	76

Аналитические реакции на L-α-аминокислоты в препаратах выполняли с применением качественного органического анализа. Установлено, по реакции с нингидрином наличие аминокислот в объектах. Термическую устойчивость твердых образцов исследовали в открытой системе и вакууме в интервале температур 100 – 300 °С. Использовали прибор определения температуры плавления компании Buchi M-560 для открытой системы и установку термического превращения в вакууме [1].

Объект	3	5	6	7
T, °С, воздух	281	215	250	250
T, °С, вакуум	210	170	200	190

Список литературы

- [1] Яблоков В.А, Васина Я.А., Зеляев И.А., Митрофанова С.В. Кинетика серосодержащих аминокислот //Журн. общ. хим. 2009. Т. 79. Вып.6. С. 969.
 [2] Якубке, Х.-Д. Аминокислоты. Пептиды. Белки/ Х.-Д. Якубке, Х Ешкайт. – М.: Мир, 1985. – 82 с.

Синтез фотоактивных противоопухолевых конъюгатов на основе тетрапиррольных соединений

Кузьмина Н.С., Отвагин В.Ф., Нючев А.В., Федоров А.Ю.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород

E-mail: kuzmina.ns2014@gmail.com

Разработана стратегия синтеза гибридных фотоактивных конъюгатов, содержащих в своём составе фрагменты синтетического или природного порфирина, линкера, терапевтического агента и/или лигандов доставки, а также гидрофильных групп [1]. С применением данной стратегии получены водорастворимые конъюгаты на основе металлокомплексов порфиринов и эффективных химиотерапевтических агентов (рис.1.).

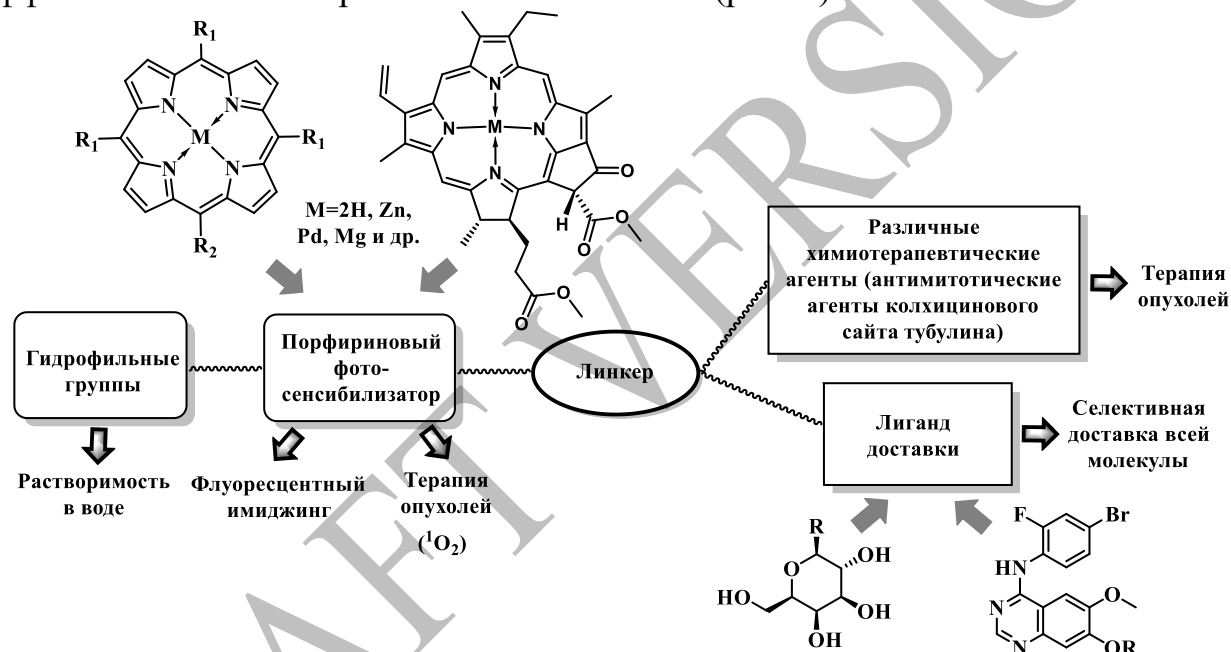


Рис.1.

Предложенные методики синтеза и полученные конъюгаты могут стать основой для создания комбинированных таргетных препаратов диагностического и/или терапевтического назначения. Для некоторых синтезированных конъюгатов проведены исследования биологической активности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-03-00464 А).

Список литературы

[1] A.V. Nyuchev, V.F. Otvagin, A.E. Gavryushin, Y.I. Romanenko, O.I. Koifman, D.V. Belykh, H.-G. Schmalz, A.Yu. Fedorov. Synthesis of chlorin-(arylamino)quinazoline hybrids as models for multifunctional drug development. *Synthesis*, 2015, 47, 3717–3726.

Реакции (dpp-bian)GaNa с изоцианатами и изотиоцианатами

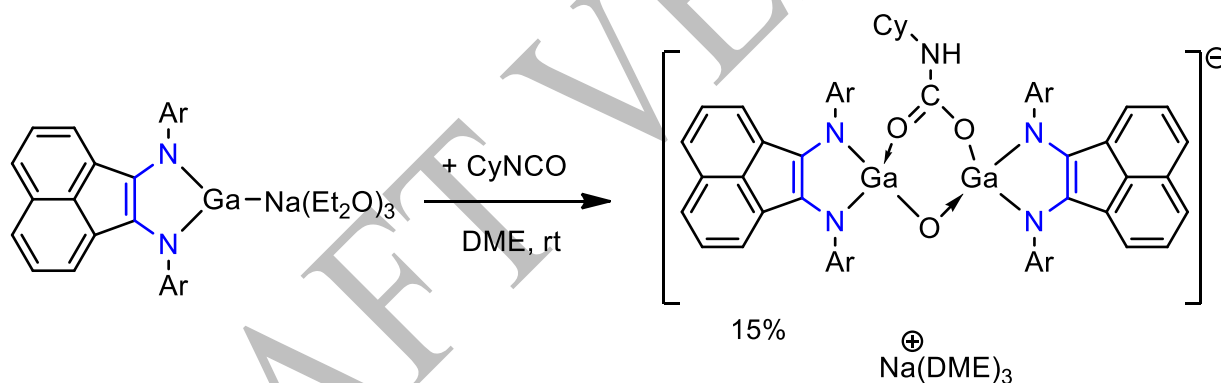
Кушнерова О.А.¹, Додонов В.А.²

¹Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

²Институт металлургической химии РАН им. Г.А. Разуваева,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: kushnerova2009@yandex.ru

Дигаллан, (dpp-bian)Ga–Ga(dpp-bian) (dpp-bian = 1,2-бис[(2,6-ди-изо-пропилфенил)имино]аценафтен), демонстрирует ряд необычных свойств: обратимое присоединение терминальных алкинов [1], взаимодействие с SO₂ [2], двухэлектронное окислительное присоединение [3]. При восстановлении натрием в диэтиловом эфире дигаллан дает [(dpp-bian)GaNa(Et₂O)₃] [4]. В работе сообщается о реакциях [(dpp-bian)GaNa(Et₂O)₃] с изоцианатами, R-N=C=O (R = Cy, Tos, Ph₃Sn), и изотиоцианатами R-N=C=S (R = All, Ph) и идентификации продуктов реакций спектральными ИК-, ЯМР- методами, а также РСА. Так, по реакции с циклогексилизоцианатом образуется биядерный карбонат-оксид:



Список литературы

- [1] Fedushkin I. L., Nikipelov A. S., Lyssenko K. A. // Journal of the American Chemical Society. 2010. T. 132, № 23. С. 7874-7875.
 [2] Fedushkin I. L., Skatova A. A., Dodonov V. A., Yang X.-J., Chudakova V. A., Piskunov A. V., Demeshko S., Baranov E. V. // Inorganic Chemistry. 2016. T. 55, № 17. С. 9047-9056.
 [3] Fedushkin I. L., Dodonov V., Skatova A., Sokolov V., Piskunov A., Fukin G. // Chemistry – A European Journal DOI:10.1002/chem.201704128.
 [4] Fedushkin I. L., Lukoyanov A. N., Tishkina A. N., Fukin G. K., Lyssenko K. A., Hummert M. // Chemistry – A European Journal. 2010. T. 16, № 25. С. 7563-7571.

Межмолекулярное гидрофосфинирование алкенов и алкинов
на комплексах двухвалентных лантаноидов и кальция

Лапшин И.В.¹, Басалов И.В.¹, Трифонов А.А.^{1,2}

¹Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева, Нижний Новгород,
Россия

²Институт элементоорганических соединений имени А. Н. Несмеянова,
Москва, Россия

E-mail: student.unn@gmail.ru

Реакции гидрофосфинирования непредельных субстратов, то есть присоединения связи Р–Н по кратной связи С–С, являются удобным и атом-экономным синтетическим методом получения фосфорорганических соединений, удовлетворяющим концепции зеленой химии.

В рамках исследований комплексов на основе редко- и щелочноземельных элементов в различных трансформациях непредельных субстратов, были разработаны и синтезированы новые амидные комплексы кальция, иттербия(II) и самария(II), содержащие карбеновые и фенолятные стабилизирующие лиганды. Полученные комплексы позволяют проводить гидрофосфинирование широкого ряда ненасыщенных субстратов, таких как пара-замещённые стиролы, 2-винилпиридин, 2,3-диметилбутadiен, стильбен, фенилацетилен и толан.

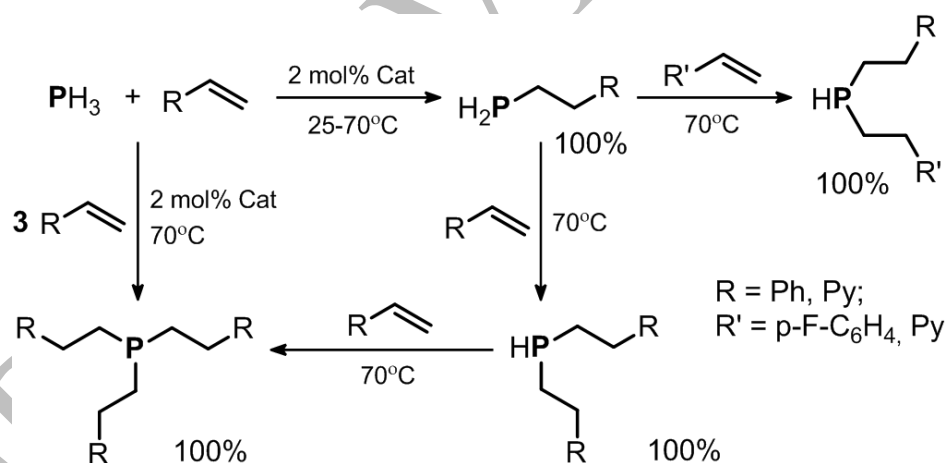


Рис. 1. Каталитическое алкилирование фосфина стиролами и 2-винилпиридином.

Осуществлен первый пример использования комплексов кальция, иттербия(II) и самария(II) в качестве катализаторов алкилирования фосфина (PH₃) стиролами различного строения и рядом других ненасыщенных субстратов (рис. 1). За счёт высокой хемоселективности каталитического процесса, последовательное алкилирование фосфина может быть использовано как удобный синтетический подход к получению несимметричных замещённых фосфинов, что и было продемонстрировано в работе.

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект №17-73-20262).

Синтез, строение дикротоната триметилсурьмы и введение его в полимерные материалы

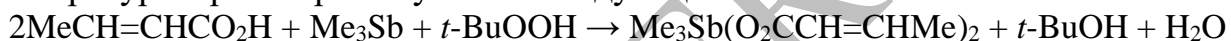
Лаханина Е.А., Малеева А.И., Гущин А.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

E-mail: liza-lakhanina@mail.ru

За последние годы возрос интерес к полимерам, содержащим в своем составе различные металлы. При этом можно отметить два основных направления: применение, связанное с улучшением каких-либо свойств полимеров и композиций на их основе, и использование, основанное на появлении новых свойств, обусловленных наличием металла в главной, или боковой полимерной цепи.

В данной работе получен дикротонат триметилсурьмы, введение которого в полимер может обеспечить высокое содержание металла с сохранением прозрачности. Его синтез проводился в отсутствие воздуха при комнатной температуре в растворе толуола по следующей схеме:



Температура плавления вещества 60-61°C, выход продукта 91%. Строение полученного продукта реакции исследовали методом ЯМР в дейтерохлороформе. В спектре ¹H-ЯМР имеются сигналы протонов в области сильного поля, подтверждающие наличие метильных групп в молекуле (δ=1.79-1.81 м.д. – протоны метильных групп в кротонатном остатке, δ=1.87 м.д. – протоны метильных групп, связанных с атомом сурьмы), а также присутствуют сигналы протонов при кратной связи (δ=5.70-5.75 м.д. и δ=6.71-6.80 м.д.).

С участием дикротоната триметилсурьмы были проведены реакции сополимеризации со стиролом и метилметакрилатом в соотношении 1:1 методом блочной полимеризации при 60°C в дегазированных запаянных ампулах с пероксидом бензоила (0.3% масс.) в качестве инициатора, с последующей дополимеризацией при 100°C. Оба полученных полимера являются мягкими и обладают хорошей растворимостью в органических растворителях, таких как хлороформ и тетрагидрофуран.

Для определения остаточного стирола и метилметакрилата была использована методика хроматографического определения остаточного мономера. Определение осуществляли методом ГЖХ на хроматографе Цвет-162 с пламенно-ионизационным детектором; колонка 0.3×300 см, 10% Reoplex-400 на Inerton AW 0.20-0.25мм; температура колонки 135°C (стирол) и 70 °C (ММА), испарителя 230°C, газ носитель – аргон. В качестве растворителей использованы CH₂Cl₂ и CHCl₃ соответственно. Установлено, что содержание остаточного мономера в полученном металлосодержащем полистироле составляет 1%, а степень конверсии для ПММА – 100%.

Синтез полиметилметакрилата с участием карбазолов в условиях Organocatalyzed ATRP

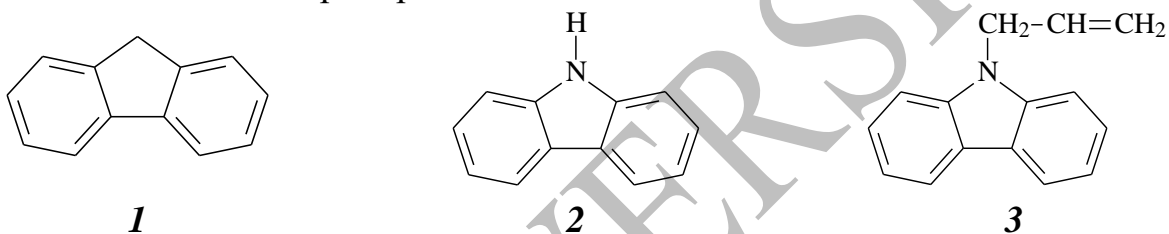
Лизякина О.С., Ваганова Л.Б., Гришин Д.Ф.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: oksana.94.02@mail.ru

Фотокаталитические радикальные реакции, благодаря своим неоспоримым преимуществам, успешно используются в синтетической органической химии [1]. Интенсивные исследования процессов полимеризации в условиях фотооблучения в последние несколько лет позволили выделить новое оригинальное направление в синтезе полимеров - *Organocatalyzed ATRP* [2].

В данной работе в качестве катализаторов полимеризации по схеме organocatalyzed ATRP апробированы соединения вида **1-3**.



Процессы проводили в условиях облучения светом УФ ($\lambda_{\text{max}} \sim 360$ нм) и видимой областей спектра. Инициаторами служили бромсодержащие (СВг₄, этил- α -бромизобутират, 1-фенил-1-этилбромид) и йодсодержащие соединения (йодбензол, йодистый цианизопропил и йодистый изоамил).

Установлено, что каждая из систем **1-3** / галогенорганическое соединение способна инициировать процесс полимеризации метилметакрилата (*ММА*) в условиях фотооблучения. Скорости процессов и молекулярно-массовые характеристики полиММА зависят от природы инициатора и катализатора, а также длины волны. Для броморганических производных соединения **2-3** в плане получения полимера с высокими выходами являются более эффективными катализаторами, чем **1**. При использовании йодорганических инициаторов удается получить лишь следовые количества полимера вне зависимости от **1-3** и условий реакции. Показано, что в случае использования систем **3** / броморганическое соединение выходы полиММА достигают $\sim 90\%$. При этом среднечисленная молекулярная масса полиММА линейно увеличивается с ростом конверсии мономера.

Таким образом, системы карбазол / галогенорганические соединения могут быть использованы для синтеза полиММА с заданными значениями молекулярных масс при фотооблучении.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 17-03-00498).

Список литературы

- [1] N.A. Romero, D.A. Nicewicz // *Chem. Rev.*, 2016, 116(17), 10075.
[2] M. Chen, M. Zhong, J.A. Johnson // *Chem. Rev.*, 2016, 116(17), 10167.

Синтез, определение индексов удерживания и характеристик сорбции сложных эфиров неопентилгликоля и кислот C₂-C₆

Лукина О.Д., Красных Е.Л.

Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

E-mail: olikhukinolik@yandex.ru

Неопентилгликоль (2,2-диметилпропан-1,3-диол) – двухатомный спирт, относящийся к типу многоатомных спиртов. Он используется в синтезе сложных полиэфиров, красок, смазок и пластификаторов. При использовании в производстве полиэфиров он повышает стабильность продукта в отношении тепла, света и воды. В результате реакции этерификации с жирными или карбоновыми кислотами могут быть получены синтетические смазочные эфиры с пониженным потенциалом для окисления или гидролиза по сравнению с природными эфирами.

Целью работы является синтез ряда сложных эфиров неопентилгликоля с органическими кислотами C₂-C₅, а так же определение индексов удерживания и характеристик сорбции. Синтез сложных эфиров проводили методом азеотропной этерификации при использовании бензола в качестве азеотропообразующего компонента. В качестве катализатора использовалась концентрированная ортофосфорная кислота (1% от реакционной массы). Мольное соотношение компонентов спирт:кислота = 1 : 4.

Очистка эфиров осуществлялась следующим образом: вакуумная отгонка избытка кислоты; нейтрализация остатков кислоты насыщенным раствором NaHCO₃: промывка дистиллированной водой. Далее эфирную фракцию подвергали вакуумной перегонке при температурах 110-150 °С в зависимости от структуры эфира. Чистота полученных сложных эфиров не менее 95% масс.

Анализ сложных эфиров проводили на хроматографе «Кристалл 2000М» с пламенно-ионизационным детектором на капиллярной колонке DB-1 100м × 0,2 мм × 0,52 мкм, газ носитель – гелий, температура колонки – 473-493К, температура испарителя 632К, температура детектора 573К.

Определение индексов удерживания проводили по стандартной методике, с использованием ряда алканов C₉-C₁₈ в диапазоне температур: 150 – 220 °С.

Расчет индексов удерживания проводили по формуле Ковача:

$$I = \frac{\lg(t'_x) - \lg(t'_z)}{\lg(t'_{z+1}) - \lg(t'_z)} \cdot 100n + 100N,$$

где N – число атомов углерода в молекуле n-алкана с меньшей молекулярной массой; n – разность чисел атомов углерода у двух n-алканов, между которыми расположено определяемое соединение, t'_x , t'_z , t'_{z+1} – исправленное время удерживания исследуемого соединения и n-алканов с числом атомов углерода z и z+1 соответственно.

Величины изменения внутренней энергии $\Delta_{\text{сорб}}\bar{U}$ (кДж/моль) и энтальпии $\Delta_{\text{сорб}}H$ (кДж/моль) сорбции при средней температуре эксперимента определяли из зависимостей:

$$\ln(k/T) = C - \frac{\Delta_{\text{сорб}}\bar{U}}{RT} \text{ и } \Delta_{\text{сорб}}H = \Delta_{\text{сорб}}\bar{U} - RT,$$

где R – универсальная газовая постоянная, k – фактор удерживания $k = \frac{t_R - t_M}{t_M}$.

Способы получения растворимых в водных средах композиций фталоцианината кобальта на основе водорастворимых полимеров

Макаревская Т.Ю., Печникова Н.Л., Агеева Т.А.

Ивановский государственный химико-технологический университет,

НИИ Макрогетероциклических соединений, Иваново, Россия

E-mail: ms.tatyana4@mail.ru

Полимерные композиции на основе фталоцианинов и их металлокомплексов являются перспективными функциональными материалами для медицины, фармакологии и технологии. Применение фталоцианинов ограничено их нерастворимостью в водных средах, поэтому задача создания водорастворимых комплексов на их основе является актуальной для проведения научных исследований. Нами были получены композиции фталоцианината кобальта на основе водорастворимых полимеров методами механохимической активации (МХА) и взаимодействия в водном растворе. Для увеличения растворимости композиционных материалов в воде и повышения их стабильности использовали ультразвуковое воздействие. В качестве водорастворимых полимеров были использованы карбоксиметилцеллюлоза (КМЦ) и поливинилпирролидон (ПВП). Содержание фталоцианината кобальта в полученных системах контролировали спектрофотометрически по электронным спектрам поглощения (ЭСП) приготовленных растворов.

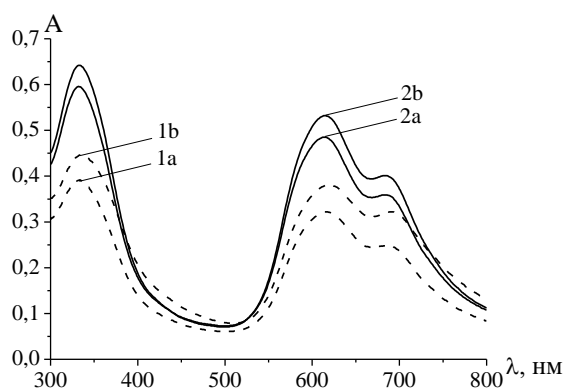


Рис. 1. ЭСП водных растворов полимерных композиций фталоцианината кобальта, полученных методом МХА на основе ПВП (1) и КМЦ (2) с массовой долей макроцикла в композите 0,5% (а) и 0,7% (б).

Было установлено, что при получении водных растворов композитов представленными способами наиболее подходящим полимером для приготовления водорастворимых композиций с кобальтовым комплексом фталоцианина, способных находиться в стабильном растворенном состоянии без выпадения макроцикла из раствора, является КМЦ. Также с ее использованием удалось получить стабильные водные растворы композиций с большим содержанием макроцикла в системе, чем при получении растворов аналогичными способами с ПВП (рис. 1.).

Работа выполнена при Финансовой поддержке гранта РФФИ (№15-03-07548).

Новые индолиновые спиропираны нафталинового ряда, содержащие гидроксильную группу в 2Н-хроменовом фрагменте

Малай В.И., Ожогин И.В., Лукьянов Б.С., Лукьянова М.Б.

НИИ физической и органической химии Южного федерального университета

Ростов-на-Дону, Россия

E-mail: vasya.1631@yandex.ru

В последнее время множество исследований было направлено на модификацию природных молекул с выраженным физиологическим действием фотохромными фрагментами, в том числе спиропирановыми. Такое решение открывает новые возможности в фотофармакологии - развивающейся отрасли биомедицины, в которой активация и дезактивация биоактивного вещества осуществляется при помощи света.

Ранее нами уже описывались индолиновые спиропираны нафталинового ряда, однако фотохромные характеристики описанных соединений нуждались в оптимизации [1]. Полученные нами новые индолиновые спиропираны содержащие гидроксильную группу в нафталиновом ядре, способны к связыванию, как через линкер, так и на прямую с биоактивным веществом.

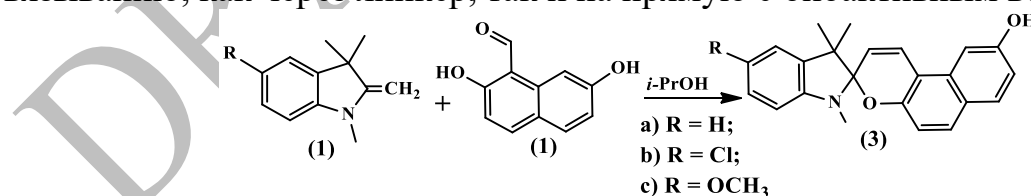


Рис. 1. Схема синтеза индолиновых спиропиранов 3а-с.

Синтез полученных соединений (3а-с) был осуществлен нами взаимодействием оснований Фишера (1) и 2,7-дигидроксиальдегида (2) в изопропиловом спирте. С помощью данных ЯМР ¹H была подтверждена структура полученных соединений в растворе при комнатной температуре.

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента Российской Федерации № МК-439.2017.3

Список литературы

- [1] Tyurin R.V., Lukyanov B.S., Chernyshev A.V., Malay V.I., Kozlenko A.S., Lukyanova M.B., Tkacheva N.S., Burov O.N., // *Doklady Chemistry*. – Pleiades Publishing. 2016. V. 470. №. 1. С. 268-273.
- [2] Zhang H., Wang C., Jiang T., Guo H., Wang G., Cai X., Yang L., Zhang Y., Yu H., Wang H., Jiang K., // *Analytical chemistry*. 2015. V. 87. №. 10. С. 5216-5222.

Синтез кротоната тетрафенилсурьмы

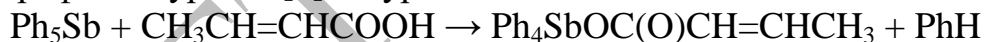
Малеева А.И., Гуцин А.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: AlevtinaMaleeva@mail.ru*

В последнее время сурьмаорганические соединения находят широкое применение в разнообразных областях научной и практической деятельности: в качестве лекарственных препаратов, как компоненты антиоксидантов, добавок к маслам, используются в качестве эффективных реагентов в тонком органическом синтезе для получения аллильных спиртов, альдегидов и кетонов, содержащих различные функциональные группы.

Цель работы является синтез и исследование метакрилатов тетраорганосурьмы и получение растворимого металлосодержащего оргстекла.

Синтез проводился по методике, применявшейся ранее для аналогичных ацилатов тетрафенилсурьмы [1] по уравнению:



В круглодонную колбу емкостью 100мл последовательно поместили 5 г (0.01 моль) пентафенилсурьмы, 17 мл толуола и 0.84 г (0.01 моль) кротоновой кислоты. Колбу заполнили аргоном и оставили при комнатной температуре на 7 дней. После этого жидкую часть отконденсировали в ловушку. Твердый остаток кротоната тетрафенилсурьмы перекристаллизовывали из системы гексан-хлороформ в объемном соотношении 3:1. Осадок отфильтровали на фильтре Шотта и промыли гексаном (3 раза по 5 мл). Получили 2.9 г подукта, $t_{\text{пл}}=121^\circ\text{C}$. Выход 64.5%.

Для изучения строения метакрилата тетрафенилсурьмы использовали ^1H -ЯМР и ИК спектроскопию.

^1H -ЯМР (400 МГц, CDCl_3): 7.65 (d, $J = 6.6$ Hz, 8H), 7.46 – 7.34 (m, 12H), 5.64 (d, $J = 15.4$ Hz, 2H), 1.70 (dd, $J = 6.8, 1.5$ Hz, 3H).

Таким образом, синтезировано новое производное кротонат тетрафенилсурьмы, строение которого исследовано ИК и ЯМР спектроскопией.

Список литературы

- [1] Кочешков К.А., Сколдинов А.П., Землянский Н.Н. Методы элементоорганической химии. Сурьма, висмут. М.: Наука, 1976. 483 с.

**Разработка депрессорной присадки к гидроочищенному
дизельному топливу**

Манина Ю.В., Симанская К.Ю., Павловская М.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: ms.simanskaya@mail.ru

В настоящее время на отечественных нефтеперерабатывающих заводах (НПЗ) для производства дизельных топлив (ДТ) применяются импортные дорогостоящие депрессорные присадки. Данные присадки являются дефицитной продукцией, так как эффективность присадок сильно зависит от состава и характеристик топлив. В связи с этим, НПЗ стараются располагать как можно более широким ассортиментом, из которого выбирают присадки, наилучшим образом подходящие к конкретному виду ДТ. Разработка отечественной депрессорной присадки, улучшающей низкотемпературные свойства современного гидроочищенного ДТ, является актуальной задачей.

В работе предложено использовать присадки на основе сополимеров акрилонитрила со стеарилметакрилатом (АН-СМА). Сополимеры получены в режиме контролируемой радикальной полимеризации с использованием бромида меди (I) в сочетании с азотсодержащим лигандом - трис[(2-пиридил)метил]амином. Установлено, что в присутствии присадки на основе СМА-АН в количестве 200-1600 ppm улучшаются низкотемпературные свойства дизельного топлива (табл.1).

Таблица 1. Низкотемпературные свойства дизельного топлива
(количество присадки 1600 ppm)

	ММ	Т застывания, °С	Т фильтруемости, °С
ДТ		-18	-12
ДТ+ ПСМА			
	13700	-21	-13
	65400	-23	-13
ДТ+П(СМА-АН)			
50/50*	15900	-23	-12
20/80*	15700	-26	-15

*соотношение СМА /АН в мономерной смеси (мол. %).

Наилучший депрессорный эффект наблюдается в случае введения в ДТ присадки на основе сополимера СМА-АН (20/80 мол. %) в количестве 1600 ppm.

Комплексы щелочноземельных металлов с редокс-активным α -дииминовым лигандом – новые катализаторы полимеризации циклических эфиров

Маркелова Е.С.¹, Морозов А.Г.²

¹Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

²Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: markelova@iomc.ras.ru

Полимеризация с раскрытием цикла лактидов, лактонов с использованием металлокомплексных катализаторов – один из наиболее эффективных способов получения биосовместимых полиэфиров [1]. Благодаря своим физико-механическим свойствам, а также гидролитической нестабильности данные полимеры находят широкое применение в медицине в качестве различных биорезорбируемых имплантов, шовного материала, систем таргетной доставки биологически активных веществ в организм [2, 3].

Настоящая работа посвящена исследованию каталитической активности комплексов магния и кальция с редокс-активным дииминовым лигандом 1,2-бис-[(2,6-диизопропил)фенилимино]аценафтенем (dpp-bian) в полимеризации лактида *L*-молочной кислоты в растворе.

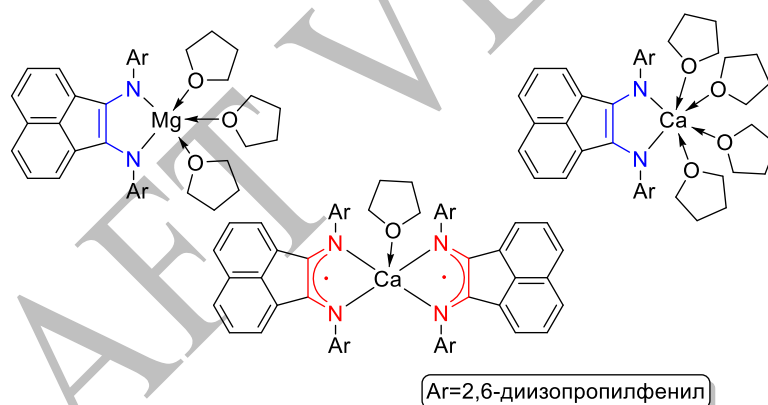


Схема 1. Комплексы щелочноземельных «биометаллов» на основе dpp-bian.

Показано влияние природы растворителя, а также центрального атома металла катализатора на молекулярно-массовые характеристики получаемого полимера. Предложен механизм образования и предполагаемое строение истинного катализатора раскрытия цикла лактида.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект 17-73-20356).

Список литературы

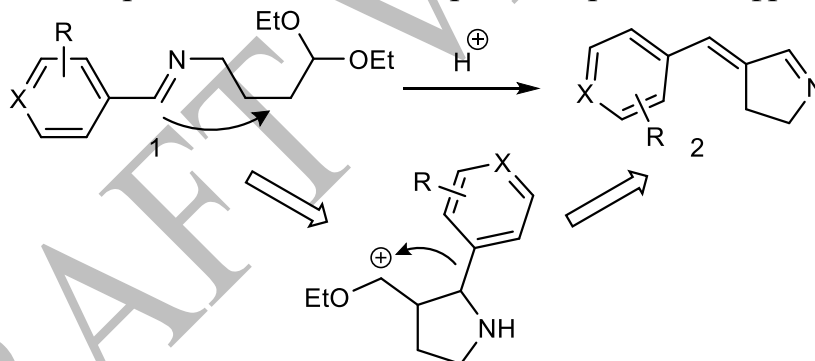
- [1] Bourissou D., Martin-Vaca B., Dechy-Cabaret O. // Chem. Rev. 2004. V. 104. P. 6147–6176.
 [2] Middleton J.C., Tipton, A.J. // Biomaterials. 2000. V. 21. P. 2335–2346.
 [3] Morozov A.G., Fedyushkin I.L., Aleinik D.Ya. // J. Appl. Chem. 2016. V. 89. No. 12. P. 2095–2101.

Необычная реакция в ряду N-(4,4-диэтоксибутил)иминов, приводящая к образованию 3-арилиден-1-пирролинов

Меляшова А.С., Смолобочкин А.В., Газизов А.С., Бурилов А.Р.

Институт органической и физической химии имени А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного учреждения науки "Федеральный исследовательский центр "Казанский научный центр Российской академии наук", Казань, Россия
E-mail: annamelyashova@yandex.ru

В настоящее время имины активно используются в органической химии в качестве удобной молекулярной платформы для получения широкого спектра различных классов соединений. Многие именные реакции включают в себя образование иминов в качестве одной из ключевых стадий. В нашей лаборатории ведутся систематические исследования производных 4,4-диэтоксибутил-1-амина. В частности, особый интерес привлекла реакция оснований Шиффа, полученных на основе этого амина. Нами было обнаружено, что N-(4,4-диэтоксибутил)-1-ариметанимины **1** в хлороформе в присутствии кислоты циклизируются до 3-арилиден-1-пирролинов **2**. Ключевыми стадиями этой реакции являются внутримолекулярная циклизация исходного ацетала по типу реакции Манниха и последующая необычная [1,3]-сигматропная перегруппировка, сопровождающаяся миграцией арильного фрагмента.



X=CH: R=H, 4-OMe, 4-Br, 4-Cl, 4-OH, 4-NO₂, 4-NMe₂, 3-F, 3-I, 2-OH, 2-OH-5-Cl
X=N: R=H

Также было изучено влияние заместителей различной природы в арильном фрагменте исходных ацеталей на их циклизацию. Показано, что введение донорных заместителей в *n*-положение арильного фрагмента значительно повышает выход целевого продукта **2**. Структура и состав полученных соединений была подтверждена рядом физических и физико-химических методов: ЯМР ¹H, ¹³C, ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии (ESI), элементным анализом. Структура некоторых 1-пирролинов установлена рентгеноструктурным анализом.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №16-13-10023).

**Стабилизация наночастиц серебра
протеолитическим ферментом химотрипсином**

Митусова К.А.¹, Плющенко А.В.^{1,2}, Боровикова Л.Н.², Киппер А.И.²,
Писарев О.А.^{1,2}

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

² Институт высокомолекулярных соединений Российской академии наук,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: mitusova.kseniya@mail.ru

Стабилизированные в водных растворах наночастицы металлов используются во многих отраслях промышленности и медицины.

Целью работы является изучение возможности стабилизации наночастиц серебра (Ag) в водных растворах в присутствии химотрипсина (ХТ) и исследование агрегативной стабильности наноконплексов Ag-ХТ.

Синтез наноконплексов Ag-ХТ осуществлялся в результате реакции восстановления азотнокислого серебра борогидридом натрия с образованием коллоидного Ag. Реакция проводилась в водной среде в присутствии ХТ при значении рН среды, равном изоточки ХТ (рН изоточки 7.2-8.0) при атмосферном давлении и температуре 4⁰С. Концентрации компонентов составляли C_{Ag} = 0.005 масс. % и C_{ХТ} = 0.1 масс. %.

Были изучены спектры поглощения и гидродинамические радиусы исследуемых наноконплексов. На спектрах поглощения Ag-ХТ наблюдался сдвиг пиков поглощения: гипсохромный с 280 нм до 275 нм (характеристический пик поглощения чистого ХТ соответствует 280 нм) и батохромный с 390 нм до 420 нм, соответствующий поглощению наночастицы Ag. Гипсохромный сдвиг обусловлен повышением энергии возбуждения электронов на атомах боковых групп ХТ вследствие взаимодействия с наночастицей. Батохромный сдвиг может быть связан как с изменением размера самой наночастицы Ag, так и с изменением ее формы, типа стабилизации и свойств окружающей жидкой среды [1]. Это свидетельствовало о межмолекулярном взаимодействии ХТ с наночастицами Ag.

Прослеживалась тенденция уменьшения гидродинамических радиусов наноконплекса во времени от 100 до 40 нм (табл.1), что указывало на продолжительное время формирования устойчивых по размерам структур и увеличение количества рассеивающих центров.

Таблица 1. Кинетика изменения гидродинамических радиусов наноконплекса Ag-ХТ.

Время	2 день	4 день	7 день	27 день
R _h , нм	100 ± 5	30 ± 2	26 ± 2	40 ± 3

Таким образом, введение ХТ в реакцию синтеза наночастиц Ag приводило к формированию агрегативно устойчивого комплекса наночастиц с ферментом.

Список литературы

[1] Yin Y., Li Z.-Y., Zhong Z., Gates B., Xia Y., Venkateswaran S. // Journal of Materials Chemistry. 2002. V. 12. P. 522–527.

Термодинамика взаимодействия сополимера на основе акриламида и калиевой соли акриловой кислоты с микрочастицами феррита стронция

Михневич Е.А., Сафронов А.П.

Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: emikhnevich93@gmail.com

В настоящее время большой интерес представляют полимерные полиэлектролитные гели, в связи с широкой возможностью их практического применения. Одной из перспективных областей применения полимерных композиций является получение магнитоуправляемых полиэлектролитных гелей, которые могут применяться для доставки лекарственных средств, целенаправленного переноса биологически активных соединений. Магнитоуправляемость таких материалов обеспечивается частицами магнитных наполнителей, распределяемых в полимерной матрице.

Целью данного исследования является синтез, а также изучение термодинамических и механических свойств наполненных полимерных гелей на основе сополимера акриламида с калиевой солью акриловой кислоты.

Первый этап работы заключался в синтезе наполненных магнитным материалом гелей. Базовой методикой синтеза была радикальная полимеризация в водном растворе смеси мономеров акриламида с калиевой солью акриловой кислоты концентрацией 2.7 М. Инициатором полимеризации служил персульфат аммония (ПСА), сшивающий агент – метилendiакриламид (МДАА). В качестве магнитного наполнителя использовали микродисперсный порошок феррита стронция ($\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$), образующийся в ходе твердофазного синтеза из оксида железа (Fe_2O_3) и оксида стронция (SrO) при температуре 1323 К. Содержание частиц магнитного наполнителя варьировалось от 20 до 160 (на 100 масс частей полимера).

Второй этап работы заключался в изучении термодинамических и механических свойств полученных гелей. Методом гравиметрии по сухому остатку после высушивания до постоянной массы при 353 К изучены степени набухания наполненных гелей; оценено влияние степени наполнения введенного магнитного наполнителя на степень набухания гелей. Методом изотермической калориметрии получены энтальпии взаимодействия наполнителя с полимерной матрицей. Для полученных гелей изучены зависимости модули Юнга от содержания наполнителя.

Функционализация даунорубицина с целью синтеза новых противораковых препаратов

Моисеева А.А.

Институт элементоорганических соединений РАН им. А.Н. Несмеянова,
Москва, Россия

E-mail: moiseevasasha@yandex.ru

Антрациклиновые антибиотики в настоящее время широко используются в терапии рака. Однако, высокая кардиотоксичность соединений и способность развития лекарственной резистентности к ним - это факторы, ограничивающие применение данного класса веществ.

Актуальной задачей является модификация по NH_2 -группе молекулы даунорубицина с целью получения новых производных с улучшенными свойствами, обладающих противоопухолевой активностью.

В настоящей работе введением в структуру антрациклина остатков спиртов, содержащих группы SF_5 и CF_3 , получены соединения **2-4**, а также методом одностадийного восстановительного аминирования синтезированы продукты **8-10** [1].

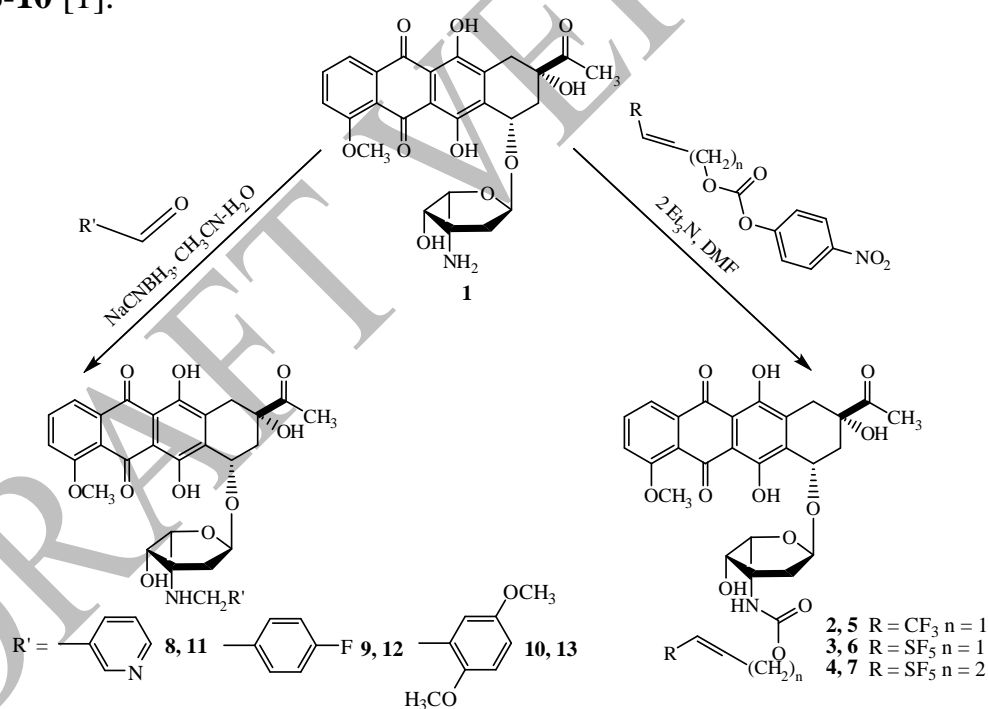


Рис. 1. Синтез новых производных даунорубицина.

Все новые производные даунорубицина были отданы на испытания противоопухолевой активности в ИФАВ РАН г. Черноголовка. Полученные результаты биологической активности обсуждаются.

Список литературы

[1] Артюшин О.И., Шарова Е.В., Виноградова Н.М., Генкина Г.К., Моисеева А.А. и др. // Журнал органической химии. 2017. № 87(6). С. 1051-1054.

Синтез блок-сополимера метилметакрилата и желатина в присутствии комплекса три-н-бутилбора с гексаметилендиамином

Морозова Е.А., Вавилова А.С.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: katrin_97_97@inbox.ru

На сегодняшний день большое внимание уделяется гибридным материалам на основе природных и синтетических сополимеров, поскольку они находят широкое применение во многих областях. Коллаген – природный полимер, обладающий рядом достоинств, а именно способностью к образованию комплексов с биологически активными веществами, высокой механической прочностью, и отсутствием канцерогенности и токсичности. Особый интерес представляют биоразлагаемые гибридные материалы на основе коллагена (или желатина).

Полимеризацию метилметакрилата в присутствии желатина и комплекса три-н-бутилбор-гексаметилендиамин осуществляли в водной суспензии при 60°C в токе аргона. Для связывания амина добавляли расчетное количество уксусной кислоты. Инициатор данного процесса – система три-н-бутилбор - кислород.

В результате полимеризации была получена водная суспензия белого цвета, содержащая мелкие шарики полиметилметакрилата. С ростом концентрации аминного комплекса три-н-бутилбора с 0,2 до 4 мол.% доля гомополимера уменьшается с 80 до 5 %. Соотношение мономера и желатина не оказывает влияние на конверсию мономера.

Также было установлено, что размер частиц продукта соответствует хорошо стабилизированной суспензии. Методом ИК-спектроскопии выявили, что суспензия содержит частицы, представляющие собой блок-сополимер полиметилметакрилата и желатина.

Предполагается, что процесс прививки носит радикальный характер. Радикалы, образующиеся при взаимодействии три-н-бутилбора с кислородом, отрывают атомы водорода от молекул желатина, генерируя активные центры, на которых осуществляется полимеризация метилметакрилата.

Изучение каталитической активности резината кобальта в электроосаждённых покрытиях

Морохина А.К., Беспалова Г.Н., Ларин А.Н., Агеева Т.А., Койфман О.И.,
Шабунин Е.К.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия*

E-mail: kraska@isuct.ru

В процессе эксплуатации изделия из металлов подвергаются коррозионному разрушению, что приводит к их преждевременному выходу из строя. Одним из эффективных способов защиты металлических изделий от коррозии является получение полимерных лакокрасочных покрытий методом электроосаждения.

В качестве объекта исследований была выбрана водоразбавляемая грунтовка ВКФ 093, одним из недостатков которой является высокая температура отверждения получаемых на ее основе покрытий (180 °С и выше). В качестве модификатора был опробован резинат кобальта, который, как известно, используется в качестве сиккатива в органорастворимых лакокрасочных материалах. Наличие в его составе поливалентного металла позволило предположить возможность снижения продолжительности структурирования пленок за счет ускорения окислительной полимеризации. Вместе с тем введение подобных соединений в водоразбавляемые композиции затруднено, поскольку может привести к утрате стабильности композиции и их работоспособности.

Изучение каталитической активности резината кобальта при отверждении электроосаждённых покрытий проводилось с использованием метода определения содержания гель G-фракции (G, %) покрытий в экстракторе Сокслета. Сравнительные результаты анализа представлены в таблице 1.

Таблица 1

Режимы отверждения		Содержание гель-фракции в покрытиях (в %), полученных из следующих композиций	
Температура, °С	Время, мин	Раствор ВКФ-093 без модификатора	Раствор ВКФ-093 + резинат кобальта $C_{Co(II)} = 0,015$ г/дл
180	10	51,1	69,0
	20	60,2	78,5
	30	69,0	82,8

Возрастание величины гель-фракции покрытий указывает на углубление процессов структурирования электроосаждённых плёнок. Поэтому использование резината кобальта в водных композициях для электроосаждения позволяет варьировать продолжительностью отверждения электроосаждённых пленок, а, следовательно, и снижать энергоёмкость их производства.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, соглашение № 14-23-00204.

Разработка и исследование олигомерных антипиренов с использованием местных сырьевых ресурсов и отходов производства

Мурзаев Р.К., Джалилов А.Т., Таджиходжаев З.А., Нуркулов Ф.Н.
 ГУП *Ташкентский научно-исследовательский институт химической технологии, Ташкент, Узбекистан*
 E-mail: nfayzulla@mail.ru

В проблеме пожарной безопасности древесных и полимерных композиционных материалов приоритетное значение имеют собственно огнезащитные средства и их взаимодействие с материалом, с достижением заданного уровня качества [1].

Синтезированы новые полифункциональные олигомерные антипирены марки ОР-200 и ОР-210, на основе кремнийсодержащих соединений, при совместном введении которых в олигомерные связующие наблюдается синергический эффект. Были изучены физико-химические характеристики олигомерного антипирена марок ОР-200, ОР-210, которые представлены в таблице.

Таблица. Физико-химические показатели олигомерного антипирена

Показатели	Олигомерный антипирен	
	ОР-200	ОР-210
Плотность, г/см ³ ГОСТ 15139-69	1,10	1,92
$\rho_{\text{хв}}$	0,077	0,082
Растворимость	Вода	
Внешний вид и цвет	Олигомерное вещество белого цвета	

Исследования огнезащитной эффективности проводились на деревянных элементах. Результаты исследования составов ОР-200 и ОР-210 показали, что в среднем потеря массы образца составила 4,9 и 6,5%, то есть огнезащитный состав обеспечивает I группу огнезащитной эффективности.

Исследования кислородного индекса композиции полиэтилена составляет КИ 28-49%.

Таким образом, доказана эффективность использования для наполнения полиэтиленов композиционными неорганическими наполнителями с фосфор-, серосодержащими олигомерными антипиренами в качестве огнезащитных средств древесных и полиолефиновых строительных материалов.

Список литературы

[1] Каблов В.Ф., Кейбал Н.А. Влияние волокнистых наполнителей на адгезионные и теплозащитные свойства эластомерных композиций // Известия ВГТУ. -2015. - № 7. -С 178–181.

**Получение ионообменного материала
на основе вторичных отходов полипропилена**

Мустакимов Р.А.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

E-mail: robmust@mail.ru

В настоящее время химическая модификация вторичных отходов полимерных материалов используется для создания эффективных защитных покрытий, получение ионообменных материалов, улучшении механических свойств композиционных материалов и т.д. [1]. Более того, химическое модифицирование поверхности - это перспективный метод переработки и рециклинга материалов, например, для получения гранулированных катионитов и анионитов.

Целью данной работы является разработка простого и доступного метода химического модифицирования поверхности вторичного дробленого полипропилена (вторичный полипропилен - ВПП) как метод создания ионообменного материала.

Модификация заключалась в предварительном окислении дробленого ВПП марки Н-350FF/3 с образованием гидроперекисных групп (ГП) и дальнейшей прививкой полиакриловой кислоты (ПАК) при температуре 70°C в атмосфере инертного газа в присутствии инициатора, характерного для водной среды – пероксида водорода [2].

В таблице 1 приведено значение статической обменной емкости (СОЕ) полученного ионообменного материала, которое определяли по ГОСТ 20255.1–89.

Таблица 1. Условия прививки ПАК к поверхности окисленных отходов ВПП.

№	Объект модифицирования	Реагент	Концентрация ГП-групп в исходном материале 10 ⁻³ моль/г	Привес, %	СОЕ привитых образцов, мг-экв/г
1	ВПП 350 белый Н-350FF/3	15% АК, H ₂ O ₂ /Fe ⁺²	4,2	14,8	2,0

Таким образом, установлено, что вторичные отходы полипропилена могут быть вовлечены в рециклинг материалов, например, для получения ионообменных материалов.

Список литературы

[1] Сирота А.Г. Модификация структуры и свойств полимеров. Л.: Химия, 1984. С. 121-123.

[2] Филимошкин А.Г., Воронин Н.И. Химические реакции полимеров полипропилена и полиэтилена. Томск: Издательство Томского университета, 1990. С. 340.

**Определение эффективности
4-гидрокси-2,2,6,6-тетраметил-4-пиперидин-1-оксида
в качестве ингибитора термополимеризации диеновых мономеров**

Мустафаева С.Э.¹, Трифонкина О.В.², Демидова Н.А.², Орлов Ю.Н.¹

¹Тольяттинский государственный университет

²ООО «СИБУР Тольятти»

E-mail: sabimus@bk.ru

Ингибирование полимеризации мономеров при их выделении и очистке является актуальной проблемой для нефтехимических производств. Для этой цели в производствах изопрена и бутадиена-1,3 ООО «СИБУР Тольятти» в последнее время применяется ингибитор ИПОН-11011, представляющий собой 20%-ный раствор стабильного иминоксильного радикала 2,2',6,6'-тетраметил-4-оксо-пиперидин-1-оксида в толуоле.

В работе была рассмотрена возможность применения в производстве альтернативных ингибиторов термополимеризации на основе 4-гидрокси-2,2,6,6-тетраметил-4-пиперидин-1-оксида и его смеси с 4-(2-октиламино)-дифениламино.

Для проведения исследований использовали изопрен-ректификат с содержанием основного вещества 99,3 мас. %, не содержащим перекисных соединений, и окисленный изопрен с содержанием перекисных соединений ~ 0,002 мас. %. Изопрен заливали в токе азота в стеклянные ампулы, предварительно продутые азотом. В каждую ампулу помещали стружку из углеродистой стали. Ампулы запаивали в токе азота и помещали в термостат, где выдерживали при заданной температуре. Через определенные промежутки времени ампулы вскрывали и определяли содержание термополимера по «сухому остатку».

Результаты исследований показали, что эффективность альтернативных ингибиторов термополимеризации при температуре 100 °С и дозировке в виде 20%-ных растворов 0,5 масс. % находится на уровне ингибитора ИПОН-11011 и составляет ~ 98 %. Повышение температуры до 120 °С снижает эффективность ингибитора на основе 4-гидрокси-2,2,6,6-тетраметил-4-пиперидин-1-оксида до 89 %, уменьшение дозировки до 0,25 мас. % - до 97%, присутствие перекисных соединений – до 82%. Эффективность ингибитора термополимеризации на основе смеси 4-гидрокси-2,2,6,6-тетраметил-4-пиперидин-1-оксида с 4-(2-октиламино)-дифениламино снижается до уровня ~ 60%, как при повышении температуры до 120 °С, так и уменьшении его дозировки в виде 20%-ного раствора до 0,25 мас. % и не зависит от присутствия перекисных соединений в мономере.

Влияние вулканизационных характеристик пероксидно-смоляной системы на свойства термопластичных вулканизатов на основе полиизопренового каучука и полипропилена

Насертдинова А.Д., Кашапова Л.Р., Алатырева О.В., Хусаинов А.Д.,
Вольфсон С.И.

*ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский
технологический университет», г. Казань
E-mail: alsu_danilovna@mail.ru*

Термопластичные эластомеры (ТПЭ) - это общее название различных по химическому составу материалов, имеющих некоторые общие свойства. Так, в условиях эксплуатации они, подобно резинам, способны к большим обратимым деформациям. Существенным отличием ТПЭ от традиционных резин является их способность при повышенных температурах приобретать текучесть, подобно термопластам. Это обуславливает возможность использования для их переработки методов применяемых при переработке термопластов, а также способностью перерабатываться в изделия на высокоскоростном и высокоавтоматизированном оборудовании, возможностью многократной переработки, отсутствием отходов при изготовлении изделий и исключением стадии вулканизации из технологической схемы процесса являются основными преимуществами ТПЭ по сравнению с традиционными резинами.

Целью настоящей работы является изучение вулканизационных характеристик пероксидно-смоляной системы на свойства термопластичных вулканизатов полученных на основе полиизопренового каучука (СКИ-3) и полипропилена (ПП).

Одной из важнейших задач при выборе вулканизирующих систем и соагентов вулканизации для ТПВ является обеспечение их хорошими технологическими свойствами при переработке и высокие упруго-прочностные показатели вулканизатов.

В связи с этим представлялось необходимым изучить влияние пероксидно-смоляной вулканизирующей системы на свойства ТПВ полученных на основе СКИ-3 и ПП. В качестве вулканизирующих агентов использовали пероксид марки Luperox- 40F и смолу марки SP- 1045.

Для определения оптимального содержания вулканизирующего агента в первую очередь проводились исследования вулканизационных характеристик резиновых смесей с последующим исследованием вулканизационных характеристик при получении ТПВ.

Анализ вулканизационных, физико-механических и технологических свойств ТПВ показал, что композиция с использованием пероксидно-смоляной вулканизирующей системы содержащей 4 мас.ч. пероксида и 4 мас.ч. смолы обладают наиболее оптимальным периодом времени вулканизации и упруго-прочностными свойствами.

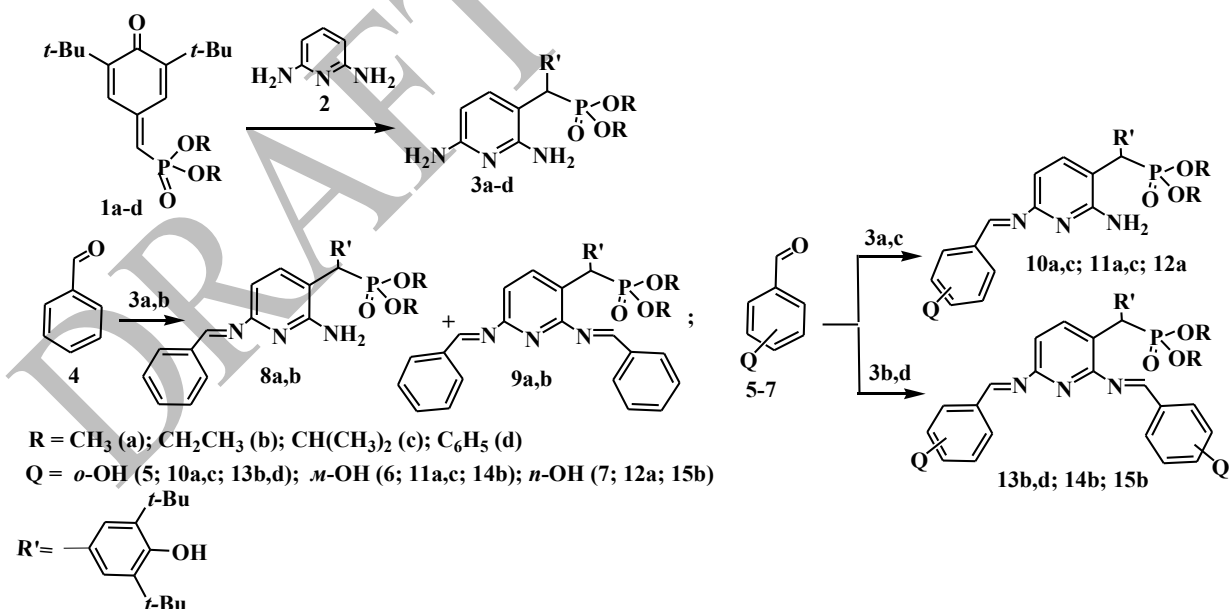
Реакции α -фосфорилированных
2,6-ди-*tert*-бутил-4-метилен-2,5-циклогексадиенонов
с 2,6-диаминопиридином. Синтез и свойства

Нгуен Тхи Тху¹, Гибадуллина Э.М.², Бурилов А.Р.²

¹Казанский Национальный Исследовательский Технологический Университет,
Казань, Россия

²ИОФХ им. А.Е.Арбузова – обособленное структурное подразделение
ФИЦ КазНц РАН, Казань, Россия
E-mail: nguenthithu202@mail.ru

Производные пространственно-затрудненных фенолов, содержащие фосфорильные группы представляют собой биологически активные вещества, способные снижать окислительный стресс организма и обладающие низкой токсичностью. Целью данной работы является синтез новых α -функциональнозамещенных фосфорилированных пространственно-затрудненных фенолов, и изучение их свойств. Нами были исследованы реакции α -фосфорилированных метиленхинонов **1a-d** с 2,6-диаминопиридином **2**, в результате получены производные 2,6-диаминопиридина со свободными аминогруппами, содержащие в ядре пространственно-затрудненный бензилфосфонатный фрагмент **3a-d**. Взаимодействием полученных производных 2,6-диаминопиридина с бензальдегидом или *o*-, *m*-, *p*-гидроксибензальдегидами синтезированы моноимины **10a,c**; **11a,c**; **12a** и диимины **13b,d**; **14b**; **15b**.



Строение всех синтезированных соединений доказано методами ЯМР ¹H, ¹³C, ³¹P, ИК-спектроскопии, масс-спектрометрией (MALDI), состав подтвержден данными элементного анализа.

**Реологические свойства смесей на основе целлюлозы
и полиуретанового каучука**

Невестенко М.А., Чернышова Е.Б., Тужиков О.И.
Волгоградский государственный технический университет
Волгоград, Россия
E-mail: nevestenkoma@gmail.com

Среди наиболее известных способов создания полимер-полимерных композиций, обладающих способностью к биологическому разложению под действием ферментов, выделяется, благодаря эффективности и экономичности, непосредственное смешение синтетических и природных полимеров. При этом представляется возможным максимальное использование свойств каждого из полимерных компонентов. Особый интерес в данной сфере представляют полимеры природного происхождения – воспроизводящиеся полисахариды, а именно целлюлоза и ее производные [1].

В данной работе рассматриваются реологические свойства растворов на основе целлюлозы (Ц), полиуретанового каучука (ПУ) и их смеси. В качестве прямого растворителя использовалась бинарная система N-метилморфолин N-оксид (NMMO) – диметилсульфоксид (ДМСО). Вискозиметрический анализ проводился на приборе Brookfield DV-ITRV. Шпиндель модели CPA-40Z. Вязкость образцов была измерена при температурах 30, 35, 40, 45 и 50 °С.

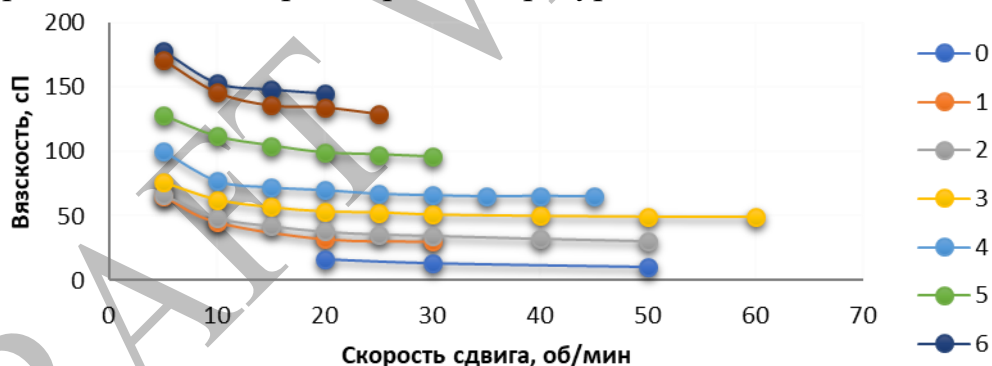


Рисунок 1. Зависимость вязкости от скорости сдвига при 30°C.:

0 – растворитель; 1 – раствор Ц; 2 – смесь 80% Ц 20% ПУ; 3 – смесь 60% Ц 40% ПУ; 4 – смесь 50% Ц 50% ПУ; 5 – смесь 40% Ц 60% ПУ; 6 – смесь 80% Ц 20% ПУ; 7 – раствор ПУ

С увеличением температуры до 50°C вязкость образцов уменьшается, однако характер зависимостей реологических свойств аналогичен рис. 1. Предположительно, образец 6 обладает большей вязкостью, чем 7 ввиду межмолекулярных взаимодействий, проявляющихся при малом количестве вводимого ПУ.

Список литературы

[1] Азаров В.И. Химия древесины и синтетических полимеров. СПб.: Лань, 2010, 619 с.

**Изучение процесса гидрирования нитроаренов при катализе никелем,
нанесенным на цеолит**

Нищик Е.В., Мохов В.М.

Волгоградский государственный технический университет,

Волгоград, Россия

E-mail: tons@vstu.ru

Процесс восстановления нитроаренов позволяет получать такие важные продукты органического синтеза как анилин и его производные.

Ранее осуществлялись реакции восстановления нитроаренов в жидкой фазе гидразингидратом при катализе наночастицами никеля в виде коллоидного раствора [1]. Однако гидразингидрат не является промышленным восстановителем.

Проведение реакции восстановления нитроаренов водородом в газовой фазе позволяет проводить процесс непрерывно и при этом соблюдать точное соотношение водорода и нитроарена.

В качестве носителя для наночастиц никеля был использован цеолит NaX. Частицы никеля наносились на данный носитель согласно методике [2].

В качестве нитроаренов были использованы нитробензол, 2- и 4-нитротолуолы. Выходы производных анилина достигали 98%. Изучено влияние на выход и селективность реакции температуры, мольного соотношения нитроарен:водород, условного времени контакта.

Таким образом, катализ процесса гидрирования нитроаренов никелем нанесенным на цеолит позволяет получить выход продукта, близкий к выходу, который получается при использовании промышленных катализаторов.

Список литературы

[1] Коллоидные и наноразмерные катализаторы в органическом синтезе. IV. Восстановление нитроаренов гидразингидратом при катализе наночастицами металлов / В. М. Мохов, Ю. В. Попов, Д. Н. Небыков // Журнал общей химии. - 2014. - Т. 84, вып. 8. - С. 1289-1292.

[2] Коллоидные и наноразмерные катализаторы в органическом синтезе XVI.[2] Непрерывное гидрирование карбонитрилов при катализе наночастицами никеля, нанесенными на подложку / Попов Ю.В., Мохов В.М., Латышова С.Е., Небыков Д.Н., Панов А.О., Плетнева М.Ю. // Журнал общей химии. - 2017. - Т. 87, вып. 10. - С. 1616-1621.

Восстановительное алкилирование карбонильных соединений нитроаренами при катализе никелем, нанесенным на цеолит

Нищик Е.В., Мохов В.М., Ширханян П.М.

Волгоградский государственный технический университет,

Волгоград, Россия

E-mail: tons@vstu.ru

Известные методы проведения реакции восстановительного аминирования альдегидов нитроаренами, осложнены либо использованием дорогостоящих и труднодоступных катализаторов, либо применением высоких давлений и температур. Например, на наноструктурированном железнооксидном катализаторе, нанесенном на углеродную подложку процесс проводился с высоким выходом продуктов при 50-70 атм и 170⁰С за 24 часа [1]. Нанонити платины позволяют осуществить восстановительное аминирование карбонильных соединений нитроаренами с выходом продуктов до 99% [2].

Для осуществления данной реакции нами был использован доступный катализатор, представляющий собой наночастицы никеля, нанесенные на цеолит NaX. Частицы никеля наносились на данный носитель согласно методике [3].

В качестве карбонильных соединений были использованы пропаналь, циклогексанон, фурфурол и другие соединения. Реакции проводились при атмосферном давлении и сопровождались высоким выходом N-алкиланилинов. Было изучено влияние на выход и селективность реакции температуры, мольного соотношения нитроарен:водород и нитроарен:карбонильное соединение.

Таким образом, катализ процесса восстановительного алкилирования карбонильных соединений нитроаренами никелем, нанесенным на цеолит позволяет получить высокий выход продукта в достаточно мягких условиях на доступном катализаторе.

Список литературы

[1] Tobias Stemmler, Annette-Enrika Surkus, Marga-Martina Pohl, Kathrin Junge, Matthias Beller // ChemSusChem 2014, 7, 3012 – 3016. DOI : 10.1002/cssc.201402413

[2] Lei Hu, Xueqin Cao, Danhua Ge, Haiyan Hong, Zhiqiang Guo, Liang Chen, Xuhui Sun, Jianxin Tang, Junwei Zheng, Jianmei Lu, Hongwei Gu // Chem. Eur. J. 2011, 17, 14283 – 14287

[3] Коллоидные и наноразмерные катализаторы в органическом синтезе XVI.[2] Непрерывное гидрирование карбонитрилов при катализе наночастицами никеля, нанесенными на подложку / Попов Ю.В., Мохов В.М., Латышова С.Е., Небыков Д.Н., Панов А.О., Плетнева М.Ю. // Журнал общей химии. - 2017. - Т. 87, вып. 10. - С. 1616-1621.

Синтез и ИК - спектроскопического исследования серосодержащего олигомера

Нормуродов Б.А.¹, Тожиев П.Ж.¹, Тураев Х.Х.¹,
Нуркулов Ф.Н.², Джалилов А.Т.²

¹Термезский государственный университет, Термез, Узбекистан

²ГУП Ташкентский научно-исследовательский институт химической технологии, Ташкент, Узбекистан

E-mail: sh_kasimov@rambler.ru

Элементная сера в чистом виде не используется в производстве строительных материалов из-за своей хрупкости. Состояние отраслей производства и использования серы подробно исследовано автором и опубликовано в ряде доступных работ.

Для синтеза серосодержащего олигомера в качестве исходного компонента использовали раствор тетрасульфида натрия, эпихлоргидрина и сульфид фосфора (V). Процесс синтеза проводили в течение 1-1,5 час с перемешиванием исходных компонентов в мольных соотношениях 1:1:0,5 соответственно, при 90-100 °С, с повышением температуры. Полученный продукт представляет собой каучукоподобные серые осадки. Исследовали методом ИК - спектроскопического анализа (рис.).

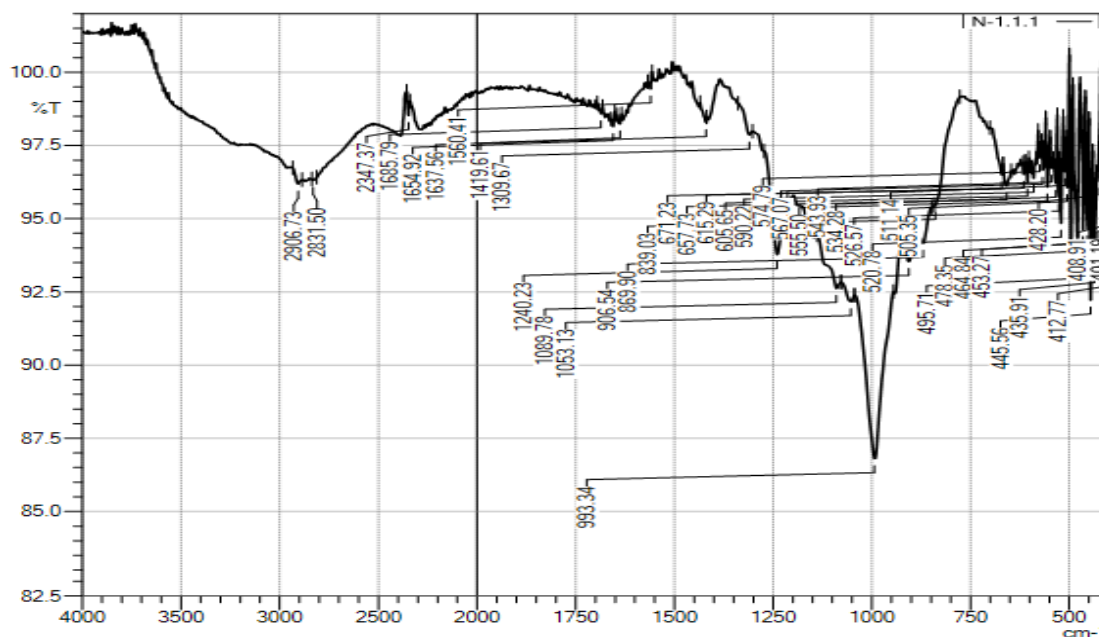


Рис. ИК - спектр полученного серосодержащего олигомера.

Из рисунка видно, что частоты поглощения связи $\text{CH}_2\text{-S-S}$ соответствуют 1240 см^{-1} , C-S $700\text{-}600\text{ см}^{-1}$, S-S наблюдается в области $500\text{-}400\text{ см}^{-1}$, частота деформационного колебания связи полисульфида наблюдается в области $478, 495\text{ см}^{-1}$.

Синтез бензизоксазолов путем внутримолекулярной циклизации орто-замещенных арилазидов.

Одинокоев А.В., Будруев А.В., Пронина А.Л.

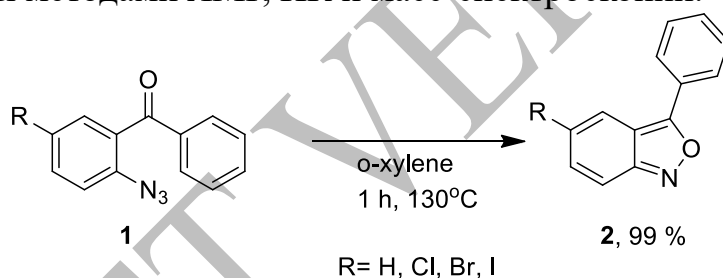
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: odinokov-1992@mail.ru

В последнее время все большее значение приобретают реакции прямого построения связи N-O. Известно о различных каталитических подходах построения данной связи, однако, с учетом стоимости и экологических проблем, вызванных использованием металлов, приоритетным является направление прямого формирования связи N-O.

В настоящей работе была проведена реакция внутримолекулярной циклизации 2-азидобензофенона (1) и его производных с образованием соответствующих бензизоксазолов (2). Были подобраны оптимальные условия проведения реакции, и выделены соответствующие продукты с высокими выходами. Структурные свойства полученных соединений были охарактеризованы методами ЯМР, ИК и масс-спектрологии.



Селективность сорбции холестерина из плазмы крови гранульными органо-неорганическими поверхностно импринтированными сорбентами

Осипенко А.А.², Полякова И.В.², Боровикова Л.Н.², Писарев О.А.^{1,2}

¹ *Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт Петербург, Россия*

² *Институт высокомолекулярных соединений Российской академии наук,
Санкт Петербург, Россия*

E-mail: osipeno4kalex@mail.ru

Эффективное снижение в крови уровня холестерина и его эфирных соединений (триглицеридов и липопротеидов низкой плотности) у больных семейной гиперхолестеринемией достигается путем эфферентной терапии[1]. Альтернативой дорогостоящим иммуноаффинным сорбентам, используемым для ЛПНП-афереза, могут стать молекулярно импринтированные полимеры (МИПы) – сорбенты, имитирующие природные рецепторы [2,3].

С целью создания сорбентов для селективной сорбции холестерина из крови и плазмы крови были синтезированы и исследованы физико-химические и сорбционные свойства новых гранульных органо-неорганических сорбентов поверхностно импринтированных молекулами холестерина. Синтез осуществлялся в сложных эмульсиях Пикеринга путем сополимеризации 2-гидроксиэтилметакрилата с диметакрилатом этиленгликоля на поверхности наночастиц селена, стабилизированных поливинилпирролидоном. При исследовании равновесной сорбции общего холестерина из плазмы крови больного СГХ *in vitro* емкости сорбции на МИПе возрастали по сравнению с его неимпринтированным аналогом – контрольным полимером (КП). При этом изменение плазмы после сорбции на МИПе в области поглощения триглицеридов и эфиров ХС были больше, чем на КП. В целом же, в других областях поглощения спектр плазмы после МИПа был по составу более близок к начальному спектру, чем после сорбции на КП. Таким образом, в условиях высокой конкуренции селективная сорбция холестерина на импринтированном сорбенте реализуется в результате специфического связывания сорбата с импринт-сайтами, имеющими более высокое термодинамическое сродство к холестерину.

Список литературы

- [1] Seidel D., Armstrong V.W., Schuff-Werner P. // J. Clin. Invest. 1991. V. 21. № 4. p. 375–383.
 [2] Gore M.A., Karmalkar R.N, Kulkarni M.G. // J. Chromatogr. B. 2004. V. 804 № 4 P. 211–221.
 [3] Polyakova I., Borovikova L., Osipenko A., Vlasova E., Volchek B., Pisarev O. // Reactive and Functional Polymers. 2016. V. 109. № 1. P. 88–98.

Создание гибридных агентов фотодинамической терапии на основе метилфторбида-а и 4-ариламинохиназолинов

Отвагин В.Ф.¹, Нючев А.В.¹, Кузьмина Н.С.¹, Койфман О.И.², Федоров А.Ю.¹

¹Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
 Нижний Новгород

²НИИ химии макрогетероциклических соединений, Иваново, Россия

E-mail: votvagin@yandex.ru

Разработана стратегия синтеза гибридных фотоактивных конъюгатов, содержащих в своём составе фрагменты диметилхлорина-*e*₆ и 4-ариламинохиназолина [1]. Предлагаемая схема синтеза позволяет получать конъюгаты, содержащие в своём составе различное количество порфириновых и хиназолиновых фрагментов (рис.1.). Для синтезированных молекул были определены основные фотофизические характеристики и исследована биологическая активность на различных клеточных опухолевых линиях.

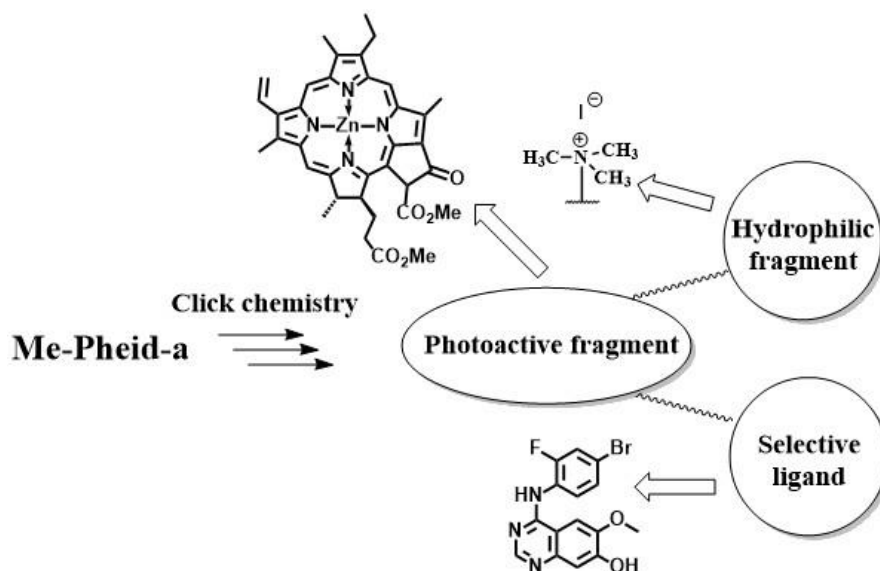


Рис.1.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-03-00464 А).

Список литературы

[1] A.V. Nyuchev, V.F. Otvagin, A.E. Gavryushin, Y.I. Romanenko, O.I. Koifman, D.V. Belykh, H.-G. Schmalz, A.Yu. Fedorov. Synthesis of chlorin-(arylamino)quinazoline hybrids as models for multifunctional drug development. *Synthesis*, 2015, 47, 3717–3726.

S-алкилирование 2-тиобарбитуровой кислоты

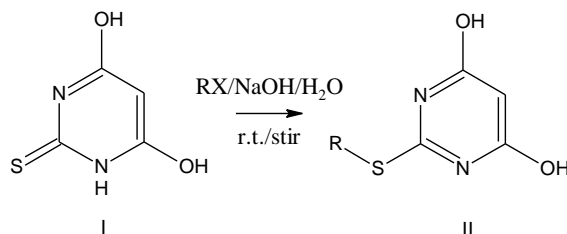
Офицерова Е.С., Шкляренко А.А., Яковлев И.П.

Санкт-Петербургская государственная химико-фармацевтическая академия,
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: OfizerovaES@mail.ru

Особый интерес для современной медицинской химии представляют производные 2-тиобарбитуровой кислоты, которые на протяжении долгих лет используются в качестве анестетиков. В последнее время идет изучение противогрибковых свойств данных соединений [1].

Одним из основных способов синтеза является алкилирование атома серы в молекуле 2-тиобарбитуровой кислоты (схема 1). В качестве растворителей для проведения процесса используют диметилформамид, спирт этиловый. Нами было проведено алкилирование 2-тиобарбитуровой кислоты йодистым метилом в воде в присутствии гидроксида натрия. Полученная натриевая соль взаимодействует с молекулой алкилирующего агента. Реакция протекает при комнатной температуре в течение 16 часов при интенсивном перемешивании образующейся в момент смешивания исходных реагентов эмульсии с выходом 82 %. В результате образуется мелкокристаллический белый осадок белого

цвета со специфическим запахом. Аналогично было проведено алкилирование 2-тиобарбитуровой кислоты 1-хлорметилнафталином, этилбромацетатом, бутилхлоридом. Как и в случае с йодистым метилом реакция протекает при комнатной температуре. Выход составляет 65-80 %.



R= CH₃; C₄H₉; EtOCOCH₂; naphthylmethyl.

X= J, Br, Cl.

Схема 1. S-алкилирование 2-тиобарбитуровой кислоты.

Список литературы

- [1] Kidwai M., Thakur R., Mohan R. // Acta Chim. Slov. 2005. V. 52. P. 88.

Синтез новых металлакарборанов рутения(II) с ди- и трифосфиновыми лигандами

Пенкаль А.М., Захаров А.А., Гришин И.Д.

Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского,

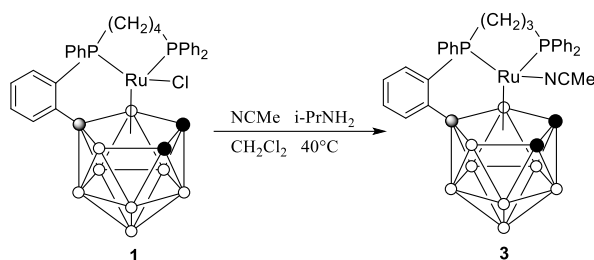
Нижний Новгород, Россия

E-mail: asya669pn@gmail.com

Интерес к химии металлакарборанов, интенсивно развивающейся в последние годы обусловлен не только необычным строением рассматриваемых кластеров, построенных за счет образования неклассических многоцентровых связей, но и широкими перспективами применения в различных областях химии, катализа и медицины. Несмотря на обширный материал по синтезу карборановых комплексов рутения (III), их двухвалентные аналоги, к настоящему времени практически не исследованы.

В данной работе представлен синтез новых металлакарборанов рутения (II), содержащих в своей структуре хелатные ди- или трифосфины, а также ацетонитрил в качестве лигандов, стабилизирующих атом металла.

В качестве исходных соединений для синтеза комплексов Ru(II) были использованы парамагнитные карборановые комплексы трехвалентного рутения. Взаимодействие указанных комплексов с изопропиламином в смеси растворителей хлористый метилен – ацетонитрил при 40°C приводило к образованию новых соединений с выходами от 60 до 80%. Новые металлакарбораны выделены в виде ярко-желтых кристаллических веществ.



Показано, что взаимодействие известного *экзо-нидо*-5,6,10-[RuCl(PPh₃)₂]-5,6,10-(μ-H)₃-10-H-7,8-C₂B₉N₈ с трис(дифенилфосфино)метаном или трис(дифенилфосфино)этаном в среде толуола приводит к образованию соответствующих трифосфиновых комплексов рутения.

Чистота полученных продуктов подтверждена методом ВЭЖХ. Строение новых комплексов было подтверждено методами спектроскопии ЯМР на ядрах водорода и фосфора, а также ИК-спектроскопией, времяпролетной масс-спектрометрией и рентгеноструктурного анализа.

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента Российской Федерации (проект № МК-1142.2017.3).

Изучение реакции амидирования *мезо*-арилзамещенных порфиринов

Петрова Д.В., Семейкин А.С.

Ивановский государственный химико-технологический университет

Иваново, Россия

E-mail: dar.isuct@yandex.ru

В процессе работы нами изучены методы ацилирования хлорангидридов тетрасульфокислоты тетрафенилпорфина и тетракарбоновой кислоты тетрафенилпорфина первичными и вторичными аминами. Исходные хлорангидриды были синтезированы либо сульфохлорированием тетрафенилпорфина хлорсульфоновой к-той (тетракис(4-хлорсульфонил-фенил)порфин), либо взаимодействием кислоты (тетра(4-карбоксифенил)-порфина) или соли (аммонийная соль тетракис(4-сульфонилфенил)порфина) с тионилхлоридом:

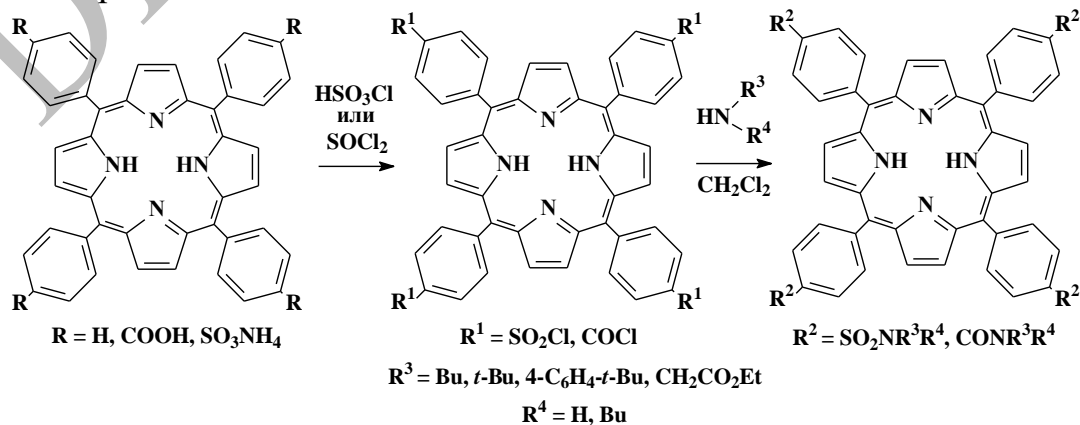


Таблица. Сульфоамидирование и амидирование порфиринов.

Структура исходного порфирина (R)	Амин	Условия реакции	Выход продукта
H	<i>t</i> -BuNH ₂	1. HSO ₃ Cl, 90° C; 2. <i>t</i> -BuNH ₂ , CH ₂ Cl ₂	3,8%
SO ₃ NH ₄	<i>t</i> -BuNH ₂	1. SOCl ₂ ; 2. <i>t</i> -BuNH ₂ , CH ₂ Cl ₂	6,1%
SO ₃ NH ₄	Bu ₂ NH	1. SOCl ₂ ; 2. Амин, CH ₂ Cl ₂	29,3%
H	4- <i>t</i> -BuC ₆ H ₄ NH ₂	1. HSO ₃ Cl, 90° C; 2. Амин, CH ₂ Cl ₂	Следы
SO ₃ NH ₄	4- <i>t</i> -BuC ₆ H ₄ NH ₂	1. SOCl ₂ ; 2. Амин, CH ₂ Cl ₂	12,8%
SO ₃ NH ₄	EtO ₂ CCH ₂ NH ₃ Cl	1. SOCl ₂ ; 2. Амин, N(C ₂ H ₅) ₃ , CH ₂ Cl ₂	Следы
COOH	EtO ₂ CCH ₂ NH ₃ Cl	1. SOCl ₂ ; 2. Амин, N(C ₂ H ₅) ₃ , CH ₂ Cl ₂	18%

Установлено, что синтез хлорангирида из аммонийной соли сульфобензил порфирина под действием тионилхлорида, приводит к более высокому выходу амида на второй стадии, в то время как хлорсульфирование тетрафенилпорфина хлорсульфоновой кислотой, с последующим амидированием, не дает такого эффекта.

Структура полученных соединений и исходных веществ доказана спектральными методами (¹H ЯМР, ИК, ЭСП и масс-спектрометрия), чистота и индивидуальность охарактеризована данными ТСХ и элементного анализа.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства образования и науки РФ № 4.7305.2017/8.9.

Получение новых производных оксазолидинов, содержащих в своем составе (η⁶-фенил)хромтрикарбонильные группы

Печень Н.А., Сазонова Е.В., Гришина Н.Ю., Артемов А.Н.
 Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
 Нижний Новгород, России
 E-mail: pechennataliya@gmail.com

Оксазолидины представляют собой интересный класс соединений как в научном плане, так и ввиду обширных возможностей их использования. Они входят в состав препаратов, обладающих различными видами биологической активности, кроме того они представляют собой прекурсоры для построения углеводородного скелета разнообразных органических соединений. Целью настоящей работы явилось получение новых представителей этого класса гетероциклов, содержащих группу Cr(CO)₃, с помощью реакции конденсации β-замещенных аминоспиртов и альдегидов (рис. 1), а также реакции координации с триаминхромтрикарбонильным комплексом (рис. 2). Для получения оксазолидинов, содержащих хромтрикарбонильную группу во 2 положении гетероцикла, по реакции координации мы использовали N-Вос-защищенные оксазолидины.

Рис.1

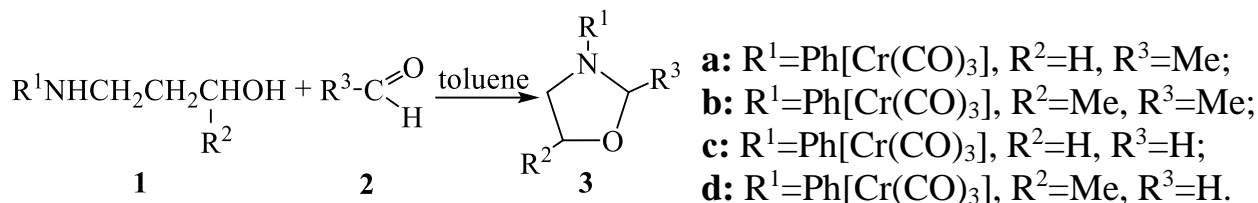
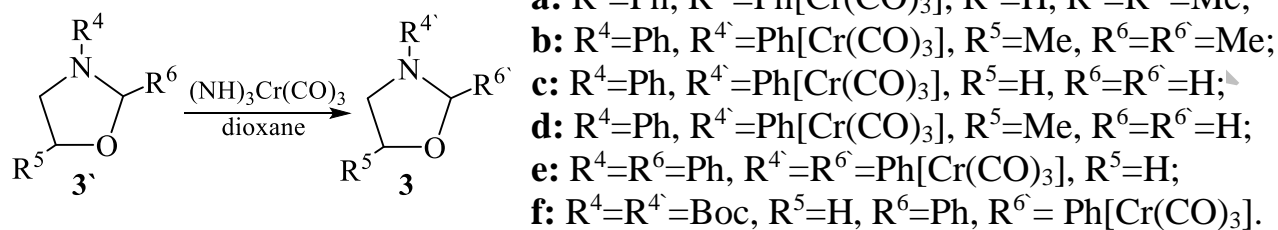


Рис. 2



Полученные оксазолидины (3) были выделены и очищены с помощью метода колоночной хроматографии и перекристаллизации из смеси гексан-этилацетат, после чего они были охарактеризованы методами ВЭЖХ, УФ-, ИК-, ^1H ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии и методом РСА.

Трисалкильные комплексы редкоземельных элементов, содержащие активную М-С связь. Синтез, строение и изучение каталитической активности

Планкин Г.С.¹, Селихов А.Н.¹, Трифонов А.А.^{1,2}

¹Институт металлоорганической химии им. Г.А.Разуваева,
Нижний Новгород, Россия

²Институт элементоорганических соединений им. Н.А. Несмеянова,
Москва, Россия

E-mail: g_krik@mail.ru

Работа направлена на поиск путей стабилизации алкильных производных РЗЭ, а также исследование факторов, оказывающих решающее влияние на свойства комплексов. В качестве альтернативы стандартным алкильным лигандам, широко используемым в химии РЗЭ, нами были предложены объемные третбутилзамещенные дифенилметанидные группы.

По реакции обмена между р,р-дитретбутилдифенилметанидом натрия (NaTBDM) и LnCl_3 ($\text{Ln} = \text{Y}, \text{Nd}, \text{Ce}, \text{La}$) образуются гомолептические трисалкильные комплексы, не содержащие в своем составе координированных оснований Льюиса.

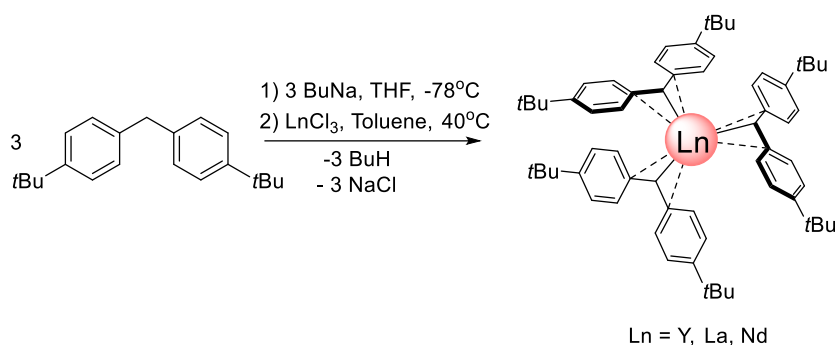


Схема 1. Синтез комплексов.



Рис. 1. Кристаллическое строение комплексов.

Все синтезированные комплексы продемонстрировали высокую термическую стабильность, вызванную делокализацией отрицательного заряда карбанионных фрагментов за счет сопряжения с π -ароматической системой фенильных колец. Алкильные производные Ln^{III} (Ln = Nd, La) в составе трех- и двухкомпонентных каталитических систем проявляют высокую активность в полимеризации изопрена, а также они позволяют проводить гидрофосфинирование ненасыщенных субстратов с высокой конверсией и селективностью.

Селективное получение вторичных аминов с использованием промышленных никель- и медьсодержащих катализаторов

Плетнева М.Ю., Панов А.О.

Волгоградский государственный технический университет,
Волгоград, Россия

E-mail: mar.pletnewa@yandex.ru

Амины различного строения имеют широкое применение в химической промышленности. Промышленные способы синтеза алифатических и ароматических аминов имеют ряд недостатков, в том числе дезактивация катализатора, недостаточная селективность, использование избыточного давления и высоких температур. В настоящее время является актуальным решение проблем и устранение недостатков, связанных с получением аминов, а также разработка новых способов их синтеза [1].

Ранее с целью разработки эффективного процесса получения аминов каталитическим гидрированием нитрилов, нами был исследован ряд катализаторов, в том числе, нанесенные металлические катализаторы на основе Ni [2]. Медь- и никельсодержащие промышленные катализаторы используются в процессах получения разнообразного спектра продуктов органического синтеза. Однако в промышленности на таком типе катализаторов процесс гидрирования нитрилов не осуществляется.

Была исследована реакция гидрирования алифатических и ароматических нитрилов на катализаторах НТК-4, АОК-71-22, Puristar R3-12, ЛОК-4 и НИАП 03-01 при атмосферном давлении и 200 °С в проточном реакторе со стационарным слоем катализатора. Были получены следующие результаты: удовлетворительная селективность в отношении вторичного амина (до 80%) при высокой конверсии нитрила (до 100%). Также стабильная работа катализаторов отмечена в течение 10 часов.

Список литературы

- [1] Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry: Amines, Aliphatic / P. Roose, K. Eller, E. Henkes, R. Rossbacher, H. Hoke // John Wiley and Sons, 2015.
- [2] Ю. В. Попов, В. М. Мохов, С. Е. Латышова, и др. // ЖОХ 2017. Т. 87. №. 10. С. 1616-1621 (Popov Yu. V. , Mokhov V. M., Latyshova S. E. et al., // Rus. J. Gen. Chem. 2017. V. 87, №. 10, P. 2276–2281).

Катализируемое комплексами металлов 6 группы присоединение диалкилфосфитов к соединениям с кратной связью, неактивированной электроноакцепторными заместителями

Плотникова А.В., Габдрахманова Р.Р., Колпакова Е.В., Курамшин А.И.,
Галкин В.И.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
E-mail: anezka_93@mail.ru

Ранее нами продемонстрировано, что взаимодействие диалкилфосфитов с гексакарбонильными комплексами металлов группы хрома приводит к образованию σ^4, λ^4 -(диалкилфосфит)пентакарбонилметаллов, в которых ОН-группа диалкилфосфита отличается значительной кислотностью [1]. Нами предположено, что такие фосфаметаллорганические соединения будут вступать в реакцию электрофильного присоединения по кратной связи С-С с образованием фосфита и дальнейшей его перегруппировкой в фосфонат. В поисках новых малостадийных и селективных способов получения функционализированных фосфонатов мы исследовали каталитическое присоединение ряда диалкилфосфитов к соединениям с кратной связью, неактивированной электроноакцепторными заместителями, в присутствии карбонильных комплексов металлов группы хрома.

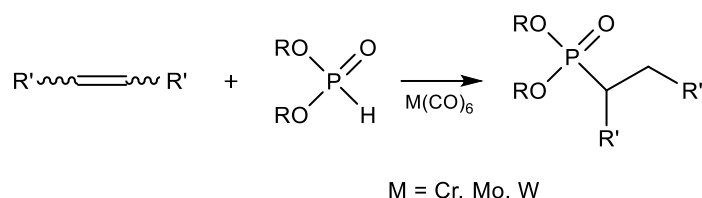


Рис. 1. Общая схема реакции.

Для всех $M(CO)_6$ в реакционной смеси детектировалось образование фосфорорганических соединений, демонстрирующих в спектрах ЯМР ^{31}P синглетные сигналы со значением химического сдвига, соответствующие сигналу фосфонатов или фосфинатов – продуктов присоединения диалкилфосфитов к неактивным в процессах нуклеофильного присоединения кратным связям.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского федерального университета.

Список литературы

[1] Plotnikova A.V., Kuramshin A.I., Galkin V.I. // Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements. 2016. V. 191. P. 1568-1569.

Катализируемое комплексами металлов 6 группы присоединение фосфинистых кислот к циклогексену

Габдрахманова Р.Р., Плотникова А.В., Колпакова Е.В., Курамшин А.И.,
Галкин В.И.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
E-mail: anezka_93@mail.ru

Ранее нами было обнаружено, что взаимодействие гидрофосфорильных соединений (ГФС) и гексакарбонильных комплексов металлов группы хрома приводит к образованию фосфаметаллоорганического соединения, содержащего в координационной сфере стабилизированную гидрокситаутомерную форму ГФС [1]. Для проверки возможности использования такого фосфаметаллоорганического соединения в качестве каталитически активного интермедиата электрофильного присоединения диалкилфосфитов к не активированным электроноакцепторными заместителями олефинам, мы изучили реакцию дигексилфосфинистой кислоты с циклогексеном в присутствии каталитических количеств (10 молярных процентов) карбонильных комплексов металлов 6 группы.

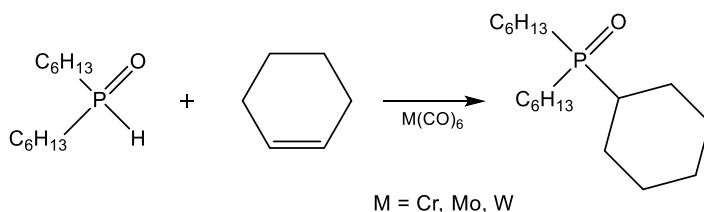


Рис. 1. Схема реакции.

Реакция протекает селективно, в случае применения гексакарбонилхрома(0) в качестве катализатора наблюдается полная конверсия дигексилфосфинистой кислоты.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского федерального университета.

Список литературы

[1] Plotnikova A.V., Kuramshin A.I., Galkin V.I. // Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements. 2016. V. 191. P. 1568-1569.

Получение модифицированных крахмалов с использованием пероксида водорода и диоксида тиомочевины

Покровская Е.А., Белова В.С.

Ивановский государственный химико-технологический университет

Иваново, Россия

E-mail: lispokr@yandex.ru

Крахмал – природный полисахарид растительного происхождения, применяемый во многих отраслях промышленности благодаря его низкой стоимости и широкой доступности. Однако натуральный крахмал не всегда пригоден для использования в промышленности, поэтому его подвергают модификации с целью получения необходимых для соответствующего применения свойств. Одним из распространенных методов модификации крахмала является окисление. В результате окисления гидроксильные группы в полимерной цепи крахмала превращаются в карбонильные и карбоксильные группы. Наличие карбоксильных групп в составе крахмала обуславливает снижение вязкости крахмального клейстера.

До настоящего времени для получения окисленных крахмалов широко используется гипохлорит натрия, однако в процессе окисления образуются токсичные побочные продукты, которые загрязняют окружающую среду. При использовании в качестве окислителя пероксида водорода в ходе реакции не образуются вредных побочных продуктов, что делает пероксид водорода привлекательным для получения модифицированных крахмалов. Однако применение пероксида водорода для окисления требует присутствия в системе активатора. Для получения окисленного пероксидом водорода крахмала традиционно используют сульфат или тетрасульфоталоцианинат железа, однако они способны проникать внутрь гранулы крахмала, вызывая его окрашивание. Кроме того, указанный подход не позволяет получать окисленный крахмал с заданным содержанием функциональных групп.

В работе предложен способ окислительной модификации крахмала с использованием диоксида тиомочевины и пероксида водорода. Диоксид

тиомочевины является промышленным продуктом и широко используется в целлюлозно-бумажной промышленности.

Предложенный способ позволяет селективно получать модифицированный крахмал, содержащий заданное число карбонильных и карбоксильных групп. Этого удается достичь путем изменения молярного соотношения диоксида тиомочевины и пероксида водорода. Показано, что предложенным способом удается варьировать вязкость клейстера, приготовленного из модифицированного крахмала. Полученный данным способом крахмал не содержит вредных неорганических примесей, ионы железа и других металлов. Окислительная модификация крахмала осуществляется в мягких условиях и протекает с высокой скоростью, что является привлекательным с точки зрения уменьшения себестоимости продукта.

Вязкость зольей. Влияние вязкости на качество просветляющих пленок, нанесенных на кристаллы DKDP

Полонецкий Д.А.¹, Беляев С.Н.²

¹ Школа юного исследователя Института прикладной физики РАН

² Институт прикладной физики РАН

Нижний Новгород, Россия

E-mail: danplaneta127@gmail.com

Тонкие плёнки золь-геля активно применяются в лазерной физике, солнечной электроэнергетике и нанoeлектронике. Они существенно улучшают оптические свойства кристалла за счет того, что просветление конечного элемента увеличивается на 6-10%. Оптические характеристики системы напрямую зависят от качества и природы подложки, а также технологии изготовления раствора золя. Его вязкость регулируется степенью коагуляции частиц золя и зависит от концентрации частиц в растворителе. Слишком жидкий раствор образует очень тонкую пленку. Слишком густой золь наносится на кристалл толстым слоем, что приводит к деформации и оптической деградации покрытия.

В настоящее время накоплено мало экспериментальных данных о том, как вязкость раствора влияет на оптические характеристики плёнки нанесенной на кристаллы DKDP. Измерить показатель вязкости можно с помощью вискозиметра. Просветляющее покрытие кристалла должно отвечать многим требованиям: максимальное просветление, минимальное светоотражение, сравнительно низкий показатель преломления, а также стойкость к деградации.

Минимального светоотражения удалось добиться с помощью использования золя оксида кремния, приготовленного на основе аммиака. Раствор золя на основе SiO₂ готовился с использованием NH₃ в качестве катализатора. Дисперсной средой послужила смесь гептана и изопропилового

спирта. Полученные растворы были нанесены на 15 кристаллов DKDP. Перед каждым покрытием была произведена визуальная оценка раствора и измерялся коэффициент вязкости с помощью вискозиметра. Состав наносился с разной скоростью и образовывал разные по толщине слои пленок. Все образцы были просушены в сушильном шкафу при температуре 60°C. У готовых оптических элементов проводилась оценка методами спектрофотометрии и эллипсометрии.

**Вязкостно-температурные характеристики раствора сополимера
бутилакрилата с винилбутиловым эфиром в диоктилсебацinate
в сравнении с коммерческими загущающими присадками**

Попова М.С.¹, Часова Ю.О.²

¹ Школа юного исследователя ИПФ РАН, Нижний Новгород, Россия

² ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

Вязкостно-температурные свойства являются важными характеристиками смазочных масел. От этих свойств зависят потери мощности на трение, а также способность масла удерживаться в смазываемом узле. Поэтому важно, чтобы масло имело определенные вязкостно-температурные характеристики при данной температуре. Для этого вводят загущающие присадки с заданной вязкостью. В настоящее время отечественные акрилатные присадки обладают недостаточно высокой устойчивостью к механической деструкции, а импортные присадки довольно дорогие. Поэтому актуальной задачей становится разработка новых загущающих присадок, которые будут превосходить по своим свойствам отечественные присадки подобного назначения и ни в чем не уступать импортным аналогам.

Целью данной работы является синтез сополимера бутилакрилата с винилбутиловым эфиром компенсационным способом в присутствии триэтилбора как инициатора и испытание его раствора в диоктилсебацinate, как синтетической основе современных смазочных масел, по вязкостно-температурным характеристикам и устойчивости к механической деструкции в сравнении с коммерческими загущающими присадками.

При проведении работы был синтезирован сополимер бутилакрилата с винилбутиловым эфиром компенсационным способом в присутствии триэтилбора как инициатора. Полученный сополимер был высушен методом вакуумной перегонки от растворителя. Затем методом вискозиметрии была определена кинематическая вязкость растворов трех различных коммерческих загущающих присадок в диоктилсебацinate с концентрацией 5 мас.% при разных температурах: 40°C, 50°C, - 40°C и 100°C. Далее была определена кинематическая вязкость раствора полученного сополимера бутилакрилата с винилбутиловым эфиром в диоктилсебацinate с концентрацией 5 мас.% тем же методом и при тех же температурах. Также был проведен анализ присадок на

устойчивость к механической деструкции методом озвучивания их на ультразвуковой установке. На основании полученных результатов вязкостно-температурные свойства полученного сополимера бутилакрилата с винилбутиловым эфиром были сравнены с аналогичными свойствами промышленных загущающих присадок.

Таким образом, можно сделать вывод, что полученный сополимер бутилакрилата с винилбутиловым эфиром обладает хорошей загущающей способностью при всех выбранных температурах и высокой устойчивостью к механической деструкции в сравнении с промышленными присадками.

Улучшение фармакологически значимых свойств производного 1,2,4-тиадиазола посредством комплексообразования с циклодекстринами

Промзелева М.А.,¹ Прошин А.Н.,² Терехова И.В.¹

¹*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия*

²*Институт физиологически активных веществ Российской Академии Наук, Черноголовка, Россия*

E-mail: marija.brusnikina@yandex.ru

Биодоступность характеризует полноту и скорость всасывания лекарственных средств, и, таким образом, отражает количество вещества, которое достигло системного кровотока относительно исходной дозы препарата. Ключевыми свойствами, определяющими биодоступность перорально вводимых лекарственных средств, являются растворимость, скорость растворения и мембранная проницаемость препарата.

Производное 1,2,4-тиадиазола, синтезированное в ИФАВ РАН, относится к группе веществ, которые способны приостановить протекание нейродегенеративных заболеваний, в частности болезнь Альцгеймера. Установлено, что рассматриваемое соединение плохо растворимо в водном среде. Поэтому, цель работы состояла в получении водорастворимых форм тиadiaзола на основе комплексов включения с циклодекстринами и исследовании их фармакологически значимых свойств. Были разработаны методики получения твердых комплексов тиadiaзола с β - и гидроксипропил- β -циклодекстринами методами лиофилизации и механоактивации. Растворимость, скорость растворения и коэффициенты мембранной проницаемости комплексов были определены в биорелевантных средах FaSSIF (pH=6.5), FaSSGF (pH=1.6), SGF (pH=1.2), имитирующих биологические жидкости ЖКТ.

Установлено, что способ получения комплексов и состав биорелевантных сред оказывают значительное влияние на биофармацевтические свойства производного 1,2,4-тиадиазола. Показано, что комплексы тиadiaзола с

гидроксипропил- β -циклодекстрином, полученные лиофилизацией, имеют наиболее высокие показатели растворимости и скорости растворения. Особенно это проявляется в биорелевантных средах SGF и FaSSIF благодаря солюбилизующей способности мицелл, присутствующих в данных буферных растворах. Однако с увеличением концентрации циклодекстрина коэффициент проницаемости лекарственного вещества уменьшается.

Результаты проведенного *in vivo* исследования комплексов производного 1,2,4-тиадиазола с гидроксипропил- β -циклодекстрином свидетельствуют об увеличении биодоступности фармакологически активного соединения в два раза.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант №15-13-10017).

Синтез замещенных 12-оксо-6,12-дигидроазепино[2,1-*b*]хиназолинов

Пронина А.Л., Одинокоев А.В., Будруев А.В.

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: nastenkapronina@bk.ru

Ранее было показано, что при фотолизе эфиров 2-азидобензойной кислоты **1** последовательно протекает 1,2-нуклеофильное присоединение 2-аминобензоата натрия к интермедиату **В** и внутримолекулярная конденсация азепина **3**, приводящая к образованию 6-замещенного 12-оксо-6,12-дигидроазепино[2,1-*b*]хиназолина **4** [1]. Однако, из-за ряда побочных реакций, выходы целевого продукта были меньше 30%.

С целью расширения круга субстратов и оптимизации условий реакций проведен фотолиз арилазидов **1** с эфирами антраниловой кислоты **2**.

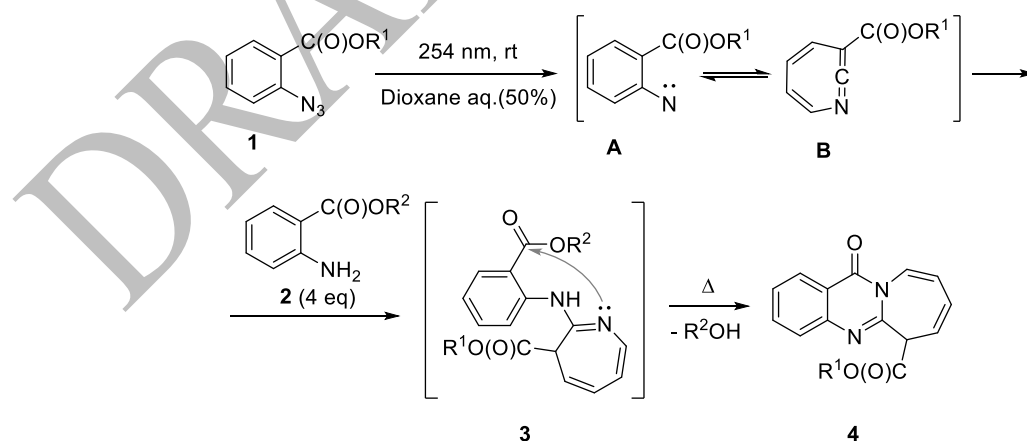


Рис. 1. Схема синтеза 12-оксо-6,12-дигидроазепино[2,1-*b*]хиназолина.

Установлено, что замена субстрата **2** с элиминированием не воды, а метанола облегчает внутримолекулярную конденсацию азепина **3**.

Строение 12-оксо-6,12-дигидроазепино[2,1-*b*]хиназолинов установленное ранее методом РСА [1], подтверждено методами масс- и ЯМР-спектроскопией.

Список литературы

[1] Budruev A. V. Dzhons, D. Y., Faerman, V. I., Fukin, G. K., Shavyrin, A. S. Photochemical synthesis of 6-substituted 12-oxo-6,12-dihydroazepino[2,1-*b*]quinazolines //Chemistry of Heterocyclic Compounds. 2016. Т. 52. №. 9. С. 694-699.

Влияние полярности среды на синтез замещенных 12-оксо-6,12-дигидроазепино[2,1-*b*]хиназолинов

Карашова В.Э., Пронина А.Л., Одинокоев А.В., Будруев А.В.
 Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,
 Нижний Новгород, Россия
 E-mail: nastenkapronina@bk.ru

В работе представлены результаты исследования влияния добавок воды на изменение выходов 12-оксо-6,12-дигидроазепино[2,1-*b*]хиназолина **3** и выхода метил-2-оксо-2,3-дигидро-1Н-азепин-3-карбоксилата **4**.

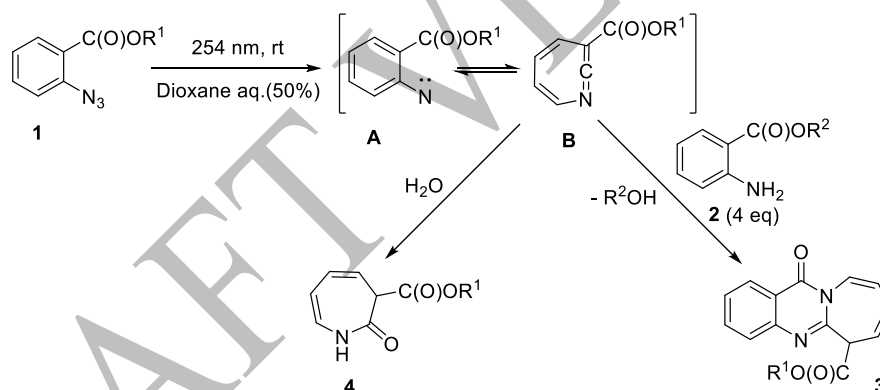


Рис. 1. Схема синтеза 12-оксо-6,12-дигидроазепино[2,1-*b*]хиназолина и метил-2-оксо-2,3-дигидро-1Н-азепин-3-карбоксилата.

Оба гетероцикла образуются в результате нуклеофильного присоединения воды или амина к субстрату **B**, и следовательно уменьшение концентрации воды должно снизить выходы 2-оксо-азепина **4** и привести к увеличению выхода азепино[2,1-*b*]хиназолина **3**. Однако, вопреки этим предположениям установлено, что уменьшение концентрации воды в реакционной смеси наоборот приводило к увеличению выхода 2-оксо-азепина **4** и уменьшению выхода азепино[2,1-*b*]хиназолина **3**. Такое на первый взгляд несоответствие может свидетельствовать об уменьшении сольватирующей способности, то есть полярности реакционной смеси и, как следствие, приводить к затруднению перераспределения зарядов в активированных комплексах перестраивающихся гетероциклических каркасов.

Синтез новых 6-арил-4-замещенных 1,2,3-триазолил-2-метоксипиридинов

Ракшин С.О., Голованов А.А.

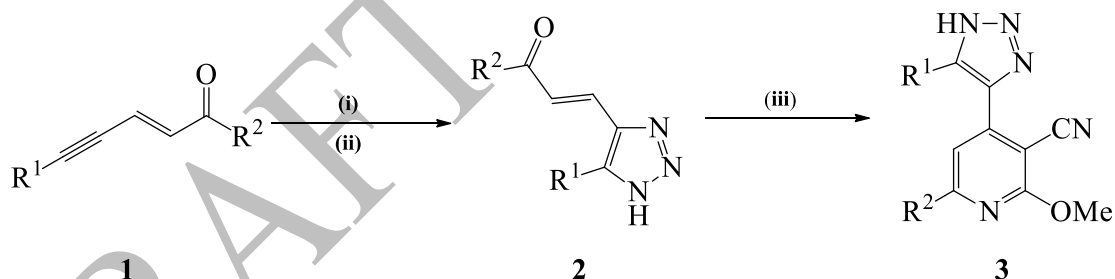
Тольяттинский государственный университет, Тольятти, Россия

E-mail: superpro.sergey@yandex.ru

1,2,3-Триазол и его производные известны как соединения, обладающие различными видами биологической активности [1]. Роль производных 1,2,3-триазолов заключается в том, что их можно эффективно использовать в качестве антибактериальных, противогрибковых, противовирусных, противотуберкулезных, инсектицидных и других препаратов.

Немаловажную роль играют производные пиридина, содержащие различные гетероциклические ядра, в частности, 1,2,3-триазольный цикл, которые также являются потенциальными биологически активными соединениями и обладают сильным фармакологическим действием [2]. Данные соединения находят применение как нелинейные оптические материалы, красители, ингибиторы коррозии, регуляторы роста растений, фунгициды, гербициды, антиоксиданты и др.

Нами было обнаружено, что взаимодействие 1,2,3-триазольных халконов **2**, полученные посредством реакции между (*E*)-арил-5-фенилпент-2-ен-4-ин-1-онов **1** и азидом калия KN_3 , с малонитрилом в абсолютном метаноле и в присутствии метилата натрия приводит к образованию 6-арил-4-замещенных 1,2,3-триазолил-2-метоксипиридинов **3** с выходами от 18-52 %.



$\text{R}^1 = \text{Ph}, 4\text{-MeC}_6\text{H}_4, 4\text{-ClC}_6\text{H}_4, \text{R}^2 = \text{Ph}, 4\text{-MeC}_6\text{H}_4, 4\text{-MeOC}_6\text{H}_4,$
 $4\text{-BrC}_6\text{H}_4, 4\text{-ClC}_6\text{H}_4, 2\text{-тиофен-2-ил}$

(i) KN_3 / ДМФА, rt; (ii) HCl; (iii) Малонитрил, NaOMe, MeOH, rt

Список литературы

- [1] J. H. Mohammed. Medicinal and Biological Importance of 1,2,3-Triazoles in Click Chemistry. // IJSET. – 2015. – Vol. 2, № 4. – pp. 901-904.
 [2] N. A. Abdelriheem, A. M. M. Mohamed, A. O. Abdelhamid. Synthesis of Some New 1,3,4-Thiadiazole, Thiazole and Pyridine Derivatives Containing 1,2,3-Triazole Moiety. // Molecules. – 2017. – Vol. 22, № 2. – pp. 1-16.

**Синтез полистеарилметакрилата в присутствии дитиобензоата
и исследование его депрессорных свойств**

Рашмакова А.Е., Колякина Е.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

kelena@ichem.unn.ru

В последнее время существенно возросло производство дизельного топлива (ДТ), однако его применение сопряжено с рядом проблем. Так при низких температурах происходит выпадение парафинов, что является причиной закупорки топливных фильтров и топливопроводов. Одним из методов получения зимнего ДТ является добавление депрессорных присадок. Приоритетной задачей в создании данных присадок к ДТ является синтез полимеров с определенными значениями молекулярных масс (ММ) и узким молекулярно-массовым распределением.

Нами синтезированы депрессорные присадки на основе стеарилметакрилата с применением подхода обратимой передачи цепи в присутствии динитрила азоизомаляной кислоты и пропил-2-цианодитиобензоата при температуре 80°C. Используемый подход позволил получить полимеры с широким диапазоном ММ (4-114 kDa) и низкими значениями полидисперсности (1.18-1.48).

Методом MALDI-TOF-спектрометрии установлено, что спектр полистеарилметакрилата, полученного в присутствии пропил-2-цианодитиобензоата, состоит из трех типов пиков. Так, полимер имеет в своем составе определенное количество звеньев мономера и разные концевые группы (цианизопропильный радикал и дитиобензотные фрагменты), кроме того в образце присутствуют «мертвые» макромолекулы, которые образуются в процессе диспропорционирования двух растущих радикалов.

Детально изучено влияние молекулярно-массовых характеристик полистеарилметакрилата на низкотемпературные свойства ДТ в диапазоне концентраций 50-3200 ppm. Выявлено, что максимальная депрессия температуры застывания летнего дизельного топлива наблюдается при применении узкодисперсных полимеров с ММ выше 40 kDa при концентрации более 400 ppm. Образцы с низкими значениями полидисперсности (1.18-1.28) проявляют наиболее ярко выраженный депрессорный эффект в широком интервале концентраций вводимых присадок в отличие от полимеров, синтезируемых на традиционном радикальном инициаторе. Таким образом, используемый подход синтеза полистеарилметакрилата позволяет подобрать наиболее эффективные присадки с оптимальными значениями молекулярных масс и полидисперсности для разных видов топлив.

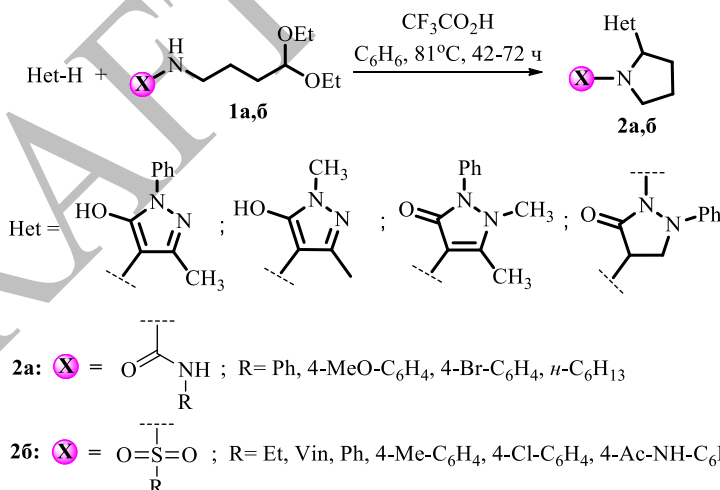
Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №17-03-00498).

Взаимодействие функционализированных производных 4,4-диэтоксипутан-1-амина с пиразол-5-онами. Синтез новых 2-пиразолилпирролидинов

Т.С. Ризбаева, А.В. Смолобочкин, А.С. Газизов, А.Р. Бурилов, М.А. Пудовик
 ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН - обособленное структурное
 подразделение ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия
 E-mail: rizbaeva.tanzilya.92@mail.ru

Среди огромного разнообразия гетероциклических соединений особый интерес представляют пирролидины, содержащие во втором положении гетероциклические фрагменты, поскольку многие из них проявляют высокую фармакологическую активность.

Ранее в нашей группе был разработан удобный и простой в исполнении метод синтеза 2-арилпирролидинов на основе кислотно-катализируемой реакции 1-(4,4-диэтоксипутан-1-ил)мочевин и N-(4,4-диэтоксипутан-1-ил)сульфонамидов с фенолами [1,2]. Учитывая, что енольная форма пиразол-5-она может рассматриваться как ароматический гидроксипиразол, мы предположили, что эти соединения могут быть использованы в качестве гетероциклического аналога фенола в реакциях с ацетальдами. Действительно, оказалось, что взаимодействие 1-(4,4-диэтоксипутан-1-ил)мочевин **1a** и N-(4,4-диэтоксипутан-1-ил)сульфонамидов **16** с пиразол-5-онами приводит к образованию ранее неизвестных 2-пиразолилпирролидинов **2**. Кроме того, было обнаружено, что в реакцию с ацетальдами **1** вступает и насыщенный 1-фенил-3-пиразолидон с образованием смеси продуктов N- и C-алкилирования.



Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №16-13-10023).

Список литературы

- [1] Gazizov A.S., Smolobochkin A. V, Voronina Y.K., Burilov A.R., Pudovik M.A. *Arkivoc*, 2014, IV, 319.
 [2] Смолобочкин А.В., Газизов А.С., Аникина Е.А., Бурилов А.Р., Пудовик М.А. *ХГС*, 2017, 53, 161.

Исследование процесса переэтерификации рапсового масла этанолом

Рогожин А.Е., Есипович А.Л., Рыбкин П.А., Загуменнова Д.В.
*Дзержинский политехнический институт (филиал) Нижегородского
государственного технического университета им. Р.Е. Алексеева,
Дзержинск, Россия
E-mail: anton.dpi@yandex.ru*

Решением многих проблем, связанных с загрязнением окружающей среды, является использование альтернативных источников химического сырья, в том числе эфиров жирных кислот (ЭЖК или биодизельное топливо).

На сегодняшний день основным спиртом, используемым в процессе переэтерификации растительных масел, является метанол. Метанол имеет достаточно низкую стоимость и высокую реакционную способность при проведении процесса переэтерификации даже в мягких условиях. Однако метанол имеет высокую токсичность, поэтому с экологической точки зрения более предпочтительным выглядит использование менее токсичного этанола. Еще одним преимуществом этанола является и то, что его производят из возобновляемого растительного сырья. Однако этиловый спирт может содержать значительное количество воды, что оказывает сильное влияние на активность катализатора, образование побочных продуктов и на выход биодизеля. Поэтому для производства биодизельного топлива необходима дополнительная стадия осушки этанола.

В ходе проведенного исследования было изучено влияние количества катализатора на скорость процесса переэтерификации рапсового масла метанолом (содержащим 0,01 % масс. воды) и этанолом (содержащим 0,5 % масс. воды) с использованием глицероксида кальция в качестве катализатора.

Наибольший выход эфиров жирных кислот равный 96 масс. % был получен при использовании метанола и 1 % масс. катализатора. При использовании этилового спирта равновесный выход эфиров сильно зависел от количества катализатора. Низкий выход при добавлении 1-3 % масс. катализатора можно объяснить тем, что при наличии воды в реакционной смеси становится возможна реакция гидролиза с последующим образованием кальциевых солей жирных кислот, что приводит к дезактивации катализатора. Максимальный выход эфиров равный 87 % масс. был достигнут при применении 5 % масс. катализатора от масс. масла.

Следует также отметить, что свойства полученных метиловых и этиловых эфиров практически одинаковы. В ходе исследования было так же установлено, что этиловые эфиры жирных кислот характеризуются более высокой вязкостью и меньшей смазывающей способностью по сравнению с метиловыми, однако они имеют более низкую температуру замерзания, что является существенным преимуществом при использовании эфиров в качестве биотоплива.

Радикальная полимеризация стирола с участием систем на основе монокатехолатов олова(IV) и галогенорганических соединений

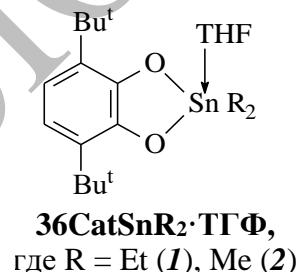
Рубцова Ю.А.¹, Ваганова Л.Б.¹, Малеева А.В.², Пискунов А.В.², Гришин Д.Ф.¹

¹ Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

² Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: yuliya.rubtsova.1995@mail.ru

Монокатехолатные комплексы олова(IV) зарекомендовали себя как перспективные реагенты для проведения радикальной полимеризации стирола (СТ) в режиме обратимого ингибирования [1]. Интересным является тот факт, что монокатехолаты олова(IV) вступают в реакции с галогенами [2]. Целью работы стало изучение процессов полимеризации СТ в диапазоне температур 70-110°C с участием систем на основе монокатехолатов олова(IV) **1-2** и галогенорганических соединений, в качестве которых использовались: четырехбромистый углерод (СВr₄), этил-2-бромизобутират (ЭБИБ), 1-бром-1-фенилэтан (ФЭБ), бромистый *трет*-бутил (Bu^tBr), йодистый цианоизопропил (СР-1), а также кристаллический йод (I₂).



Установлено, что введение по отдельности **1-2** и броморганических соединений приводит к уменьшению скорости полимеризации СТ. Среднечисленная молекулярная масса (ММ) полистирола (ПСТ) при этом не изменяется. Эффективность системы **1** / броморганическое соединение определяется составом галогенорганического соединения. В случае системы **1** / СВr₄ наблюдается увеличение выхода ПСТ, а значения ММ становятся ниже, чем при автополимеризации, и пропорционально возрастают с увеличением степени превращения СТ. В случае других броморганических соединений общая скорость полимеризации снижалась. При сочетании **1** с ФЭБ или Bu^tBr наблюдается линейный рост ММ ПСТ. В случае же системы **1** / ЭБИБ ММ ПСТ не изменяется. Большой интерес в плане взаимодействия компонентов представляет комбинация комплексов **1-2** с соединениями, содержащими йод. Сочетание **1-2** с СР-1 или I₂ при определенных условиях позволяет наблюдать линейный рост ММ ПСТ. При этом значения ММ и полидисперности имеют меньшие значения, чем в случае броморганических соединений. Таким образом, сочетание монокатехолатов олова(IV) и галогенорганических соединений позволяет инициировать радикальную полимеризацию СТ, при этом эффективность процесса синтеза полимеров зависит от состава системы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 17-03-00498).

Список литературы

- [1] Л. Б. Ваганова, Е. В. Колякина, А. В. Ладоев, А. В. Пискунов, Д. Ф. Гришин // Высокомолекул. соед. – 2009. – Т.51. – С.530-536.
[2] Е. В. Ильякина, А. И. Поддел'ский, А. В. Пискунов, Н. В. Сомов // Inorganica Chimica Acta, 2012, 380, P. 57-67.

Реологические свойства полимерных систем
в смеси вода-пропиленгликоль

Савинова М.В., Большакова Е.А., Антонов А.А.

Нижегородский государственный технический университет

им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия

E-mail: mash91@mail.ru

В данной работе были исследованы реологические свойства растворов индивидуального полиэлектролита и его смесей с полимерными добавками в системе вода-пропиленгликоль (ПГ) в интервале температур от 20 до -10 °С.

На рис. 1а показана зависимость напряжения сдвига (δ) от скорости сдвига ($\dot{\gamma}$) для растворов вода-ПГ (массовое соотношение 1:1) с добавкой 0,5 мас.% частично ацетилированного поливинилового спирта (ПВС), содержащего 5 мол.% бутиральных (ПВБ) или октанальных (ПВО) групп. Полученные линейные зависимости свидетельствуют о ньютоновском характере течения данных жидкостей.

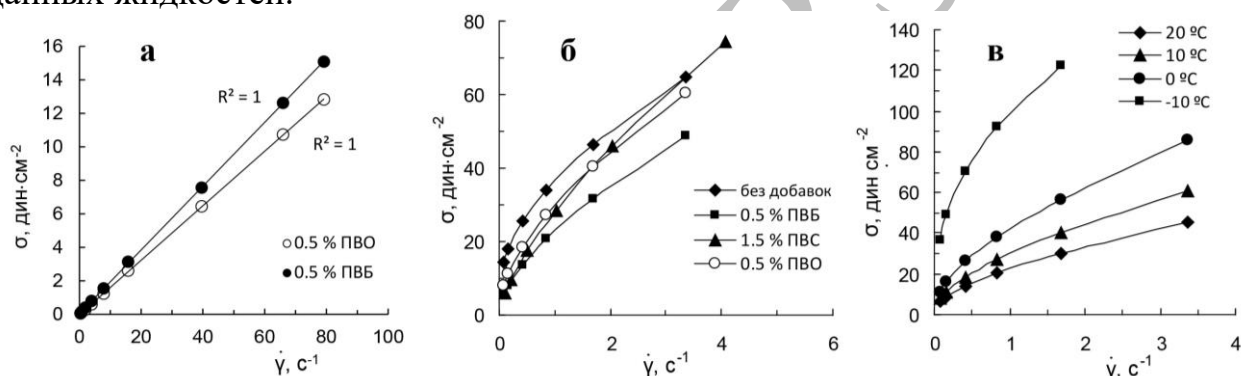


Рис. 1. Зависимость напряжения сдвига от скорости сдвига смеси ПГ-вода, содержащей ГМ-ПВС (а) и 0,45 мас.% ГМ-ПАК с различными добавками (б), при 10 °С; 0,45 мас.% ГМ-ПАК с 0,5 масс.% ПВО при различных температурах (в).

В отличие от указанных систем растворы, содержащие полиэлектролит – гидрофобно-модифицированную полиакриловую кислоту (ГМ-ПАК) – демонстрируют неньютоновское поведение, т.е. имеют нелинейную зависимость сдвигового напряжения от скорости сдвига. Как видно из рис. 1б-1в, кривизна графиков для растворов на основе ГМ-ПАК зависит не только от природы добавки, но и от температуры. Угол наклона кривых (рис. 1в) медленно возрастает с понижением температуры до 0 °С. При дальнейшем охлаждении от 0 до -10 °С наблюдается резкое увеличение значения начального напряжения сдвига (с 11,8 до 37 дин/см²) с одновременным ростом кривизны графика. Наблюдаемый эффект можно объяснить образованием гидрофобных ассоциаций между алкильными группами ГМ-ПАК и ПВО при низких температурах. По сравнению с системой, содержащей ПВО, для полиэлектролитных растворов с ПВБ и ПВС характерен плавный рост δ с увеличением $\dot{\gamma}$ во всем интервале исследованных температур.

**Исследование сополимеризации акриламида
и N-[3-(диэтиламино)пропил]метакриламида.
Термочувствительные свойства полимеров**

Садиков А.Ю.¹ Кашурин В.С.² Корякова А.А.² Коротаев М.С.²

¹Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

²Нижегородский государственный технический университет
им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия

E-mail: mr.sadikovanton@mail.ru

Термочувствительные полимеры представляют собой перспективный класс соединений, обладающий в водных растворах температурой фазового перехода ($T_{фп}$). Поли-N-[3-(диэтиламино)пропил]метакриламид (пДЭАПМА) - полимер с низшей критической температурой растворимости (НКТР). $T_{фп}$ полимеров можно регулировать путем ввода в цепь сомономеров.

Были исследованы закономерности радикальной сополимеризации акриламида (АА) и N-[3-(диэтиламино)пропил]метакриламида. Методом Файнмена-Росса определены константы сополимеризации и исследованы термочувствительные свойства полученных полимеров.

Сополимеризацию вели при температуре 70 °С, в диоксане, с массовой долей сомономеров 20% и в присутствии динитрила азоизомасляной кислоты в качестве инициатора, при различном соотношении амидов.

На основе полученных данных, была построена диаграмма состава сополимеров при низких степенях конверсии (рис. 1) и определены константы сополимеризации ($r_1=0,361\pm 0,05$; $r_2=1,254\pm 0,15$).

Также были определены значения НКТР для полученных полимеров (табл. 1). Результат исследования вызывает особый интерес, так как расходится с классической теорией, согласно которой $T_{фп}$ должна расти при увеличении доли гидрофильного фрагмента в сополимере.

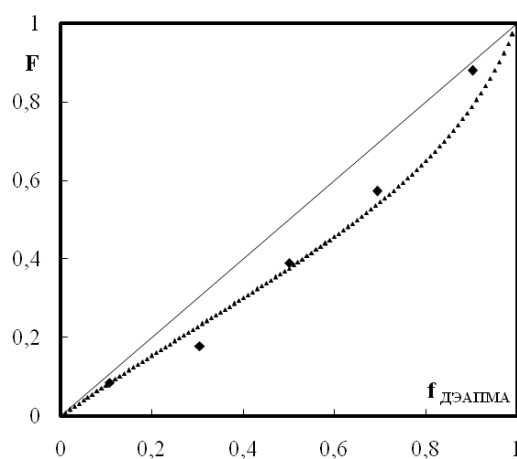


Рисунок 1. Диаграмма состава сополимера ДЭАПМА-АА.

Таблица 1. Значения НКТР при различных концентрациях полимеров в воде (С).

Полимер	С, масс. %			
	0,10	0,25	0,50	1
ДЭАПМА	46,20	38,90	36,00	33,20
ДЭАПМА:АА 9:1	66,84	60,53	47,94	43,28
ДЭАПМА:АА 7:3	59,93	49,51	42,00	36,58
ДЭАПМА:АА 5:5	82	75,59	63,14	48,57

**Биосовместимые системы доставки лекарственных препаратов
на основе лиотропных жидких кристаллов**

Селиванова Н.М., Жегалина Т.А., Галяметдинов Ю.Г.

Казанский национальный исследовательский технологический университет,

Казань, Россия

E-mail: natsel@mail.ru

Использование систем доставки для пролонгированного высвобождения лекарств в оптимальном терапевтическом диапазоне является чрезвычайно важной задачей биомедицины. На сегодняшний день в качестве систем доставки активно используются везикулы, мицеллы, полимерные гели, полимерсомы, модифицированные наночастицы, дендримеры. Однако имеются существенные недостатки данных систем, такие как быстрое высвобождение и низкая стабильность в условиях повышенной кислотности, высокая стоимость производства, риск рекристаллизации. В этом плане лиотропные жидкокристаллические (ЛЖК) системы являются перспективной альтернативой. Структурное подобие лиомезофаз мембранным системам позволяет рассматривать ЛЖК в качестве моделей биообъектов для интерпретации молекулярной структуры и функций различных клеточных органелл, тканей и органов. Благодаря своим уникальным свойствам и строению лиомезофазы обладают широкими пределами инкапсулирования и способны к переносу как гидрофобных, так и гидрофильных биоактивных компонентов.

В данной работе представлен подход к созданию эффективных систем транспорта биомедицинского назначения - организованных биосовместимых сред в жидкокристаллическом состоянии на основе биополимера хитозана и молочной кислоты. Жидкокристаллические и структурные параметры лиотропных систем исследовались методами поляризационной оптической микроскопии и рентгенофазового анализа. Для изучения высвобождения *in vitro* использовалась трансмембранная модель пассивной диффузии витамина В2 из синтезированных лиомезофаз. Кинетика массопереноса оценивалась фотометрически. Были установлены концентрационные и температурные границы формирования жидкокристаллических фаз и гидрогелей хитозан/молочная кислота. Выявлены закономерности формирования хиральных лиомезофаз. Исследован *in vitro* процесс массопереноса биоактивных субстанций из синтезированных лиотропных систем через модельные мембраны, выявлены основные закономерности влияния надмолекулярной организации ЛЖК систем на высвобождение лекарственного препарата рибофлавина. Показано, что релизинг из ЛЖК системы по сравнению с гидрогелем существенно замедлен и имеет индукционный период. Таким образом, предложенные среды могут являться эффективными системами транспорта с контролируемым релизингом.

**Изучение влияния модификатора
на прочность и водостойкость геополимера**

Соттикулов Э.С., Джалилов А.Т., Каримов М.У., Киёмов Ш.Н.

*ГУП Ташкентский научно-исследовательский
институт химической технологии, Ташкент, Узбекистан*

E-mail: elyor-s88@mail.ru

Технологические аспекты приготовления бетонов на основе вяжущих щелочной активации и их строительно-технические свойства в основном аналогичны технологии и свойствам бетонов на основе портланд цемента, хотя в синтезе геополимерных бетонов, как правило, всегда требуется термическая активация. Температура значительно ускоряет процесс растворения исходного алюмосиликатного каркаса и тем самым оказывает важное влияние на твердение геополимерных композиций, особенно в начальный период реакции [1]. Зола-унос при обычной температуре вступает в реакцию очень медленно и даже через месяц твердения в обычных условиях дает незначительную прочность. Однако выдерживание свежеприготовленного изделия при 70–90°C в течение от нескольких часов до 1 суток позволяет достичь практически конечной прочности, оставляющей до 60–70 МПа (по некоторым данным, прочность геополимеров может достигать 100 МПа и более).

Нами синтезирован вяжущий на основе модифицирования жидкого стекла для получения геополимерного бетона. Жидкое стекло модифицировано органическим модификатором, который содержит изоцианатную группу. Полученный геополимер на основе этого вяжущего показывает хорошую устойчивость к агрессивным средам и перепадам температуры, прочность и достаточную водостойкость. Благодаря этим свойствам полученные материалы на основе синтезированного нами вяжущего пригодны для работы в неблагоприятных условиях.

Увеличение концентрации модификатора в составе вяжущего повышает прочность и водостойкость полученного геополимерного бетона (рис.1).

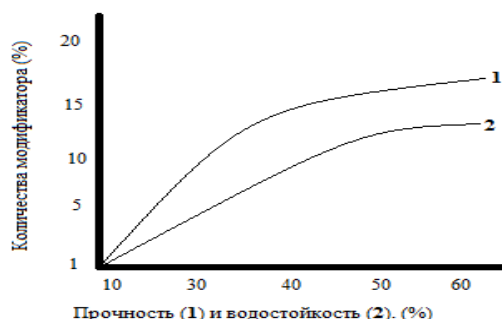


Рис 1. Зависимость прочности и водостойкости полученного геополимерного бетона от количества модификатора.

Список литературы

[1] Khale D., Chaudhary R. Mechanism of geopolymerization and factors influencing its development // J. Mater. Sci. 2007. V. 42. P. 729–746.

Исследование сорбционных свойств ортокремниевой кислоты, модифицированной этаноламинами

Соттикулов Э.С., Джалилов А.Т., Каримов М.У., Киёмов Ш.Н.

ГУП Ташкентский научно-исследовательский институт химической технологии, Ташкент, Узбекистан

E-mail: elyor-s88@mail.ru

Целью данной работы является разработка и получения новых полифункциональных ионообменников на основе ортокремниевой кислоты (ОКК) и некоторых этаноламинов, изучение их основных физико-химических и комплексообразующих свойств.

На рис. 1 представлены инфракрасные спектры модифицированной диэтаноломином ОКК и их комплексы с ионами металлов. На спектрах модифицированных образцов (рис. 1, спектры 1) выделяются полосы слабой интенсивности при 3750 см^{-1} , соответствующие поглощению свободных гидроксильных групп поверхности. Гораздо более интенсивным поглощением ИК-излучения характеризуются гидроксогруппы, связанные водородной связью, наличие которых на поверхности соответствует широкая полоса с максимумом при 3400 см^{-1} . Площади описанных полос (3400 см^{-1}) координированных с ионами металлов отличаются большей интенсивностью, по сравнению с модифицированной ОКК. Причиной этого являются различные структурные характеристики образцов.

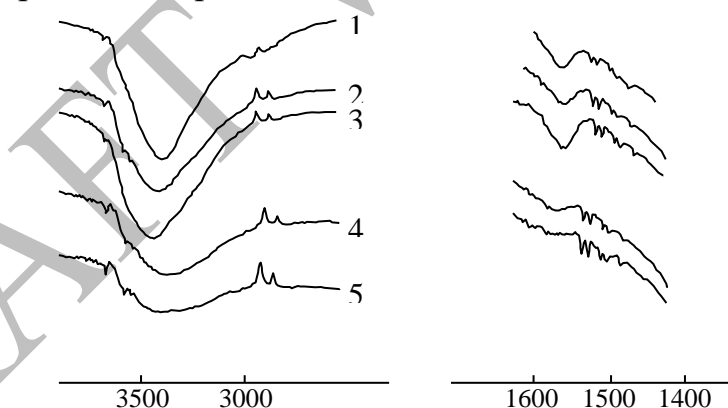


Рис. 1. ИК-спектр ортокремниевой кислоты, модифицированной диэтаноломином и комплексы с ионами металлов.

1 – модифицированная ОКК, 2 – комплексы с ионами Ni^{2+} , 3 – Zn^{2+} , 4 – Fe^{2+} , 5 – Cu^{2+} .

Инфракрасные спектры ОКК, модифицированной диэтаноломином и сорбированной ионами Fe^{2+} , Cu^{2+} , Ni^{2+} и Zn^{2+} исследовались, вследствие их незначительного отклика на изменения в поверхностном слое соответствующего силикагеля. Предположение о том, что полоса 1520 см^{-1} соответствует деформационным колебаниям группы $-\text{NH}_3^+$, экспериментально подтверждается формой спектра ОКК, модифицированной диэтаноломином, на которой не присутствует полоса поглощения 1520 см^{-1} . Одновременно с

возникновением полосы 1520 см^{-1} на координированных с ионами металлов в спектрах наблюдается существенное уменьшение полосы поглощения 1660 см^{-1} , соответствующей деформационным колебаниям связей N–H привитых аминоэтоксигрупп. Площади пиков 1630 см^{-1} на спектрах ОКК с адсорбированными основными формами металлов Ni^{2+} и Zn^{2+} не претерпевают существенных изменений по сравнению с теми же пиками на спектрах ОКК, модифицированной диноэтаноломином (рис. 1, спектры 2 и 3). Этот эффект объясняется отсутствием участия гидроксогрупп ОКК, не связанных с ДЭА, во взаимодействии с молекулами металлов.

Из основных свойств ионитов важное значение имеет ионообменная способность, которая характеризует иониты с целью оценки их эксплуатационных свойств. Величина ее, в основном, зависит от количества ионогенных групп ионита, степени их диссоциации, а также природы и концентрации обменивающихся ионов.

Контролируемый синтез сополимеров акрилонитрила для получения прекурсора углеродного волокна

Стахи С.А., Гришин И.Д.

*Национальный исследовательский Нижегородский государственный
университет им. Н.И.Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

E-mail: s.stakhi@yandex.ru

Интерес к углеродному волокну со стороны ряда высокотехнологичных отраслей промышленности, таких как аэрокосмическая, военная, медицинская, строительная, спортивная и ряд других обусловлен уникальным сочетанием отличных механических свойств с низкой плотностью, а также высокой термоокислительной и химической устойчивостью. В настоящее время основная масса углеродного волокна производится из полиакрилонитрильных волокон (ПАН-волокна). Основным исходным материалом для их производства являются сополимеры на основе акрилонитрила, к которым предъявляются достаточно жёсткие требования по составу и молекулярно-массовым характеристикам. Необходимость введения различных сомономеров в дополнение к акрилонитрилу обусловлена их пластифицирующим эффектом при вытяжке и сглаживанием теплового эффекта процесса окислительной стабилизации волокна. С точки зрения получения полимеров с заданными характеристиками и свойствами, привлекательной является контролируемая радикальная полимеризация по механизму с переносом атома (ATRP). В отличие от других методов контролируемой радикальной полимеризации рассматриваемый процесс является каталитическим, что, с одной стороны, позволяет использовать малые количества регулирующих агентов, а с другой - подразумевает отсутствие встраивания катализатора в полимерную цепь.

В настоящей работе исследованы особенности проведения сополимеризации акрилонитрила с метилакрилатом и эфирами этилендикарбоновых кислот в контролируемом режиме в присутствии каталитической системы на основе бромида меди (I). Установлено, что процесс сополимеризации протекает равномерно и без гель-эффекта и характеризуется линейным увеличением значений молекулярной массы с ростом конверсии. Абсолютные значения молекулярной массы полученных сополимеров лишь незначительно превышают теоретически рассчитанные, что свидетельствует о высокой степени контроля над процессом. О контролируемом характере процесса свидетельствует и относительно узкое молекулярно-массовое распределение полученных сополимеров (1.3-1.9). Были получены образцы с молекулярной массой более 70 кДа, что также делает предложенный метод перспективным для получения сополимеров, пригодных для переработки в углеродное волокно. Проведённые калориметрические измерения свидетельствуют о том, что введение данных сомономеров приводит к сглаживанию экзотермического эффекта, возникающего в процессе термообработки ПАН-прекурсора.

Работа поддержана грантом Президента РФ (МК-1142.2017.3).

Разработка фармацевтической субстанции разветвленного олигогексаметиленгуанидина гидросукцинат

Стерин И.В.¹, Шаталов Д.О.^{1,2}, Кедик С.А.^{1,2}, Аскретков А.Д.¹, Коваленко А.В.¹

¹ *Московский технологический университет, Москва, Россия*

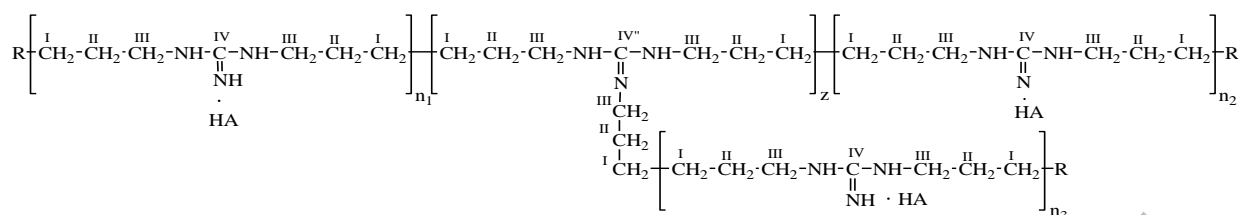
² *ЗАО «Институт фармацевтических технологий», Москва, Россия*

E-mail: amicusolis@gmail.com

Разветвленного олигогексаметиленгуанидина гидросукцинат (ОГМГсукц) (рис. 1) – перспективное соединение, обладающее широким спектром антимикробного действия. Согласно патенту [1] предложенное соединение, будучи схожим с разветвленным олигогексаметиленгуанидином, обладает улучшенными и устойчиво воспроизводимыми дезинфицирующими свойствами, а за счет наличия в качестве противоиона остатка янтарной кислоты, обладает пониженной токсичностью и коррозионной активностью и, таким образом, может быть использовано в качестве активной фармацевтической субстанции для производства офтальмологических лекарственных препаратов.

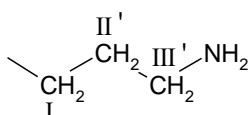
Ввиду особенностей строения данного соединения, а также возможности существования в различных солевых формах была разработана технология получения, которая бы позволяла получать соединение, соответствующие заданным критериям качества, обеспечивающих высокую эффективность в отношении широкого спектра патогенной микрофлоры, низкую токсичность в

отношении человека и применимость для терапии инфекционных глазных заболеваний.



где HA - 1/2 (HOOCCH₂CH₂COOH).

R =



или

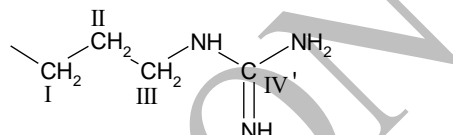


Рис. 1. Структурная формула ОГМГсукц.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ, государственный контракт от 22 ноября 2017 г. № 14.N08.11.0190

Список литературы

[1] Патент RU 2443684 С1, 2012, МПК С07С279/00, С08G73/00, А61L2/16.

Разветвленные олигомеры на основе производного гуанидина и содержащее их дезинфицирующее средство / Кедик С.А., Седишев И.П., Панов А.В., Жаворонок Е.С., Ха Кам Ань.

Использование сополимера N-винилпирролидона с 2-метил-5-винилпиридином для борьбы с гельминтозом

Твердохлебова А.М.¹, Шаталов Д.О.^{1,2}, Кедик С.А.^{1,2}

¹ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский технологический университет», Институт тонких химических технологий (МИТХТ), Москва, Россия

² ЗАО «Институт фармацевтических технологий», Москва, Россия

E-mail: anna-tverdokhlebova@ya.ru

В настоящее время доля заболеваний, вызванных ослаблением иммунной системы, постоянно увеличивается, так, паразитарными заболеваниями поражено около 4,5 миллиарда человек в мире [1], а на долю гельминтозов приходится 99 % всех инвазий [2, 3]. Успешное лечение и профилактика данных заболеваний зависит от разработки новых высокоэффективных лекарственных препаратов.

Антигельминтные препараты должны обладать низким токсическим воздействием на организм хозяина, но высокотоксичным на организм паразита. В качестве основы для разработки синтетических иммуномодуляторов особый

интерес представляют полимеры, обладающие широким спектром физиологического действия.

В ходе первичных исследований (выявление специфической активности) удалось выявить, что сополимер N-винилпирролидона с 2-метил-5-винилпиридином обладает повышенной фагоцитарной активностью, которая служит инструментом для подавления роста гельминтов.

Таким образом, использование сополимера N-винилпирролидона с 2-метил-5-винилпиридином является перспективным направлением исследований для дальнейшего вывода на рынок в качестве высокоэффективного лекарственного средства для борьбы с гельминтозом.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ, государственный контракт от 14 августа 2017 г. № 14.N08.11.0175.

Список литературы

- [1] Миропольская Н.Ю., Молочный В.П. Гельминтозы Дальнего Востока России // Дальневосточный медицинский журнал. – 2014. – С. 116-122.
- [2] Булай А.А. Достижения и перспективы развития современной паразитологии // Труды V Респ. научно-практической конференции. – Витебск: ВГМУ, 2006. – С. 154-157.
- [3] Василевич Ф.И., Шевкопляс В.Н. Паразитарные зоонозы // Ветеринария Кубани. – 2012. – № 3. – С. 5-11.

Определение конформационных переходов макромолекул хитозана

Ткачук Е.К., Апрытина К.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: apryatina_kv@mail.ru

Модификация хитозана биосовместимыми полимерами открывает возможности для получения разнообразных универсальных материалов с улучшенными физико-механическими характеристиками, обладающими биоразлагаемостью и ранозаживляющими свойствами. Конформационные изменения цепей хитозана будут влиять на глубину превращения и степень полимеризации, поэтому актуальна разработка экспресс-метода определения конформационного состояния макромолекул полисахарида.

Известно, что макромолекулы солевой формы хитозана в зависимости от рН среды формируют различные конформации - спиральную при значениях рН ~ 4,8, клубок при рН среды ~ 3,6 [1]. Нами было проведено подтверждение конформационных переходов хитозана спектрофотометрическим методом и четко зафиксировано значение рН, при котором имеет место конформационный переход клубок-спираль (рис. 1). Он соответствует значению рН среды 3,4 и полностью совпадает для обоих значений молекулярных масс (ММ) хитозана.

Второй минимум на кривых 1 и 2 (рис. 1) можно интерпретировать конформационным переходом спираль-глобула, т.к. в этой области рН наблюдается выпадение осадка. Переход спираль-глобула при приближении к точке рН осаждения полимера различен для хитозана с отличающимися ММ. Для хитозана с $MM = 1,1 \cdot 10^5$ этот переход соответствует значению $pH = 5,7$, в то время как макромолекул с в два раза большей ММ коллапсируют уже при $pH = 5,0$.

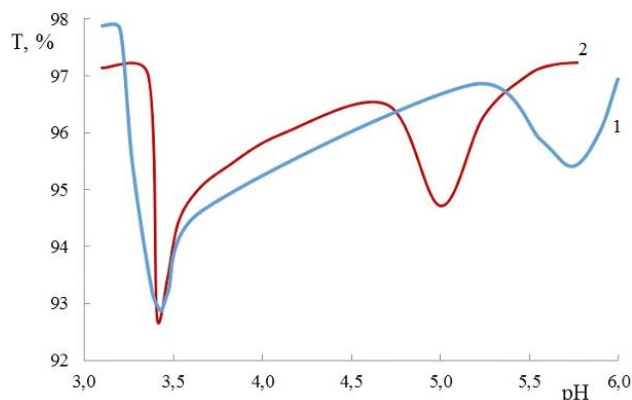


Рис 1. Изменение оптической плотности растворов хитозана с $MM = 1,1 \cdot 10^5$ (1), $MM = 2,2 \cdot 10^5$ (2).

Четкое определение конформационных переходов цепей хитозана открывает новые пути для модификации полимера.

Список литературы

[1] Федосеева Е.Н., Смирнова Л.А., Федосеев В.Б. // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2008. № 4. С. 59-64.

Изучение физико-механических свойств базальтосодержащих полиэтиленовых композиций

Тожиев П.Ж.¹, Нормуродов Б.А.¹, Тураев Х.Х.¹,
Нуркулов Ф.Н.², Джалилов А.Т.²

¹Термезский государственный университет, Термез, Узбекистан.

²ГУП Ташкентский научно-исследовательский институт химической технологии, Ташкент, Узбекистан

E-mail: sh_kasimov@rambler.ru

В настоящее время существуют различные виды наполнителей для полимеров, и их количество с каждым годом увеличивается, что связано с расширением областей применения полимерных материалов. Кроме того, современные экономические условия требуют получения материалов не только с высоким комплексом характеристик, но и доступных, с достаточно низкой стоимостью [1]. Поэтому большие потенциальные возможности улучшения характеристик композиционных материалов заложены в использование

недорогих и эффективных наполнителей, в число которых, безусловно, входят базальт и его производные.

Определение физико-механических свойств показало, что при введении до 50 масс.ч. базальта как в ПЭНП, сохраняется комплекс всех свойств (табл.), в то же время отмечено повышение прочности при разрыве и понижение относительного удлинения при разрыве. Это может быть объяснено изменением характера разрушения композита.

Таблица. Сравнительная характеристика физико-механических свойств разработанных ПМК.

Состав композиции, масс.ч., на 100 масс.ч. ПЭ	Изгибающее напряжение, МПа	Разрушающее напряжение при растяжении, МПа	Относительное удлинение при разрыве, %	Прочность при разрыве, МПа
ПЭНД	17	28	1184	9,12
ПЭНД+30 базальта	24	14	95,39	11,5
ПЭНД+40 базальта	28	14	35	13,7
ПЭНД+50 базальта	25	13	12	15,9

Список литературы

[1] Бредихин П.А., Нуртазина А.С., Кадыкова Ю.А. Влияние базальта различных месторождений на свойства полиэтилена // Ползуновский вестник. - №3. – 2016. –С. 148-150.

Влияние количества базальта на показатели горючести полиэтилена

Тожиев П.Ж.¹, Нормуродов Б.А.¹, Тураев Х.Х.¹,
Нуркулов Ф.Н.², Джалилов А.Т.²

¹*Термезский государственный университет, Термез, Узбекистан.*

²*ГУП Ташкентский научно-исследовательский институт химической технологии, Ташкент, Узбекистан*

E-mail: sh_kasimov@rambler.ru

Уникальные свойства базальта делают его одним из самых востребованных материалов. Базальт не горюч и способен выдерживать температуры до 900⁰С, прочен и устойчив к механическим воздействиям, обладает высокими звуко- и теплоизоляционными свойствами, биологической стойкостью, а также химической нейтральностью – устойчив к влиянию агрессивных кислотных и щелочных сред, не накапливает радиацию [1, 2].

Оценку реологических свойств наполненных композитов проводили по пределу текучести расплава (ПТР). С повышением содержания базальта в ПКМ, текучесть композиции уменьшается (табл.), но вместе с тем композиции, наполненные базальтом, можно перерабатывать методом литья под давлением.

Таблица. Влияние количества базальта на показатели горючести полиэтилена и изменение показателя текучести расплава композиции при 200⁰С в зависимости от ее состава (размер частиц ≤140 мкм).

Состав композиции, масс.ч.,	ПЭ ПТР, г/10мин,	Потеря массы при поджигании на воздухе, %	Время самостоятельного горения, сек.
ПЭНД	5,30	56	238
ПЭНД+30 базальта	3,18	32	147
ПЭНД+40 базальта	2,75	25	125
ПЭНД+50 базальта	2,12	23	113

Введение дисперсного базальта оказывает влияние на показатели горючести ПМК, снижая время самостоятельного горения в 2 раза по сравнению с чистым полиэтиленом, так же уменьшается потеря массы при поджигании на воздухе. Все показатели горючести изменяются аддитивно содержанию наполнителя, являющегося негорючим материалом.

Список литературы

- [1] Бредихин П.А., Кадыкова Ю.А. Исследование свойств ПКМ, наполненных дисперсным базальтом // V Международная студенческая электронная научная конференция «Студенческий научный форум» - 2013.
- [2] Курбанов А.А. Разработка рациональной технологии переработки разнотипных базальтов Узбекистана // автореферат докторской диссертации по спец. 04.00.14–Обогащение полезных ископаемых (технические науки), Навои, -2016. –29 с.

Триметилгидразиний пропионата дигидрат. Синтез, свойства, применение в медицине

Харитонов К.О., Кадомцева А.В.

Нижегородская государственная медицинская академия МЗ РФ,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: kadomtseva@nizhgma.ru

Триметилгидразиний пропионата дигидрат представляет собой белый кристаллический порошок со слабым запахом, легко растворим в воде, трудно – в спирте. Гигроскопичен. Сначала соединение было описано в виде дигидрата, имеющего положительный заряд на гидрозиниевом фрагменте и отрицательный на карбоксилатной группе. В ЯМР-спектре на ядрах водорода (¹H) наблюдается два сигнала с химическими сдвигами $3,11 \cdot 10^{-6}$ — 3,11 м д. (миллионных долей), (принадлежит триплету CH₂) и 3,30 м д. (принадлежит синглету CH₃).

Синтез включает разделение смеси, полученной в результате щелочного гидролиза бромида метилпропионата триметилгидразиния и отделения бромида калия, при этом смесь после отделения бромида калия обрабатывают ортофосфорной кислотой и смесью моно- и дизамещенного фосфата аммония, а

полученную суспензию фосфатов калия в водном растворе фосфатов триметилгидразиний-пропионата фильтруют, выделяя фосфаты калия, из раствора, содержащего фосфаты триметилгидразинийпропионата, выкристаллизовывают охлаждением и отфильтровывают фосфат триметилгидразиний-пропионата, который после промывки изопропанолом суспендируют в изопропаноле, затем суспензию фосфата триметилгидразиний-пропионата в изопропаноле обрабатывают аммиаком, из раствора, содержащего моногидрат триметилгидразиний-пропионата, выделяют двузамещенный фосфат аммония $((\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4)$, который рециклизуют, охлаждают раствор моногидрата триметилгидразиний-пропионата в изопропиловом спирте и добавлением воды гидрат 3-(2,2,2-триметилгидразиний)-пропионата переводят в дигидрат 3-(2,2,2-триметилгидразиний)-пропионата.

В организме человека карнитин синтезируется из γ -бутиробетаина. Является структурным аналогом γ -бутиробетаина, и поэтому может ингибировать фермент γ -бутиробетаингидроксилазу, ответственный за синтез карнитина, также снижает абсорбцию экзогенного карнитина в тонкой кишке благодаря конкурентному воздействию на специфический белок-транспортер OCTN2 (organic carnitine cation transporter 2), а также транспорт длинноцепочечных жирных кислот через оболочки клеток, препятствует накоплению в клетках активированных форм неокисленных жирных кислот - производных ацилкарнитина и ацилкоэнзима А. Период его полураспада составляет 12 часов, а полное выведение из организма осуществляется в течение нескольких суток. В настоящее время он применяется для улучшения метаболизма, является аналогом гамма-бутиробетаина. В условиях ишемии восстанавливает равновесие процессов доставки кислорода и его потребления в клетках, предупреждает нарушение транспорта АТФ; одновременно с этим активирует гликолиз, который протекает без дополнительного потребления кислорода. В результате снижения концентрации карнитина усиленно синтезируется гамма-бутиробетаин, обладающий вазодилатирующими свойствами. Механизм действия определяет многообразие его фармакологических эффектов: повышение работоспособности, уменьшение симптомов психического и физического перенапряжения, активация тканевого и гуморального иммунитета, кардиопротекторное действие. В случае острого ишемического повреждения миокарда замедляет образование некротической зоны, укорачивает реабилитационный период. При сердечной недостаточности повышает сократимость миокарда, увеличивает толерантность к физической нагрузке, снижает частоту приступов стенокардии. При острых и хронических ишемических нарушениях мозгового кровообращения улучшает циркуляцию крови в очаге ишемии, способствует перераспределению крови в пользу ишемизированного участка. Эффективен при сосудистой и дистрофической патологии глазного дна. Оказывает тонизирующее действие на ЦНС, устраняет функциональные нарушения со стороны нервной системы у больных хроническим алкоголизмом при синдроме абстиненции.

Способ получения N-циклогексил-2-бензтиазолилсульфенамида окислительной конденсацией с использованием пероксида водорода

Хилько П.Р., Апевалин И.В, Иванкина О.М., Курунина Г.М.
*Волжский политехнический институт (филиал)
Волгоградского государственного технического университета
Волжский, Россия
E-mail: ivankin63@mail.ru*

N-циклогексил-2-бензтиазолилсульфенамид (сульфенамид Ц₆) - ускоритель вулканизации резиновых смесей на основе различных синтетических каучуков, обеспечивающий хорошее замедление подвулканизации при температурах переработки и высокую скорость самой вулканизации [1].

Один из способов получения сульфенамида Ц - реакция окислительной конденсации 2-меркаптобензтиазола (2-МБТ) и циклогексиламина (ЦГА). Растворителем в процессе может служить избыток исходного амина. Окисляющим агентом могут быть галогены [2], соли хлорноватистой кислоты [3], пероксида водорода [4], перманганата калия, кислорода и др. В предложенном нами способе в качестве окислителя использовали раствор пероксида водорода, как наиболее экологически безопасного окислителя.

В проведенных ранее исследованиях были установлены условия проведения процесса обеспечивающие максимально возможный выход и высокое качество получаемого продукта. Оптимальное мольное соотношение 2-МБТ: ЦГА составляет 1: 4, оптимальная концентрация перекиси водорода 13%, температура синтеза 20-25 °С. При этом технологический выход составил 80%. Содержание основного вещества по результатам анализа 98%, температура плавления 101-103°С [5]. Установлено, что из-за высокой растворимости сульфенамида Ц в ЦГА, часть целевого продукта терялась с маточным раствором.

Было предложено для предотвращения потерь сульфенамида снизить мольное соотношение 2-МБТ: ЦГА до 1:3,5. В этих условиях несколько вырос расход раствора пероксида водорода (примерно на 10%). Однако, технологический выход целевого продукта возрос до 83-85%, ухудшения качества продукта не произошло.

Список литературы

- [1] Химия и технология ускорителей вулканизации бензтиазольного типа: монография / Г.М. Бутов, О.М. Иванкина, М.В. Крякунов, Т.В. Рудакова – ВПИ (филиал) ВолгГТУ. – Волгоград: ИУНЛ ВолгГТУ, 2013 г.–196 с
- [2] А.с. СССР SU 724508 (1980), Бюл. № 12.
- [3] А.с. СССР SU 689174 (1980). Без опубликования.
- [4] Пат. Китая CN 1523020 (2004).
- [5] Морина А.С., Иванкина О.М.// Международный студенческий вестник. 2017. № 4-8. С.1276-1278.

Солюбилизация производного адамантана
в мицеллярных растворах полимера Pluronic F 127

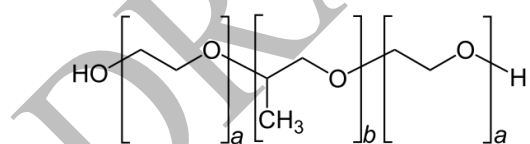
Чебрякова А.И.¹, Волкова Т.В.²

¹Ивановский государственный химико технологический университет,
Иваново, Россия

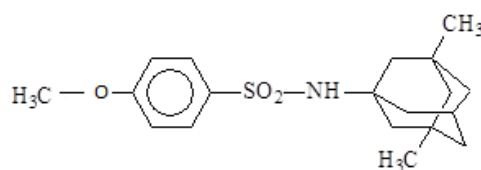
²Институт химии растворов им. Г.А. Крестова, Иваново, Россия
E-mail: annachebryakova@mail.ru

Традиционным подходом к достижению терапевтической концентрации биологически активного соединения в клетках является увеличение дозы назначаемого активного вещества, что не только приводит к побочным эффектам, но и зачастую является невыполнимым в связи с его низкой растворимостью. Рациональным подходом в решении этой проблемы является применение полимерных систем доставки, среди которых широко используются блоксополимеры этиленоксида и пропиленоксида - плуроники. Благодаря наличию гидрофильного полиэтиленоксидного блока и гидрофобного полипропиленоксидного блока плуроники обладают амфифильными свойствами, которые определяют их эффективность, в том числе и как солюбилизаторов.

Лекарственные препараты на основе адамантана имеют широкое применение в фармацевтике. Они могут считаться уникальными препаратами XXI века, которые способны контролировать функциональную активность нервной и иммунной систем, регулировать нейроиммунный гомеостаз, усиливать сопротивляемость организма к вирусным и бактериальным инфекциям, а также к другим неблагоприятным факторам среды.



Pluronic F 127



N-(3,5-Dimethyl-adamantan-1-yl)-4-oxymethyl-benzenesulfonamide

Методом изотермического насыщения в работе была определена растворимость соединения класса адамантанов в системах фосфатный буфер/Pluronic F 127 при различных концентрациях полимера в интервале температур 25-40⁰С. Рассчитаны термодинамические параметры процесса растворения.

Тетра-4-(4'-бромфенокси)фталоцианины и сульфокислоты на их основе

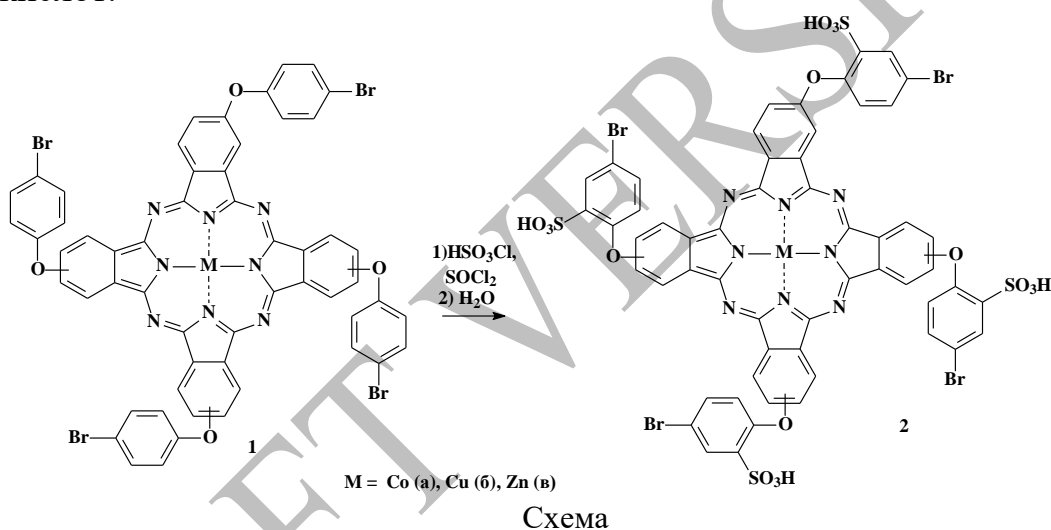
Чеснов А.А., Тихомирова Т.В., Шапошников Г.П.

Ивановский государственный химико-технологический университет,

НИИ МГЦ, Иваново, Россия

E-mail: tararjkina@mail.ru

Низкая растворимость незамещенных фталоцианинов (Pc) в большинстве растворителей ограничивает их возможные области применения. Введение функциональных заместителей в бензольные кольца придает им способность растворяться в различных растворителях (легкокипящих органических или водно-щелочных), что существенно расширить области практического использования. В связи с этим целью данной работы был синтез и изучение спектральных свойств тетра-4-(4'-бромфенокси)фталоцианинов и их сульфокислот.



Синтез тетра-4-(4'-бромфенокси)фталоцианинов (**1а-в**) осуществляли нитрильным методом путем взаимодействия 4-бифенилоксифталоцианила с ацетатами кобальта, меди и цинка при температуре 185-190°C. Синтезированные фталоцианины очищали методом колоночной хроматографии. Получение сульфокислот тетра-4-(4'-бромфенокси)фталоцианинов (**2а-в**) осуществляли сульфохлорированием соответствующих замещенных фталоцианинов (**1а-в**) с последующим гидролизом образовавшихся сульфохлоридов при их кипячении с водой.

Подтверждение состава и структуры синтезированных соединений проводили с привлечением современных физико-химических методов анализа.

Полученные фталоцианины (**1а-в**) обладают растворимостью в хлороформе и ДМФА, а их сульфокислоты (**2а-в**) – в воде, что позволило изучить их спектральные характеристики в данных растворителях.

Работа выполнена в рамках Государственного задания 4.1929.20017/4.6 и Гранта Президента РФ МК-161.2017.3 с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ФГБОУ ВО «ИГХТУ».

**Амидирование метиловых эфиров жирных кислот
N,N-диметиламинопропиламином в присутствии аминоспиртов**

Ширшин К.К.^{1,2}, Ершов Д.А.², Гущин А.В.¹

¹*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

²*Нижегородский государственный технический университет
им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия*

E-mail: kkshirshin@mail.ru

Амиды жирных кислот находят широкое применение в косметической, фармацевтической и пищевой промышленности. Такие амиды часто используются в качестве эмульгаторов и плёнкообразующих ингибиторов сернокислой коррозии. Традиционно амиды жирных кислот получают взаимодействием кислот с соответствующими аминами. В настоящее время альтернативным сырьём для получения амидов являются метиловые эфиры жирных кислот (МЭЖК), получаемые переэтерификацией растительных непищевых масел метанолом.

Процесс амидирования МЭЖК N,N-диметиламинопропиламином (ДМАПА) представляет собой классическую реакцию нуклеофильного замещения. Известно, что подобные реакции должны катализироваться сильными основаниями или сильными кислотами. Однако в настоящее время рассматриваются и другие химические методы стимулирования данной реакции. Так, например, нами предлагается стимулирование амидирования с помощью водородных связей. Действительно, наличие водородных связей между кислородом эфирной группы и стимулятором способно несколько ослабить связь C=O, что делает атом углерода более привлекательным для атаки нуклеофила, с последующим образованием амида тетрагонального строения. Процесс разрушения этого амида протекает по тому же механизму, по которому он и был образован.

В ходе ряда экспериментов был протестирован ряд стимуляторов. Так, скорость реакции возрастает в присутствии этаноламинов. Добавки моноэтаноламина (5% мольн.) слабо влияют на скорость реакции, в то время как, добавки диэтаноламина, метилдиэтаноламина и триэтаноламина (5% мольн.) в значительной степени способствуют увеличению скорости реакции. Дальнейшее увеличение концентраций стимуляторов оказывает незначительное влияние на рост начальной скорости реакции, что, по-видимому, связано с определенным пределом растворимости стимуляторов в реакционной массе.

Необходимо отметить, что кроме аминоспиртов, потенциальными стимуляторами данных реакций могут являться одноатомные спирты, гликоли и глицерин. Стимулирование реакций нуклеофильного замещения веществами, содержащими ОН-группы, становится достаточно перспективным направлением в зарубежной литературе.

Влияние концентрации фталоцианина кобальта на морфологию синтезированного полианилина

Шишкина А.Н., Шигапова А.Р.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

E-mail: anastasia.shishkina1993@mail.ru

Полианилин (ПАНИ) в настоящее время является наиболее распространенным электропроводящим полимером. Благодаря широкому спектру полезных свойств, ПАНИ находит применение во многих областях народного хозяйства. Как правило, высокомолекулярное соединение получают, путем окислительной химической полимеризации анилина в течение 24 – 48 часов, а выход при этом составляет 50 %.

Для сокращения времени преобразования мономера в полимер в настоящей работе проведен синтез с добавлением в качестве катализатора фталоцианина кобальта. Реакция завершалась за 1 час с количественным выходом продукта. Изучено влияние концентрации вводимого в процесс катализатора на морфологию выделяемого полимера. Морфология приготовленных образцов ПАНИ исследована с помощью сканирующей электронной микроскопии (SEM MIRA3 TESCAN) (рис. 1).

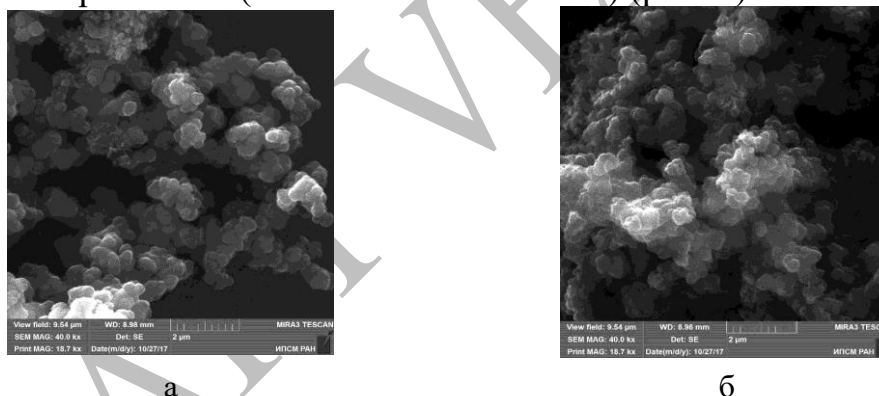


Рисунок 1. СЭМ изображение ПАНИ, полученного с минимальным количеством катализатора (а) и ПАНИ, полученного с максимальным количеством катализатора (б).

На СЭМ изображениях видно, что обе пленки полимера имеют похожую морфологию, состоящую из взаимосвязанных глобулярных структур и небольшого количества волокон. Структура синтезированных высокомолекулярных соединений идентична той, которая имеет место быть для образца ПАНИ, синтезированного по классической методике. Следовательно, присутствие катализатора влияет на такие основные характеристики целевого продукта, как, например, проводимость. Тем не менее, необходимо отметить, что при введении в полимеризационный процесс максимального количества фталоцианина кобальта, целевой продукт отличается большим количеством волокон. В отсутствие катализатора структура ПАНИ, полученного по классической методике, характеризуется глобулярной аморфностью.

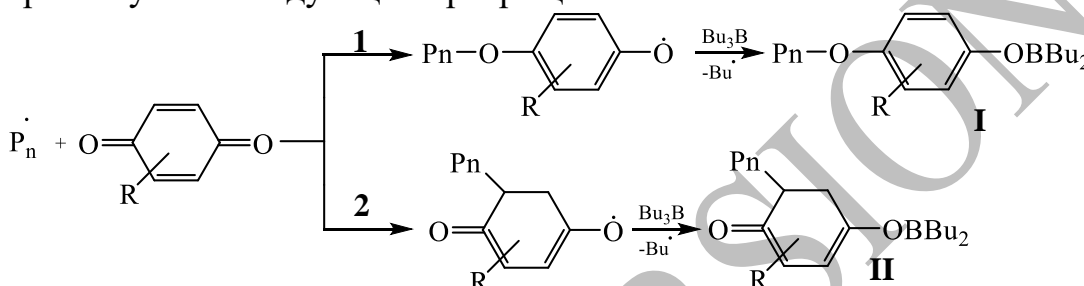
Влияние температуры на полимеризацию метилметакрилата в присутствии системы три-*n*-бутилбор – *n*-хинон

Шувалов С.Э., Полозов Е.Ю.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: sereja.shuvalov@yandex.ru

При полимеризации метилметакрилата в присутствии три-*n*-бутилбора и *n*-хинона реализуются следующие превращения:



Продукты **I** и **II** идентифицировали методами УФ-спектроскопии и МАЛДИ-масс-спектрометрии. Соотношение **I** и **II** определяется электронными и стерическими характеристиками заместителей **R** *n*-хинона [1], не зависит от способа иницирования термо- [1] и фото- [2]. Продукты **I** являются макроинициаторами SFRP.

С увеличением температуры для нафтохинона увеличивается доля продукта **II**, а для 2,5-ди-*трет*-бутил-*n*-хинона – **I**. Для *n*-бензохинона наблюдается тенденция к уменьшению концентрации продуктов **II** и накоплению продуктов **I**, что полностью исключалось при 30°C по данным работ [1, 2].

Появление продуктов направления **I** должно привести к реализации механизма SFRP в присутствии *n*-бензохинона совместно с три-*n*-бутилбором. Подтверждение чего является пост-полимеризация иницируемая 5 масс.% полиметилметакрилата, синтезированного в присутствии бензохинона (рис. 1).

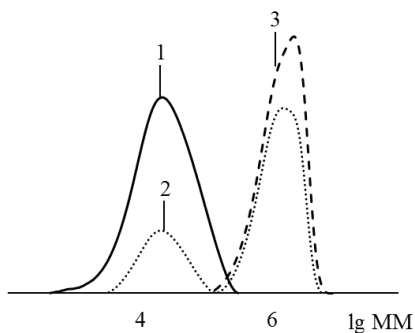


Рис. 2. Кривые ММР ПММА-инициатора (1) и пост-полимера, полученного за 2 часа (2) и 4 часа (3) при 80°C.

Список литературы

- [1] Додонов В.А., Кузнецова Ю.Л., Лопатин М.А., Скатова А.А. // Изв. РАН. 2004. № 10. С. 2114.
[2] Кузнецова Ю.Л., Чесноков С.А., Зайцев С.Д., Додонов В.А.. // Высокомолекулярные соед. 2010, Т. 52 Б. № 3. С. 498.

Изучение процессов гидрирования непредельных циклических углеводородов в присутствии наночастиц никеля, нанесенных на подложку

Небыков Д.Н., Щербакова К.В.

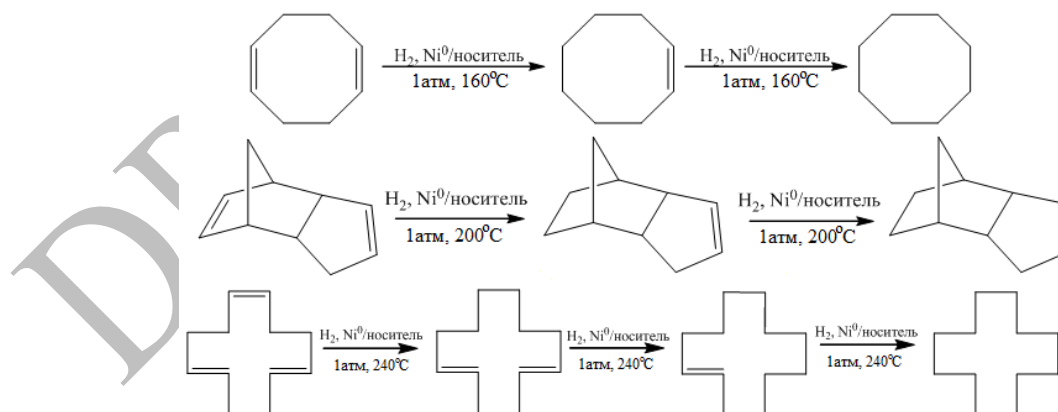
Волгоградский государственный технический университет, Волгоград, Россия

E-mail: killcelery@gmail.com

Непредельные циклические углеводороды в химической промышленности служат сырьем для получения широкого ряда ценных продуктов, например, циклододекана, который используется для получения додекалактама; экзотетрагидродициклопентадиена, который применяется при производстве высококалорийного ракетного топлива, а также циклооктана, который является сырьем для синтеза пробковой кислоты.

Применение катализаторов в виде наночастиц открывает множество новых возможностей в области органического синтеза, и реакций гидрирования, в частности. Катализаторы такого рода, обладают большой удельной поверхностью и, следовательно, проявляют более высокую каталитическую активность.

В ходе данного исследования были изучены процессы гидрирования непредельных циклических углеводородов в присутствии наночастиц никеля, иммобилизованных на подложке. В качестве носителей использовали Цеокар-2, оксид алюминия, цеолиты NaX и A. Катализатор получали пропиткой водным раствором гексагидрата хлорида никеля (II) с последующим восстановлением тетрагидроборатом натрия или гидразин моногидратом. Процессы проводили в интервале температур 160-240°C при атмосферном давлении, 3-6-кратном избытке водорода в реакторе проточного типа.



Изученные катализаторы показали высокую активность и селективность в изучаемых процессах. В зависимости от используемой подложки, восстановителя предшественника и условий проведения процесса возможно получение продуктов как исчерпывающего восстановления с селективностью до 100% при полной конверсии исходного соединения, так и селективного гидрирования с выходом до 98% при полной конверсии субстрата.

Исследование модификации хлорсульфированного полиэтиленера эпоксидными модификаторами

Эркаев А.М., Нуркулов Ф.Н., Джалилов А.Т.

*ГУП Ташкентский научно-исследовательский институт химической
технологии, Ташкент, Узбекистан*

E-mail: ardasher_82@mail.ru

Как известно, наиболее реакционноспособной группой в хлорсульфированном полиэтилене (ХСПЭ) является хлорсульфоновая группа. Модификация полимера проводилась в растворе толуола при нормальных условиях. Возможные схемы превращений макромолекул хлорсульфированного полиэтилена по указанной группе разработанными модифицирующими добавками представлены ниже [1].

Были отработаны технологические режимы получения модификаторов на основе эпихлоргидрина и меламина. В результате проведенных исследований нами установлено, что при взаимодействии эпихлоргидрина с меламином образуется продукт ЭМЕ-1 при соотношении исходных реагентов 1:1 и при взаимодействии эпихлоргидрина с аддуктом меламина образуется продукт ЭМЕ-2 при соотношении исходных реагентов 2:1.

Физические свойства полученных модифицирующих добавок представлены в таблице.

Таблица 1. Свойства полученных модификаторов.

Тип Модификатора	Плотность, г/см ³	Показатель преломления
ЭМЕ-1	1,12-1,14	1,336-1,340
ЭМЕ-2	1,15-1,18	1,329-1,335

Взаимодействие разработанных модификаторов с макромолекулой ХСПЭ по хлорсульфоновой группе протекает с образованием сульфонамидной группировки и выделением хлороводорода, вступающего в реакцию со второй молекулой модификатора.

Таким образом, модификация ХСПЭ позволяет получить полимер с большим числом разнообразных адгезионно-активных групп.

Хлорсульфированный полиэтилен (ХСПЭ) широко применяется для создания покрытий, грунтовок, лаков, эмалей и герметиков. Данные материалы характеризуются комплексом ценных технических свойств: стойкостью к действию масел, озона и коррозионных сред.

Список литературы

[1] Иванова Е.Н. Регулирование структуры и свойств хлорсульфированного полиэтилена аминными соединениями / Е.Н. Иванова, Е.Д. Лебедева, В.С. Осипчик // Пластические массы. 2005. №6. – С.21-23.

Влияние концентрации дауномицина на размерные характеристики нанокompозита антибиотика с наночастицами селена

Яковлев И.В.¹, Боровикова Л.Н.², Киппер А.И.², Писарев О.А.^{1,2}

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

²Институт высокомолекулярных соединений РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Yakovlev.iliya@gmail.com

Изучение механизмов межмолекулярного взаимодействия наночастиц с антрациклиновыми антибиотиками и биосовместимыми полимерами, позволит создать новые противоопухолевые препараты, обладающего высокой селективностью и низкой токсичностью. Цель работы – исследование влияния концентрации дауномицина (ДМ) на размерные характеристики нанокompозитов антибиотика с наночастицами селена и поливинилпирролидона. Выбор веществ обусловлен их широким использованием в медицине. Были исследованы два возможных способа (I и II) проведения синтеза наночастиц Se по реакции (1) в присутствии ДМ и ПВП при атмосферном давлении и температуре 20 °С.



Способ I заключался в предварительной стабилизации наночастиц Se полимером с последующим введением ДМ. Способ II реализовывался путем предварительного образования комплекса между ДМ и ПВП с последующим восстановлением селена по реакции (1). Проведенные исследования методом динамического светорассеяния нанокompозитов Se⁰ – ДМ – ПВП в течении месяца показали воспроизводимость размерных характеристик и унимодальное распределение на всем протяжении времени исследования (гидродинамический радиус R_h изменялся не более чем на 10 %). На рис. 1 показана зависимость размеров нанокompозитов от концентрации введённого ДМ для способов синтеза I и II.

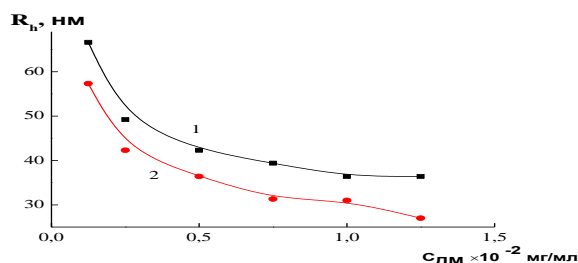


Рис. 1. Зависимость гидродинамического радиуса R_h от концентрации ДМ:
1 - I способ синтеза; 2 – II способ синтеза.

Таким образом, для обоих методов синтеза значение R_h убывает с увеличением $C_{\text{ДМ}}$ и радиусы нанокompозита, синтезированного по I способу больше, чем по II способу, это связано с последовательностью введения ДМ в реакцию синтеза нанокompозита.

Исследование азотсодержащих олигомеров для обессеривания природного газа от сероводорода

Яхияев Б.М., Нуркулов Ф.Н., Джалилов А.Т.

ГУП Ташкентский научно-исследовательский институт химической технологии, Ташкент, Узбекистан

E-mail: nfayzulla@mail.ru

Особенностью развития мирового топливно-энергетического комплекса в настоящее время является увеличение в его структуре доли природного газа. Природный газ остается самой быстро растущей составляющей в мировом потреблении энергии. При очистке природного газа используют аминную обработку, которая является хорошо известной технологией по удалению H_2S и CO_2 путем абсорбции и химической реакции [1].

В настоящее время явно выражена тенденция роста объема промышленного производства азотсодержащего абсорбента и расширение областей его применения в очистке природного газа. Несмотря на большой ассортимент материалов, на основе азотсодержащего абсорбента, требуется доработка составов и технологии применительно к условиям эксплуатации.

Проводились реакции полиэтиленполиаминов с хлорсодержащими органическими соединениями, в процессе получения проводились исследования физико-химических свойств олигомеров для очистки природного газа от сероводорода. Как видно из таблицы при оптимальных условиях ($T=90^{\circ}C$, $\tau=3ч$) высокий выход олигомерного соединения получается при соотношении полиэтиленполиамин: хлорсодержащее органическое соединение 2:2. При этом выход составляет 80 %. Полученное олигомерное соединение - вязкое вещество марки SS-99.

Таблица 1. Физико-химические характеристики олигомера.

Название олигомерного соединения	Агрегатное состояние	pH	Плотность, г/см ³	Растворимость
SS-99	Вязкое вещество	6,5-7,5	1,06	Растворяется в органических веществах

Таким образом, были определены физико-химические свойства азотсодержащего олигомера и доказано, что олигомер может быть использован для обессеривания природного газа от сероводорода.

Список литературы

[1] Строков А.А. Исследование очистки от сероводорода с помощью минеральных хемосорбентов генераторного газа, сжигаемого в энергетических парогазовых установках с газификацией углей: диссертация кандидата технических наук: 05.14.14./ Строков А.А.- Москва., 2015. -15с.

СЕКЦИЯ 2

Неорганическая химия, химия высокочистых веществ

Синтез и исследование урансодержащих соединений аланина и глицина

Алахмад Али, Князев А.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

aalahmad.87@gmail.com E-mail

Разработка новых гибридных металлоорганических материалов остается перспективной областью исследований, поскольку эти соединения обладают уникальными свойствами, которые могут быть использованы в передовых технологиях. Кристаллические гибридные материалы, такие как металлоорганические каркасы, являются предметом многочисленных исследований, учитывая перестраиваемость металлических центров, а также координационных лигандов. Первоначально эти материалы изучались из-за их обширных возможностей хранения газа, но в последнее время исследования расширились, включая разработку каталитических реакторов, датчиков и разделительных мембран. Кристаллическая технология гибридных материалов посредством супрамолекулярных взаимодействий, таких как водородные связи и π - π -взаимодействия, является еще одной хорошо исследованной областью, которая первоначально фокусировалась на взаимодействиях с малыми молекулами, но была расширена за счет включения новых композиций наночастиц и биомолекул, мезопористых материалов и металлических органических нанотрубок.

В настоящей работе изучены пути взаимодействия оксогруппы уранила в супрамолекулярных взаимодействиях и исследована роль водородных связей с зарядовой поддержкой для образования новых гибридных уранильных материалов. Наблюдается такой тип взаимодействия с катионом уранила и амидными функциональными группами белков и может играть значительную роль в биокоординировании и переносе урана в биологических системах. Для настоящего исследования выбраны две цвиттерионные протеиногенные аминокислоты – глицин (Gly) и L-аланин (Ala) в качестве органических лигандов из-за их цвиттерионной природы и получены три новых уранил-гибридных соединения: $[(\text{UO}_2)_3(\text{Gly})_2(\text{O})_2(\text{OH})_2](\text{H}_2\text{O})_6$ (1), $[(\text{UO}_2)_5(\text{Gly})_4(\text{O})_3(\text{OH})_3](\text{NO}_3)(\text{H}_2\text{O})_{12}$ (2) и $[(\text{UO}_2)_3(\text{Ala})_2\text{O}(\text{OH})_3](\text{NO}_3)(\text{H}_2\text{O})_3$ (3).

Изучено фазообразование данных соединений, выполнен фактор-групповой анализ и исследовано термическое поведение в т.ч. тепловое расширение.

**Физико-химическое исследование
железосодержащих фаз Руддлсдена-Поппера**

Алексеева Ю.В., Крашенинникова О.В., Князев А.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

E-mail: alekseeva.julia-chem@yandex.ru

Одним из перспективных направлений в энергетике является аккумуляция солнечной энергии посредством химических ячеек различного типа, например, фотокаталитического разложения воды. Данное направление является многообещающим по причине неисчерпаемости солнечного излучения и экологической чистоты водородного топлива.

На данный момент лишь немногие полупроводниковые материалы для таких ячеек демонстрируют достаточную эффективность в силу величин их запрещённой зоны. В связи с этим необходимы материалы с меньшим размером запрещённой зоны, высокой химической стабильностью и низкой стоимостью. Таким образом, интерес представляют ферриты, которые часто характеризуются низкой подвижностью зарядов и, следовательно, их рекомбинацией. Но недавние исследования показали, что рекомбинация зарядов может быть существенно снижена в некоторых слоистых соединениях, где разрешено только плоскостное движение зарядов. Такими соединениями являются представители семейства Руддлсдена-Поппера. Общую формулу можно записать в виде $A_{m+1}B_mX_{3m+1}$ или $AX(A'BX_3)$, где A, A' – катионы щелочных, щелочноземельных или редкоземельных элементов, B – катионы переходного металла, формирующие анионные октаэдры (m – количество октаэдрических слоев) [1].

С помощью высокотемпературных твердофазных реакций нами получены фазы состава $LaSrFeO_4$ ($m = 1$), $La_2SrFe_2O_7$ ($m = 2$), $Sr_3Fe_2O_7$ ($m = 2$). Реакционную смесь в необходимом стехиометрическом соотношении помещали в фарфоровый тигель, для получения однородной смеси навески реагентов тщательно перетирали в агатовой ступке в течение 10 минут, затем отжигали первоначально при $700\text{ }^\circ\text{C}$ в течение 5 часов, а затем проводили синтез в интервале температур $1000\text{--}1200\text{ }^\circ\text{C}$ в течение 12 часов.

Для всех полученных соединений определены температуры плавления методом дифференциальной сканирующей калориметрии. Для соединения $Sr_3Fe_2O_7$ методом адиабатической вакуумной калориметрии впервые изучена температурная зависимость изобарной теплоемкости.

Список литературы

[1] Александров К.С., Безносиков Б.В. Перовскиты. Настоящее и будущее. (Многообразие прафаз, фазовые превращения, возможности синтеза новых соединений)/ К. С. Новосибирск: Издательство СО РАН. – 2004. – с.231.

**Керамики для консолидации альфа-отходов,
полученные методом Spark Plasma Sintering**

Балкарова Ж.Б., Потанина Е.А., Болдин М.С., Ланцев Е.А.
*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: balkarowa.zhanna@yandex.ru*

Керамические материалы на основе минералоподобных соединений представляют собой перспективные матрицы для консолидации радиоактивных, в том числе альфа, отходов. Выбор химических форм таких материалов основан на принципах кристаллохимии и природоподобия.

В данной работе изучали минералоподобные соединения со структурами коснарита (NZP) и лангбейнита, характеризующиеся широким изоморфизмом образующих их атомов. Изученные соединения содержат в своем составе лантаниды и барий, которые являются химическими аналогами актинидов (Pu, Am, Cm) и радия.

Разработана методика синтеза порошков. Технологию SPS использовали для получения керамики на их основе (установка Dr.Sinter Model-625, SPS Syntex Inc. Ltd. (Япония)).

Порошки и керамики характеризовали методами рентгеновского анализа на порошковом дифрактометре Shimadzu LabX XRD-6000 и сканирующей электронной микроскопии (с помощью растрового электронного микроскопа Jeol JSM-6490).

Из экспериментов было установлено, что имело место образование керамики с высокими физико-механическими характеристиками (по сравнению с обычным методом спекания). Продолжительность процесса спекания составляла 15-17 минут. Полученные значения относительной плотности имели значения 96-99%.

Были проведены эксперименты по контролируемому изменению пористости, что необходимо для установления оптимальных условий для эффективного удаления гелия – продукта распада альфа-отходов - из керамических компаундов.

Получены предварительные данные об изучении процессов потока и диффузии гелия через керамику с контролируемой пористостью.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 16-13-10464).

Влияние распределения зарядов на атомах и энтальпии взаимодействия в стёклах $\text{GeS}_x\text{:Bi}$ ($1 < x < 2$) на их люминесцентную активность

Балуева К.В., Плехович А.Д., Вельмузов А.П., Кутьин А.М.
 Институт химии высокочистых веществ РАН им. Г.Г. Девярых,
 Нижний Новгород, Россия
 E-mail: balueva@ihps.nnov.ru

Халькогенидные стёкла благодаря широкой области пропускания, высокому показателю преломления и нелинейной восприимчивости используются в ряде устройств для хранения и передачи информации, в оптоэлектронике, фотонике и телекоммуникациях. Особый интерес представляют стёкла, активированные Bi, ввиду наличия у них ультраширокой полосы люминесценции, обеспечиваемой активными центрами висмута. В частности, для стёкол $\text{GeS}_x\text{:Bi}$ ($1 < x < 2$) люминесценция с максимумом около 1700 нм наблюдалась в диапазоне длин волн 1500-2500 нм при возбуждении на длине волны 975 нм. При этом наиболее интенсивную люминесценцию показало стекло состава $\text{GeS}_{1.5}$, легированное 0.5 ат.% Bi.

В настоящее время данные о природе инфракрасной люминесценции активного центра висмута в зависимости от его координационного окружения в халькогенидных стёклах (координационное число КЧ = 3 или 4), межатомных расстояний Bi-S и других факторов весьма противоречивы.

Целью работы является разработка методики оценки энергетики взаимодействия компонентов стекла $\text{GeS}_x\text{:Bi}$ ($1 < x < 2$) во взаимосвязи с распределением зарядов на атомах и влияния этих факторов на степень окисления висмута в зависимости от состава.

Для решения поставленной задачи использована модель валентных состояний (МВС) атомов в химическом соединении. Стандартная энтальпия образования в МВС при заданных числах атомов n_i и их валентных орбиталей v_i определяется потенциалами a_i и потенциальными коэффициентами b_i , которые однозначно взаимосвязаны с энергиями ионизации и сродства атомов к электрону в соответствующих валентных состояниях:

$$\Delta_f H^\circ = \sum n_i \gamma_i v_i b_i \delta_i (1 - \delta_i), \quad \gamma_i = \left(A_0 \frac{v_i^\omega v^{1-\omega}}{v} \right),$$

$$\delta_i = \frac{a - a_i}{b_i}, \quad a = \frac{\sum n_i v_i^{a_i/b_i}}{\sum n_i^{v_i/b_i}}.$$

Заряды на атомах (δ_i) в свою очередь определяются результирующим потенциалом (a) химического соединения. Введённый в базовую формулу коэффициент активности γ_i в виде относительного перекрытия объемов i -ой орбитали v_i и молекулярной v на полуэмпирической основе учитывает различия размеров атомных орбиталей.

Расчёты по формуле позволили выявить корреляции поверхности распределения эффективного заряда на висмуте $\delta_{\text{Вi}}$ с поверхностью энтальпий образования стекла $\Delta_f H^\circ$ в зависимости от его состава.

Вычисленные по формуле стандартные энтальпии образования возможных соединений позволили по методу Гиббса рассчитать состав стекла, взаимосвязанный со степенью окисления висмута.

Получение и исследование гексауратов рубидия и цезия

Бахметьев М.О., Чаплиёва К.А., Нипрук О.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: maximbakh@mail.ru

Взаимодействием $\text{UO}_3 \cdot 2,25\text{H}_2\text{O}$ с водными растворами гидроксидов $\text{M}^{\text{I}}\text{OH}$ (M^{I} – Rb, Cs) впервые синтезированы уранаты рубидия и цезия. Методами рентгенофлуоресцентной спектроскопии, рентгенографии, ИК-спектроскопии, дифференциально термического и термогравиметрического анализов исследован состав и установлено строение полученных соединений.

Элементный состав установлен методом РФА после растворения соединений в разбавленной азотной кислоте. Анализ проведён по характеристическим линиям: $\text{RbK}\beta$, $\text{CsL}\alpha$, $\text{UL}\alpha$ и $\text{UL}\beta$. Содержание воды определено нагреванием образцов при температуре 600°C . Полученные соединения являются кристаллогидратами гексауратов состава: $\text{Rb}_2\text{U}_6\text{O}_{19} \cdot 11\text{H}_2\text{O}$ (1) и $\text{Cs}_2\text{U}_6\text{O}_{19} \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ (2).

Методом рентгенофазового анализа порошкообразных образцов установлено, что соединения являются хорошо сформированными индивидуальными кристаллическими фазами. Наличие рефлексов на малых углах 2θ и пинакоидальных максимумов указывает на слоистый тип структуры.

В ИК-спектре соединений наблюдается четыре типа полос поглощения: молекулярной воды, уранильного фрагмента $\text{UO}_2^{\delta+}$, группы UOH и связей U-O_{eq} в кислородном полиэдре урана. Деформационные колебания $\delta(\text{H}_2\text{O})$ смещены от 1595 см^{-1} , характерных для молекулярной H_2O в газовой фазе, к 1635 см^{-1} для (1) и 1624 см^{-1} для (2) из-за образования Н-связей. По той же причине валентные колебания $\nu_{\text{as}}(\text{H}_2\text{O})$ и $\nu_{\text{s}}(\text{H}_2\text{O})$ не разрешены и представляют собой широкую полосу с максимумом поглощения при 3509 см^{-1} и 3508 см^{-1} для (1) и (2) соответственно. Валентные $\nu_{\text{as}}(\text{UO}_2^{\delta+})$ колебания представлены полосой при 915 см^{-1} (1) и 925 см^{-1} (2). Отсутствие полосы $\nu_{\text{s}}(\text{UO}_2^{\delta+})$ указывает на симметричность и равноплечность уранильного фрагмента. Деформационные колебания $\delta(\text{UOH})$ представлены полосой при 982 см^{-1} и 996 см^{-1} , а валентные $\nu(\text{UOH})$ - плечом с максимумом поглощения при 3318 см^{-1} и 3315 см^{-1} для (1) и

(2) соответственно. Планарные колебания $U-O_{eq}$ в кислородном полиэдре урана отображены полосами при $400 - 600 \text{ см}^{-1}$ для (1) и (2).

Исследована термическая устойчивость гексауранатов и показано, что единственным процессом в интервале температур $60^\circ\text{C}-350^\circ\text{C}$ является дегидратация. Продукты термораспада $t > 900^\circ\text{C}$ – уранаты M^I и U_3O_8 .

На основании проведённых исследований установлено, что соединения (1) и (2) обладают слоистой структурой. Кислородные полиэдры урана формируют отрицательно заряженные слои. Катионы M^+ и молекулы воды находятся в межслоевом пространстве и вместе с гидроксидными группами обеспечивают связывание слоёв.

Все исследования проведены на оборудовании фирмы Shimadzu.

Получение высокочистого железа методом разложения пентакарбонила железа

Белозеров Ю.С., Буланов А.Д.

ФГБУН Институт химии высокочистых веществ РАН,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: belozerov@ihps.nnov.ru

Высокочистые изотопнообогащенные железосодержащие материалы в настоящее время находят применение при проведении исследований различными спектроскопическими методами, в частности применяемых в медицине для диагностики и лечения заболеваний крови, а также заболеваний, связанных с дефицитом железа. Также изотопнообогащенное железо используется при исследовании свойств ряда аморфных и кристаллических материалов, пленок с уникальными магнитными свойствами [1]. Пентакарбонил железа $Fe(CO)_5$, благодаря низким температурам плавления и кипения, является подходящим соединением как для разделения изотопов железа, так и для его очистки от примесей.

Для получения карбонильного железа из очищенного нами дистилляцией пентакарбонила был изготовлен аппарат, представляющий собой вертикально расположенную трубу из кварцевого стекла, запаянную снизу. При помощи двух трубчатых печей в аппарате создается две температурные зоны: $270-280^\circ\text{C}$ в верхней части аппарата (основная зона разложения карбонила), $290-300^\circ\text{C}$ в нижней части. Повышенная температура в нижней части аппарата гарантирует отсутствие проскока карбонила. Разложение пентакарбонила железа проводилось при следующих скоростях потока газов: азота – 220 мл/мин, водорода – 24 мл/мин. Для удаления примесей углерода и кислорода после остановки подачи карбонила в аппарат разложения проводился отжиг полученного порошка железа в токе водорода при температуре 350°C . Полученный таким образом порошок был проанализирован методом ЛМС.

Согласно данным анализа, содержание следующих примесей в данном образце меньше, чем в получаемом из того же сырья промышленном карбонильном железе: титана – на 3 порядка, кремния – на 2 порядка, никеля, меди, кальция, алюминия, натрия, магния – на порядок, фосфора и цинка – на полпорядка, хрома – в 3 раза, селена – в 2 раза. Кроме того, содержание примесей никеля (в 4 раза), натрия и хрома (в 3 раза) ниже, чем их содержание в образце железа, представленном на Выставке-коллекции веществ особой чистоты [2].

Список литературы

- [1] Изотопы. // ред. В.Ю. Баранов. – Москва: Физматлит. 2005. т. 2, с. 705-707.
[2] Лазукина О.П., Малышев К.К., Волкова Е.Н., Чурбанов М.Ф. Примесный состав образцов Выставки-коллекции веществ особой чистоты I. Образцы простых веществ, поступившие в 2007-2015 гг. // Неорганические материалы. 2017. Т.53. №2. с. 220–228.

Высокотемпературные исследования соединения KNbTeO_6

Блохина А.Г., Князев А.В., Лавренова Ж.А., Федоркина Е.О.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Ниžний Новгород, Россия
E-mail: Allona.rom@yandex.ru

Материалы со структурой минерала пирохлора находят широкое применение в качестве адсорбентов, ионных проводников, а в последнее время и как фотокатализаторы для разложения воды. Использование материалов со структурой минерала пирохлора в данных аспектах сопряжено с работой при высоких температурах. Таким образом, изучение свойств соединений данного класса в условиях высоких температур, является актуальной задачей. В данной работе представлены высокотемпературные исследования соединения KNbTeO_6 методом ДСК в сочетании с высокотемпературной рентгенографией и спектроскопии комбинационного рассеивания при высокой температуре. Соединение KNbTeO_6 является одной из основных фаз на основе теллуридной стеклокерамики. Кроме того, это соединение используется в качестве фазы ионного обмена для синтеза серийного пирохлора.

Данным термического анализа (DTA) и высокотемпературной рентгенографией, позволили установить некоторые особенности процессов, происходящих с соединением при нагревании. На рисунке 1 представлена кривая DTA для KNbTeO_6 , где мы можем видеть три эндотермических эффекта при 1079K, 1137K, 1208K.

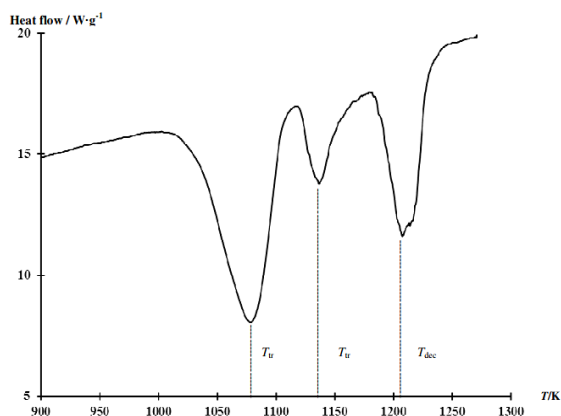


Рисунок 1. Кривая DTA KNbTeO_6

На рисунке 2 представлены спектры комбинационного рассеивания в диапазоне температур от 993К до 1223К.

При анализе спектров мы можем наблюдать падение интенсивностей и появления боковой полосы около 122 см^{-1} при 1143 К (обозначено красной стрелкой на рисунке 2). Появление боковой полосы при 122 см^{-1} и данные термического анализа, указывают на структурный фазовый переход около (1133-1143) К. Данный фазовый переход является фазовым переходом первого рода и приводит к разупорядочению кристаллической фазы KNbTeO_6 с сохранением структуры пирохлора.

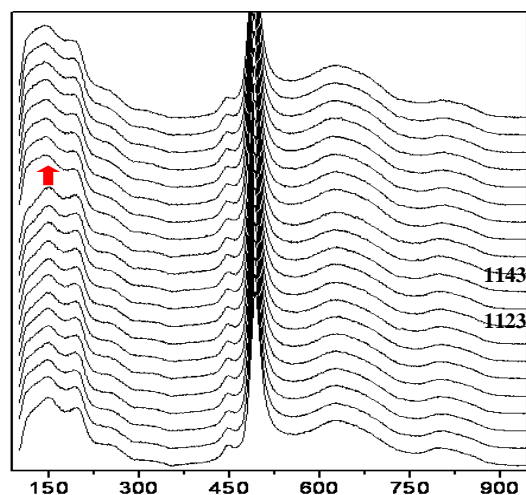


Рисунок 2. Спектр КР KNbTeO_6

Синтез и фазообразование сульфат-фосфатов со структурой минерала эвлитина

Боков А.И., Дмитриенко А.С.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: temabokov@mail.ru*

Повышенный интерес к сульфат-фосфатам различного строения объясняется расширяющейся перспективой их использования в качестве материалов, обладающих высокими температурами плавления/разложения, низким тепловым расширением, что позволяет применять их в качестве элементов высокотехнологичных устройств (лазеры, светодиодная техника, микроволновые установки), работающих в экстремальных условиях.

Значительная разность в температурах получения фосфатов (температуры синтеза $>800^\circ\text{C}$) и термической устойчивости сульфатов (многие термически неустойчивы $>750^\circ\text{C}$) приводит к сложностям синтеза сульфат-фосфатов. Главная проблема заключается в частичной потере серы в процессе синтеза (в виде SO_3), что не позволяет получить однофазный сульфат-фосфат из-за нарушения стехиометрии образца. Потерю серы в процессе синтеза можно предотвратить, связав серу в интермедиат с высокой температурой разложения. Поэтому при направленном синтезе сульфат-фосфатов соблюдали условие, позволяющее удержать ее в реакционной зоне: в процессе синтеза не должны образовываться промежуточные термически нестойкие соединения серы.

Цель работы – синтез сульфат-фосфатов с предполагаемой структурой минерала эвлитина: $\text{ASr}_2\text{Eu}(\text{PO}_4)_2\text{SO}_4$ ($A = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$), $\text{NaBa}_6\text{Zr}(\text{PO}_4)_5\text{SO}_4$,

$Ba_xSr_{4-x}(PO_4)_2SO_4$ ($0 \leq x \leq 4$), $Pb_2Mg_2(PO_4)_2SO_4$, изучение их фазообразования и параметров теплового расширения.

Для получения $ASr_2Eu(PO_4)_2SO_4$ ($A = K, Rb, Cs$), на первом этапе навески оксида европия (III) растворяли в азотной кислоте при нагревании до полного растворения. Затем сливали стехиометрические количества солей при постоянном перемешивании. В последнюю очередь добавляли раствор серной кислоты и дигидрофосфата аммония. Образцы высушивали и в дальнейшем подвергали термообработке. Синтез остальных соединений аналогичен описанному выше, за исключением первого шага (растворения оксида в азотной кислоте). Окончательные температуры синтеза $ASr_2Eu(PO_4)_2SO_4$ ($A = K, Rb, Cs$), $Ba_4(PO_4)_2SO_4$, $Ba_3Sr(PO_4)_2SO_4$ и $Sr_4(PO_4)_2SO_4$ составили $1150^\circ C$, $Ba_2Sr_2(PO_4)_2SO_4$ и $BaSr_3(PO_4)_2SO_4$ – $1100^\circ C$, $NaBa_6Zr(PO_4)_5SO_4$ – $850^\circ C$, $Pb_2Mg_2(PO_4)_2SO_4$ – $700^\circ C$.

Сульфат-фосфаты охарактеризованы методами рентгенографии (дифрактометр Shimadzu XRD-6000) и микронзондового анализа (сканирующий электронный микроскоп JEOL JSM-7600F с термополевой пушкой, оснащенный системой рентгеноспектрального анализа EDX – энергодисперсионный спектрометр OXFORD X-Max 80 (Premium)).

Величины средних линейных коэффициентов теплового расширения изученных сульфат-фосфатов со структурой эвлитина варьируют от $1.1 \cdot 10^{-5}$ до $1.7 \cdot 10^{-5} K^{-1}$, что позволяет отнести их к классу средне расширяющихся материалов.

Синтез и физико-химические свойства фазы Диона – Якобсона $KCa_2NaNb_4O_{13}$

Борисов Г.А., Сыров Е.В., Крашенинникова О.В., Князев А.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

E-mail: german.borisov.1997@mail.ru

Фазы Диона – Якобсона относятся к классу слоистых перовскитов с общей формулой $A'[A_{n-1}B_nO_{3n+1}]$, где $A' = Ti, Cs, Rb, K, Na, Li, NH_4$; $A = La, Ca, Sr, Ba, Na$; $B = Ti, Nb, Ta$ [1]. Структура данных соединений представляет собой чередование n перовскитоподобных слоев октаэдров BO_6 с атомами A в кубооктаэдрических позициях и слоев, состоящих из катионов A' . Интерес к данным соединениям обусловлен возможностью их применения в качестве диэлектриков, пьезоэлектриков, сверхпроводников и фотокатализаторов разложения воды под действием видимого света. Кроме того, важное значение имеет использование фаз Диона – Якобсона в качестве исходного реагента для синтеза других слоистых перовскитов.

Синтез фазы состава $\text{KCa}_2\text{NaNb}_4\text{O}_{13}$ ($n=4$) проводили тремя способами: классическим твердофазным синтезом, по реакции $\text{KCa}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$ ($n=3$)+ NaNbO_3 и методом «раствор в расплаве»^[2]. Однако, образец без примесных фаз был получен только с помощью твердофазного метода синтеза.

Физико-химические свойства полученного образца были изучены методами высокотемпературной рентгенографии, дифференциальной сканирующей калориметрии и адиабатической вакуумной калориметрии.

Было обнаружено, что для данного соединения в районе 1000-1100°C имеет место обратимый фазовый переход. Он связан с перестройкой структуры из искаженной ромбической модификации, обладающей сверхячейкой типа $2 \times 2 \times 2$, в более симметричную тетрагональную модификацию с пространственной группой $R4/mmm$, аналогичную фазе $\text{RbCa}_2\text{NaNb}_4\text{O}_{13}$. Образование сверхячейки происходит из-за смещения перовскитных блоков в структуре на половину трансляции ($a/2$). Вероятно, искажение исходной высокосимметричной структуры обусловлено нахождением между слоями атомов К с меньшим, по сравнению с Rb, радиусом. По результатам высокотемпературной рентгенографии были определены параметры элементарной ячейки и коэффициенты теплового расширения для каждой из температур, построены зависимости параметров элементарных ячеек от температуры, а также фигуры теплового расширения.

Список литературы

- [1] Dion M., Ganne M., Tournoux M. Nouvelles Familles De Phases $M^I M_2^I I I \text{Nb}_3\text{O}_{10}$ A Feuilletes "Perovskites" // Materials Research Bulletin. 1981. V. 16. P. 1429-1432.
[2] Kulischow N., Ladasiu C., Marschall R. Layered Dion-Jacobson type niobium oxides for photocatalytic hydrogen production prepared via molten salt synthesis// Catalysis Today 2017. V. 287. P. 65-69.

Структура сложных оксидов в системе Y-Fe-Co-O

Брюзгина А.В., Урсова А.С., Черепанов В.А.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России

Б.Н. Ельцина, Екатеринбург

E-mail: anna.brjuzgina@urfu.ru

Ферриты и кобальтиты щелочноземельных и редкоземельных металлов и твердые растворы на их основе обладают рядом электрических и магнитных свойств, что делает их пригодными для разнообразного практического использования. Настоящая работа посвящена изучению кристаллической структуры индивидуальных фаз в системе Y - Fe - Co - O при 1373 К на воздухе. Для изучения фазовых равновесий и кристаллической структуры образующихся соединений в системе Y - Fe - Co - O всего было приготовлено 48 образцов с различным соотношением металлических компонентов.

По результатам РФА построен разрез фазовой диаграммы Y - Fe - Co - O при 1373 К на воздухе. Диаграмма состояния Y - Fe - Co - O была разбита на 8 фазовых полей. Также было установлено, что в изучаемой системе образуется четыре ряда твёрдых растворов: твёрдые растворы на основе CoO (пр. гр. *P63/m*), на основе Fe₂O₃ (пр. гр. *R-3 m*), на основе CoFe₂O₄ (пр. гр. *Fd3m*) и на основе феррита иттрия YFeO_{3±δ} (пр. гр. *Pnma*). В зависимости от температуры была изучена структура и термодинамическая стабильность твёрдого раствора на основе феррита иттрия состава YFe_{1-x}Co_xO_{3±δ}. Установлено, что граница растворимости кобальта в феррите иттрия с увеличением температуры уменьшается.

Более подробно был изучен ряд твёрдых растворов YFe_{1-x}Co_xO_{3±δ} (0 ≤ x ≤ 0.45) синтез, которых проводился при 1373 К на воздухе. По результатам РФА установлено, что замещение железа на кобальт привело к образованию твёрдых растворов состава YFe_{1-x}Co_xO_{3±δ} с 0 ≤ x ≤ 0.45. Дифрактограмма незамещенного феррита иттрия YFeO_{3±δ} была обработана в рамках орторомбической ячейки (пр. гр. *Pnma*). Подобно незамещённому ферриту иттрия все полученные однофазные твердые растворы так же были описаны в рамках орторомбической ячейки. Показано, что увеличение содержания кобальта в YFe_{1-x}Co_xO_{3±δ} приводит к монотонному уменьшению параметров и объёма ячеек, что можно объяснить размерным эффектом ($r_{Fe^{3+}/Fe^{4+}} = 0.785 / 0.725 \text{ \AA}$, к.ч. = 6 и $r_{Co^{3+}/Co^{4+}} = 0.61 / 0.53 \text{ \AA}$, к.ч. = 6) [1].

Список литературы

[1] Shannon R.D. Revised effective ionic radii and systematic studies of interatomic distances in halides and chalcogenides // Acta Cryst. 1976. A. 32. P. 751-767.

Кристаллические структуры сложных фосфатов цинка, железа и элементов IVB группы

Бутрина О.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород*

E-mail: butrina.olga@gmail.com

Среди неорганических фосфатов распространены соединения со структурными октаэдро-тетраэдрическими каркасами структурных типов фосфата натрия-дициркония (NZP) и вольфрамата скандия (SW).

Целью данной работы является исследование структурообразования фосфатов общей формулы Zn_{0.5(1+x)}Fe_xM_{2-x}(PO₄)₃ (M – Zr, Hf), включающих в позиции каркаса ионы циркония и гафния, близких по ионным радиусам, но имеющих различные атомные массы и количество орбитальных электронов. Для этого синтезированы и структурно охарактеризованы образцы составов Zn_{0.7}Fe_{0.4}Zr_{1.6}(PO₄)₃ (x = 0.4) и Zn_{0.85}Fe_{0.7}Hf_{1.3}(PO₄)₃ (x = 0.7).

Фосфаты синтезированы твердофазным методом и охарактеризованы методами рентгенографии (дифрактометр Shimadzu LabX XRD-6000), электронного микронного анализа (электронный микроскоп JEOL JSM-7600F), ИК-спектроскопии (ИК-Фурье-спектрофотометр Shimadzu FTIR-8400S).

Структурное исследование $Zn_{0.7}Fe_{0.4}Zr_{1.6}(PO_4)_3$ (рис. 1) и $Zn_{0.85}Fe_{0.7}Hf_{1.3}(PO_4)_3$ (рис. 2) проведено методом Ритвельда по данным порошковой рентгенографии. Установлено, что цирконийсодержащий фосфат кристаллизуется в SW-типе структуры, а гафнийсодержащий фосфат – в NZP-типе. Показано, что катионы Fe^{3+} и Zr^{4+} (Hf^{4+}) статистически распределяются в позициях каркаса их структур. Катионы Zn^{2+} занимают тетраэдрически координированные позиции полостей SW-структуры или октаэдрически координированные NZP-полости. Различие в строении Zr- и Hf-содержащих фосфатов вероятно объясняется влиянием массы каркасообразующего иона.

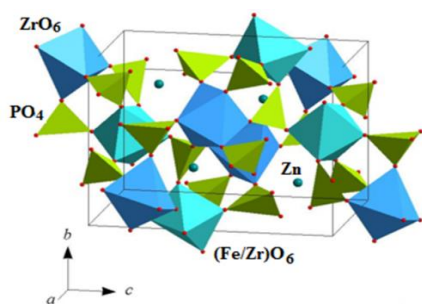


Рис. 1. Фрагмент кристаллической структуры фосфата $Zn_{0.7}Fe_{0.4}Zr_{1.6}(PO_4)_3$.

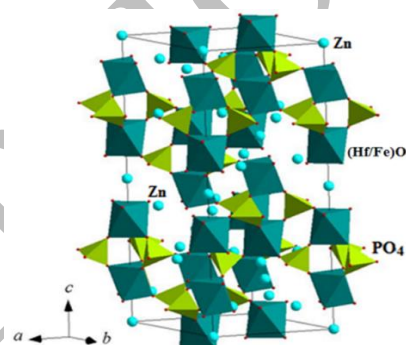


Рис. 2. Фрагмент кристаллической структуры фосфата $Zn_{0.85}Fe_{0.7}Hf_{1.3}(PO_4)_3$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-33-00248).

Синтез и исследование сложных фосфатов $Na_{1+2x}Zn_xZr_{2-x}(PO_4)_3$

Бутрина О.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород*

E-mail: butrina.olga@gmail.com

Интенсивное изучение фосфатов каркасного строения связано с такими их свойствами, как высокая химическая, термическая и радиационная устойчивость, низкое тепловое расширение, каталитическая активность, ионная проводимость, способностью включать в кристаллическую структуру катионы разного заряда и размера, что делает перспективным дальнейшее развитие работ по синтезу и исследованию новых систем.

Цель данной работы – синтезировать и исследовать фазообразование в рядах сложных фосфатов $Na_{1+2x}Zn_xZr_{2-x}(PO_4)_3$.

Для получения фосфатов использовали золь-гель метод. Он является одним из наиболее часто применяемых методов синтеза. Исходными реагентами служили NaNO_3 , ZrOCl_2 , ZnCl_2 , $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$. При синтезе водные растворы солей металлов сливали при перемешивании, затем медленно добавляли раствор фосфорного реагента. Гель высушивали при 90°C , и подвергали ступенчатому отжигу до завершения синтеза. Поэтапный нагрев чередовали с диспергированием.

Синтезированные фосфаты охарактеризованы методами рентгенографии (рентгеновский порошковый дифрактометр Shimadzu Lab XRD-6000), ИК-спектроскопии (ИК-Фурье спектрометр Shimadzu FTIR 4000).

Полученные результаты свидетельствуют об образовании в системе $\text{Na}_{1+2x}\text{Zn}_x\text{Zr}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ ограниченных твердых растворов NZP-строения. Образцы получены при температуре 600°C и термически стабильны не ниже $650\text{--}700^\circ\text{C}$. Изучена зависимость кристаллографических характеристик фосфатов от химического состава.

Фосфорсодержащие поллицитоподобные соединения и керамика на их основе для иммобилизации цезия и стронция

Васильева А.А., Трошин А.Н.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

E-mail: vasileva_anastasia_94@list.ru

Одной из главных проблем атомной энергетики является разработка материалов для безопасного обращения с отходами ядерного топливного цикла и облученным ядерным топливом. Совершенствование способов получения и исследования таких материалов также является важным аспектом.

В рамках этих проблем инновационной задачей современной неорганической химии и материаловедения является разработка новых материалов с высокими характеристиками термической, химической, радиационной устойчивости, а следом локализация высокоактивных отходов (ВАО) и выбор коррозионно- и радиационностойких матриц, которые при длительном хранении или захоронении не будут изменять свои изоляционные свойства. Было установлено, что кристаллические керамические матрицы подходят значительно лучше для долговременной изоляции ВАО по сравнению со стеклянными формами.

Использование минеральных матриц является наиболее надежным методом иммобилизации ВАО при их длительном хранении (использование принципа «природоподобия»). Однако, при всем многообразии известных матриц, окончательный выбор в пользу какого-либо их типа еще не сделан.

Для решения проблемы с цезием и стронцием развитие получают силикатные и фосфатные формы его отверждения, которые представляют соединения со структурой природного минерала поллуцита (аналог $\text{CsAlSi}_2\text{O}_6$, где содержится до 43 масс. % Cs). Силикатные и фосфатные минералы являются наиболее представительными в породах земной коры.

Интерес представляют фосфорсодержащие соединения со структурой поллуцита, т.к. при переработке отходов ядерных производств фосфатные группы уже могут в них присутствовать.

В настоящей работе синтезировали порошки фосфорсодержащих поллуцитоподобных соединений рядов $\text{A}_x\text{Cs}_{(1-x)}[\text{MgR}_{0.5}\text{P}_{1.5}\text{O}_6]$, где $\text{A} = \text{Na}, \text{K}, \text{Rb}$; $\text{R} = \text{V}, \text{Al}, \text{Fe}$; $0.0 \leq x \leq 1.0$ и $\text{Sr}_x\text{Cs}_{(1-x)}[\text{Mg}_{(1-y)}\text{R}_{0.5(1-x+y)}\text{Li}_{0.5(x+y)}\text{P}_{1.5}\text{O}_6]$, где $\text{R} = \text{V}, \text{Al}, \text{Fe}$; $0.0 \leq x \leq 0.5$; $0.0 \leq y \leq 0.5$ золь-гель методом и оптимизировали условия их получения. Методами ДСК установили температуры фазообразования, а РФА – кристаллизацию фаз в кубической сингонии с пр.гр. $\text{I4}_1\text{32}$ и нашли границы изоморфного замещения. С помощью методов СЭМ и РМА исследовали микроструктуру и установили состав полученных соединений.

Методом высокоскоростного электроимпульсного спекания (SPS) из порошков получили образцы керамики и ее охарактеризовали. Достигнутые относительные плотности имели значения 98–99 %. Для некоторых составов керамических образцов провели исследования гидролитической устойчивости.

Изучение магнитных гистерезисных свойств порошков на основе (Sm, R)-(Fe, T)-N, где R = Er, Ho; T = V, Al, полученных при различных режимах механоактивации

Веселова С.В.

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
Москва, Россия*

E-mail: sv_veselova@mail.ru

Нитриды $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$ обладают рядом уникальных магнитных характеристик ($K_1 = 8 \text{ МДж/м}^3$, $J_s = 1,61 \text{ Тл}$, $T_C = 470^\circ\text{C}$), что делает их перспективными материалами для производства постоянных магнитов, способные заменить самые высокоэнергоемкие на сегодняшний день магниты на основе интерметаллида $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{V}$ [1]. Представляют интерес для изучения нитриды на основе замещенных соединений 2-17, в которых атом самария замещается другим РЗМ, а железо – намагнитным атомом. С учетом одновременных факторов замещения и внедрения в $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$ вероятно можно повысить значения температуры Кюри (сделать расстояние Fe-Fe $\geq 2,45 \text{ \AA}$) и увеличить вклад анизотропии магнитной подрешетки редкой земли в общей анизотропии вследствие изменения электронной структуры исходных соединений. Подобная трансформация свойств проазотированного материала по сравнению с исходным

связывается, прежде всего, с объемным эффектом (увеличение атомного объема, расстояний Fe-Fe, R-Fe) и химическим эффектом при введении атомов внедрения. Ранее для $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$ установлено [2], что после измельчения с последовательным увеличением времени помола коэрцитивная сила образца растет. Уменьшение размера частиц способствует зарождению и росту доменов обратной намагниченности в процессе перемагничивания. *Цель данной работы* – синтезировать и изучить магнитные свойства порошков нитридов на основе (Sm, R)-(Fe, T)-N, где R = Er, Ho; T = V, Al, а также механически измельченных (в планетарной мельнице) порошков после различных режимов помола. Взаимодействие сплава с азотом проводилось в условиях нагрева образцов при $p=40$ атм и $T \leq 450^\circ\text{C}$ в течение нескольких дней. Анализ рентгенограмм синтезированных нитридов показывает, что соединения кристаллизуются в структурном типе $\text{Th}_2\text{Zn}_{17}$ (пр. гр. $R\bar{3}m$). Магнитные измерения образцов выполнены с использованием вибрационной магнитной приставки к установке измерения физических величин PPMS EverCool-II с $H_{\text{max}} = 9$ Тл и на вибромагнитометре Model VSM-250 в полях до 20 кЭ при комнатной температуре.

Список литературы

- [1] Hiroswawa S., Nishino M., Miyashita S. Perspectives for high-performance permanent magnets: applications, coercivity, and new materials // J. Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol. 2017. V. 8. 013002 (12pp).
[2] O'Donnell K., Coey J.M.D. Characterization of hard magnetic two-phase mechanically alloyed $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_3/\alpha\text{-Fe}$ nanocomposites // J. Appl. Phys. 1997. V. 81. P. 6310-6321.

Синтез и свойства ферритов никеля и кальция

Волкова А.В., Румянцев Р.Н., Денисова К.О., Ильин А.А., Ужевская У.С.

Ивановский государственный химико-технологический университет,

Иваново, Россия

E-mail: anzhelikayavelikaya@mail.ru

Ферриты обладают рядом уникальных физико-химических, которые позволяют их использовать в различных отраслях промышленности. Перспективным направлением использования ферритов является катализ, так как они могут успешно заменять традиционно используемые контакты, содержащие в своем составе токсичные или дорогостоящие металлы такие, как хром, платина, палладий, золото и др [1].

Для получения ферритов используются различные методы, такие как осаждение из растворов, золь-гель, спекание исходных компонентов и др. Перспективным методом получения неорганических материалов является метод механохимического синтеза, так как позволяет использовать в качестве

исходного сырья сухие порошки, сократить стадийность процесса, а также снизить температуру термической обработки.

В данной работе ферриты кальция и никеля были получены двумя способами: твердофазным синтезом ТС (путем спекания двух порошков) и с помощью метода механохимии (МХС). В качестве исходного сырья использовались гидроксиды ($\text{Ca}(\text{OH})_2$ и $\text{Ni}(\text{OH})_2$) и оксалат железа ($\text{FeC}_2\text{O}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$). Механическую активацию проводили в ролико-кольцевой вибрационной мельнице в течении 120 минут.

Исследования образцов методом СЭМ показывает, что они состоят из частиц сферической формы, которые входят в состав более крупных агрегатов агрегатов.

В таблице 1 приведены характеристики и условия получения ферритов кальция и никеля.

Таблица 1. Температура термообработки и величина удельной поверхности ферритов.

Образец	Способ получения			
	ТС		МХС	
	$S_{\text{уд}}, \text{M}^2/\text{Г}$	$T_{\text{термообр.}}, \text{°C}$	$S_{\text{уд}}, \text{M}^2/\text{Г}$	$T_{\text{термообр.}}, \text{°C}$
NiFe_2O_4	2,9	700	6,5	700
$\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$	9,7	560	29,7	560

Таким образом, можно сделать вывод, что метод МХС позволяет получить ферриты с высокой удельной поверхностью и низкой температурой прокаливания.

Работа выполнена при поддержке стипендии Президента РФ (СП-3477.2016.1). При выполнении исследований использовалось оборудование ЦКП ИГХТУ.

Список литературы

[1] Romyantsev R.N., Ilyin A.A., Babichev I.V. et al. // Journal «Scientific Israel-Technological Advantages». 2014 Vol.16. №3. P.1-5.

Стеклообразование в системе $\text{TeO}_2 - \text{WO}_3 - \text{La}_2\text{O}_3$

Гаврин С.А., Ревина А.В., Сибиркин А.А.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: sa-gavrin@yandex.ru

Теллуритно-вольфраматные стекла являются перспективным материалом для волоконной оптики благодаря широкой области прозрачности в видимой и ближней инфракрасной области, устойчивости к кристаллизации и химической стойкости. Введение оксида лантана в теллуритно-вольфраматную систему позволяет расширить область стеклообразования [1] и получить стекла с требуемыми оптическими и термическими свойствами. Целью этого исследования является уточнение границ области стеклообразования в системе

TeO₂ – WO₃ – La₂O₃ и установление природы твердых фаз, образующихся при кристаллизации стекла.

Образцы лантансодержащих теллуритно-вольфраматных стекол были получены плавлением шихты из ортотеллуровой кислоты, тетрагидрата паравольфрамата аммония и гексагидрата нитрата лантана [2] при температурах 800 – 950 °С с последующим быстрым охлаждением расплава до комнатной температуры путем контакта с массивной металлической пластиной. Образование стекла подтверждалось методом рентгеновской дифракции. Уточнены границы области стеклообразования в тройной системе TeO₂ – WO₃ – La₂O₃.

Кристаллизация полученных стекол проводилась при температурах 550 – 700 °С в зависимости от состава стекла в течение 3 – 4 часов. Природа кристаллических фаз установлена методом рентгенофазового анализа.

Список литературы

[1] Imaoka M., Yamazaki T. Studies of the Glass-formation Range of Tellurite Systems // Journal of the Ceramic Association of Japan. 1968. V. 76. № 5. P. 160 – 172.

[2] Патент 2584482 Российская Федерация. МПК С 03 С 6/04. Шихта для получения теллуритных стекол (варианты) / М.Ф.Чурбанов, А.А.Сибиркин, О.А.Замятин, И.Г.Горева, С.А.Гаврин. Заявл. 07.04.2015. Заявка на изобретение 2015112744. Опубл. 20.05.2016. Бюл. 14.

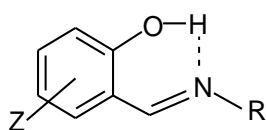
Особенности синтеза и строения молекулярных и внутрикомплексных соединений диоксомолибдена(VI) с салицилиден-2-фурфурилиминами

Ганущак Ю.В., Абраменко В.Л.

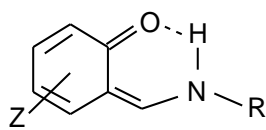
Луганский государственный медицинский университет, г. Луганск, Украина

E-mail: iyuliyag97@gmail.com

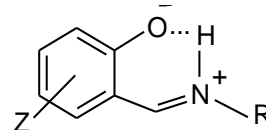
Салицилиденимины (о-оксиазометины, основания Шиффа) (HL) могут существовать в растворах в различных таутомерных формах - бензоидной (енолиминной) (а), хиноидной (хинонаминной) (б) или цвиттер-ионной (биполярной) (в), что позволяет синтезировать на их основе с кислотами Льюиса MX_n комплексы разного типа и строения – аддукты, или молекулярные комплексы (МК) MX_n·mHL, и внутрикомплексные соединения (ВКС) ML_m.



а



б



в

Нами оптимизированы условия и осуществлён синтез комплексов диоксомолибдена(VI) разного типа, МК и ВКС, с салицилидениминами, производными замещенных Z-салициловых альдегидов [Z = Н (HL¹); 3-ОСН₃ (HL²); 5-Br (HL³), 4-ОН (HL⁴), 3-МеО-5-Br (HL⁵), 3-NO₂ (HL⁶), 3,5-Cl₂ (HL⁷), 3,5-Br₂ (HL⁸)] и 2-фурфурилимина, исследованы их строение и свойства. Аддукты MoO₂Cl₂·2HL¹⁻⁸ получены методом непосредственного взаимодействия диоксодихлорида молибдена с HL в среде малополярных растворителей при комнатной температуре. Внутриклеточные соединения (ВКС) получены методом лигандного обмена в среде метанола между MoO₂(Acac)₂ и HL (1:2) (для HL¹⁻³). С лигандами HL² и HL⁵ получены биядерные ВКС - [{MoO₂(L²)(CH₃OH)}₂(μ-O)] и [{MoO₂(L⁵)}₂(μ-O)] соответственно. По данным ИК-спектроскопии в МК MoO₂Cl₂·2HL атом Мо (КЧ_{Мо} = 6) координирует лиганды через О-атомы хиноидной таутомерной формы (*б*). Строение моноядерного ВКС MoO₂(L¹)₂ и двух биядерных комплексов [{MoO₂(L²)(MeOH)}₂(μ-O)] (Z = 3-OMe) и [{MoO₂(L⁵)}₂(μ-O)] (Z = 3-OMe-5-Br) установлено методом РСА. Первые два комплекса имеют обычное *цис*-октаэдрическое строение. В биядерном комплексе [{MoO₂(L⁵)}₂(μ-O)] каждый атом Мо1, Мо2 имеет необычное для комплексов [{MoO₂(L)}₂(μ-O)] КЧ = 5 (по данным Кембриджского банка структурных данных известно лишь 3 подобные структуры). Структуру [{MoO₂(L⁵)}₂(μ-O)] можно описать либо как сильно искаженную тригональную бипирамиду, либо как промежуточный полиэдр между тригональной бипирамидой и квадратной пирамидой. Обсуждена конкурентная координация салицилидениминов в комплексах диоксомолибдена(VI) молекулярного типа.

Синтез и свойства каркасных фосфатов с общей формулой



Глухова И.О.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

Разработка полифункциональных материалов с прогнозируемыми и улучшенными служебными свойствами (химическая и радиационная устойчивость, термостабильность, в том числе и к тепловым ударам, каталитические свойства в реакциях конверсии спиртов) является одним из ключевых направлений исследования в области материаловедения. Подобные материалы могут быть применены в оптике, промышленности в качестве катализаторов, а также для получения особо прочных конструкционных материалов. Кристаллохимический дизайн новых соединений из фрагментов известной топологии позволяет целенаправленно синтезировать вещества с

плавно меняющимися составами, а комплексное исследование их свойств – выявлять связь между составом, структурой и свойствами.

В настоящей работе синтезированы ряды фосфатов каркасного строения структурных типов коснарита и вольфрамата скандия с общей формулой $M_{0.5(1+x)}Fe_xZr_{2-x}(PO_4)_3$ ($M = Mn, Co, Ni, Cu, Zn; 0 \leq x \leq 2.0$). Для синтеза использованы золь-гель метод без применения органических реагентов и цитратный метод (метод Печини). Полученные образцы исследованы методами порошковой рентгенографии (рентгеновский дифрактометр Shimadzu XRD-6000 в интервале углов $10-60^\circ$ с шагом 0.02° , CuK_α -излучение), ИК-спектроскопии (спектрофотометр Shimadzu FTIR-8400S в диапазоне волновых чисел $400-1400\text{ см}^{-1}$).

Во всех изученных системах выявлено образование ограниченных твердых растворы с плавно изменяющимися свойствами. Выявлены температурно-концентрационные пределы существования систем каркасных фосфатов, зависимость фазообразования и структуры от размера каркасообразующего катиона. Результаты проведенного исследования сопоставлены с полученными ранее данными по фазообразованию аналогичных титансодержащих систем $M_{0.5(1+x)}Fe_xTi_{2-x}(PO_4)_3$ ($M = Mn, Co, Ni, Cu, Zn$), кристаллизующихся в структурном типе коснарита.

Для комплексной материаловедческой характеристики проведено исследование каталитических свойств полученных соединений в реакциях превращения метанола. Показано, что основными направлениями конверсии метанола в изученных условиях были дегидратация и дегидрирование.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-33-00248).

Сложный оксид $Pr_2Te_2Mo_2O_{13}$ – компонент шихты для получения теллуритных стекол для магнитооптических устройств

Горяев В.М., Сибиркин А.А.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: wwwxutuk@mail.ru

Интерес к празеодимсодержащим теллуритно-молибдатным стеклам связан с возможностью их применения в магнитооптике. Изготовление компактных магнитооптических устройств требует использования материалов с высокими значениями постоянной Верде. Это может быть достигнуто введением в теллуритное стекло значительных количеств оксида празеодима [1]. Однако получение таких стекол из традиционно используемых бинарных оксидов TeO_2 , MoO_3 и Pr_6O_{11} требует проведения длительного гомогенизирующего плавления при высокой температуре, что приводит к

восстановлению части атомов Mo^{+6} до Mo^{+5} . Следствием этого является снижение оптической прозрачности стекол в видимой и ближней инфракрасной областях спектра. Снижения температуры и продолжительности гомогенизирующего плавления может быть достигнуто варьированием природы исходных компонентов шихты. Целью работы является исследование возможности получения стекол из шихты, содержащей четверной оксид состава $\text{Pr}_2\text{Te}_2\text{Mo}_2\text{O}_{13}$.

Стекло состава $(\text{TeO}_2)_{0.25}(\text{MoO}_3)_{0.5}(\text{PrO}_{1.5})_{0.25}$ получено плавлением смеси $\text{Pr}_2\text{Te}_2\text{Mo}_2\text{O}_{13}$ и MoO_3 в мольном отношении 1 : 2 при температуре 820 °С в течение 5 – 10 минут с последующим охлаждением расплава в разборной металлической форме, разогретой до 400 °С. Образование стекла подтверждено регистрацией рентгеновских дифрактограмм. Стекло окрашено в интенсивный зеленый цвет и визуально прозрачно. В спектре его пропускания отсутствуют интенсивные полосы поглощения, связанные с электронными переходами в атомах молибдена в промежуточной степени окисления. Спектр пропускания содержит полосы поглощения, вызванные присутствием атомов празеодима.

Найдены оптимальные условия гомогенизирующего плавления, формования и отжига стекол, обеспечивающие получение однородных образцов, обладающих высоким значением удельного вращения плоскости поляризации электромагнитного излучения в магнитном поле. Стекла с высоким содержанием оксида празеодима являются перспективным материалом для изготовления компактных магнитооптических фильтров.

Список литературы

[1] Borelli N.F. Faraday Rotation in Glasses // The Journal of Chemical Physics. – 1964. – V. 41, No, 11. – P. 3289 – 3293.

Получение изотопнообогащенного тетрахлорида кремния-28 по реакции тетрафторида кремния-28 и трихлорида алюминия

Гребеньков К.С.

Институт химии высокочистых веществ РАН им. Г.Г. Девярых,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: constantin.grebenckov@yandex.ru

Изотопнообогащенный тетрахлорид кремния ($^{28}\text{SiCl}_4$, $^{29}\text{SiCl}_4$, $^{30}\text{SiCl}_4$) является перспективным материалом для получения кварцевых световодов с измененным изотопным составом. Такие кварцевые световоды обладают лучшими оптическими свойствами по сравнению со световодами на основе природного кремния [1]. Для разделения изотопов кремния используют его тетрафторид ввиду высокого значения давления пара этого вещества и моноизотопности природного фтора [2]. Целью работы является разработка методики получения высокочистого изотопнообогащенного $^{28}\text{SiCl}_4$ из $^{28}\text{SiF}_4$,

обеспечивающей высокий выход целевого продукта, низкое содержание примесей и отсутствие изотопного разбавления кремния.

Опыты по синтезу $^{28}\text{SiCl}_4$ проводили в статических условиях с использованием AlCl_3 в качестве хлорирующего агента при температуре 200-350°C, начальном давлении $^{28}\text{SiF}_4$ 2-12 абс. атм. и стехиометрическом соотношении $^{28}\text{SiF}_4$ и AlCl_3 1:2÷1:10. Установлено, что оптимальными условиями синтеза являются $t=350^\circ\text{C}$ $P_{\text{нач.}}(^{28}\text{SiF}_4)=12$ абс. атм. и мольном соотношении 1:10. Выход $^{28}\text{SiCl}_4$ составил $90\pm 2\%$. Очистку полученного $^{28}\text{SiCl}_4$ проводили на ректификационной колонне с нижним кубом. В результате получен образец тетрахлорида $^{28}\text{SiCl}_4$ с содержанием примесей на уровне $n\cdot 10^{-4}$ - $n\cdot 10^{-8}$ масс. %. Определяли изотопный состав кремния в $^{28}\text{SiF}_4$, $^{28}\text{SiCl}_4$ после синтеза и $^{28}\text{SiCl}_4$ после ректификации методом масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой. (Лаборатория ФМИ ИХВВ им. Г.Г.Девярых). Установлено, что изотопного разбавления кремния на стадиях синтеза и очистки $^{28}\text{SiCl}_4$ в пределах погрешности анализа ($1\cdot 10^{-5}$ ат. %) не наблюдалось.

Используя данные газохроматографического анализа с применением модели химических последовательных реакций, рассчитали константы скорости промежуточных стадий последовательной реакции $^{28}\text{SiF}_4$ и AlCl_3 при $t=330^\circ\text{C}$. Значения констант составили: $k_1=0,16$ час $^{-1}$, $k_2=0,42$ час $^{-1}$, $k_3=0,53$ час $^{-1}$, $k_4=0,48$ час $^{-1}$. Методом релеевской дистилляции определили значение равновесного коэффициента разделения жидкость-пар для системы SiCl_4 - SiFCl_3 . Значение $\alpha_{\text{равн}}$ составило 4.9.

Список литературы

- [1] Douglas C., Allan, T. J. Brown. Isotopically altered optical fiber. US Patent 0022562 A1 Feb. 3, 2005.
[2] Y.V. Tarbeyev, et al. "Scientific, Engineering and Metrological Problems in Producing Pure Si-28 and Growing Single Crystals", Metrologia, 31, 1994 pp. 269-273.

Экспериментальное исследование и ab initio расчет фазового перехода в KTaWO_6 под высоким давлением

Демидов Д.Н., Князев А.В., Блохина А.Г.

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

E-mail: ig-aloe@mail.ru

Одним из перспективных классов неорганических соединений являются сложные анион-дефицитные оксиды со структурой минерала пироклора. Материалы на основе данных соединений имеют ряд применений, включая их использование в качестве адсорбентов, твердых электролитов, катализаторов. Особый интерес вызывает поведение пироклоров под давлением, поскольку в этих условиях из-за их относительно открытых структур они достаточно легко переходят в более плотные фазы. Данная работа является продолжением

систематических исследований дефектных пироксенов и включает в себя изучение влияния давления в диапазоне 2-5 ГПа на соединение KTaWO_6 .

С помощью порошковой рентгенографии был зафиксирован фазовый переход при 4 ГПа. Обзор баз данных COD и ICSD показал, что полученная фаза высокого давления (HP- KTaWO_6) относится к новому структурному типу. Здесь следует отметить, что хотя рентгенограмма HP- KTaWO_6 сильно напоминает рентгенограммы фаз, подобных ReO_3 , таких как, например, вольфрамовая бронза $\text{Na}_{0.54}\text{WO}_3$ (или $\text{Na}_{1.08}\text{W}^{\text{V}}_{1.08}\text{W}^{\text{VI}}_{0.92}\text{O}_6$), положения пиков существенно отличаются. В целом, весьма вероятно, что структура HP- KTaWO_6 представляет собой каркас из октаэдров TaO_6 , WO_6 , аналогичный каркасу ReO_3 , в пустотах которого неким образом размещен К.

Из-за недостаточной кристалличности HP- KTaWO_6 , определение его структуры только по рентгенографическим данным не представляется возможным. Поэтому для установления структуры новой фазы мы использовали квантово-химические расчеты. Предсказание кристаллической структуры проводили с использованием эволюционного алгоритма USPEX. Для предложенных программой структур строили теоретические рентгенограммы и сравнивали с рентгенограммой HP- KTaWO_6 . В связи с отсутствием совпадений, перешли к методу эволюционной метадинамики [1], который зарекомендовал себя при исследовании фазовых переходов в сложных структурах при высоком давлении. На следующем этапе, в случае неудачи, предполагается провести расчет с использованием эволюционной метадинамики, но с меньшей элементарной ячейкой. Это должно существенно увеличить количество рассчитываемых структур в единицу времени, хотя есть риск потерять нужное решение. Возможен расчет при помощи алгоритма USPEX с использованием подобной ReO_3 структуры в качестве материнской (seed technique).

Список литературы

[1] Zhu Q., Oganov A.R., Lyakhov A.O. // CrystEngComm, 2012, 14, 3596-3601.

Синтез и исследование фосфатов $\text{A}_{2-x}\text{A}'_x\text{Mg}_{0.5}\text{E}_{1.5}(\text{PO}_4)_3$ ($\text{A}/\text{A}' = \text{Na, K, Rb, Cs}$; $\text{E} = \text{Ti, Zr}$)

Залымова И.А.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

Включение элементов в степенях окисления +1 и +2 в высоких концентрациях в труднорастворимые устойчивые структуры минералов коснарита и лангбейнита является важной особенностью фосфатов каркасного строения, которая позволяет разрабатывать однофазные матрицы для иммобилизации радиоактивных отходов, адаптированные к их составам и удовлетворяющие требованиям радиоэкологической безопасности.

Цель работы – синтез фосфатов $A_{2-x}A'_xMg_{0.5}E_{1.5}(PO_4)_3$ ($A/A' = Na, K, Rb, Cs; E = Ti, Zr$) со структурами коснарита и лангбейнита, изучение их фазообразования, концентрационно-температурных полей устойчивости, параметров теплового расширения.

Образцы получали золь–гель методом. К стехиометрической смеси растворов солей металлов при перемешивании добавляли раствор дигидрофосфата аммония. Реакционные смеси высушивали при 90–130°C и подвергали изотермической термообработке при 600–1000°C. Каждую стадию нагревания чередовали с диспергированием для обеспечения гомогенизации смесей. Полученные фосфаты изучали с применением рентгенографии, ИК-спектроскопического, микрозондового и дифференциально-термического анализов (использовали оборудование фирмы Shimadzu).

Результаты РФА $K_{2-x}Rb_xMg_{0.5}Zr_{1.5}(PO_4)_3$, $K_{2-x}Rb_xMg_{0.5}Ti_{1.5}(PO_4)_3$ и $K_{2-x}Cs_xMg_{0.5}Zr_{1.5}(PO_4)_3$ показали, что фосфаты имеют структуру лангбейнита. Рентгенограммы полученных образцов обнаруживают плавное смещение дифракционных максимумов при постепенном изменении их относительных интенсивностей с ростом x . В полученных рядах фосфатов параметр ячейки a растет с увеличением x .

ИК спектры образцов, типичны для фосфатов структурного типа лангбейнита, кристаллизующихся в пр. гр. $P2_13$. Результаты электронной микроскопии и микрозондового анализа показали однородность образцов и близость их составов теоретическим.

РФА образцов $K_{2-x}Na_xMg_{0.5}Zr_{1.5}(PO_4)_3$ с $x = 0.5$ и 1.0 показал, что они представляют собой смеси фаз со структурами лангбейнита и коснарита. $Na_2Mg_{0.5}Zr_{1.5}(PO_4)_3$ кристаллизуется в структурном типе коснарита. Различие в строении изученных фосфатов объясняется разницей радиусов ионов Na, K и Rb, занимающих полости структур.

Результаты низкотемпературной рентгенографии соединений структурного типа лангбейнита показали, что параметр элементарной ячейки a увеличивается с ростом температуры. По значениям коэффициентов теплового расширения (КТР) эти фосфаты можно отнести к классу среднерасширяющихся веществ. У фосфата $Na_2Mg_{0.5}Zr_{1.5}(PO_4)_3$ параметр a уменьшается, а параметр c увеличивается с ростом температуры, что является типичным поведением фосфатов со структурой коснарита. Средний КТР позволяет отнести соединение к классу малорасширяющихся веществ.

Халькогенидные волоконные световоды для FEWS анализа

Зернова Н.С., Вельмузов А.П.

Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девярых Российской академии наук, Нижний Новгород, Россия

E-mail: nz_18@mail.ru

Волоконная спектроскопия вытекающей волны (FEWS) является активно развивающимся спектральным методом анализа. Этот метод основан на принципе многократного нарушения полного внутреннего отражения и заключается в измерении ИК-спектра поглощения анализируемой пробы с помощью погруженного в нее волоконного световода. К настоящему времени показана перспективность метода FEWS для анализа органических жидкостей (нефть и продукты ее переработки), наркотических веществ, газов, биологических тканей и т.д. Перспективными материалами для изготовления волоконно-оптических сенсоров являются халькогенидные стекла на основе селенидов и теллуридов мышьяка и германия. Эти стекла прозрачны в ближнем и среднем ИК-диапазоне (2–18 мкм) и обладают высокими значениями показателя преломления (2.5–3.2).

Целью исследования была разработка способа получения особо чистых стекол на основе селенидов германия, вытяжка из них волоконных световодов и изготовление сенсоров на их основе для FEWS анализа.

Предложен новый способ получения стекол системы Ge – Se с низким содержанием поглощающих примесей, основанный на использовании моноселенида германия. GeSe получали пропусканием паров селена над гранулированным германием при температуре 550–580°C в режиме непрерывного вакуумирования реактора.

Синтезированный моноселенид германия подвергали многократной вакуумной сублимации, последняя стадия которой совмещалась с его загрузкой в реактор синтеза стекла. Были получены стекла с содержанием примеси водорода в форме SeH-групп 0.04 ppm wt, кислорода < 0.1 ppm wt, воды < 0.05 ppm wt.

Вытяжкой из тигля изготовлены бесструктурные волоконные световоды диаметром 125-250 мкм. Методом «штабик в трубке» получены волоконные световоды со стеклянной оболочкой. Минимальные оптические потери составили 0.9 дБ/м на длине волны 7 мкм. На основе этих световодов изготовлены волоконные сенсоры с различной геометрией чувствительной зоны: линейная, U-образная, двух- и трехвитковая. Показана перспективность использования полученных сенсоров для анализа смесей органических веществ в спектральном диапазоне 2 – 10 мкм (водные растворы ацетона, этанола, продукты переработки нефти).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 16-13-1025).

Изучение кинетики последовательной реакции SiF₄ с AlCl₃

Каминская Е.И.¹, Кириллов Ю.П.², Трошин О.Ю.^{1,2}

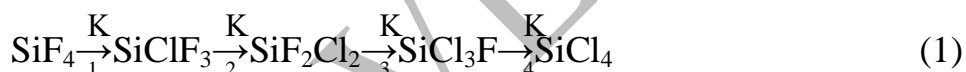
¹Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

²Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Десятых РАН

Нижегород, Россия

E-mail: kamkat@bk.ru

Индивидуальные изотопы кремния ²⁸Si, ²⁹Si, ³⁰Si, и их соединения представляют интерес для различных фундаментальных и прикладных исследований. Также представляют интерес соединения изотопнообогащенного кремния; например, в ряде патентов на основании расчетов сделан вывод о наличии особых физико-химических свойств у кварцевого стекла с измененным изотопным составом. Перспективными способами получения изотопнообогащенного SiO₂ является MCVD-метод, золь-гель метод и ряд других, в которых в качестве прекурсора используется SiCl₄. Для разделения изотопов кремния используется его тетрафторид, поэтому синтез изотопнообогащенного SiCl₄ предложено проводить путем взаимодействия SiF₄ с AlCl₃ в статических условиях [1]. Особенностью данного метода является образование промежуточных продуктов - фторхлоридов кремния, по реакции:



что указывает на последовательный характер замещения атомов галогенов.

Целью данной работы является изучение макроскопической кинетики взаимодействия SiF₄ с AlCl₃ в статических условиях и определение кинетических параметров этого процесса.

Опыты проводили путем выдерживания SiF₄ с AlCl₃ в закрытом реакторе при определенной температуре; для газохроматографического определения состава продуктов реакции проводили периодический отбор проб из реактора в ампулы. Значение констант скоростей стадий последовательной химической реакции (1) рассчитывали по алгоритму, приведенному в работе [2], а также при помощи пакета прикладных программ (MathLab 6).

На основании результатов работы определены значения констант скоростей реакций образования фторхлоридов и хлорида кремния при различной температуре. Кинетические кривые содержания SiF₄, SiClF₃, SiF₂Cl₂, SiCl₃F, SiCl₄ в смеси качественно коррелируют с кинетическими кривыми для последовательных реакций, приведенных в литературе [2].

Список литературы

[1] Способ получения изотопнообогащенного тетрахлорида кремния. Патент РФ №2618265 Чурбанов М.Ф., Буланов А.Д., Трошин О.Ю., Гребеньков К.С. Оpubл. 03.05.2017 бюл. № 13.

[2] Родигин Н.М, Родигина Э.Н. Последовательные химические реакции (математический анализ и расчеты). М: Изд. АН СССР. 1960. 138 С.

**Исследование влияния условий синтеза на оптическую прозрачность
стекол системы $\text{TeO}_2 - \text{MoO}_3 - \text{La}_2\text{O}_3$**

Козина А.А., Федотова И.Г., Карзанов В.В., Сибиркин А.А.
*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского
Нижний Новгород, Россия
E-mail: anastasya.cozina2011@yandex.ru*

Теллуритно-молибдатные стекла легированные атомами редкоземельных элементов являются перспективными оптическими материалами. Однако, присутствие в стекле триоксида молибдена может снижать оптическую прозрачность в видимой области спектра за счет восстановления части атомов молибдена (IV) в ходе синтеза стекла. На процесс восстановления могут влиять условия получения стекла, такие как состав стекла, природа исходных веществ для синтеза стекла, температура и продолжительность гомогенизирующего плавления шихты. Данная работа посвящена исследованию влияния условий синтеза на оптическую прозрачность стекол системы $\text{TeO}_2 - \text{MoO}_3 - \text{La}_2\text{O}_3$. В ходе работы синтезированы серии лантансодержащих теллуритно-молибдатных стекол с варьированием одного из перечисленных условий синтеза.

Оптическая прозрачность полученных образцов исследовали на спектрометре Shimadzu UV – 3600 в интервале длин волн от 450 – 2200 нм с шагом сканирования 2 нм. Из зарегистрированных спектров поглощения стекол определили коротковолновую границу пропускания.

В ходе работы было установлено, что в стеклах системы $\text{TeO}_2 - \text{MoO}_3 - \text{La}_2\text{O}_3$ при изменении состава стекла с увеличением содержания триоксида молибдена от 23 до 31 мол. % наблюдается смещение коротковолновой границы пропускания из видимой в ближнюю ИК - область спектра.

Для стекла состава $(\text{TeO}_2)_{0.76}(\text{MoO}_3)_{0.19}(\text{LaO}_{1.5})_{0.05}$ увеличение времени гомогенизирующего плавления от 15 до 120 минут приводит к небольшому увеличению значения коротковолновой границы пропускания с 540 до 557 нм.

Для стекла состава $(\text{TeO}_2)_{0.76}(\text{MoO}_3)_{0.19}(\text{LaO}_{1.5})_{0.05}$ увеличение температуры гомогенизирующего плавления шихты с 700 до 800 °С приводит к смещению коротковолновой границы пропускания с 674 до 718 нм.

Стекла полученные из шихты, состоящей из ортотеллуровой кислоты, тетрагидрата гептамолибдата аммония, гексагидрата нитрата лантана обладают большей оптической прозрачностью (коротковолновая граница пропускания 543 нм), по сравнению со стеклами, полученными в равных условиях из диоксида теллура, триоксида молибдена и триоксида дилантана (коротковолновая граница пропускания 674 нм).

Условиями заметно влияющими на оптическую прозрачность стекол системы $\text{TeO}_2 - \text{MoO}_3 - \text{La}_2\text{O}_3$ являются состав стекла, температура гомогенизирующего плавления и природа исходных веществ для синтеза стекла.

Синтез и строение фосфата $\text{Na}_3\text{Zr}_{1.5}(\text{PO}_4)_3$

Козлова Е.А.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

Неорганические фосфаты каркасного строения структурного типа $\text{NaZr}_2(\text{PO}_4)_3$ (NЗР [1]) изучаются как основа керамик, обладающих высокой термической, химической, радиационной устойчивостью. Изучение подобных систем также связано с наличием низкого теплового расширения, ионной проводимости и каталитической активности.

В литературе подробно изучен родоначальник семейства $\text{NaZr}_2(\text{PO}_4)_3$ [1], каркас структуры которого образован октаэдрами ZrO_6 и тетраэдрами PO_4 , а полости занимают ионы Na^+ . Известно NЗР-соединение $\text{Na}_5\text{Zr}(\text{PO}_4)_3$ [2], в котором катионы Na^+ совместно с Zr^{4+} участвуют в формировании каркасообразующих октаэдров. О фосфатах промежуточного состава $\text{Na}_{1+4x}\text{Zr}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ ($0 < x < 1$) имеются лишь отрывочные данные.

Цель данной работы – синтез и исследование $\text{Na}_3\text{Zr}_{1.5}(\text{PO}_4)_3$.

Для получения фосфата использовали твердофазный метод. Исходными реагентами служили NaCl , ZrO_2 , $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$. Реакционную смесь нагревали и выдерживали последовательно при 200°C (24 ч) и 600°C (100 ч). Поэтапный нагрев чередовали с диспергированием.

Полученный образец исследовали методом рентгенографии (Shimadzu XRD-6000, рис. 1а). ИК-спектр был записан на спектрофотометре Shimadzu FTIR-8400S в диапазоне волновых чисел $400\text{--}1400\text{ см}^{-1}$ (рис. 1б). Результаты комплексного исследования свидетельствуют о кристаллизации фосфата $\text{Na}_3\text{Zr}_{1.5}(\text{PO}_4)_3$ в структуре NЗР-типа. Соединение $\text{Na}_3\text{Zr}_{1.5}(\text{PO}_4)_3$ проиндицировано в тригональной сингонии с параметрами элементарной ячейки: $a = 8.8279\text{ \AA}$, $c = 22.9180\text{ \AA}$.

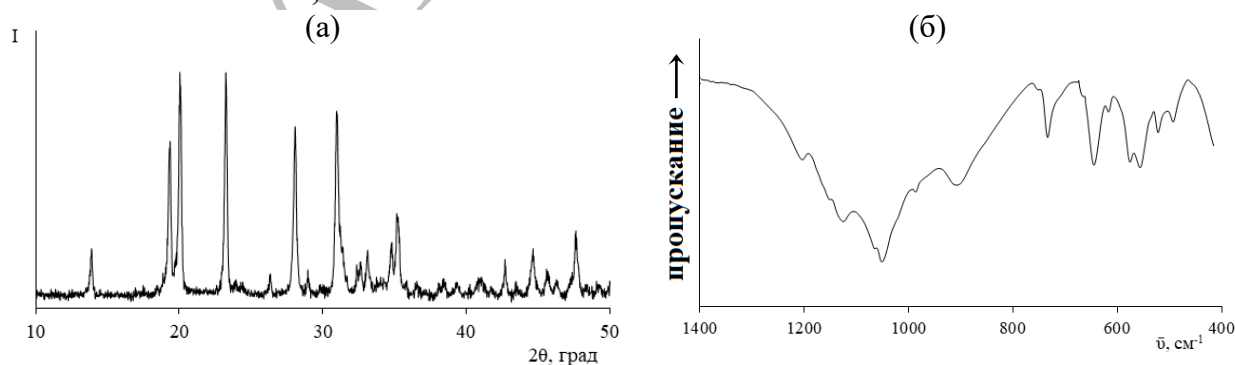


Рис. 1. Рентгенограмма (а) и ИК-спектр (б) фосфата $\text{Na}_3\text{Zr}_{1.5}(\text{PO}_4)_3$.

Список литературы

- [1] Hagman L.O., Kierkegaard P. // Acta Chem. Scand. 1968. V. 22. № 6. P. 1822-1832.
[2] Boilot J. P., Collin G., Comes R. // Solid State Commun. 1983. V. 45. № 3. P. 231.

Изучение теплового расширения сложных силикатов тория

Комшина М.Е., Князев А.В., Савушкин И.А., Лукоянов А.Ю.
*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: m.komshina@yandex.ru.ru*

Одними из распространенных форм нахождения тория в природе являются силикаты, поэтому их синтез и изучение физико-химических свойств, несомненно, является актуальной задачей для решения многих проблем современной радиохимии. Одним из методов, позволяющих определить особенности влияния температуры на кристаллическую структуру, является терморентгенография. Все исследования были проведены на рентгеновском дифрактометре Shimadzu XRD-6000 с использованием приставок HA-1001 фирмы Shimadzu и ТТК-450 фирмы Anton Paar.

Среди полисиликатов тория наибольшее значение имеют аналоги природных минералов эканита, туркестанита и апатита, которые являлись объектами данного исследования.

Полисиликаты тория, которые относятся к структурным типам минералов эканита $M^{II}CaTh(Si_8O_{20})$ ($M^{II} = Ca, Sr$) и туркестанита $M^I NaCaTh(Si_8O_{20})$ ($M^I = Li, Na, K, Rb, Cs$), имеют схожее кристаллическое строение, поэтому обладают общими тенденциями изменения структуры при нагревании. Однако следует отметить, что особенностью силикатов тория, принадлежащих к группе эканита, является то, что в интервале температур 173 – 293 К они обладают нулевыми коэффициентами теплового расширения вдоль всех кристаллографических направлений. Наличие полостей в структурах данных соединений может нивелировать воздействие температуры за счет смещения колебаний в направлении полостей. Данное свойство делает структурный тип эканита перспективным для дальнейших исследований в области низкорасширяющихся материалов. При достижении 293 К расширение вдоль кристаллографического направления c значительно больше, чем вдоль a , что аналогично характеру теплового расширения соединений группы туркестанита. Однако в более плотноупакованной структуре соединений $M^I NaCaTh(Si_8O_{20})$ коэффициенты теплового расширения принимают большие значения. Рост радиуса катиона щелочного металла приводит к уменьшению объема полостей, что понижает способность структуры сдерживать расширение. Силикат тория со структурой апатита $Ca_6Th_4(SiO_4)_6O_2$ характеризуется умеренными коэффициентами теплового расширения, и при увеличении температуры его расширение становится так же более изотропным, как и у ранее рассмотренных силикатов [1].

Список литературы

[1] Bulanov E.N., Wang J., Knyazev A.V., White T., Komshina M.E., Baikie T., Lapshin A.N., Dong Z. // *Inorganic Chemistry*. 2015. V. 53. №23. P. 11356–11361.

Терморентгенографические исследования $\text{BiCa}_4(\text{PO}_4)_3\text{O}$

Коршак К.С., Буланов Е.Н., Князев А.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: Korshak.Ksenia@yandex.ru

Соединение $\text{BiCa}_4(\text{PO}_4)_3\text{O}$ относится к структурному типу апатита. Как и одно из самых известных соединений класса – гидроксипатит $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}$, оно представляет интерес именно с точки зрения своей биоактивности. Благодаря наличию в своем составе висмута, соединение обладает антимикробными свойствами, что было подтверждено на культурах *E.coli*, *S.aureus* и *C.albicans*. Несмотря на изученность биологической активности $\text{BiCa}_4(\text{PO}_4)_3\text{O}$, особенности кристаллической структуры данного вещества, в том числе ее изменения в области температур получения биоматериалов на его основе и их дальнейшей эксплуатации, были не известны. В связи с этим, нами были проведены терморентгенографические исследования $\text{BiCa}_4(\text{PO}_4)_3\text{O}$ в интервале температур $-100 - 200^\circ\text{C}$. Съёмку рентгенограмм проводили на рентгеновском дифрактометре Shimadzu XRD-6000 с термоприставкой Anton Paar ТТК 450. Уточнение структур проводили с помощью метода Ритвельда на программном обеспечении Topas 3.0. Уточнение структур было проведено в пространственной группе $\text{P6}_3/\text{m}$, характерной для класса апатита. Однако при -100°C наблюдали появление дополнительного рефлекса отражения $2\theta=24^\circ$. Появление данного дополнительного рефлекса не может быть объяснено с точки зрения наличия в системе каких-либо побочных продуктов реакции или исходных реактивов. Исследования в области низких температур с помощью дифференциального сканирующего калориметра DSC 204 F1 Phoenix (Netzsch-Geratebau) с μ -сенсором датчиков также не выявили каких-либо процессов, объясняющих данный эффект. Подобное явление ранее было описано для $\text{Pb}_5(\text{AsO}_4)_3\text{Cl}$ и объяснено появлением сверхструктуры, образующейся в результате смещений стереохимически активной пары $6s^2$ электронов катионов Pb^{2+} . Наличие аналогичной пары у атомов висмута позволяет предположить возможность протекания аналогичного процесса и в исследуемом веществе. Из данных порошковой рентгенографии также были рассчитаны коэффициенты теплового расширения в исследуемом интервале температур, позволяющие оценить термические деформации структуры (табл. 1).

Таблица 1. Параметры элементарной ячейки и коэффициенты теплового расширения $\text{BiCa}_4(\text{PO}_4)_3\text{O}$.

Температура	a (Å)	$\alpha_a \cdot 10^6$ (K^{-1})	c (Å)	$\alpha_c \cdot 10^6$ (K^{-1})	Vol (Å ³)	$\alpha_V \cdot 10^6$ (K^{-1})
-100°C	9.4192(2)	9.1	6.9129(2)	9.0	531.155(2)	27.2
25°C	9.4301(1)	10.9	6.9209(1)	11.0	533.00(2)	32.8
100°C	9.4397(2)	11.9	6.9280(2)	12.2	534.63(2)	36.1
200°C	9.4506(2)	13.3	6.9363(2)	13.8	536.51(2)	40.5

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-33-60172 мол_а_дк.

**Получение и исследование свойств
изотопнообогащённого кварцевого стекла**

Кужелев И.А.¹, Трошин О.Ю.^{1,2}

¹*Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

²*Институт химии высокочистых веществ им. Г. Г. Девярых РАН,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: jeankoujelev@mail.ru*

Соединения изотопнообогащённого кремния представляют фундаментальный и прикладной интерес как новые материалы и промежуточные вещества для получения индивидуальных высокочистых изотопов кремния [1].

Перспективным направлением в области исследования изотопнообогащённых веществ является получение и изучение физико-химических свойств оптических материалов на основе кварцевого стекла с изменённым относительно природного изотопным составом кремния и кислорода.

В ряде патентов, например [2], приведены расчётные спектры оптических потерь кварцевого стекла природного и изменённого изотопного состава. В связи с этим представляет интерес получение и изучение свойств изотопнообогащённого кварцевого стекла, что явилось целью работы.

Получение образцов изотопнообогащённого диоксида кремния проводили золь-гель методом с использованием в качестве исходного соединения изотопнообогащённого тетрахлорида кремния, синтез которого проводили по реакции хлорирования изотопнообогащённого кремния и ряда его соединений. Хлорид кремния по реакции с безводным спиртом переводили в соответствующие алкоголяты, при гидролизе которых получали гель. Полученный гель подвергали осушке и прокаливанию.

Спектры пропускания полученных образцов снимали на спектрофотометре Shimadzu UV-3600. В работе приводится сравнительная характеристика стекла с природным и модифицированным изотопным содержанием кремния.

Список литературы

- [1]. Девярых Г.Г., Дианов Е.М., Буланов А.Д., Трошин О.Ю., Балабанов В.В. // Доклады Академии наук. 2003. Т. 391. № 5. С.638 – 639.
[2]. D. C. Allan, J. T. Brown // Patent USA № 0022562 A1. 03.02.2005.

**Горячее прессование прозрачной керамики оксида тербия,
легированного редкоземельными элементами**

Кузнецов Д.Д.¹, Пермин Д.А.²

¹*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

²*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,
Нижний Новгород, Россия*

E-mail: deniskuznetsov.94@mail.ru

Наиболее широко используемым магнитоактивным материалом в изоляторах Фарадея является тербий галлиевый гранат (ТГГ). Это связано с высоким значением постоянной Верде ($37 \text{ рад}/(\text{T}\cdot\text{м}) @ 1\text{мкм}$), термооптическими свойствами, позволяющими работать на высоких средних мощностях, отработанной технологией выращивания монокристаллов до 40 мм.

В последнее время нами была разработана методика получения оптической керамики Tb_2O_3 значение константы Верде которой более чем в 3 раза выше, чем для ТГГ в диапазоне прозрачности материала 380-1750 нм. Тем не менее, технология их производства по-прежнему требует дальнейшего улучшения.

Настоящая работа посвящена изучению фазовых превращений нанопорошков оксида тербия (III,IV) при температурах спекания с целью оптимизации производства прозрачной керамики и изучения возможности увеличения константы Верде за счёт добавления некоторых РЗЭ.

Синтез нанопорошков оксида тербия был проведён методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) с использованием нитрата тербия (III) и глицина в качестве окислителя и горючего соответственно. Эволюция фазового состава продукта СВС при нагревании были исследованы методами высокотемпературной дифференциальной сканирующей калориметрии, дилатометрии и рентгенофазового анализа. Показано, что полученные порошки, представляющие собой смесь фаз Tb_7O_{12} и $\text{Tb}_{11}\text{O}_{20}$, превращаются в Tb_2O_3 после прокаливания при 600-800°C в восстановительной атмосфере.

Спекание керамики $\text{RE:Tb}_2\text{O}_3$, где $\text{RE} = \text{Sc}, \text{Y}, \text{Ce}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Yb}, \text{Lu}$ проводили горячим прессованием при давлении 50 МПа и температурах 1200-1600°C.

Микроструктуру керамики исследовали с помощью сканирующей электронной микроскопии. Установлено, что плотные прозрачные образцы могут быть получены при температуре 1500-1550°C. Проведено исследование влияния содержания оксидов редкоземельных элементов на светопропускание и константу Верде магнитооптической керамики на основе оксида тербия.

**Фазообразование двойных фосфатов в системах $M_{0.5+2x}E_{2-x}(PO_4)_3$
($M = Zn, Mn; E = Ti, Zr$)**

Лавренов Д.А.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

E-mail: Lavrenov_D.A@mail.ru

Неорганические фосфаты со структурными октаэдро-тетраэдрическими каркасами, включающие в состав титан (цирконий) и элементы в степени окисления +2, изучаются как основа керамик, обладающих высокой термической, химической, радиационной устойчивостью и регулируемым, часто ультрамалым, тепловым расширением [1, 2]. Цель данной работы – определить границы существования структурных типов $Sc_2(WO_4)_3$ (SW) и $NaZr_2(PO_4)_3$ (NZP) в системах $M_{0.5+2x}E_{2-x}(PO_4)_3$ ($M = Zn, Mn; E = Ti, Zr$).

Индивидуальные соединения и твердые растворы синтезированы золь-гель методом. В качестве исходных реагентов использовали соли металлов в степени окисления +2 и +4 и дигидрофосфат аммония. При синтезе реакционные смеси подвергали термообработке на воздухе при температурах от 90 до 1100°C. Поэтапный изотермический нагрев образцов чередовали с диспергированием. Также для получения фосфатов использовали другой вариант золь-гель процесса – цитратный метод Печини. К раствору лимонной кислоты добавляли растворы солей металлов. К полученной смеси добавляли раствор дигидрофосфата аммония и этиленгликоль. Затем образцы высушивали, диспергировали и подвергали ступенчатому отжигу.

Полученные образцы представляли собой поликристаллические порошки. Они охарактеризованы методами рентгенофазового анализа (дифрактометр Shimadzu LabX XRD-6000) и ИК-спектроскопии (спектрофотометр Shimadzu FTIR-8400S). Области протяженности структурных типов в изученных системах составили: (1) $Mn_{0.5+x}Mn_xZr_{2-x}(PO_4)_3$ – SW, $0 \leq x \leq 0.35$; (2) $Mn_{0.5+x}Mn_xTi_{2-x}(PO_4)_3$ и (3) $Zn_{0.5+x}Zn_xTi_{2-x}(PO_4)_3$ – NZP, $x = 0$. В большинстве случаев ионы Mn^{2+} по отношению к кислороду имеют октаэдрическую координацию, но также встречается и тетраэдрическая координация. Реализация твердых растворов в системе 1 подтверждает этот факт: КЧ марганца в полостях структуры SW равно 4, в каркасе 6. В системе 2 твердые растворы не получены из-за больших различий ионных радиусов Ti и Mn. В отношении цинксодержащей системы 3 можно сказать, что катион Zn^{2+} проявляет четкую тенденцию к тетраэдрической координации и заселяет только внекаркасные позиции (КЧ 4).

Список литературы

- [1] Петьков В.И., Асабина Е.А., Шипилов А.С., Щелоков И.А., Суханов М.В., Дмитриенко А.С., Алексеев А.А., Лавренов Д.А., Майоров П.А. NZP-керамика с регулируемыми и близкими к нулевому коэффициентами теплового расширения // Керамика и композиционные материалы: Доклады IX Всероссийской конференции. 23–26 мая 2016 г., Сыктывкар. С. 174-176.
[2] Asabina E., Pet'kov V., Mayorov P., Lavrenov D., Schelokov I., Kovalsky A. Synthesis, structure and thermal expansion of the phosphates $M_{0.5+x}M'_xZr_{2-x}(PO_4)_3$ (M, M' –metals in oxidation state +2) // Pure Appl. Chem. 2017. V. 89. № 4. P. 523-534.

**Масс-спектрометрический анализ тонких плёнок
на основе гексацианоферратов переходных металлов**

Лаптенкова А.В., Селютин А.А.

Санкт-Петербургский государственный университет,

Санкт-Петербург, Россия

E-mail: laptenkova15@gmail.com

Потребность в системах хранения энергии с каждым годом увеличивается из-за роста новых областей энергетики, основанных на возобновляемых источниках энергии, таких как: энергия солнца, ветра, прилива и отлива. В тоже время развитие принципов «Зелёной химии» в современном обществе предполагает отказ от органических растворителей. Для создания новых аккумуляторов на основе водных систем необходимо заменить литий на менее активный металл, каким является магний, а также подобрать эффективный катодный материал.

Гексацианоферратные комплексы переходных металлов хорошо зарекомендовали себя в качестве катодных материалов для водных аккумуляторов по ряду причин [1]. Во-первых, по своей природе данные соединения являются цеолитами и могут интеркалировать катионы щелочных и щелочноземельных элементов в водном растворе [2]. Во-вторых, синтез этих комплексов экономичен, а сами по себе материалы не токсичны и безопасны в использовании [3].

Улучшить электрохимические показатели аккумуляторов можно путем использования наноразмерных материалов катода. Для этого получают тонкие пленки гексацианоферратов переходных металлов методом Ленгмюра-Блоджетт. В этом случае отрицательно заряженные наночастицы комплексов, растворенные в водной субфазе, адсорбируются на положительно заряженный монослой за счёт сил электростатических взаимодействий.

В данной работе были получены плёнки гексацианоферратов переходных металлов, содержащие ионы магния, с использованием катионного ПАВ октадециламина. Для понимания механизма взаимодействия в подобных системах необходимо установить структуру полученных соединений. С этой целью были проведены комплексные масс-спектрометрические исследования методом MALDI-MS.

Исследования проведены с использованием оборудования ресурсных центров Научного парка СПбГУ.

Список литературы

- [1] C. Wessells, M. McDowell, S. Peddada, M. Pasta, R. Huggins, Y. Cui // *Am. Chem. Soc.* 2012. 6 (2). P. 1688-1694.
- [2] G. Kasiri, R. Trocoli, A. Hashemi, F. Mantia // *Electrochem. Acta.* 2016. 222. P. 74-83.
- [3] C. Wessells, R. Huggins, Y. Cui // *Nat. Com.* 2016. 2. P. 550-554.

**Структурные исследования двойных нитратов тория состава
 $\text{NH}_4\text{Th}(\text{NO}_3)_5 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ($n = 5, 9$)**

Лукоянов А.Ю.¹, Комшина М.Е.¹, Савушкин И.А.¹, Баранов Е.В.^{1,2}

¹Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

²Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: Aleksey.Lukouanov@yandex.ru

Соединения тория находят применение в различных отраслях промышленности, но наиболее перспективным направлением является ядерная энергетика. В связи с этим необходимо изучение физико-химических свойств сложных комплексов тория, которые образуются на различных стадиях топливных циклов.

Целью данной работы является исследование кристаллического строения аммоний-содержащих комплексов тория. Работа была проведена с использованием дифрактометра Xcalibur Gemini (Mo-K α , $\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$) и ИК спектрометра Shimadzu FTIR – 8400S.

Структуры соединений $\text{NH}_4\text{Th}(\text{NO}_3)_5 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ и $\text{NH}_4\text{Th}(\text{NO}_3)_5 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ имеют схожее строение. Основой являются анионные комплексы тория состава $[\text{Th}(\text{NO}_3)_5(\text{H}_2\text{O})_2]^-$, образующие слои, которые связаны катионами и молекулами воды путем $\text{NH}_4^+ \cdots \text{O}(\text{NO}_3^-)$ и водородных взаимодействий [1]. Для понимания механизмов структурных перестроек во время обезвоживания была проведена «мягкая» дегидратация наонагидрата пентанитратотората аммония в пентагидрат. Изучение дегидратации выявило повышение симметрии элементарной ячейки и выравнивание анионных комплексов тория друг относительно друга в плоскости $b0c$, а также формирование одиночной зигзагообразной ленты из катионов аммония и молекул воды, тогда как в наонагидрате слои анионных комплексов тория сдвинуты друг относительно друга, а между ними располагаются две зигзагообразные ленты из NH_4^+ и H_2O . Согласно анализу наиболее укороченных контактов, двумерные цепочки комплексов $[\text{Th}(\text{NO}_3)_5(\text{H}_2\text{O})_2]^-$ формируются посредством укороченных водородных связей с участием атомов водорода координированной воды и кислорода NO_3^- лиганда. Расстояние между слоями ториевых комплексов в $\text{NH}_4\text{Th}(\text{NO}_3)_5 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ составляет примерно 7.3 \AA , в $\text{NH}_4\text{Th}(\text{NO}_3)_5 \cdot \text{H}_2\text{O}$ около 6 \AA . Очевидно, что данное различие обусловлено большим количеством сольватных молекул воды в структуре первого пентанитратотората по сравнению со вторым. Несмотря на это, при анализе полученных соединений можно выявить значительные «напряжения» в структуре пентагидрата. Наблюдается существенная разница в длинах связей Th-O(H_2O), при этом нитратные группы $\text{NH}_4\text{Th}(\text{NO}_3)_5 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ разупорядочены по двум положениям и имеют заселенности 0.491 и 0.509.

Синтез и исследование
сложных фосфатов циркония и металлов в степени окисления +2

Майоров П.А.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: pavel.mayorov.94@mail.ru

Неорганические фосфаты каркасного строения изучаются как основа керамик, обладающих высокой устойчивостью к тепловым ударам и способностью к включению широкого диапазона элементов в нерастворимую стабильную структуру. Среди них широко известны сложные фосфаты со структурными каркасами вида $\{[L_2(PO_4)_3]^{P-}\}_{3\infty}$, относящиеся к структурным типам $NaZr_2(PO_4)_3$ (NZP) и $Sc_2(WO_4)_3$ (SW). Особенности их строения в значительной степени зависят от размеров входящих в их состав катионов.

Цель данной работы – изучение фазообразования и структурных особенностей и фосфатов состава $M_{0.5+x}M'_xZr_{2-x}(PO_4)_3$ (M, M' – металлы в степени окисления +2: Co, Mn, Cd, Sr, Pb, Ni, Cu; $0 \leq x \leq 2$).

Фосфаты синтезированы золь-гель методом из водных растворов солей элементов в степени окисления +2, оксихлорида циркония и дигидрофосфата аммони. Реакционные смеси сушили при 90°C, затем диспергировали и подвергали ступенчатому отжигу при температурах 600 и 650°C (с диспергированием после каждой стадии).

Полученные образцы исследованы с помощью рентгенофазового анализа, ИК-спектроскопии и микронзондового анализа. Рентгенофазовый анализ проводили на дифрактометре Shimadzu XRD-6000 в интервале углов 10-60° с шагом 0.02°. ИК-спектры исследуемых веществ записаны на спектрофотометре Shimadzu FTIR-8400S в диапазоне волновых чисел 400-1400 cm^{-1} .

Микронзондовый анализ проводился на сканирующем электронном микроскопе JEOL JSM-7600F с термополовой электронной пушкой (катод Шоттки).

Согласно полученным результатам, в рядах фосфатов, включающих в полости структуры крупные катионы кадмия, стронция и свинца, получены твердые растворы структурного типа NZP (рис. 1а.). ИК-спектры образцов приведенной системы подобны по

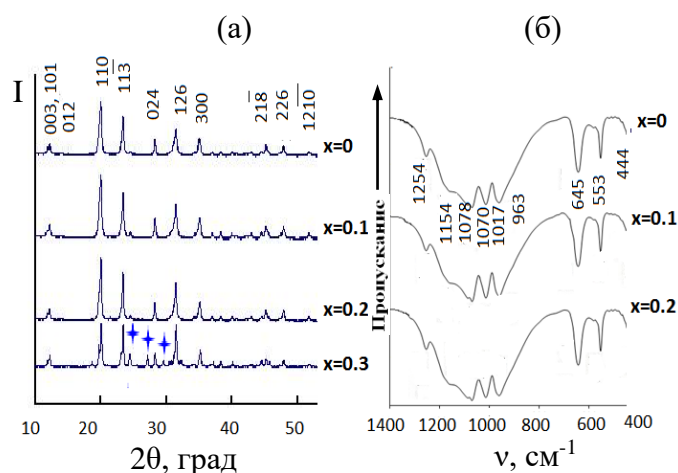


Рис. 1. Рентгенограммы (а) и ИК-спектры (б) фосфатов $Co_{0.5+x}Cu_xZr_{2-x}(PO_4)_3$. Знаком \star обозначены примеси.

форме и положению полос поглощения и характерны для фосфатов NZP-типа (рис. 1б.). В системах фосфатов, включающих в полости небольшие ионы кобальта и марганца, согласно данным рентгенографии и ИК-спектроскопии, образуются твердые растворы структурного типа вольфрамата скандия.

Кристаллическая структура фосфата $Pb_{0.5}Zr_2(PO_4)_3$ ($x = 0$) уточнена методом Ритвелда по данным порошковой рентгенографии при температурах -100 и +200°C. Обнаружено, что в зависимости от температуры изученное соединение кристаллизуется в одной из двух структурно-близких модификаций, отличающихся особенностями распределения катионов свинца в полостях структуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-33-00248).

Кристаллическая структура и физико-химические свойства соединений, образующихся в системах Ln-Sr-Co-O (Ln = Sm, Gd)

Маклакова А.В., Волкова Н.Е.

Уральский Федеральный Университет им. первого президента России

Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

E-mail: anastasia_maklakova@mail.ru

Физико-химические свойства оксидов, образующихся в системах Ln-Me-Me/-O (где Ln – лантанид, -Me – щелочноземельный металл, Me/ - 3-d металл) зависят от их кристаллической структуры, на формирование которой существенное влияние оказывает содержание кислорода. В связи с этим информация о методах получения, физико-химических свойствах и стабильности оксидов при варьировании химического состава на сегодняшний день является актуальной.

Поэтому целью настоящей работы явились определение фазовых равновесий в системах Ln-Sr-Co-O (Ln = Sm, Gd), а так же оптимизация условий синтеза, определение кристаллической структуры и физико-химических свойств соединений, образующихся в данных системах.

Синтез образцов проводили по глицерин-нитратной технологии. Заключительный отжиг проводили при 1100°C на воздухе в течение 240 часов с промежуточными перетираниями и последующим медленным охлаждением на комнатную температуру. Фазовый состав полученных оксидов контролировали рентгенографически. Идентификацию фаз проводили при помощи картотеки JCPDS и программного пакета «freak». Определение параметров элементарных ячеек из дифрактограмм осуществляли с использованием программ «CelRef 4.0», уточнение полнопрофильного анализа Ритвелда в программе «FullProf 2008».

Согласно результатам РФА в системах Ln–Sr–Co–O (Ln = Sm, Gd).на воздухе установлено образование двух типов твердых растворов: $Sr_{1-x}Ln_xCoO_{3-\delta}$, $Sr_{2-y}Ln_yCoO_{4-\delta}$ (Ln = Sm, Gd). Установлено, что однофазные сложные оксиды $Sr_{1-x}Gd_xCoO_{3-\delta}$ образуются при $0.1 \leq x \leq 0.4$ и $Sr_{2-y}Gd_yCoO_{4-\delta}$ - при $0.8 \leq y \leq 1.2$. Для твердых растворов $Sr_{1-x}Sm_xCoO_{3-\delta}$, $Sr_{2-y}Sm_yCoO_{4-\delta}$ область гомогенности лежит в следующем интервале составов: $0.05 \leq x \leq 0.50$ и $0.9 \leq y \leq 1.3$. Рентгенограммы всех однофазных оксидов удовлетворительно описываются в рамках тетрагональной ячейки пространственной группы $I4/mmm$.

Для всех однофазных оксидов были рассчитаны параметры элементарной ячейки и координаты атомов. Показано, что при увеличении концентрации ионов Sm (Gd) наблюдается уменьшение параметров и объёма элементарной ячейки для сложных оксидов, что связано с размерными эффектами.

Для всех однофазных оксидов были рассчитаны параметры элементарной ячейки и координаты атомов. Для образцов состава $Sr_{1-x}Sm_xCoO_{3-\delta}$ ($x = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$) и $Sr_{1-x}Gd_xCoO_{3-\delta}$ ($x = 0.1, 0.2$), построена зависимость содержания кислорода на воздухе от температуры.

Кристаллическая структура глутаратуранилата гуанидиния

Манаков Н.В., Новиков С.А.

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия
E-mail: manakov@himgos.ru

Взаимодействием оксида урана (VI), глутаровой кислоты и карбоната гуанидиния в водной среде были получены монокристаллы состава $(Gu)_2[(UO_2)_2(Glut)_3] \cdot 4H_2O$, где Gu – $C(NH_2)_3^+$, Glut – $C_5O_4H_6^{2-}$. Строение полученного соединения установлено методом рентгеноструктурного анализа монокристалла (РСА). Рентгенодифракционный эксперимент проведен на автоматическом четырехкружном дифрактометре с двумерным детектором Bruker Каппа Арех II. По данным РСА кристаллы соединения $(Gu)_2[(UO_2)_2(Glut)_3] \cdot 4H_2O$ (I) принадлежат к моноклинной сингонии с параметрами элементарной ячейки $a = 9.1640(2) \text{ \AA}$, $b = 17.4116(3) \text{ \AA}$, $c = 20.6270(4) \text{ \AA}$, $\beta = 93.461(1)^\circ$, пр. гр. $P 2_1/n$, $Z = 4$. Полученные кристаллы были исследованы на ИК Фурье-спектрометре. Результаты ИК спектроскопического анализа хорошо согласуются с данными РСА.

В структуре присутствуют два кристаллографически разных атома урана, отличающихся параметрами координационных полимеров (КП). Для обоих атомов урана КП имеет вид гексагональной бипирамиды, в аксиальных позициях которой расположены атомы кислорода уранильных групп. Шесть атомов кислорода в экваториальных позициях КП принадлежат трем глутарат-

ионам, координированным бидентатно-циклически к двум атомам урана (с образованием четырехчленных циклов), реализуя тип координации Q^{02} [1].

Структурными единицами кристаллов **I** являются слои состава $[(UO_2)_2(Glut)_3]^{2-}$, которым соответствует кристаллохимическая формула $A_2Q^{02}_3$ ($A = UO_2^{2+}$, $Q^{02} = C_5O_4H_6^{2-}$) (типы координации лигандов и кристаллохимическая формула приведены в соответствии с [2]). Во внешней сфере комплекса находятся ионы гуанидиния и молекулы воды, связывающие глутаратуранилатные слои в каркас посредством электростатических взаимодействий и водородных связей.

Работа выполнена при финансовой поддержке базовой части государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации.

Список литературы

- [1] Сережкин В.Н., Медведков Я.А., Сережкина Л.Б., Пушкин Д.В. // Журн. физ. химии. 2015. Т. 89. С. 978.
[2] Сережкин В.Н., Польшова Т.Н., Порай-Кошиц М.А. // Коорд. химия. 1995. Т. 21. С. 253.

Исследование области стеклообразования в системе TeO_2 - ZnO - CuO

Медведева Ю.А., Замятин О.А.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: medvedeva_555@mail.ru*

Исследование переходных элементов в кристаллической и стеклообразной матрице в настоящее время является перспективным научным направлением, связанным с возможностью изготовления лазеров, оптических усилителей и фильтров. Введение в стеклообразную матрицу 3d-элементов приводит к модификации физических и оптических свойств. Особый интерес представляют стеклообразные материалы, содержащие оксид меди. Образцы, легированные ионами Cu^{2+} , обладают электрической проводимостью и существенно изменяют их магнитную восприимчивость. Кроме того, ионы меди могут переходить в одновалентное состояние, которое формирует центры фотолюминесценции, что позволяет применять такие материалы в солнечных батареях в качестве фотогальванического элемента. В данной работе на основе теллурично-цинкатной системы изучено влияние оксида меди на физические термические и оптические свойства тройных стекол. Положение границы стеклообразования было установлено расплавным методом с использованием оксидов теллура, цинка и меди в качестве исходных веществ. Установлено, что максимальное содержание оксида меди в стекле, при заданном соотношении диоксида теллура и оксида цинка, составляет 40% (мол.).

Методом ДСК исследованы термические свойства образцов стекол различного состава и определены температуры стеклования, кристаллизации и плавления. Показано, что по мере увеличения содержания оксида меди происходит увеличение температуры стеклования и повышение склонности стекол к кристаллизации. Оптические свойства стекол тройной системы были исследованы во всей области прозрачности и показано, что в видимой области присутствуют интенсивная полоса поглощения, обусловленная наличием иона Cu^{2+} . С помощью метода рентгенофазового анализа была установлена природа кристаллических фаз, образующихся в шихте при ее нагревании и при кристаллизации стекол. Установлено, что в результате синтеза стекла в шихте формируются фазы сложных оксидов теллура, цинка и меди. Методом ЭПР были исследованы магнитные свойства стекол и охарактеризован геометрический полиэдр иона Cu^{2+} в стекле.

**Комплексное структурное исследование сложных оксидных
марганецсодержащих соединений системы
 $\text{K}_2\text{O}-\text{A}^{\text{III}}_2\text{O}_3-\text{MnO}_2$ (A^{III} - Al, Cr, Ga)**

Муравьёва А.А., Князев А.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия.*

E-mail: Nastyamuravjova@yandex.ru

Голландиты могут быть использованы как огнеупоры, ионные проводники, катализаторы, кантилеверы в атомно-силовой микроскопии, неорганические сорбенты, матрицы для захоронения радиоактивных отходов. Их комплексное исследование носит не только научный, но и практический интерес.

В результате проведения данной работы установлено, что в системе $\text{K}_2\text{O}-\text{A}^{\text{III}}_2\text{O}_3-\text{MnO}_2$ (A^{III} - Al, Cr, Ga) могут образовываться соединения, кристаллизующиеся в структурно типе голландита с общей формулой $\text{K}_2\text{A}^{\text{III}}_2\text{Mn}_6\text{O}_{16}$. Методом высокотемпературного твердофазного синтеза получено три индивидуальных соединения. Из них два индивидуальных соединения синтезированы впервые.

Полноматричное уточнение структур проводили методом Ритвельда с использованием программы RIETAN-97. По полученным данным построен фрагмент структуры изученного соединения (рис. 1). Данные соединения кристаллизуются в тетрагональной сингонии и имеют пространственную группу $I4/m$. Соединения имеют каркасное строение. В каркасе данных соединений, построенном из октаэдров $\text{A}^{\text{III}}(\text{Mn})\text{O}_6$,

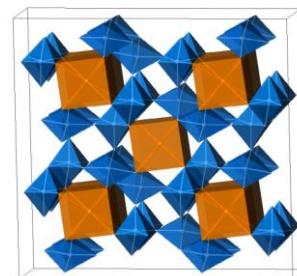


Рисунок 1. Фрагмент структуры $\text{K}_2\text{Al}_2\text{Mn}_6\text{O}_{16}$, построенный на основе данных, полученных методом Ритвельда.

образуются 2 типа туннелей, незаполненные R-туннели и содержащие позиции Уайкоффа 4e H-туннели на которых располагаются катионы калия.

Для всех синтезированных соединений были определены температурные зависимости параметров элементарной ячейки и коэффициенты теплового расширения. В голландитах, содержащих в октаэдрических A^{III} позициях последовательно ряд катионов Cr, Al, Ga, наблюдается заметное увеличение коэффициентов теплового расширения.

Для голландитов характерна малая анизотропия теплового расширения. Среди соединений $M^{k_{2/k}}A^{III}_2Mn_6O_{16}$ ($M^{k_{2/k}}$ – Ba, K, Rb, Cs; A^{III} – Al, Cr, Ga) наиболее анизотропно расширяются барий- и цезийсодержащие голландиты.

Список литературы:

1) Mukheejee, B. Space group and cell dimensions of a specimen of hollandite / B. Mukheejee // Acta Crystallographica. – 1960. – V.13, - P.164-168.

Влияние условий синтеза аморфного гидроксида алюминия методом переосаждения из Al-содержащих растворов по нитратной технологии

Мухамедьярова А.Н., Егорова С.Р., Скибина Ю.Д., Чжан Ю., Ламберов А.А.
 Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
 E-mail: anm03@list.ru

В качестве катализатора в таких крупных нефтехимических процессах, как дегидратация спиртов и скелетная изомеризация олефинов используется γ - Al_2O_3 с высокой концентрацией кислотных центров Льюиса, получаемый, в основном, из псевдобемита. Полученный напрямую из псевдобемита алюмооксидный катализатор не обладает достаточной для проведения этих реакций силой кислотных центров Льюиса, поэтому поверхность оксида алюминия модифицируют с целью ее повышения. Одним из способов увеличения силы кислотных центров Льюиса на поверхности оксида алюминия является направленная гидротермальная обработка слабоокристаллизованных (псевдобемит) и неокристаллизованных (аморф) форм гидроксида алюминия, которые частично присутствуют в составе промышленных образцов гидроксидов алюминия, получаемых методом «переосаждения» Al-содержащих растворов, полученных из гиббсита.

Осаждение аморфного продукта проводили путем покапельного добавления 12,5 % р-ра NH_4OH к водному раствору $Al(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$ при перемешивании 450 об/мин. Во время осаждения варьировали конечное значение рН маточного р-ра=5,5-8,0, стабилизация после достижения требуемого рН не проводилась. Синтез проводился при комнатной температуре 19-25 °С в ледяной бане. После достижения требуемого рН гелеобразный осадок фильтровали через фильтрующую ткань под вакуумом. Отмывка от примесных ионов, в том числе от NH_4NO_3 , осуществлялась путем

центрифугирования геля в 1 л дистиллированной воды. Фазовый состав продуктов осаждения анализировались с помощью метода ТГ/ДСК/МС. Исходя из полученных результатов, аморфная фаза гидроксида алюминия образуется при рН=6,3 и постепенном смешении реагентов. Основные соли образуются при пониженном значении рН и любом типе смешения, в то время как псевдобемит, наоборот, образуется при повышенных значениях рН.

Влияние интенсивности перемешивания на гранулометрический состав и насыпную плотность концентрата урана

Наливайко К.А., Титова С.М., Смирнов А.Л., Рычков В.Н.

*Уральский федеральный университет имени первого
Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*

E-mail: kssuha95@mail.ru

Получение химического концентрата является завершающей стадией технологического цикла уранодобывающих заводов. Строго регламентируется примесный состав уранового концентрата. Кроме того, предпочтительно получать концентраты высокой насыпной плотности с целью минимизации транспортных затрат предприятия. Одним из факторов, определяющих насыпную плотность, является гранулометрический состав осадка. В данной работе исследована возможность влияния на размер частиц концентрата и на насыпную плотность в процессе осаждения посредством варьирования интенсивности перемешивания реакционной пульпы.

В качестве реагента-осадителя использовали 25% водный раствор аммиака. Осаждение вели путем нейтрализации до рН 7,0 десорбата, полученного в результате регенерации насыщенного сильноосновного анионита, следующего состава, г/дм³: U – 17,785; H₂SO₄ – 15,6; SO₄ – 37,5; NO₃⁻ – 56,2. Осаждение вели при температуре 45 – 50⁰ С и постоянном перемешивании; частоту вращения мешалки варьировали в диапазоне от 60 до 700 об/мин. Осадки фильтровали, отмывали от маточного раствора, сушили при 120⁰ С в течение 8 ч. Результаты исследования гранулометрического состава суспензий и сухих концентратов, а также значения насыпной плотности после утряски приведены в табл. 1.

Таблица 1. Значения среднего диаметра частиц и насыпной плотности после утряски.

Частота вращения мешалки, об/мин	Средний диаметр частиц суспензии, мкм	Средний диаметр частиц сухих концентратов, мкм	Плотность после утряски, кг/м ³
60	3,76	110,8	1092,16
100	5,00	84,9	942,99
200	6,30	13,7	509,98
300	4,30	4,4	870,87
400	4,20	6,1	935,35
500	4,50	4,6	788,84
600	3,00	7,3	772,74
700	3,00	2,7	832,18

Концентраты с наибольшими значениями среднего диаметра частиц и плотности после утряски получены при перемешивании реакционной пульпы с частотой 60-100 об/мин. Однако, перемешивание при низких оборотах не допустимо, так как приводит к осветлению суспензии. В данном случае оптимальным значением частоты вращения мешалки является 400 об/мин.

**Исследование физико-химических свойств
конверсионного карбоната кальция**

Натарова Е.С.¹, Рудакова Л.В.¹, Нифталиев С.И.²

¹ Воронежский государственный медицинский университет им. Н.Н. Бурденко,
Воронеж, Россия

² Воронежский государственный университет инженерных технологий,
Воронеж, Россия

E-mail: natarovaekaterina@yandex.ru

В научно-технической литературе присутствует большой объем данных о свойствах наполнителей на основе карбоната кальция, как природного, так и химически осажденного, методиках оценки их влияния на характеристики наполненных продуктов. Перспективным направлением является применение в качестве наполнителей полимерных материалов отходов производства, а именно побочного продукта производства нитроаммофоски – конверсионного карбоната кальция. В связи с этим актуальным становится исследование физико-химических свойств этого продукта, позволяющее получить необходимые данные для разработки технологии производства качественного наполнителя.

Исследование компонентного состава конверсионного карбоната кальция проводили при помощи рентгеновского дифрактометра PANalytical Empyrean.

Дисперсный состав проб изучали лазерно-дифракционным методом на анализаторе Microtrac S3500 фирмы «Microtrac Inc» в режиме диспергирования пробы в водной среде.

По внешнему виду конверсионный карбонат кальция представляет собой сыпучий порошок белого цвета с вкраплениями частиц темного цвета. По своему химическому составу конверсионный карбонат кальция существенно отличается от природного. Сумма карбонатов кальция, магния, стронция в пересчете на CaCO_3 составляет 95,5 %, в значительных количествах содержится фтора – 0,27%, фосфора – 0,33 %, стронция – 1,20 % на фоне низкого содержания магния – 0,01 %. В составе продукта присутствуют водорастворимые азотсодержащие соединения – 0,16 %, что объясняется неполным вытеснением раствора аммиачной селитры из осадка карбоната кальция. Зерновой состав конверсионного карбоната кальция в основном представлен частицами размером 30...150 мкм, что не удовлетворяет требованиям по дисперсности наполнителей полимерных материалов.

Анализируя полученные результаты можно сделать вывод, что конверсионный карбонат кальция обладает рядом недостатков, ограничивающих его применение в качестве наполнителя полимерных материалов, что требует проведения дополнительных исследований по изучению влияния различных методов обработки (измельчение, термообработка) на его состав и свойства.

Исследование термических свойств стекол системы $\text{TeO}_2\text{—MoO}_3\text{—La}_2\text{O}_3$

Никулина А.И., Федотова И.Г.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: nikulina.anuta12@mail.ru

В настоящее время теллуритные стекла являются перспективным материалом для волоконной и нелинейной оптики. Это связано с их высокими значениями линейного и нелинейного показателя преломления, широкой областью прозрачности и низкими оптическими потерями. При изготовлении волоконных световодов стекла подвергаются термической обработке. При нагревании теллуритных стекол может протекать процесс кристаллизации, который является негативным процессом при изготовлении световодов. Поэтому исследование термических характеристик теллуритных стекол является актуальной научной задачей.

В данной работе проведено исследование термических свойств серии стекол системы $\text{TeO}_2\text{—MoO}_3\text{—La}_2\text{O}_3$ и установлена природа продуктов их кристаллизации. Исследуемые стекла получали плавлением смеси ортотеллуровой кислоты, тетрагидрата гептамолибдата аммония и гексагидрата нитрата лантана с последующим охлаждением расплава. Методом дифференциального термического анализа определили температуры стеклования и кристаллизации исследуемых образцов. Температуры стеклования стекол лежат в интервале от 345 до 387 °С. Значение температуры стеклования зависит от состава стекла и возрастает на 4.5 °С с ростом содержания $\text{LaO}_{1.5}$ на 1 мол. % в образце. Стекло состава $62\text{TeO}_2\text{—}31\text{MoO}_3\text{—}7\text{LaO}_{1.5}$ при скорости нагрева 10 К/мин не подвергается кристаллизации.

Для установления природы продуктов кристаллизации стекол их нагревали до температуры кристаллизации и выдерживали при этой температуре около 10 часов. Далее образцы измельчали и исследовали методом рентгенофазового анализа. Установлено, что продуктами кристаллизации исследуемых стекол являются оксиды элементов макрокомпонентов стекла. Образование кристаллических фаз в стекле состава $62\text{TeO}_2\text{—}31\text{MoO}_3\text{—}7\text{LaO}_{1.5}$ не наблюдалось и после длительного выдерживания при повышенной температуре, вплоть до его плавления. Таким образом, стекло состава $62\text{TeO}_2\text{—}31\text{MoO}_3\text{—}7\text{LaO}_{1.5}$ устойчиво к кристаллизации в широком интервале температур и может быть рекомендовано для получения на его основе волоконных световодов.

Комплексообразование железа(III) с N,N'-диэтилтиомочевины
в среде 3 моль/л HCl при 318 К

Одинаев Ш.А.

Таджикский национальный университет (ТНУ), г. Душанбе, Таджикистан

E-mail: Sharif.Geolog@mail.ru

В данной работе приведены результаты наших исследований по изучению процесса комплексообразования в системе $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{Cl}_3$ – N,N'-диэтилтиомочевина 3 моль/л HCl при 318 К. Установлено, что в этой системе последовательно образуются пять комплексных форм. Оцененные методом Бьеррума значения ступенчатых констант образований комплексов оказались следующими: $pK_1=3.52$; $pK_2=3.19$; $pK_3=2.95$; $pK_4=2.82$; $pK_5=2.73$. Проведено уточнение найденных значений констант решением уравнения [1]:

$$\bar{n} = \frac{\beta_1[L] + 2\beta_2[L]^2 + 3\beta_3[L]^3 + 4\beta_4[L]^4 + 5\beta_5[L]^5}{1 + \beta_1[L] + \beta_2[L]^2 + \beta_3[L]^3 + \beta_4[L]^4 + \beta_5[L]^5},$$

где β – общая константа устойчивости; $[L]$ – равновесная концентрация органического лиганда.

С использованием полученных данных после обработки с использованием уравнения построена кривая образования комплексов железа(III) с N,N'-диэтилтиомочевинной (N,N'-ДЭ.), из которой найдены уточнённые величины при полуцелых значениях \bar{n} : $pK_1^*=-\lg[L]_{\bar{n}=0.5}=3.80$; $pK_2^*=-\lg[L]_{\bar{n}=1.5}=3.28$; $pK_3^*=-\lg[L]_{\bar{n}=2.5}=3.01$; $pK_4^*=-\lg[L]_{\bar{n}=3.5}=2.76$; $pK_5^*=-\lg[L]_{\bar{n}=4.5}=2.34$. С использованием уточнённых величин ступенчатых констант образований рассчитаны кривые распределения всех комплексных форм, 5 образующихся в системе FeCl_3 – N,N'-ДЭ. – 3 моль/л HCl при температуре 318 К (рис. 1).

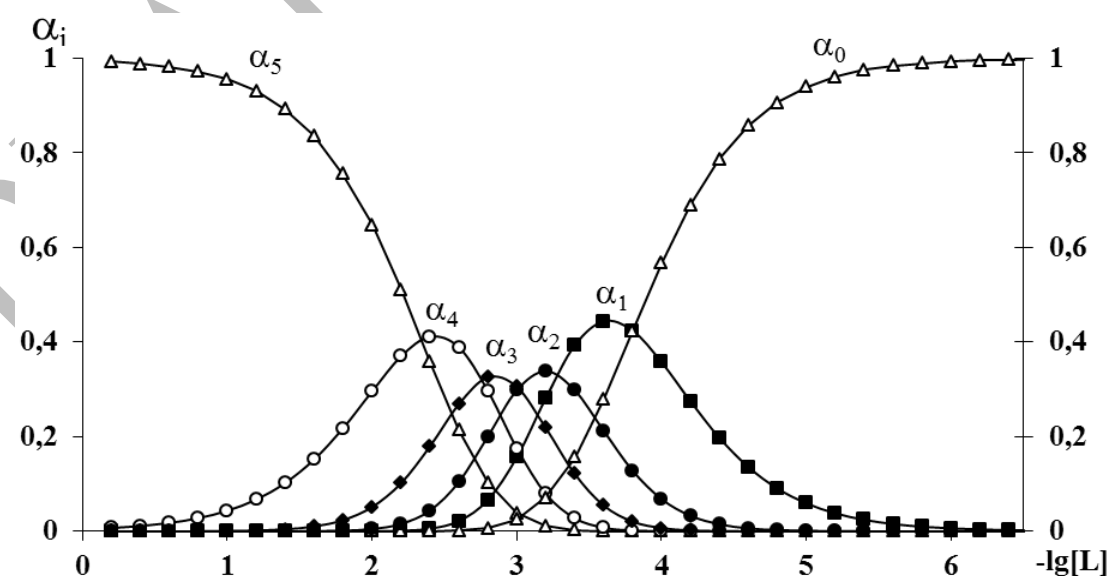


Рис.1. Кривые распределения N,N'-ДЭ. комплексов железа(III) в среде 3 моль/л HCl при 318 К.

Найденные из кривых распределений величины максимумов выхода комплексных форм для всех N,N'-диэтилтиомочевинных комплексов железа(III) при 318 К приведены в таблице 1.

Таблица 1. Максимумы выхода комплексов железа(III) с N,N'-диэтилтиомочевины в среде 3 моль/л HCl при 318 К.

Комплексное соединение	α_i^{\max}	$-\lg[L]$
$[\text{FeL}(\text{H}_2\text{O})_5]^{3+}$	0,44	3,6
$[\text{FeL}_2(\text{H}_2\text{O})_4]^{3+}$	0,34	3,2
$[\text{FeL}_3(\text{H}_2\text{O})_3]^{3+}$	0,30	2,8
$[\text{FeL}_4(\text{H}_2\text{O})_2]^{3+}$	0,41	2,4

Из данных таблицы видно, что с увеличением числа координированных молекул N,N'-диэтилтиомочевины α_i^{\max} - смещается в сторону больших значений равновесной концентрации N,N'-диэтилтиомочевины.

Список литературы

[1] Saurenbrunn R.D., Sandell E.B. J.Amer. Soc., 1953, v. 75, N14, p. 3553.

Изучение бинарной системы $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ - $\text{Sr}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$

Петров С.С., Буланов Е.Н., Лелет М.И., Князев А.В.

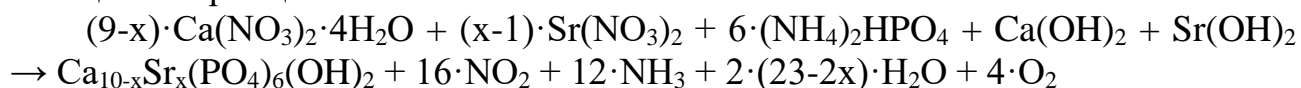
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: bulanoven@yandex.ru

Костная ткань включает нанокристаллический гидроксиапатит кальция ГАП $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$. Синтетические аналоги апатита широко используются для создания инновационных материалов медицинского назначения. Благодаря большой изоморфной емкости структурного класса апатита, в состав костной ткани могут внедряться различные элементы, в частности стронций. Особенно остро проблема изучения такого внедрения стоит в виду наличия особо опасных для человека радиоактивных изотопов ^{89}Sr и ^{90}Sr . В связи с этим была поставлена задача моделирования и экспериментального изучения бинарной системы $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ - $\text{Sr}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$.

Синтез поликристаллических образцов проводили твердофазной реакцией между нитратами стронция и кальция гидрофосфатом аммония и гидроксидами кальция и стронция:



В исследуемой системе по данным порошковой рентгенографии не наблюдается отклонений от правила Вегарада для обоих параметров элементарной ячейки (*a* и *c*).

Для дальнейшего термодинамического моделирования процессов внедрения ионов стронция в структуру гидроксиапатита костной ткани был проведен теоретический расчет термодинамических функций индивидуальных соединений и твердых растворов в рассматриваемой системе. Для моделирования процесса использовался метод равновесного комплекса "GIBBS", что позволило количественно охарактеризовать процесс растворения, проходящий в системе "осадок-раствор" при различных значениях концентрации ионов стронция в модельном растворе. В рассматриваемой системе происходит внедрение ионов стронция в гидроксиапатит костной ткани. При этом, несмотря на учитываемые при моделировании фосфаты кальция, стронция и твердые растворы другого состава, образуется единственная фаза состава $\text{Ca}_7\text{Sr}_3(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$. С точки зрения кристаллической структуры апатитов получение устойчивого соединения указанного стехиометрического состава представляется необычным – не соответствует соотношению независимых кристаллографических позиций катиона в структуре. Однако ранее в бинарной системе $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6\text{Cl}_2\text{-Pb}_{10}(\text{PO}_4)_6\text{Cl}_2$ было обнаружено формирование индивидуального соединения состава $\text{Ca}_7\text{Pb}_3(\text{PO}_4)_6\text{Cl}_2$. Возможная причина возникновения устойчивого соединения подобного состава заключается в возможности формирования сверхструктуры в соединениях со структурой апатита.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-33-60172 мол_а_дк.

Композитные керамики на основе вольфрамов и оксида магния

Потанина Е.А., Ланцев Е.А., Болдин М.С., Сахаров Н.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: Ekaterina.potanina@list.ru

Изучаемая проблема включает разработку и совершенствование свойств неорганических материалов (порошков и керамик) для ядерных технологий, для конструктивных применений. В данной работе исследовали композиционные материалы, содержащие наряду с базовым соединением со структурой шеелита дополнительную фазу в виде оксида магния. Тем самым предлагалось решение задачи регулируемого изменения пластичности - важной служебной характеристики керамического материала.

Объектами исследования являлись композиты на основе соединений вольфрамов со структурой минерала шеелита и оксида MgO: $\text{CaWO}_4 / \text{Na}_{0.1}\text{Ca}_{0.8}\text{Nd}_{0.1}\text{WO}_4 - x(\text{масс.}\%)\text{MgO}$, $x = 5, 10, 20$.

Контроль за фазовым состоянием порошков и керамик выполняли методом РФА на порошковом дифрактометре Shimadzu LabX XRD-6000.

Микроструктуру полученных образцов использовали метод сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), исследования выполняли на растровом электронном микроскопе Jeol JSM-6490 с рентгеновским микроанализатором INCA 350. Керамики спекали на установке Dr.Sinter Model-625 производства SPS Syntex Inc. Ltd. (Япония). Микротвердость по Виккерсу (H_V) измеряли на автоматизированном микротвердомере «Struers Duramin-5». Плотность спеченных образцов ($\rho_{\text{эксп}}$) измеряли методом гидростатического взвешивания в дистиллированной воде при помощи весов Sartorius CPA.

Температура начала и окончания усадки изменялась при изменении концентрации замещающих атомов в составе образцов и количества x в композитах. Химический состав керамики не оказывал существенного влияния на их твердость и трещиностойкость: $H_V = 4,3 - 4,9$ ГПа, $K_{IC} = 0,7 - 0,9$ МПа \cdot м $^{1/2}$. При проведении экспериментов по определению микротвёрдости и трещиностойкости образцы композитной керамики разрушались под нагрузкой индентора.

Полученные керамики сохраняли фазовый состав исходных порошковых образцов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 16-13-10464 “Перспективные керамические минералоподобные материалы с улучшенными и регулируемым служебными характеристиками: разработка, синтез, изучение”).

Синтез и кристаллохимия тройных фосфатов тория, лантана и двухвалентного элемента

Савушкин И.А., Комшина М.Е., Лукоянов А.Ю.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: 38savushkin@gmail.com*

Разработка материалов для иммобилизации опасных отходов ядерных реакторов является актуальной задачей. Благодаря химической, термической и радиационной стабильности соединения со структурой монацита (рис.1) подходят для решения этой задачи, и в состоянии обеспечить защитный барьер для иммобилизации радиоактивных отходов в течение длительного времени.

Монацит является достаточно редким минералом и, как правило, встречается в виде примеси в гранитах, аплитах и гнейсах. Этот минерал склонен изовалентному и гетеровалентному изоморфизму, поэтому способен включать в свой состав различные редкоземельные, щелочноземельные элементы, а также актиноиды, которые могут замещать церий.

В данной работе представлены результаты исследования соединений со структурой монацита с общей формулой $M^{II}LaTh(PO_4)_3$ (где $M^{II} = Ca, Sr, Cd$).

Все представленные соединения были синтезированы твердофазным способом, путем отжига нитратов и дальнейшем спекании при температуре 1280°C. В качестве исходных реагентов использовали La_2O_3 , $\text{Th}(\text{NO}_3)_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ и $\text{M}^{\text{II}}(\text{NO}_3)_2$ (где $\text{M}^{\text{II}} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Cd}$). Далее было проведено исследование методом порошковой рентгеновской дифракции (Shimadzu XRD-6000) с последующей интерпретацией данных методом Ритвельда (рис.2), в результате чего были уточнены кристаллографические параметры и изучены особенности строения синтезированных соединений.

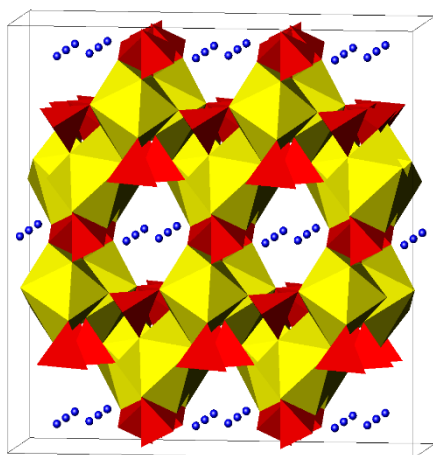


Рис.1. Пример структуры монацита.

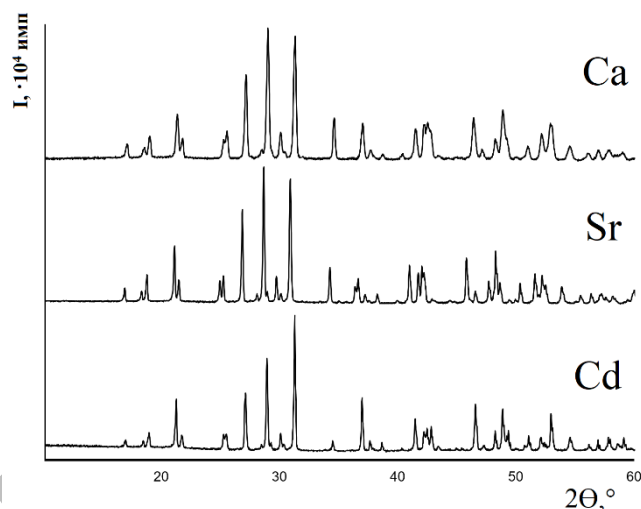


Рис.2. Рентгенограммы соединений $\text{M}^{\text{II}}\text{LaTh}(\text{PO}_4)_3$, где $\text{M}^{\text{II}} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Cd}$.

Синтез и изучение строения фосфатов титана, диспрозия и неодима

Седов В.А.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

E-mail: sedov.domasniy@yandex.ru

Разработка материалов на основе новых химических соединений, обладающих уникальными характеристиками, является одной из основных задач современной химии. Высокая химическая, термическая и радиационная устойчивость, в сочетании с ультрамалым тепловым расширением чрезвычайно важны для приборостроительной и машиностроительной промышленности, а материалы, обладающие этими редкими свойствами, пользуются огромным спросом. Все перечисленные свойства характерны для изученных в этой работе фосфатов структурного типа $\text{NaZr}_2(\text{PO}_4)_3$ (NZP). Более того, внедрение редкоземельных элементов (Ln – Dy, Nd) в состав NZP-соединений даёт возможность получать материалы, обладающие ионной проводимостью и ценными люминесцентными характеристиками.

В работе изучены условия образования фосфатов состава $\text{Ln}_{1/3}\text{Ti}_2(\text{PO}_4)_3$ (Ln – Dy, Nd) при их синтезе методом Печини (метод синтеза высокоомогенных и высокодисперсных продуктов из органических реагентов с использованием комплексообразования и промежуточным получением полимерного геля). Реакционные смеси последовательно высушивали при 90, 130, 350°C, а затем диспергировали и подвергали ступенчатому отжигу при температурах 600–800°C. Полученные поликристаллические порошки охарактеризованы методами рентгенографии (дифрактометр Shimadzu LabX XRD-6000). Индексирование проведено с использованием данных о структурном аналоге $\text{La}_{1/3}\text{Ti}_2(\text{PO}_4)_3$, анализ рентгенограмм в соответствии с законами погасания полученных наборов рефлексов показал, что изученные соединения кристаллизуются в пр. гр. $R\bar{3}c$ (рис. 1). Рассчитаны кристаллографические характеристики синтезированных фосфатов.

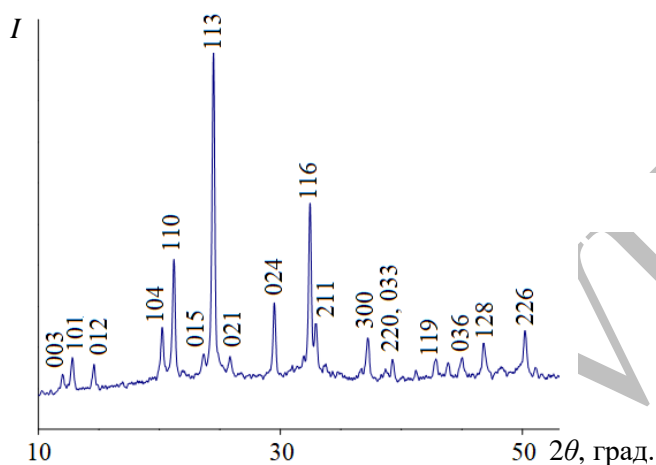


Рис. 1. Рентгенограмма $\text{Dy}_{1/3}\text{Ti}_2(\text{PO}_4)_3$.
Структурный тип NZP, Z = 6:
 $a = 8.370(6) \text{ \AA}$, $c = 22.02(3) \text{ \AA}$,
 $V = 1336.3(1.7) \text{ \AA}^3$.

Получение и исследование фазообразования каркасных фосфатов $\text{Sr}_{0.5+x}\text{M}_x\text{Zr}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ (M – Ni, Cu) структурного типа NZP

Седов В.А.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

Соединения, имеющие структурный тип NZP, привлекают внимание специалистов полезными свойствами, обусловленными строением кристаллической решетки. NZP структура характеризуется смешанным октаэдро-тетраэдрическим каркасом $\{[\text{L}_2(\text{PO}_4)_3]^{p-}\}_{3\infty}$ с возможностью внедрения в полости каркаса катионов различного размера, что позволяет моделировать соединения с возможностью их применения в качестве керамик, оптических материалов, матриц для захоронения радиоактивных отходов.

Синтезирована система фосфатов $\text{Sr}_{0.5+x}\text{Ni}_x\text{Zr}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ ($0 \leq x \leq 2.0$) преципитатным методом из водных растворов солей металлов с

последовательным отжигом при 600°C, 650°C, 700°C, 750°C в течение 24 часов и диспергированием после каждой стадии нагрева. Исследовано фазообразование в указанных пределах x с помощью порошковой рентгенографии, ИК-спектроскопии.

Рентгенографические исследования проведены на рентгеновском дифрактометре на дифрактометре Shimadzu XRD-6000 в диапазоне углов 10-50° с шагом 0.02°. Для ИК-спектроскопических исследований изученных веществ использован спектрофотометр Shimadzu FTIR-8400S в интервале волновых чисел 400-1400 см⁻¹.

Согласно результатам рентгенографии, ИК-спектроскопии в приведённом ряду фосфатов получены индивидуальное соединение ($x=0$) Sr_{0.5}Zr₂(PO₄)₃ и твердые растворы структурного типа NZP в интервале составов $0 \leq x \leq 0.4$, при $x > 0.4$ наблюдалось появление дополнительных фаз фосфатов скандия, циркония и железа. Однофазные продукты образуются при 750°C. ИК-спектры всех монофазных образцов подобны по форме и положению полос поглощения и показали отсутствие рентгеноаморфных примесей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-33-00248).

Кристаллическая структура и теплофизические свойства Ba₅(MnO₄)₃Cl

Сюй Ц., Коршак К.С., Буланов Е.Н., Князев А.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород

E-mail: dox82@icloud.com

Среди большого разнообразия соединений марганца соединения с Mn⁺⁵ встречаются крайне редко. Ограниченное число фаз связано с рядом причин. Во-первых, существование марганца в степени окисления +5 возможно только в оксосоединениях в тетраэдрической координации. Во-вторых, их получение возможно только в щелочной среде, что исключает диспропорционирование в более устойчивые степени окисления (+2, +4, +6, +7). Как известно, показателем щелочных свойств щелочных и щелочноземельных атомов может выступать их первый потенциал ионизации. Величины потенциалов ионизации для Li, Na, K и Ba находятся в очень узком интервале 4,3-5,4 эВ, и именно эти атомы способны формировать гипоманганаты. Вследствие этого для Mn-содержащих соединений будет характерна узкая кристаллохимическая область существования.

Ba₅(MnO₄)₃Cl – соединение, относящееся к структурному классу апатита и имеющее большой потенциал в качестве устойчивого неорганического пигмента. Уточнение структуры с помощью метода Ритвельда (R₆₃/m, $a = 10.46076(15)$ Å, $c = 7.75624(13)$ Å, R-Bragg = 5.083) подтвердило наличие

типичных особенностей структуры апатитов, в частности, распределение катионов по двум кристаллографическим разным позициям: $4f$ и $6h$. Причем в последней при относительном разнообразии координационных чисел катионов в апатитах (от 7 до 9) для соединений с Ва всегда реализуется КЧ=8.

Анализ структуры позволил объяснить тот факт, что при тепловом расширении кристаллографическое направление a является приоритетным ($\alpha_a = 10.8 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, $\alpha_c = 6.7 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$). Структура апатитов носит квазислоистый характер: слои, формируемые тетраэдрами MnO_4 и полиэдрами $\text{Ba}(6h)\text{O}_6\text{Cl}_2$,

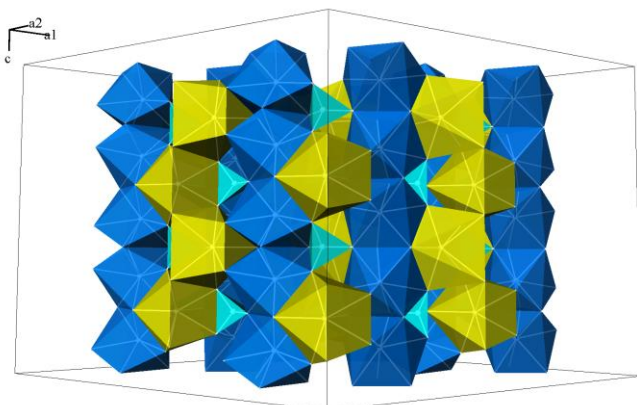


Рис. 1. Фрагмент кристаллической структуры $\text{Ba}_5(\text{MnO}_4)_3\text{Cl}$

перпендикулярны кристаллографической оси c , связаны между собой полиэдрами $\text{Ba}(4f)\text{O}_9$. При этом длины связей в полиэдрах $\text{Ba}(6h)\text{O}_6\text{Cl}_2$ имеют большее отклонение от среднего значения, чем в $\text{Ba}(4f)\text{O}_9$, что объясняет их большую температурочувствительность и, следовательно, большую склонность структуры к расширению в слоях по сравнению с межслоевым расстоянием.

Синтез, структурные и магнитные характеристики твердых растворов состава $\text{YBaCo}_{4-4x}\text{R}_{4x}\text{O}_7$ ($\text{R} = \text{Al}, \text{Zn}$)

Токарева П.В., Королев Д.А.

Санкт-Петербургский государственный университет,

Санкт-Петербург, Россия

E-mail: k_n_ch@mail.ru

Одним из перспективных магнетиков, в котором может быть реализовано состояние «спинового стекла» является YBaCo_4O_7 ^[1]. В настоящее время исследования свойств замещенного кобальтата иттрия-бария проводятся эмпирически. Целью данной работы являлось получение твердых растворов состава $\text{YBaCo}_{4-4x}\text{R}_{4x}\text{O}_7$ ($\text{R} = \text{Al}, \text{Zn}$), а также систематическое изучение их структурных и магнитных свойств в зависимости от типа диамагнитной добавки (Zn, Al) и ее количества.

В настоящей работе керамическим и золь-гельным методами синтеза получены и аттестованы полнопрофильным анализом твердые растворы состава $\text{YBaCo}_{4-4x}\text{R}_{4x}\text{O}_7$ ($\text{R} = \text{Al}, \text{Zn}$), выполнен химический анализ на содержание кобальта, цинка и алюминия методом атомно-эмиссионной спектроскопии (ICP), проанализировано изменение структурных (рис. 1) и

магнитных (рис. 2) характеристик твердых растворов в зависимости от содержания цинка и алюминия, сделаны выводы о типе магнитного обмена между атомами кобальта и приводятся доказательства в пользу существования состояния «спинового стекла» в исследуемых системах.

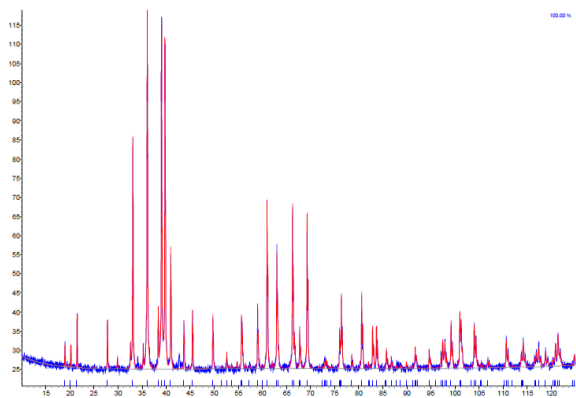


Рис. 1. Полнопрофильный анализ дифрактограммы образца $\text{YBaCo}_{3.5}\text{Al}_{0.5}\text{O}_7$.

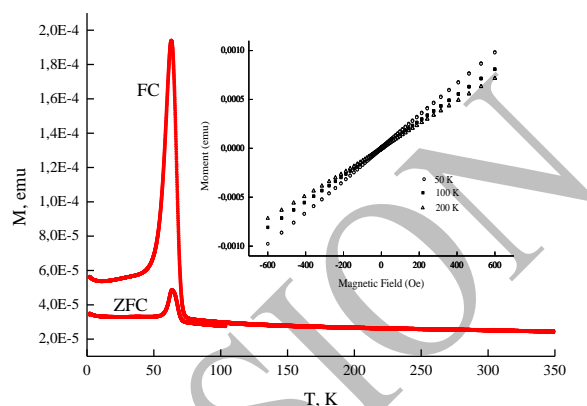


Рис.2. Кривые ZFC и FC и гистерезисные кривые для $\text{YBaCo}_{3.5}\text{Al}_{0.5}\text{O}_7$.

Список литературы

[1] Martin Valldor, Magnus Andersson, Solid State Sciences, Volume 4, Issue 7, June 2002, Pages 923-931.

Получение и исследование керамических композитов на основе молибдатов со структурой шеелита

Токарев М.Г.¹, Потанина Е.А.¹, Болдин М.С.², Ланцев Е.А.²

¹Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского
Национальный исследовательский университет, химический факультет,

²Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Научно-исследовательский физико-технический институт,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: tockarev.mikhail2015@yandex.ru

В настоящее время существует необходимость в материалах с изменяемыми свойствами, такими как теплопроводность и пластичность.

В работе исследовали соединения со структурой шеелита и композиты на их основе с общей формулой $\text{Na}_x\text{Sr}_{1-2x}\text{Nd}_x\text{MoO}_4 - y$ (масс.%) MgO , где $x = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$; $y = 0, 5, 10, 20$. Порошковые образцы получили методом соосаждения из водных растворов с последующим высушиванием при $T = 90$ °C и их отжигом при $T = 800$ °C в течение 10 ч. Керамические образцы синтезировали методом Spark Plasma Sintering (SPS) на установке “DR. SINTER

model SPS-625 Spark Plasma Sintering System» (SPS SYNTEX INC. Ltd., Япония).

Контроль фазового состава полученных порошков и керамик проводили с помощью рентгенофазового анализ (РФА) на порошковом дифрактометре Shimadzu LabX XRD-6000. Плотность керамических образцов измеряли методом гидростатического взвешивания в дистиллированной воде при помощи весов Sartorius CPA. Микротвердость по Виккерсу (H_V) измеряли на автоматизированном микротвердомере «Struers Duramin-5». Значение коэффициента трещиностойкости (K_{IC}) рассчитывали по методу Палмквиста.

Спекание проводили при $T = 860 - 1000$ °С. Относительная плотность керамик составила 95 – 99 %. Стадия изотермической выдержки отсутствовала, общее время спекания не превышало 18 мин. По данным РФА, после спекания образцы сохранили свой фазовый состав.

Изменение пластичности полученных композитов оценивали через изменения значений микротвердости и трещиностойкости.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 16-13-10464 “Перспективные керамические минералоподобные материалы с улучшенными и регулируемыми служебными характеристиками: разработка, синтез, изучение”).

Исследование процесса диффузионного легирования CVD-ZnSe ионами Fe^{2+}

Томилова Т.С., Тимофеева Н.А., Гаврищук Е.М.

Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девярых Российской академии наук, Нижний Новгород, Россия

E-mail: tanya.tomilova14@mail.ru

Fe^{2+} :ZnSe является перспективной средой для ИК-лазеров, генерирующих в спектральной области 4-5 мкм [1]. На практике легирование ZnSe ионами Fe^{2+} чаще всего осуществляют методом диффузии, который включает в себя высокотемпературную обработку (900-1350°С). Одновременно с диффузией ионов Fe^{2+} в CVD-ZnSe протекают процессы рекристаллизации, влияющие на эксплуатационные свойства получаемого материала. Примеси, также, могут оказывать заметное влияние на протекание рекристаллизационных процессов. Целью нашей работы явилось исследование механизмов процессов диффузии и рекристаллизации, протекающих в кристаллах Fe^{2+} :ZnSe при высоких температурах отжига.

В работе были выявлены закономерности влияния легирующей примеси Fe^{2+} и атмосферы диффузионного отжига (Zn, Se, Ar) на протекание рекристаллизации в поликристаллическом ZnSe. Легирование Fe^{2+} расширяет температурный интервал протекания вторичной рекристаллизации

(920-1050°C). Для нелегированного ZnSe этот интервал составил 950-100°C. Рассчитаны значения энергии активации рекристаллизации Fe²⁺:ZnSe: 270±30 кДж/моль при температурах 900-1000 °С и 470±50 кДж/моль при 1050-1150 °С. Отжиг в парах Zn уменьшает средний размер зерна по сравнению с отжигом в Ar, а отжиг в парах Se способствует росту зерен и приводит к формированию более однородной кристаллической структуры. Получены концентрационные профили образцов Fe²⁺:ZnSe, легированных при различных условиях диффузионного отжига (температура и атмосфера), рассчитаны коэффициенты диффузии. Выявлено влияние атмосферы на диффузию Fe²⁺ в ZnSe.

Список литературы

[1] Peppers J., Fedorov V. V., and Mirov S. B. // Optics Express. 2015. V. 23. P. 4406-4414.

Изучение строения частиц гиббсита методом электронной сканирующей микроскопии

Тронов А.П., Толчев А.В.

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Синтетический гидроксид алюминия γ -модификации, известный в литературе под названием гиббсит, получают гидролизом раствора алюмосиликата натрия в щелочной среде (способ Байера), кристаллизуется в моноклинной сингонии (пространственная группа симметрии P2₁/n; z = 6) [1, 2]. Объектом исследования являлся синтетический гидроксид алюминия – полупродукт Уральского алюминиевого завода, из которого методом классификации на ситах с различным диаметром ячеек были получены два образца: крупная фракция с размером частиц более 160 мкм и мелкая с размером частиц менее 63 мкм.

В работе исследовали электронно-микроскопическое строение частиц синтетического гиббсита с различной степенью дисперсности.

Проведенные исследования свидетельствуют о том, что частицы гидроксида алюминия, получаемого по способу Байера, имеют блочное строение, то есть состоят из более мелких, однородных по контрасту кристалликов, размеры и форма которых различается в зависимости от размера первичных частиц. Крупные частицы гиббсита (>160 мкм) состоят из пластинчатых кристаллов, характеризующихся отношением размеров в поперечнике к их толщине (форм-фактор) порядка 30-50 (рис. 1а). Мелкие частицы (<63 мкм) состоят из нескольких единиц или десятков призматических кристалликов, обладающих огранкой и однородным контрастом (рис. 1б).

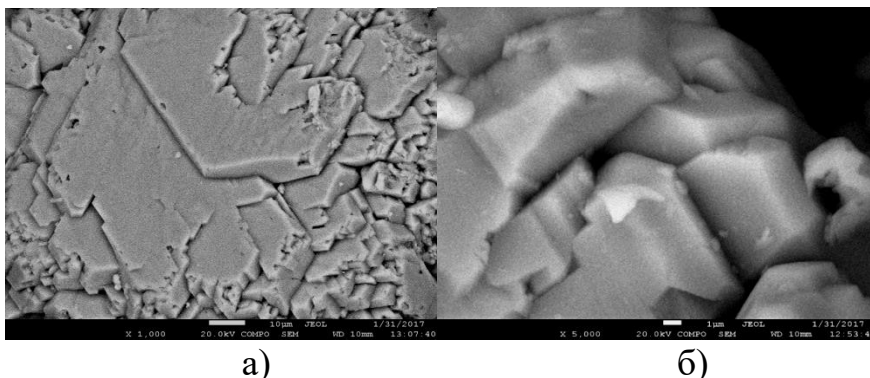


Рис. 1. Электронно-микроскопические изображения фракций гиббсита: а) более 160 мкм при увеличении $\times 1000$; б) менее 63 мкм при увеличении $\times 5000$.

Список литературы

- [1] Никольская М.П., Кузнецова Е.В. Технология получения глинозема из бокситов. *Каменск – Уральский*. 2007. 184с.
- [2] Годовиков, А.А. Минералогия. 2-е изд., перераб. и доп. М.: *Недра*. 1983. 647с.

Новые тригональные фазы $\text{InR}^{3+}\text{TeO}_6$

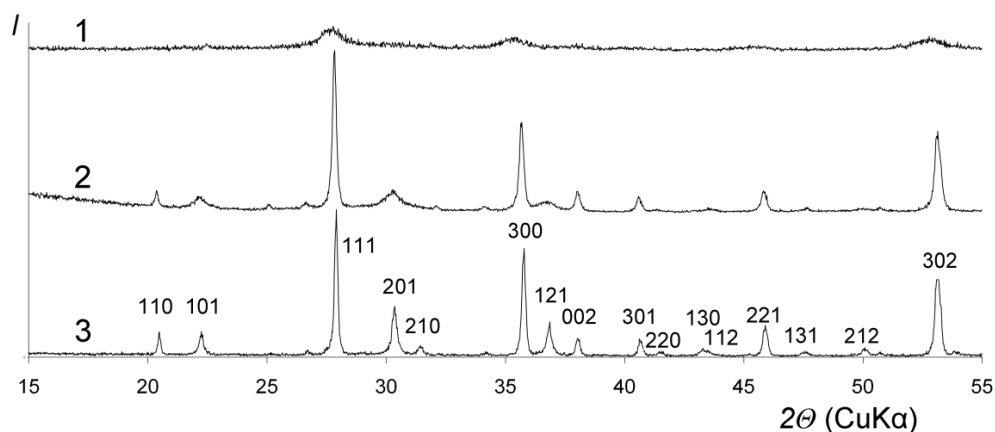
Тюрева А.Д., Красникова Т.А., Рыжакова А.П., Налбандян В.Б.
Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия
E-mail: tyureva.lika@mail.ru

Задачей данной работы является поиск новых фаз с тригональными кристаллическими структурами типа In_2TeO_6 , которые могли бы представить интерес своими магнитными свойствами, если бы удалось ввести туда парамагнитные ионы d- или f-элементов. Все доселе известные R_2TeO_6 этого структурного типа ($\text{R} = \text{Sc}, \text{In}, \text{Tl}, \text{Lu}$) диамагнитны. С трёхзарядными катионами меньшего размера ($\text{R} = \text{Al}, \text{Cr}, \text{Ga}, \text{Fe}, \text{Mn}, \text{Rh}$) образуется тетрагональная структура типа рутила или трирутила, а с более крупными ($\text{R} = \text{La} \dots \text{Tm}, \text{Y}$) – орторомбическая структура типа La_2TeO_6 . Пограничное положение занимает Yb_2TeO_6 , который получен лишь в виде смеси двух модификаций.

В структуре In_2TeO_6 катионы индия занимают два типа октаэдрических позиций. Это предполагает, что трёхзарядные катионы не обязательно должны быть одинаковыми, и половину индия можно заместить как более крупными, так и более мелкими катионами, что и подтвердилось в данной работе.

Трудность синтеза подобных тройных оксидов $\text{In}^{3+}\text{R}^{3+}\text{Te}^{6+}\text{O}_6$ – в низкой активности In_2O_3 и R_2O_3 , что требует применения высоких температур, когда оксиды теллура могут быть летучи. В данной работе испытано несколько вариантов синтеза, и наиболее эффективным признано твердофазное взаимодействие TeO_3 с совместно осаждёнными гидроксидами трёхвалентных

металлов при ступенчатом нагреве прессованных порошковых смесей с промежуточными перетираниями в защитной засыпке того же состава. В результате получены новые тригональные фазы InRTeO_6 , где $R = \text{Cr, Fe и Gd}$. Широкий диапазон размеров этих ионов позволяет уверенно прогнозировать существование ещё десятка новых фаз того же типа с ионами R^{3+} промежуточного размера. На рисунке показана малоугловая часть рентгенограмм InFeTeO_6 , полученного гидротермальным методом при 200°C (1), твёрдофазным синтезом при $400+750+800^\circ\text{C}$ (2) и после дополнительного обжига при 950°C (3).



**Получение дисперсных материалов с наноразмерными фазами
электрохимическим окислением меди и алюминия
с использованием переменного тока**

Усольцева Н.В.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Томск, Россия*

E-mail: usoltseva.nv@mail.ru

Проведение процесса электролиза с использованием переменного тока промышленной частоты 50 Гц позволяет осуществлять совместное электрохимическое окисление меди и алюминия. Скорость окисления алюминия определяется диффузионными процессами и в 2–30 раз превышает скорость окисления меди, зависящую от скорости электрохимических реакций.

Независимо от условий проведения процесса совместного электрохимического окисления меди и алюминия в растворе хлорида натрия, продукт электролиза представляет собой дисперсный материал, состоящий из оксида меди Cu_2O с наноразмерными кристаллами и рентгеноаморфного оксигидроксида алюминия AlOOH , соотношение которых зависит от технологических параметров процесса электролиза. С ростом содержания Cu_2O в диапазоне 0,8–32,0 % мас. площадь удельной поверхности и суммарный объем пор уменьшаются от 300 до 227 $\text{m}^2/\text{г}$ и от 0,77 до 0,35 $\text{cm}^3/\text{г}$, соответственно.

В нестационарных условиях при электролизе с использованием переменного тока образуется нанодисперсный энергонасыщенный материал, обладающий большим запасом внутренней энергии. Это способствует снижению температур окисления Cu_2O до CuO и разложения медь-алюминиевого слоистого двойного гидроксида, образующегося при карбонизации продуктов электролиза (230–320 и 110–150 °С, соответственно), по сравнению с температурами протекания данных процессов при термообработке материалов, полученных традиционными стационарными способами (300–400 и 150–160 °С, соответственно).

Периодическое изменение полярности электродов и выделение газа в процессе электролиза способствуют формированию дисперсных материалов с развитой мезопористой структурой, которая обеспечивает высокую термостойкость этих материалов: площадь удельной поверхности полученных дисперсных материалов в 6–10 раз превышает площадь удельной поверхности аналогичных продуктов, полученных методом осаждения [1, 2].

Список литературы

- [1] US 6916457 Preparation and use of non-chrome catalysts for Cu/Cr catalyst application.
- [2] Alejandre A., Medina F., Rodriguez X. Preparation and Activity of Cu–Al Mixed Oxides via Hydrotalcite-like Precursors for the Oxidation of Phenol Aqueous Solutions // Journal of Catalysis. 1999. Vol. 188. Is. 2. P. 311 – 324.

Исследование люминесцентных свойств стекол Ge-Ga-As-Se, легированных Pr (3+)

Филатов А.И.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: fil.138@yandex.ru*

Халькогенидных стекла легированные редкоземельными элементами являются перспективными материалами для создания волоконных лазеров и усилителей, так как обладают широким диапазоном прозрачности (1-12 мкм), высокой механической, термической и химической стойкостью, высокими нелинейными оптическими характеристиками. В [1] показано, что на оптические и люминесцентные свойства активированных халькогенидных стекол оказывают влияние макросостав, химическая природа активатора, его концентрация, а также наличие лимитирующих примесей.

Целью данной работы являлось исследование фотолюминесценции в халькогенидных стеклах системы Ga-Ge-As-Se с различной концентрацией активатора (500-3000 ppm) и волоконных световодов из них

В работе изучены ИК-спектры поглощения образцов стекол системы Ge-Ga-As-Se с содержанием галлия до 5 ат.% в диапазоне длин волн 8000-500 см⁻¹. В спектрах стекол наблюдались полосы примесного поглощения, относящиеся к SeH, OH, GeO и AsO. В ИК- спектрах реперных образцов с различной концентрацией Pr (3+) идентифицированы полосы поглощения ионов Pr (3+) и проведена оценка коэффициента экстинкции Pr, который составил $2,5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}/\text{ppm}$.

Для измерений спектров фотолюминесценции в диапазоне длин волн 1,5-10 мкм был собран стенд, на базе ИК-Фурье спектрометра, накачка осуществлялась волоконными лазерами на 1560 и 1975 нм. В стеклах Ga-As-Se легированных Pr(3+) обнаружена интенсивная широкополосная люминесценция в области 3,5-5,5 мкм. Изучение спектров образцов стекол с различным содержанием Pr(3+) показало, что оптимальной является диапазон концентраций активатора 500-1000ppm. Зависимость интенсивности люминесценции от мощности лазера накачки была близка к линейной.

Исследование кинетики люминесценции показало, что времена жизни в образцах стекол составляли 5-12 мс.

Список литературы

[1] A. B. Seddon, Z. Tang, D. Furniss, S. Sujecki and T. M. Benson Progress in rare-earth-doped mid-infrared fiber lasers // J. Optical Society of America. 2010. V. 18. №25. P. 26704–26719.

Синтез, структура и кислородная нестехиометрия сложных оксидов общего состава $\text{Sr}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$

Халмирзаева Д.У., Волкова Н.Е., Гаврилова Л.Я.

Уральский федеральный университет

Екатеринбург, Россия

E-mail: Khalmirzaeva.d@yandex.ru

Перовскитоподобные сложные оксиды представляют большой интерес для исследователей благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам, таким как высокая подвижность ионов кислорода, большие значения электронной проводимости, а также устойчивость в окислительных атмосферах. Поэтому данные материалы являются перспективными для использования в качестве электродов ТОТЭ, мембран для концентрирования кислорода, газовых сенсоров и др. [1]

В данной работе были оптимизированы условия синтеза, а также исследованы кристаллическая структура и кислородная нестехиометрия оксидов общего состава $\text{Sr}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$.

Синтез был проведен по глицерин-нитратной технологии на воздухе. Заключительный отжиг проводился при 1100°C с последующей закалкой на

комнатную температуру Фазовый состав определен рентгенографически. Определение параметров элементарной ячейки из дифрактограмм проводили с использованием программы «CelRef 4.0», уточнение - методом полнопрофильного анализа Ритвелда в программе «FullProf 2008».

Кристаллическая структура оксидов с малыми концентрациями железа описана в рамках тетрагональной ячейки пространственной группы $I4/mmm$. Рентгенограммы образцов с большей концентрацией железа были проиндексированы в рамках кубической ячейки пространственной группы $Pm\bar{3}m$. Для всех однофазных образцов из рентгеновских данных рассчитаны параметры и объем элементарных ячеек. Установлено, что параметры элементарной ячейки твердых растворов $Sr_{1-x}Sm_xCo_{1-y}Fe_yO_{3-\delta}$ увеличиваются с ростом концентрации стронция и железа в образцах. Абсолютное значение содержания кислорода для образцов $Sr_{1-x}Sm_xCo_{1-y}Fe_yO_{3-\delta}$ определяли методом йодометрического титрования. увеличение концентрации железа в образцах $Sr_{0.7}Sm_{0.3}Co_{1-y}Fe_yO_{3-\delta}$ приводит к уменьшению индекса кислородной нестехиометрии. Кислородную нестехиометрию (δ) сложных оксидов $Sr_{1-x}Sm_xCo_{1-y}Fe_yO_{3-\delta}$ изучали методом термогравиметрического анализа (ТГА) как функцию температуры (в интервале 25 – 1100°C) на воздухе.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-53-45010 ИНД_а.

Список литературы

[1] Aksenova T.V., Gavrilova L.Ya., Cherepanov V.A. // Journal of Solid State Chemistry. 2008. V. 181. P. 1480–1484.

Кристаллическая структура сложных оксидов гомологического ряда Раддлесдена-Поппера $Sr_{2-y}Sm_yFeO_{4-\delta}$

Хвостова Л.В., Петрова А.В., Волкова Н.Е., Черепанов В.А.

Уральский федеральный университет им. Ельцина, Екатеринбург, Россия

E-mail: lada.zubatkina@urfu.ru

$Sr_2FeO_{4-\delta}$ при 1100°C на воздухе термодинамически нестабилен. Поскольку введение самария в подрешетку стронция понижает среднюю степень окисления железа в твердом растворе $Sr_{2-y}Sm_yFeO_{4-\delta}$, тем самым, стабилизируя фазу со структурой типа K_2NiF_4 , нами была предпринята попытка получения твердых растворов на основе $Sr_2FeO_{4-\delta}$.

С этой целью были синтезированы образцы общего состава $Sr_{2-y}Sm_yFeO_{4-\delta}$ с $y = 0.3; 0.6; 0.7; 0.8; 0.9; 1.0; 1.2; 1.4$.

По данным РФА установлено, что однофазные сложные оксиды образуются при $y = 0.7-0.8$. На рисунке 1 представлена модель кристаллической структуры оксида $Sr_{1.2}Sm_{0.8}FeO_{4-\delta}$ (пр.гр. $I4/mmm$).

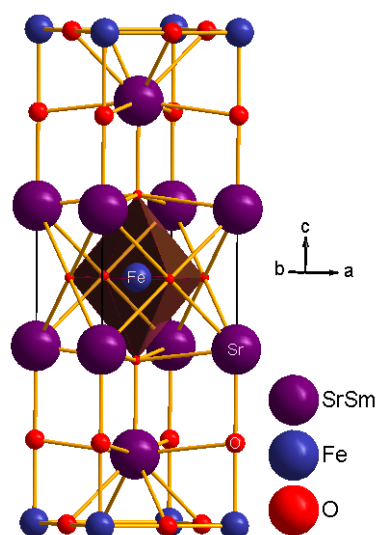


Рис.1. Модель кристаллической структуры для $\text{Sr}_{1.2}\text{Sm}_{0.8}\text{FeO}_{4-\delta}$.

В таблице 4.5 представлены координаты атомов оксида $\text{Sr}_{1.2}\text{Sm}_{0.8}\text{FeO}_{4-\delta}$, вычисленные методом Ритвельда из рентгеновских данных.

Таблица 1. Координаты атомов сложного оксида $\text{Sr}_{1.2}\text{Sm}_{0.8}\text{FeO}_{4-\delta}$ ($I4/mmm$).

Sm/Sr – (0, 0, z); Fe – (0, 0, 0); O1 – (0, 0.5, 0); O2 – (0, 0, z)			
атом	x	y	z
Sr/Sm	0.00000	0.00000	0.35775
O2	0.00000	0.00000	0.16810
$R_{Br} = 5.69\%$; $R_f = 4.81\%$			

Определение коэффициента испарения пентакарбонила железа при простой дистилляции

Шапошников В.А.

Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г.Девярых Российской академии наук, Нижний Новгород, Россия

E-mail: shaposhnikovva@mail.ru

В дистилляционных методах очистки процессы испарения и конденсации осуществляют разделения компонентов смеси для получения высокочистой смеси либо смеси заданного состава. Дистилляция является взаимосвязанной системой механизмов испарения, газодинамического переноса и конденсации.

Согласно формуле Ленгмюра $L = \frac{k\Delta P}{\sqrt{2\pi MRT}}$, где L – скорость испарения,

моль/(м²с); Δp – разность давлений, Па; T – температура, К; R – универсальная газовая постоянная, Дж/(К моль); M – молярная масса испаряющегося вещества, кг/моль; k – коэффициент испарения (конденсации), испарение/конденсация осуществляется за счет разницы давлений ΔP между давлением насыщенного

пара и давления вблизи поверхности испарения/конденсации. Градиент давления является движущей силой процессов испарения, конденсации, как и процесса газодинамического переноса. Коэффициент испарения k представляет долю образующегося конденсата от количества, испарившегося в единицу времени вещества и зависит от загрязненности поверхности испарения, присутствия примесей в разной форме, многокомпонентности испаряемого вещества, наличия неконденсирующихся газов в паровой области. Для медленно протекающих процессов испарения и конденсации коэффициенты испарения и конденсации принимаются равными друг другу. Вследствие зависимости коэффициента испарения от многих факторов его величина обычно определяется экспериментально.

На примере дистилляционной очистки пентакарбонила железа и математической модели замкнутого испарительно-конденсационного процесса из условия минимума среднеквадратичного отклонения теоретической кривой от экспериментальных точек рассчитан коэффициент испарения $k=5.5 \cdot 10^{-4}$. Для полученного коэффициента испарения рассчитана скорость испарения жидкости в зависимости от температурных условий проведения процесса дистилляции, физико-химических характеристик пентакарбонил железа и геометрических параметров испарительно-конденсационной установки.

Синтез и строение $PbUO_2(CH_2C(CH_3)COO)_4$

Шимин Н.А.

*Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, Самара, Россия
E-mail: shiminikita.su@gmail.com*

Взаимодействием оксида свинца(II), дигидрата оксида урана(VI) и метакриловой кислоты в мольных соотношениях 2 : 1 : 16 получен новый координационный полимер состава $PbUO_2(CH_2C(CH_3)COO)_4$ (I). Соединение кристаллизовалось при изотермическом испарении водного раствора. Синтез затруднен предрасположенностью метакриловой кислоты к быстрой и необратимой полимеризации, обусловленной фотохимической реакцией и катализирующейся присутствием в растворе катиона уранила. Поэтому используемые для синтеза сосуды были окрашены в черный цвет.

Полученные кристаллы исследованы методами ИК Фурье спектроскопии и рентгеноструктурного анализа (РСА). Методом пересекающихся сфер [1] было установлено, что уран проявляет координационное число, равное семи, и имеет координационный полиэдр UO_2O_5 в виде пентагональной бипирамиды. В экваториальной плоскости находятся пять атомов кислорода, два из которых принадлежат одному метакрилат-иону (связанному только с атомом урана), координированному бидентатно-циклически с типом координации V^{01} (типы

координации лигандов и кристаллохимическая формула приведены в соответствии с [2]) и образующему с атомом урана четырехчленный цикл. Три других атома кислорода принадлежат трем метакрилат-ионам, проявляющим по отношению к атому урана монодентатный концевой характер (тип координации M^1). Каждый атом свинца окружен восемью атомами кислорода метакрилат-ионов, которые принадлежат трем соседним урансодержащим комплексам. Основными структурными единицами кристаллов являются цепочки $[PbUO_2(mac)_4]$ ($mac = CH_2C(CH_3)COO^-$), распространяющиеся вдоль направления $[100]$. Разная кристаллоструктурная роль четырех кристаллографически неэквивалентных метакрилат-ионов определяет кристаллохимическую формулу цепочек как $AA'B^{01}B^{11}(B^{21})_2$, где $A = UO_2^{2+}$, $A' = Pb^{2+}$, а B^{01} , B^{11} и $B^{21} = mac$. Связывание цепочек в каркас происходит за счет системы водородных связей. Рассмотрено влияние неподеленной электронной пары $Pb(II)$ на структуру I.

ИК спектр соединения полностью согласуется с результатами РСА.

Работа выполнена при финансовой поддержке базовой части государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации.

Список литературы

- [1] Сережкин В.Н., Михайлов Ю.Н., Буслаев Ю.А. // Журн. неорган. химии. 1997. Т. 42. № 12. С. 2036.
 [2] Serezhkin V.N., Vologzhanina A.V, Serezhkina L.B. et al. // Acta Cryst. B. 2009. V. 65. № 1. P. 45.

Определение теплоемкости и термодинамических свойств системы $Pb_{0.5+x}Mg_xZr_{2-x}(PO_4)_3$ ($x = 0, 0.5$)

Шипилов А.С.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
 Нижний Новгород, Россия*

Изучение теплофизических свойств, таких как тепловое расширение и теплоемкость, в широком диапазоне температур позволяет определить термостойкость веществ при их тепловой обработке в ходе производства или при использовании. Эти данные имеют фундаментальное значение независимо от того, где данные вещества применяются.

Целью работы является определение теплоемкости и термодинамических констант синтезированных веществ для последующего их использования в термодинамических и теплофизических расчетах процессов получения керамик с участием изученных соединений.

Температурная зависимость теплоемкости фосфатов $Pb_{0.5+x}Mg_xZr_{2-x}(PO_4)_3$ ($x = 0, 0.5$) изучена с помощью адиабатической вакуумной и дифференциальной сканирующей калориметрии в интервале температур 7-660 К.

Выявлено, что вблизи комнатной температуры оба фосфата претерпевают обратимые фазовые переходы (при температуре 298 К для $Pb_{0.5}Zr_2(PO_4)_3$ и 286 К для $PbMg_{0.5}Zr_{1.5}(PO_4)_3$). Эти полиморфные превращения можно охарактеризовать как переходы G-типа.

За исключением областей переходов, теплоемкость фосфатов не имеет особенностей и плавно возрастает во всем изученном интервале температур.

Рассчитанные и экспериментальные (при 660 К) значения теплоемкости составили 436.5 и 387.8 Дж/(моль·К) для $Pb_{0.5}Zr_2(PO_4)_3$, 449.0 и 416 Дж/(моль·К) для $PbMg_{0.5}Zr_{1.5}(PO_4)_3$.

Полиморфные переходы, проявившихся на кривых теплоемкости изученных фосфатов, характеризуются скачкообразным изменением теплоемкости, но происходят без изменения энтальпии, энтропии и функции Гиббса фосфатов, и могут быть отнесены к переходам II рода. Для изучения природы этих фазовых превращений проведено структурное исследование $Pb_{0.5}Zr_2(PO_4)_3$ при температурах 173 и 473 К с помощью метода Ритвельда по данным порошковой рентгенографии.

Результаты уточнения структуры $Pb_{0.5}Zr_2(PO_4)_3$ показали, что полиморфный переход на кривой теплоемкости $Pb_{0.5}Zr_2(PO_4)_3$ обусловлен ростом позиционной разупорядоченности катионов свинца в полостях NZP структуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-33-00248).

СЕКЦИЯ 3

Аналитическая химия и экология

Quality analysis control of pharmaceutical medicines that containing ibuprofen

Dhyaaldain H.M.

Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, Nizhni Novgorod, Russia

E-mail: hayder.dhiaaldeen@gmail.com

The issues of medicines quality control remain relevant in modern analytical chemistry. The most popular are techniques for rapid determination of substance in pharmaceutical components without prior separation or concentration.

Ibuprofen is one of the substances included in the composition of anti-inflammatory medicines as the main non-steroidal active substance, both individually and in combination with other components.

The identification of Ibuprofen in the method of UV spectroscopy has been used comparing to the standard Ibuprofen by Merck company. A solution of Ibuprofen was prepared by dissolving a weighed portion of cure in the mixture ethanol:water (1:1) or in 0.1 mol/l NaOH solution. Absorption spectrum was recorded on Shimadzu spectrophotometer UVmini – 1240 in the range from 190 to 450 nm in a quartz cell with thickness of absorbing layer 1 cm relative to the solvent. Absorption spectrum had 2 absorption maximum: $\lambda_1 = 222.5\text{nm}$ and $\lambda_2 = 365\text{nm}$. For authentication of medicines Mig, Novigan, Ibuprofen, Nurofen which containing Ibuprofen, prepared solutions of these in the appropriate solvents and the UV absorption spectrum was recorded. The identity of the spectrum confirmed the authenticity of drugs.

Definition of ibuprofen in the medicines was performed by the method of potentiometric titration. For this method 10 tablets were ground in a porcelain mortar until smooth. Weighed drug is dissolved in a volumetric flask in a mixture of ethanol:water (1:1). An aliquot of the prepared drug has been titrated potentiometric 0.1 mol/l solution of NaOH. The pH change during titration was recorded by readings of a potentiometer (Mettler Toledo) with a combined glass electrode. $C_{\min} = 0.1\text{ mg/ml}$. Validation was performed by UV spectroscopy method. For this, standard solutions of Ibuprofen were constructed calibration dependence of absorption from the content of the substance with $\lambda_1 = 222.5\text{ nm}$. According to the obtained equation $y = 40,15x + 0.002$ estimated detection limit. $LOQ = 0.5\text{ mkg/ml}$. Was measured the absorption of solutions prepared with drugs and the content of Ibuprofen was calculated according to the equation. The results of the experiment showed that the content of Ibuprofen in the analyzed specimens is within the acceptance criterion. Both methods can be used for analysis. The choice of method depends on the content of the substance in the product.

References

[1] Glushchenko N.N. Pharmaceutical chemistry. M.: Academy. 2004. 384 p.

Voltammetric "electronic tongue" based on glassy carbon electrodes modified by polyarylenephthalide composite with melamine and cyanuric acid for recognition of propranolol enantiomers

Khabletdinova A.I., Yarkaeva Y.A., Zilberg R.A., Sidelnikov A.V.

Bashkir State University, Ufa, Bashkortostan, Russia

E-mail: aigulik17@mail.ru

Many synthetic drug compounds exist in the form of two or more enantiomers. However, their pharmacological activity is usually associated with the action of only one enantiomer. Others enantiomers show a less pronounced effect or are not active. This stimulates the development of research on the recognition and determination of enantiomers in drugs. Several analytical methods have been explored for the enantiomers' recognition, such as chromatography, capillary electrophoresis and mass spectrometry. However, these methods are expensive, time-consuming and require complicated sample pre-treatment steps. Recently, electrochemical methods, particularly voltammetry, based on various chemically modified electrodes have been widely used in chiral recognition of drugs due to their speed, low cost and simplicity as well as to increase the sensitivity and selectivity of voltammetric sensors the chemometric methods e.g. PCA, SIMCA, PLS, PLS-DA applied. In the present work we consider the potential of voltammetric "electronic tongue" [1, 2, 3] in solving the identification problems of propranolol enantiomers. Under voltammetry conditions the electrochemical behavior of propranolol enantiomers on glassy carbon electrodes (GCEs) modified with polyarylenephthalide composites with melamine and cyanuric acid is studied. Moreover, the analytical characteristics and the optimal conditions for recording of analytical signals are evaluated either. The surface modifying methods of GCE by polyarylenephthalide (PAP) composites, recording of voltammograms of propranolol enantiomers and further discrimination of analytical signals were optimized by voltammetric methods, atomic force microscopy and molecular dynamics simulation. Thus, using the voltammetric electronic tongue, based on GCEs modified with PAP composites with melamine and cyanuric acid, and chemometric methods PCA and PLS-DA we have been able to demonstrate a method for the rapid identification and discrimination of propranolol enantiomers in their racemic mixture. This work was supported by the Russian Science Foundation, project no. 16-13-10257.

References

- [1] Sidelnikov A.V., Maistrenko V.N., Zilberg R.A., Yarkaeva Yu.A., Khamitov E.M. An enantioselective voltammetric sensor for the recognition of propranolol stereoisomers journal of analytical Chemistry. 2017. T. 72. № 5. С. 575-581.
- [2] A.V. Sidel'nikov, R.A. Zil'berg, Y.A. Yarkaeva, V.N. Maistrenko, V.A. Kraikin, Voltammetric Identification of Antiarrhythmic Medicines Using Principal Component Analysis. J Anal Chem 2015, 70. 1261-1266.
- [3] R.A. Zil'berg, Y.A. Yarkaeva, E.I. Maksyutova, A.V. Sidel'nikov, V.N. Maistrenko, Voltammetric Identification of Insulin and Its Analogues Using Glassy Carbon Electrodes Modified with Polyarylenephthalides. J Anal Chem 2017, 72. 402-409.

The concentration effect research on differentiated determination in a mixture of the lactic and sulfuric acids content in a non-aqueous solvent medium by potentiometric titration

Kuvaeva A.O.

Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russia

E-mail: Mia181193@mail.ru

During the treatment of black liquors in the sulphate – cellulose industry, separated out a fraction, in which a co – presence of lactic acid with a high yield, sulfuric acid and other hydroxy acids are observed.

The aim of the work is to study the concentration’s effect on the titration jump value of a mixture containing lactic and sulfuric acid.

Differential titration curves with jumps (Fig. 1), corresponding to successive precipitation of sulfuric and lactic acids, are obtained.

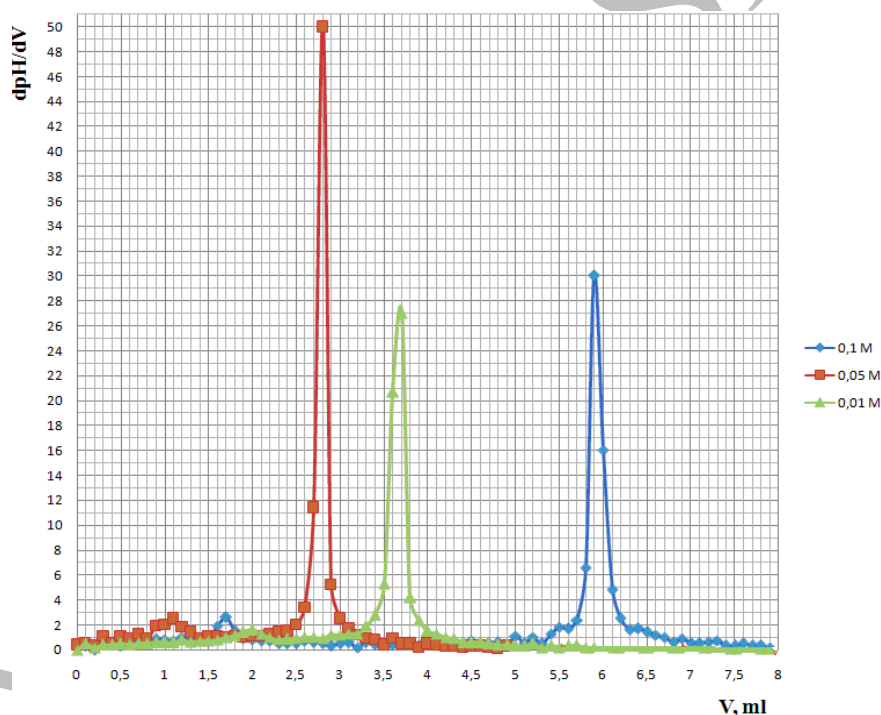


Fig.1. Differential curves for sulfuric and lactic acid in a molar ratio 1:1 titration by a solution of NaOH in a non-aqueous medium of ethylene glycol and acetone by potentiometric titration.

Table 1. Results of measurement.

The determination concentration of the lactic / sulfuric acids	0,01 M	0,05 M	0,1 M
Content of acid, mg	20,5±0,3	21,1±0,4	34,6±0,3
	9,2±0,3	5,4±0,4	5,6±0,3
Relative error,%	26%	6,2%	4,5%
	24%	17%	18%

Metrological characteristics of the method determination of reduced glutathione by spectrophotometry

Sokolova M.L., Lyalina E.I.
Vyatka State University, Kirov, Russia
E-mail: marijasokolowa@mail.ru

Glutathione (GSH) protects our body from the negative effects of active oxygen radicals, is involved in detoxification of xenobiotics and / or their metabolites. The most active functional group of the molecule is thiol, which is primarily exposed to active oxygen radicals. The most common method for the determination of thiol compounds is spectrophotometry, based on the reaction of these groups with the Ellman reagent (5,5'-dithio-bis- (2-nitrobenzoic acid))

In the literature, the technique is presented without metrological characteristics. Metrological characteristics are necessary, since the reliability of the results depends to a large extent on the characteristics of measurement errors in a given range of values. For these determinations, a calibration graph was constructed and its control was performed using the "entered-found" method. According to the received data, the main metrological characteristics of the analysis procedure were calculated: the repeatability index, the reproducibility index, the accuracy index, the detection limit.

Table 1. Metrological characteristics in a given range of concentrations at n = 8, P = 0.95.

Concentration, mol/dm ³	Repeatability, σ_r , %	Reproducibility index, σ_R , %	Accuracy rate, $\pm\delta$, %
0,00000048	2,4	18,1	3,8
0,00000072	4,4	13,5	3,5
0,0000012	15,0	10,8	1,6
0,0000052	5,6	17,1	7,4
0,000013	15,0	17,8	3,1
0,000023	0,3	13,1	1,3

Based on the obtained results, the maximum values for the whole range of concentrations were assigned for the method. The reproducibility is 18.1%, the repeatability is 15.0%, and the accuracy is 7.4%. It was also determined that the detection limit of glutathione in this technique is $1.4 \cdot 10^{-7}$ mol / dm³. The lower limit of the operating range of concentrations is $4.2 \cdot 10^{-6}$ mol / dm³.

The technique was used to study the composition of glutathione-containing copper (II) sulfate solutions.

**Окисление уксусной кислоты пероксидом водорода
в водной среде в сверхкритических флюидных условиях**

Аетов А.У., Усманов Р.А., Габитов Р.Р., Мазанов С.В.

*Казанский Национальный Исследовательский Технологический Университет,
Казань, Россия*

E-mail: aetovalmaz@mail.ru

Реакция окисления уксусной кислот пероксидом водорода в водной среде в сверхкритических флюидных условиях исследована на установке непрерывного действия.

Одним из основных качественных показателей степени загрязнения питьевых, природных и сточных вод является «химическое потребление кислорода» (ХПК). Анализ продукта реакции на ХПК осуществлялся с помощью Анализатора ХПК "Эксперт-003-ХПК" фотометрический с терморектором на 26 проб в соответствии с ГОСТ Р 52708-2007.

Для экспериментального исследования эффективности процесса СКВО нами была выбрана модельная химико-технологическая система окисления уксусной кислоты пероксидом водорода. Выбор данной кислоты в качестве модельных, помимо практической значимости, был обусловлен тем, что в нашей статье [1] ранее уже были подробно квантово-химически исследованы элементарные акты окислительного акватермолиза с участием пероксида водорода и требовалось качественное экспериментальное подтверждение описанных реакций триглицеридов жирных кислот, имеющих место при воздействии на них водных растворов пероксида водорода в сверхкритических флюидных средах.

Результаты, полученные анализом продуктов реакции, показывают, что при увеличении длительности и температуры процесса окисления, значение ХПК уксусной кислоты имеет наименьшее значение при $T = 723$ К после 30 минут проведения реакции, более длительный временной интервал эксперимента не исследовался. Эффективность процесса также максимальна при этих условиях. В этих условиях значение ХПК уксусной кислоты в сравнении с исходной величиной уменьшается в 8.6 раз, в то время как при $T = 673$ К эта величина составила только 3.7 раза, что указывает на уменьшение ХПК уксусной кислоты в 2.3 раза при повышенной температуре при прочих равных условиях.

Список литературы

[1] Аетов А.У., Курдюков А.И., Гумеров Ф.М., Усманов Р.А., Габитов И.Р., Мазанов С.В., Зарипов З.И. // Бутлеровские сообщения. 2017. Т.50, с.67-76.

Газо-адсорбционное выделение селена на магнитных наночастицах с последующим определением методом ААС

Аликина М.Д., Тимофеева И.И., Осмоловская О.М., Булатов А.В.
*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,
Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: alikinamariya1012@gmail.com

Селен как микроэлемент, являющийся антиоксидантом и противоопухолевым агентом, добавляют в яйца, молоко и другие продукты питания. В высоких концентрациях этот элемент токсичен, а также способен накапливаться в организме человека, что может привести к аллергическим реакциям, отравлениям, зарождению раковых клеток. Поэтому существует необходимость проверки качества пищевых продуктов и биологических добавок с целью обнаружения превышенного содержания селена, угрожающего здоровью и жизни потребителя [1].

В данной работе была предложена новая схема газо-адсорбционного выделения селена на магнитных наночастицах с последующим его определением методом атомно-абсорбционной спектроскопии (ААС). Согласно этой схеме, на первом этапе происходит перевод селена в летучую форму гидрида селена, который затем сорбируется на магнитных наночастицах, обладающих высокими магнитными свойствами и большой поглощающей поверхностью [2]. На втором этапе проводится элюирование окисленной формы селена с частиц, с его последующим ААС определением. В ходе работы была изучена зависимость сорбционной способности гидрида селена от состава наночастиц, их массы, а также условий выделения гидрида селена в рамках разработанной схемы. Кроме того, важным аспектом работы был выбор условий перевода селена в окисленную форму для последующего ААС определения. Возможности разработанной схемы продемонстрированы на примере определения селена в пищевых продуктах.

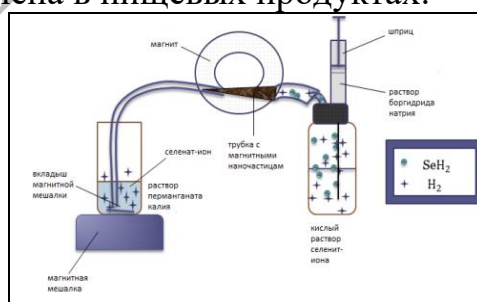


Рис. 1. Схема эксперимента.

Список литературы

- [1] Специфика влияния селена на организм человека и животных. Третьяк Л.Н., Герасимов Е.М.
- [2] Влияние температуры синтеза на морфологию и магнитные свойства наночастиц магнетита. Осмоловский М.Г., Осмоловская О.М., Власова А.А.

Новые аналитические методы контроля фенолов в водных растворах

Аралкина М.В., Аралкин О.Л., Вяткина О.В., Сетюхова М.В.

ФГАОУ ВО «КФУ им. В. И. Вернадского»

Таврическая Академия (структурное подразделение), Симферополь, Россия

E-mail: mariya95@mail.ru

В объектах хозяйственно-питьевого водопользования ПДК летучих фенолов – 0,001 мг/л [1]. Превышение естественного фонового содержания фенолов в водоемах оказывает токсическое влияние на живые организмы, является причиной изменения режима биогенных элементов и растворенных газов. В связи с высокой экотоксичностью фенолов разработка новых дешевых и экспрессных методов on-site анализа актуальна. Большинство классических методов количественного определения фенолов требуют стационарного оборудования либо дорогостоящих реактивов и не подходят для (on-site) анализа. Известно, что фенольные вещества, являются легко окисляемыми субстратами растительных пероксидаз, образующими в результате окрашенные продукты реакции, что дает возможность как визуальной, так и фотоколориметрической их идентификации. Поэтому целью нашего исследования была разработка новых простых и экспрессных методик определения количественного содержания фенолов в водных растворах в концентрациях соизмеримых с ПДК и превышающих её, основанных на каталитическом окислении фенолов ферментным препаратом с пероксидазной активностью, экстрагированным из корнеплодов редьки черной и иммобилизованным методом физической сорбции в оптимальных условиях на силикагеле, синтезированном при pH=10.

Было установлено, что максимальной пероксидазной активностью обладает ферментный препарат сорбированный при $t=25^{\circ}\text{C}$ из раствора ($V(\text{H}_2\text{O}):(\text{фосфатнобуферный экстракт пероксидазы})=6:4$) при соотношении твердая фаза:раствор=1:17) в течении 60 мин.

Показана возможность использования полученных ферментных препаратов с пероксидазной активностью для визуального полуколичественного и фотоколориметрического количественного определения фенола, гидрохинона, пирогаллола.

Определены метрологические характеристики таких методик, проведен их сравнительный анализ с подобными параметрами классических фотоколориметрических методик определения соответствующих фенолов [2].

Список литературы

[1] Гн 2.1.5.689-98 Предельно допустимые концентрации (пдк) химических веществ в воде водных объектов хозяйственно-питьевого и культурно-бытового водопользования.

[2] Лурье Ю. Ю. Химический анализ производственных сточных вод / Ю. Ю. Лурье, А. И. Рыбников. – М.: Химия, 1966. – 395 с.

**Получение и применение фермент-полиэлектrolитных комплексов
с пероксидазной активностью**

Бажин В.Ю., Вяткина О.В., Ярощук А.В., Александрова Д.Д.

Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского,

Симферополь, Россия

E-mail: mr.darmstadtium@mail.ru

Использование обычных растворимых ферментов имеет определенные сложности ввиду ряда факторов. Фермент-полиэлектrolитные комплексы с пероксидазной активностью могут быть лишены недостатков нативных ферментов. Такие комплексы дешёвы в производстве и не требуют долгих процессов очистки ферментов.

В качестве исходного раствора использовался 2% раствор желатина марки П-9, для которого предварительно были определены: молекулярный вес, методом вискозиметрии, изоэлектрическая точка, методом набухания, количество карбоксильных групп, титриметрическим методом. Фермент-полиэлектrolитный комплекс получали путем смешивания исходного раствора желатина при температуре 40°C с фосфатным буферным экстрактом пероксидазы, извлеченном из очищенных от кожуры корнеплодов редьки черной, по методике, предложенной Селибером [1], затем данную смесь разливали в чашки Петри и оставляли сушиться, таким образом получили плёнки разной толщины, либо, после измельчения и дробления высохших плёнок, фракцию с средним размером зерна 0,5-1 мм. В полученных образцах исследовали обратимость связывания фермента с матрицей. Остаточную концентрацию пероксидазы в растворе определяли фотоколориметрическим методом при $\lambda=400$ нм. Так же, в этом комплексе была изучена пероксидазная активность относительно гидрохинона, влияние температуры на скорость каталитического окисления гидрохинона и установлена активность полученного препарата при хранении. Образцы фермент-полиэлектrolитного комплекса изучались методом ИК-спектроскопии, для определения возможного механизма связывания фермента с матрицей, в результате чего был предположен сложный механизм связывания, сочетающий образование водородных связей и новых амидных связей между ферментом и желатином.

Данный комплекс был применён для создания оптического биосенсора. На предметное стекло, ровным слоем толщиной в 0,2 мм наносился исследуемый комплекс. После затвердевания комплекса, пластинки было удобно использовать для фиксации изменения их оптической плотности на ФЭК, до и после выдерживания в растворах гидрохинона. По разнице оптических плотностей возможно определение концентрации гидрохинона в водных средах.

Список литературы

[1] Селибер Г.Л. // Большой практикум по микробиологии. 1962. С. 492.

Вольтамперометрическое поведение энантиомеров триптофана с использованием электрохимически активированного сенсора

Богуславский В.Б., Тихонова А.А., Максютובה Э.И., Сидельников А.В.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

boguslavskiy97@yandex.ru

Современные методы электроаналитической химии обладают широкими возможностями, как в количественном, так и в качественном анализе многих органических и неорганических соединений.

С развитием математических способов обработки электрохимических данных в последние десятилетия активно развиваются мультисенсорные методы анализа с одновременной обработкой большого массива данных. Создаются мультисенсорные системы типа «электронный язык», «электронный нос», которые позволяют одновременно определять несколько компонентов при совместном присутствии или распознавать сложные растворы без подробного количественного анализа (задачи распознавания, оценки вкуса, запаха и т.д.).

Для увеличения чувствительности и специфичности электрохимических сенсорных систем создают гибридные варианты, включающие различные типы сенсоров. В зависимости от типа аналитической задачи исследователь использует различные математические способы обработки экспериментальных данных, например, МГК и SIMCA – для распознавания, PLS и ИНС – для количественного анализа, Фурье-преобразование и вейвлет-анализ – для предварительной обработки данных.

К настоящему времени актуальной проблемой в электроаналитической химии является распознавание и количественное определение изомеров, которые проявляют различную биологическую активность в зависимости от строения молекулы.

В работе представлены результаты изучения электрохимического поведения энантиомеров триптофана в условиях циклической вольтамперометрии с использованием электрохимически активированного стеклоуглеродного электрода.

Для описания дифференциальных вольтамперограмм был применен комбинированный метод «считывания» аналитических сигналов на основе модифицированного Фурье-преобразования и обобщенного метода главных компонент.

Данный комбинированный метод позволил количественно описать сигналы, обусловленные присутствием L- и D-триптофана в водных растворах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ: грант № 17-43-020232 р-Поволжье-а.

Газохроматографическое определение продуктов взаимодействия SiF_4 с AlCl_3

Буланова А.А.¹, Сорочкина Т.Г.²

¹*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

²*Институт химии высокочистых веществ им.Г.Г.Десятых Российской академии наук, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: insidious.fish@mail.ru

В настоящее время изотопно- и химически чистый кремний и его соединения являются потенциально перспективными для создания новых функциональных устройств и материалов. При взаимодействии изотопно-обогащенного тетрафторида кремния с хлоридом алюминия может быть получен изотопно-обогащенный тетрахлорид кремния - перспективный материал для волоконной оптики. Продуктами взаимодействия в данной реакции являются следующие вещества: SiF_3Cl , SiF_2Cl_2 , SiFCl_3 , SiCl_4 .

Определение фторхлоридов кремния $\text{SiF}_{4-n}\text{Cl}_n$ при получении SiCl_4 из SiF_4 , в том числе изотопно-обогащенного, является актуальной задачей, т.к. позволит оптимизировать проведение реакции до образования исключительно SiCl_4 . Наиболее перспективным методом анализа, позволяющим контролировать содержания этих веществ на уровне 10^{-4} об.%, является метод газовой хроматографии. Целью настоящей работы являлась разработка методики газохроматографического анализа продуктов взаимодействия SiF_4 с AlCl_3 .

Для газохроматографического разделения веществ были исследованы четыре насадочные разделительные колонки: 1 - с адсорбентом полисорб-1 (0.15 - 0.25 мм), длиной 1 м, внутренним диаметром 2 мм, 2 - с углем СКТ длиной 1,4 м, внутренним диаметром 3 мм, 3 - с карбоситами длиной 1,4 м и внутренним диаметром 3 мм, 4 - с хроматоном N-AW-HMDS (0.200-0.250 мм), содержащим 15% полидиметилсилоксана Е-301, длиной 5 м и внутренним диаметром 3 мм. Дозирование газообразной исследуемой смеси осуществлялось посредством вакуумной системы ввода проб. Газ-носитель гелий дополнительно очищали до содержания воды $<1 \cdot 10^{-5}$ об.%, углеводородов $\text{C}_1\text{-C}_4$ $<1 \cdot 10^{-7}$ об.%. Температура колонок составляла 30-50⁰С, скорость потока газа-носителя - 25-30 мл/мин. Для регистрации разделенных компонентов смеси был выбран детектор по теплопроводности (катарометр), обладающей достаточной чувствительностью (до 10^{-4} об.%) к определяемым веществам.

Идентификацию веществ в исследуемой смеси проводили хромато-масс-спектрометрическим методом. Показано присутствие следующих веществ: SiF_4 , SiClF_3 , SiCl_2F_2 , SiCl_3F , SiCl_4 . Было исследовано их разделение и наилучшие результаты были получены с колонкой, заполненной хроматоном N-AW-HMDS (0.200-0.250 мм), содержащим 15% полидиметилсилоксана Е-301. Расчет концентраций веществ проводили методом нормировки с учетом коэффициентов относительной чувствительности.

Высококчувствительное определение эфиров *o*-фталевой кислоты в слабоалкогольных напитках

Александрова Е.А., Буланова С.А., Мосягин П.В.
Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: ivanov@mail.ru

Эфиры *o*-фталевой кислоты являются весьма токсичными веществами. Поступлении их в организм приводит к возникновению раковых опухолей, заболеваниям печени, почек, репродуктивных органов. Появление *o*-фталатов в напитках связано с поступлением из пластифицированных полимерных уплотнений, тары и трубопроводов. В настоящем исследовании впервые в России разработано высококчувствительное определение *o*-фталатов в слабоалкогольных напитках (красное и белое вино, шампанское) с использованием микроэкстракционного концентрирования. Высокая эффективность концентрирования обеспечена диспергированием экстрагента в микрокапли размером 0.01 – 0.1 мкм. В качестве экстрагента предложен экологически безопасный углеводород – гексан. Определение примесей проводили методом хромато-масс-спектрометрии. Достигнутые пределы обнаружения токсикантов в слабоалкогольных напитках составляют 10^{-5} - 10^{-6} мг/л и находятся на уровне лучших мировых достижений. В работе исследованы источники возможных систематических погрешностей определения: поступление *o*-фталатов из хроматографических самоуплотняющихся мембран; загрязнение *o*-фталатов в растворителях и др. Предложены способы учета и устранения систематических погрешностей. Проведен анализ слабоалкогольных напитков отечественного и зарубежного происхождения. Относительная погрешность определения токсикантов составила 7– 20 %.

Высококчувствительное газохроматографическое определение хлорпроизводных эфиров ортофосфорной кислоты и полибромированных бифениловых эфиров

Вдовина И.А., Мосягин П.В.
Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: mospv@mail.ru

Эфиры ортофосфорной кислоты и полибромированные бифениловые эфиры нашли широкое применение в качестве антипиренов, т.е. добавок в полимеры, придающие материалу огнезащитные свойства. Эти вещества являются весьма токсичными, поступление их в организм приводит к возникновению раковых опухолей, заболеваниям печени, почек, репродуктивных органов. Содержание в воде данных токсикантов необходимо

контролировать на уровне 10^{-3} - 10^{-5} мг/л. Для решения этой проблемы нами разработаны методики высокочувствительного газохроматографического определения хлорпроизводных эфиров ортофосфорной кислоты и полибромированных бифениловых эфиров.

Для разделения компонентов использованы капиллярные колонки, регистрация примесей проводилась высокочувствительным и селективным электрозахватным детектором (ЭЗД). Изучено влияние температуры ЭЗД на возможности определения аналитов. Установлено, что при увеличении температуры ЭЗД от 240 до 300°C соотношение сигнал/шум возрастает более чем в 8 раз. Исследовано влияние поддува азота в ЭЗД на предельные возможности газохроматографического определения. За счет использования установленных оптимальных параметров работы детектора удалось снизить предел обнаружения в 25 раз. Для концентрирования примесей применено термофокусирование на начальном участке хроматографической колонки.

Концентрирование примесей из исследуемых водных образцов проводилось методом жидкофазной микроэкстракции с ультразвуковым диспергированием экстрагента и капиллярным сбором экстракта. Благодаря сочетанию высокочувствительного детектирования и эффективного концентрирования удалось реализовать низкие пределы обнаружения (100-10 нг/л), позволяющие проводить надежное определение следовых количеств аналитов. Разработанные методики успешно апробированы при анализе реальных объектов – образцов воды различного происхождения.

Исследование сорбции палладий ион полимерных сорбентов содержащие фрагмент сульфодимезин и NN'-дифенилгуанидин

Гашимова Е.Н.¹, Абилова У.М.², ЧыраговФ.М.²

¹*Азербайджанская государственная нефтяная и индустриальный университет
Баку, Азербайджан*

²*Бакинский Государственный Университет, Баку, Азербайджан*

E-mail: esmira.hashimova@mail.ru

На основе сополимера малеинового ангидрида со стиролом в присутствии формальдегида синтезировали новые хелатообразующие сорбенты содержащие фрагменты сульфодимезина (M_1) и NN'-дифенилгуанидина (M_2). Полученные полимерные сорбенты были идентифицированы методом ИК-спектроскопии. Термогравиметрическим методом исследована термоустойчивость сорбентов и их полихелатов с ионами Pd (II) образующихся в жидкой фазе. Фотометрическим методом была определена концентрация ионов Pd(II) в жидкой фазе с использованием известного реагента (2,2, 3,4 тетрагидрокси сульфо азо хлорид бензол).

Были определены ионная сорбционная емкость, рН жидкой фазы, ионная сила и начальная концентрация ионов металла синтезированных сорбентов палладия (II), а также исследованы оптимальные условия сорбции, необходимые для установления времени сорбционного равновесия ионов Pd (II). В этих же концентрациях различных кислот (HCl, HNO₃, HClO₄, H₂SO₄) проведен процесс десорбции. Была исследована зависимость процесса сорбции от ионной силы. Увеличение ионной силы жидкой фазы до 0,8 моль/л серьезно не влияет на степень сорбции.

Сорбент	Оптимальный рН процесса сорбции	Установленный период баланса, часы	Ионная сила mol/l	Максимальная сорбционная емкость мг/г	Оптимальный элюент
M ₁	5	1	0,8	523,158	H ₂ SO ₄
M ₂	4	1-1,5	0,8	487,226	HClO ₄

При концентрации ионов Pd²⁺ в растворе менее, чем 10⁻⁴ М происходит количественное разделение в условиях оптимальной сорбции и десорбции. Определение микроколичеств ионов Pd²⁺ позволяет использовать сорбенты в качестве эффективного концентратора в различных промышленных и биологических объектах. Разработаны методики эффективного сорбционно-фотометрического определения микроколичеств ионов Pd²⁺ в горных породах и стандартных образцах.

Газохроматографическое определение пестицидов в винах с микроэкстракционным концентрированием

Грубов Р.Е., Смирнова Л.В., Селивёрстов М.Е.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: rgrubov@mail.ru

Бесконтрольное использование инсектицидов, гербицидов, фунгицидов в сельском хозяйстве привело к накоплению пестицидов в пищевых продуктах, в частности, в вино-водочной продукции. Определение пестицидов в винах регламентируется рядом нормативных документов: ГОСТ Р 53971-2010 «Продукция винодельческая. Определение массовой концентрации пестицидов группы триазолов методом капиллярного электрофореза в сочетании с твердофазной экстракцией»; МУК 4.1. 2041.а-06 «Определение остаточных количеств хлорорганических пестицидов в винах и виноматериалах методом хромато-масс-спектрометрии». Тем не менее, разработанные методы определения пестицидов в винах недостаточно чувствительны. Для

концентрирования примесей применяется макроэкстракция с использованием больших объемов токсичных экстрагентов.

В данном исследовании для концентрирования пестицидов предложен метод жидкофазной микроэкстракции. Показано, что эффективное концентрирование пестицидов возможно с применением нетоксичного экстрагента – гексана, с его эмульгированием ультразвуковым облучением. Исследовано влияния концентрации спирта на степень извлечения пестицидов. Хроматографическое разделение пестицидов проводилось в капиллярной колонке DB-5, установленной в хроматографе ХРОМОС ГХ-1000. Для регистрации примесей использованы термоионный, пламенно-фотометрический и масс-спектрометрический детекторы. Идентификация примесей проводилась методом масс-спектрометрии (прибор Focus DSQ II). Достигнутые пределы обнаружения пестицидов находятся на уровне 10^{-4} мг/л.

Расчет возможности химического взаимодействия смешиваемых сточных вод на промышленных предприятиях

Дремичева Е.С.¹, Мялкин И.В.²

¹Казанский государственный энергетический университет, Казань, Россия

²Выксунский филиал Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС", Выкса, Россия

E-mail: i.v.myalkin@gamil.com

Снижение водопотребления возможно, как при применении маловодных и безводных и разработке новых технологических процессов, так и при создании и развитии рациональных схем водоснабжения для существующих технических процессов, в том числе замкнутых систем. При проектировании водоотводящих систем промышленных предприятий одним из самых актуальных вопросов, от решения которого зависит сметная стоимость строительства и затраты на эксплуатацию очистных сооружений, а также уровень надежности защиты окружающей среды от загрязнения, является целесообразность разделения или объединения отдельных потоков сточных вод. Очень часто разделение системы очистки на локальную часть, принадлежащую промышленному предприятию или группе предприятий, имеющих какие-то характерные загрязнения, легко устранимые в малом количестве сточных вод и собственно городской сток, имеющий большие объемы и характерный хозяйственно-бытовой состав загрязнений, часто дает возможность упростить, а главное, удешевить и сделать эксплуатацию квалифицированнее. В число факторов, диктующих необходимость раздельной очистки отдельных потоков сточных вод, входят санитарно-гигиенические причины, пожаро- и взрывоопасность, возможность разрушения или зарастания трубопроводов за счет появления в результате химического взаимодействия объединяемых стоков нерастворимых в воде

примесей. Однако производственные сточные воды многих отраслей промышленности содержат кислоты и щелочи. С целью предупреждения коррозии материалов и сооружений, нарушения биохимических процессов, кислые и щелочные сточные воды перед сбросом их в водоем, подачу на биологические очистные сооружения или повторном использовании в технологическом процессе должны быть нейтрализованы. Кислые воды (рН8,5), и представляют большую опасность. Наиболее часто сточные воды загрязнены минеральными кислотами: серной, азотной, соляной, а также их смесями. Концентрация их обычно не превышает 3 %, но иногда достигает 40 % и более. Выбор способа нейтрализации зависит от вида и концентрации кислот, загрязняющих сточные воды, расхода и режима поступления вод на нейтрализацию, наличия реагентов, местных условий и т. п.

Метрологическая характеристика определения растворенного кислорода в растворах сульфата меди (II) с добавлением восстановленного глутатиона GSH методом амперометрии

Ёлкина Ю. С., Лялина Е. И.

Вятский Государственный Университет, Киров, Россия

E-mail: yvolkina95@mail.ru

В последнее время наибольшую популярность для определения растворенного кислорода в воде получил амперометрический метод с использованием полупроницаемых мембран, отделяющих электроды в растворе электролита от исследуемой воды.

Этот метод положен в основу измерения концентрации кислорода оксиметром HI 9143 – фирмы HANNA и в основном применяется для определения растворенного кислорода в водной среде. Однако неизвестно, применим ли метод для определения растворенного кислорода в глутатионсодержащих растворах сульфата меди(II).

Для выявления пригодности метода определения растворенного кислорода в глутатионсодержащих растворах сульфата меди(II), были определены метрологические характеристики методики: показатель точности, показатель повторяемости, показатель воспроизводимости.

Установили, следующие метрологические характеристики: показатель точности – 24%, показатель повторяемости – 10%, показатель воспроизводимости – 26%.

Данную методику применили для исследования растворов сульфата меди(II) с концентрацией ионов меди Cu^{2+} 0,1 и 1 мг/дм³ и добавлением восстановленного глутатиона GSH до мольного соотношения 1Cu:4GSH.

Было установлено, что растворенный в воде кислород расходуется на образование АФК, потому что коэффициент корреляции между молекулярным

кислородом и АФК для раствора с концентрацией меди(II) 1 мг/дм³ в соотношении с глутатионом 1Cu:4GSH равен 0,845, это говорит о сильной линейной связи между этими показателями. Для раствора с концентрацией меди(II) 0,1 мг/дм³ в соотношении с глутатионом 1Cu:4GSH коэффициент корреляции равен 0,608, что означает наличие слабой связи.

Список литературы

[1] Falck D. // «Amperometric oxygen electrodes», Current Separations. 1997. Vol. 16. No. 1. pp. 19–22.

Исследование возможности чувствительного определения некоторых неорганических веществ методом микрокристаллоскопии

Загородников Н.В.

Школа юного исследователя,

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: nikita.zagor01@gmail.com

Тенденция развития современной науки и техники является миниатюризация процессов. Одним из воплощений этой тенденции является микрокристаллоскопия в аналитической химии. Микрокристаллоскопия находит применение главным образом для качественного анализа очень небольших по размерам объектов (включения в металлы и минералы, мельчайшие металлические частицы, пыль, содержимое растительных и животных клеток). Применение специфических реакций делает микрокристаллоскопию очень удобным методом анализа в судебно-медицинской практике, в металлургии, в медицинских и экологических исследованиях. Однако возможности этого метода, а также влияние различных факторов на применимость метода микрокристаллоскопии в различных случаях недостаточно изучены.

В данной работе проведено исследование возможности обнаружения некоторых ионов неорганических веществ с помощью метода микрокристаллоскопии. В результате были изучены формы и цвет кристаллов, образующихся при проведении микрокристаллоскопической реакции; установлены пределы обнаружения аналитов. При выполнении работы исследована скорость роста кристаллов и влияние других ионов, рН среды на возможности микрокристаллоскопического определения аналита. Проведен анализ реальных образцов водных объектов с помощью микрокристаллоскопии.

Электрохимическое поведение энантиомеров атенолола на стеклоуглеродном электроде, модифицированном трехкомпонентной смесью полимеров

Кабирова Л.Р., Яркаева Ю.А., Зильберг Р.А., Сидельников А.В.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

E-mail: Kabirova.lian@yandex.ru

Блокирующий β -адренорецептор 4-(2-гидрокси-3-изопропиламино-пропокси)фенилацетамид, коммерчески известный как атенолол (АТН), используют в качестве антигипертензивного препарата, для лечения стенокардии, и как антиаритмический препарат для регулирования сердцебиения. Исследования окислительно-восстановительного поведения биологически активных соединений с помощью электрохимических методов обеспечивают ценную информацию об окислительно-восстановительных реакциях этих молекул, в частности в этих целях широко применяют вольтамперометрические методы, ввиду их высокой чувствительности.

В данной работе изучено электрохимическое поведение энантиомеров АТН ($C=1\text{мМ}$) на стеклоуглеродном электроде (СУЭ), модифицированном трехкомпонентной смесью, состоящей из катионного полимера-хитозана, анионного полимера-сукцинамид хитозана, и α,β,γ -циклодекстринов в соотношении 1:1:1 с концентрацией каждого компонента 5 г/л, в качестве электрода сравнения служил хлоридсеребряный электрод, вспомогательный электрод - платиновая пластина. Вольтамперограммы (ВАГ) энантиомеров АТН регистрировали в водных растворах на фоне фосфатного буферного раствора ($\text{pH}=6.86$) в диапазоне потенциалов $0.0\div 1.8$ В и скорости развертки потенциала 0.1 В/с, данному этапу предшествовала электрохимическая активация поверхности рабочего электрода посредством 5 циклов развертки потенциала при $-1.5\div 2.5$ В и скорости развертки 2.5 В/с. На полученных ВАГ наблюдаются два анодных пика в диапазоне потенциалов $0.8\div 1.6$ В. На немодифицированном СУЭ в отсутствие хирального селектора ВАГ энантиомеров АТН практически одинаковы и по высоте пиков и по потенциалам, при использовании перечисленных выше модификаторов ток пика для S-атенолола выше по сравнению с R-атенололом. При хемометрической обработке полученных ВАГ на графике счетов и нагрузок наблюдается разделение энантиомеров на кластеры по 3-4 главным компонентам, следовательно, предложенные модификаторы чувствительны к энантиомерам атенолола.

Таким образом, было изучено электрохимическое поведение атенолола, дальнейшая работа будет направлена на изучение механизма происходящих реакций на поверхности, модифицированного СУЭ и создание мультисенсорной системы типа «электронный язык» для распознавания энантиомеров атенолола в рацемической смеси и реальных объектах - лекарственных препаратах.

Работа выполнена при поддержке РФФ: грант № 16–13–10257.

Электрохимическая активация поверхности рабочего электрода

Кабилова Л.Р., Яркаева Ю.А., Зильберг Р.А., Сидельников А.В.

Бакирский государственный университет, г. Уфа, Россия

E-mail: Kabirova.lian@yandex.ru

Вольтамперометрия это развивающийся электрохимический метод (ЭХМ), находящий широкое применение в актуальном на сегодняшний день направлении аналитической химии - анализе лекарственных средств. Высокая чувствительность и воспроизводимость вольтамперометрических измерений во многом зависят от свойств поверхности рабочего электрода, поэтому большое внимание уделяется материалу электрода, а также способам его регенерации. Ранее в работах по изучению электрохимического поведения β -адреноблокаторов на различных сенсорах нами использовалась механическая регенерация поверхности рабочего электрода, включающая удаление пленки модификатора раствором N,N-диметилформамида, полирование пастой на основе 0,1-0,3 мкм Cr_2O_3 , промывание 0,1 М раствором ЭДТА для удаления микрочастиц Cr_2O_3 , а затем этанолом перед сушкой. Наиболее часто в ЭХМ анализа используют электрохимическую обработку: электрод выдерживают при высоких положительных и отрицательных потенциалах для растворения продуктов реакции и десорбции.

На основе анализа литературных данных предложена электрохимическая активация, приводящая к более плотному, равномерному распределению модификатора на поверхности. В качестве модификатора использовали смесь катионного полимера-хитозана, анионного полимера-сукцинамид хитозана, и циклодекстринов в соотношении 1:1:1. В процессе вольтамперометрического анализа атенолола на фоне фосфатного буферного раствора, проводили несколько циклов развертки потенциала при $-1.5 \text{ В} \div 2,5 \text{ В}$ и скорости развертки $2,5 \text{ В/с}$, вследствие чего поверхность стеклоуглеродного электрода частично окисляется и становится активной, затем регистрировали линейные вольтамперограммы (ВАГ) в диапазоне потенциалов $0 \div 1.8 \text{ В}$ и скорости развертки 0.1 В/с . Основной задачей является выбор оптимального числа циклов для получения сходимых результатов, в качестве такого параметра использовали графики счетов хемометрического метода главных компонент (МГК), а именно расположение точек на графике счетов МГК-моделирования, который может показать дрейф сигнала, кластеризацию, и отличия ВАГ между собой. Для этого проводили эксперимент при использовании первых 5, 10, 20, 50, 100 ВАГ. Анализируя графики, можно сделать вывод, что первые 20-30 циклов являются активационным периодом. Таким образом, для получения прецизионных результатов, позволяющих различить объекты между собой целесообразно использование последних 20 ВАГ в циклах, т.к. в этом случае размах кластеров небольшой и дисперсия сигналов меньше, чем расстояние между кластерами. Данное исследование является начальным этапом в попытке повышения воспроизводимости результатов вольтамперометрического определения лекарственных веществ.

Работа выполнена при поддержке РФФ: грант № 16–13–10257.

Микроаналитические системы для анализа выдыхаемого воздуха

Карапетян Д.Д., Игитханян А.Э., Платонов И.А., Колесниченко И.Н.
Самарский национальный исследовательский университет имени академика
С.П. Королёва, г. Самара, Россия
E-mail: dianik2@mail.ru

В последние годы интенсивно развивается новое направление неинвазивной медицинской диагностики – анализ выдыхаемого воздуха, основанный на определении эндогенных биомаркеров, позволяющих идентифицировать широкий спектр заболеваний на ранних стадиях [1].

Одним из лимитирующих факторов, определяющих точность и скорость выполнения измерений биомаркеров в выдыхаемом воздухе, является адекватный пробоотбор и пробоподготовка, исключающие внесение дополнительных примесей.

В связи с вышесказанным актуальным является разработка методических приёмов и способов для повышения точности количественного определения эндогенных биомаркеров в выдыхаемом воздухе.

Для этих целей были разработаны хромато-десорбционные микросистемы (ХДМС), позволяющие осуществлять градуировку и концентрирование в идентичных условиях, исключая при этом промежуточные операции, тем самым повысив точность анализа. Микроаналитические системы представляют собой медицинские иглы длиной 40 мм и внутренним диаметром 0,5 мм, заполненные сорбентом с известным количеством аналита. В рамках работы была изучена возможность применения аналитических микросистем, заполненных следующими видами сорбентов: Al_2O_3 , MN-202, Chromaton N-AW-DMCS-25% $CaCl_2$.

Установлено, что при дискретном дозировании газовой смеси ресурс работы ХДМС составляет не менее 6 циклов при стандартном отклонении $\delta=15\%$. При этом возобновляемый ресурс системы составил не менее 4 циклов. По результатам исследований перспективными сорбентами для ХДМС являются Al_2O_3 и сорбенты, модифицированные неорганическими солями (Chromaton N-AW-DMCS-25% $CaCl_2$).

Необходимо отметить, что применение микроаналитических систем обладает рядом преимуществ, главными из которых являются простота аппаратного оформления, универсальность, экономичность, экспрессность и возможность автоматизации анализа.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках государственного задания на выполнение работ (проект №4.6875.2017/8.9).

Список литературы

[1] Копылов Ф.Ю., Сыркин А.Л., Чохамидзе П.Ш. и др. «Перспективы диагностики различных заболеваний по составу выдыхаемого воздуха» // Клиническая медицина, 2013, №10, с.16-21.

Использование сорбентов для определения пластификаторов в воздухе

Карсункина А.С., Лебедев А.Н.

Самарский национальный исследовательский университет

им. академика С.П. Королева, Самара, Россия

E-mail: karsunkina.alesya@mail.ru

Широкое применение во многих отраслях промышленности получили различные по своей природе сорбенты. Одним из важнейших применений сорбентов является их использование для концентрирования микропримесей из воздушных и водных сред с целью последующего определения их концентрации. Анализ атмосферного воздуха, промышленных выбросов, воздуха рабочей зоны и жилых помещений приобретает особую актуальность для защиты окружающей среды и здоровья человека.

Критериями выбора сорбента для решения конкретной аналитической задачи является его сорбционная емкость, селективность, а также возможность быстрой и эффективной десорбции.

Цель работы – разработка методики определения пластификаторов в воздухе методом газовой хроматографии.

При реализации данного метода определения микропримесей важнейшим шагом является концентрирование. Для концентрирования пластификаторов выбран новый сорбционный материал на основе «металлорезины» (МР) – блочного материала с варьируемой порозностью, в котором адсорбционных слой формируется непосредственно на металлической спирали путем оксидирования.

Для оптимизации процесса десорбции было использовано три типа растворителей: изопропанол, гексан, толуол. Отмечено, что толуол превосходит по эффективности десорбции изопропанол в 1,5 раза, а использование гексана негативно отражается на результатах анализа в связи с его высокой летучестью.

В рамках работы проведено сравнение сорбционного материала на основе МР и активированного угля. Экспериментально установлено, что при использовании активированного угля для концентрирования пластификаторов наблюдается значительное увеличение количества аналита при проведении последовательной десорбции новыми порциями толуола, но при использовании МР практически весь пластификатор был десорбирован при первой десорбции.

Экспериментально показано, что при абсорбционном концентрировании с использованием изопропанола наблюдается неполное улавливание пластификатора.

Таким образом, экспериментально установлено, что определение пластификаторов с применением сорбционного материала на основе МР является наиболее экспрессным и правильным по сравнению с рассмотренными способами концентрирования.

**Фармакогностическое изучение бодяка разнолистного –
нового потенциально лекарственного вида растения**

Касьянов З.В., Ганькова К.Л., Шустов М.В.

*Пермская государственная фармацевтическая академия Минздрава России,
Пермь, Россия*

E-mail: zaharyuga@gmail.com

Бодяк разнолистный (*Cirsium heterophyllum*, Asteraceae) – растение перспективное для комплексного фармакогностического изучения. Растение применяется в народной медицине в виде настоев травы и листьев при лечении астмы и туберкулёза лёгких; кашку из свежих листьев (или листья целиком) накладывают на ссадины, фурункулы; высушенные листья растирают в порошок и посыпают им гноящиеся раны.

Нами установлено, что экстрагентами, с максимальным выходом суммы биологически активных веществ из сырья бодяка разнолистного, являются вода очищенная и 70% этиловый спирт, а сырьем, с учетом фазы вегетации, листья, заготовленные в период цветения.

Объектом химического исследования служил образец листьев, собранный в Пермском районе в июле 2017 в период цветения растения. Методом тонкослойной хроматографии в водном извлечении из листьев бодяка обнаружены лимонная и винная кислоты. Определение производилось на пластинках «Сорбфил ПТСХ-П-А-УФ» в системе: спирт этиловый 96% – раствор аммиака концентрированный (16:4,5), проявитель – спиртовой раствор бромкрезолового зеленого. Среднее содержание свободных кислот при титриметрическом определении в пересчете на лимонную составило $10,43 \pm 0,85\%$. Качественными реакциями подтверждено, что листья содержат гидролизованные дубильные вещества, а их содержание в пересчете на танин определяли перманганатометрически (индикатор индигосульфокислота), которое составило $15,90 \pm 0,59\%$.

Изучен ряд биологических активностей водного извлечения (1:10). Показана высокая гемостатическая активность на цитратной крови в сравнении с этамзилатом, умеренная противовоспалительная активность в сравнении с диклофенаком, слабо выраженное инсектицидное действие в сравнении с пиримифосом и иминоклопридом.

Из литературных данных известно, что обширной группой биологически активных веществ бодяка разнолистного являются флавоноиды [1], поэтому перспективно углублённое изучение извлечений этой группы веществ, что является предметом нашей дальнейшей работы.

Список литературы

[1] Огурцова Л.Н. и др. // Хим. прир. соед. 1974. №1. С. 90.

Разработка методики хроматографического определения состава циркулирующего ацетонитрила на капиллярной колонке

Китева Е.А., Григорьева О.Б.

Тольяттинский государственный университет, г. Тольятти, Россия

E-mail: groly@yandex.ru

При получении бутадиена-1,3 из пиролизной фракции методом экстрактивной ректификации в качестве экстрагента используется ацетонитрил. В его составе присутствует ряд примесей, таких как вода, метанол, толуол, ацетон, винилциклогексен (ВЦГ), а также значительное количество органических веществ с широким диапазоном температур кипения, которые накапливаются в процессе работы. С целью недопущения забивки аппаратуры смолами, для предотвращения коррозии оборудования и образования термополимера в технологическую систему подается ряд продуктов, таких как ингибитор, растворитель, которые частично также присутствуют в ацетонитриле. При определенных условиях регенерации ацетонитрила, ВЦГ и ацетонитрил образуют азеотропную смесь, что приводит к накоплению ВЦГ в системе. Поэтому производственной необходимостью остается задача количественного определения ВЦГ в циркулирующем ацетонитриле.

Работа проводилась на хроматографе Shimadzu с детектором по теплопроводности и капиллярной колонкой Rtx-624 длиной 30 м, диаметром 0,53 мм, с нанесенной неподвижной фазой – 6 % цианопропилфенил / 94 % диметилполисилоксан, толщина пленки 3 мкм. Использовали режим программирования температур (начальная температура колонки - 40°C, время начальной изотермы – 10 мин; скорость программирования температуры - 15°C/мин; конечная температура колонки - 100°C). Данный режим является оптимальным для разделения компонентов всей области определения.

Идентификация компонентов осуществлялась методом добавки чистых веществ, наличие которых в пробе предварительно подтверждено с помощью хромато-масс-спектрометра (масс-спектрометр «Clarus 500 MS» с квадрупольным анализатором). В качестве метода количественного определения использовали метод внутренней нормализации с учетом коэффициентов чувствительности. Поправочные коэффициенты чувствительности определяли хроматографированием искусственно приготовленных смесей необходимых компонентов с выбранным стандартным веществом (ацетоном) в среде растворителя (ацетонитрила).

В работе в циркулирующем ацетонитриле определено содержание более 19 компонентов (вода, углеводороды C4, метанол, этанол, ацетон, изопропанол, ацетонитрил, триметилкарбинол (ТМК), аллиловый спирт, vt-бутанол, бензол, кротональ, n-бутанол, толуол, ВЦГ, п+м-ксилол, о-ксилол, стирол).

Разработанная методика определения может быть рекомендована для аналитического контроля производства бутадиена.

**Загрязнение хлорорганическими пестицидами экосистемы
северо-восточной части Черного моря в 2016 году**

Котов С.В.

*ФГБНУ «Азовский научно-исследовательский институт
рыбного хозяйства», Ростов-на-Дону, Россия*

E-mail: KotovSerg2013@mail.ru

Из множества загрязняющих веществ, поступающих в водные объекты, стойкие хлорорганические пестициды (ХОП) имеют наивысший (1-й класс) опасности, поскольку оказывают наиболее сильное влияние на состояние гидробионтов. ХОП практически не подвержены биодegradации, легко накапливаются в биологических объектах, обладают высокой токсичностью и отрицательно воздействуют на репродуктивные процессы.

В настоящем сообщении приводятся основные результаты загрязнения ХОП экосистемы северо-восточной части Черного моря, полученные в результате весенних и осенних исследований в 2016 г. Оценка содержания ХОП в пробах воды (поверхностный, 10м, придонный горизонты) и донных отложений дана по сумме наиболее распространенных ХОП: изомеров ГХЦГ (α -, γ -, β -) и метаболитов и изомеров ДДТ (n,n'-ДДЕ, o,n-ДДЕ, n,n'-ДДД, o,n-ДДД, n,n'-ДДТ, o,n-ДДТ).

Концентрации ХОП в водной толще северо-восточной части Черного моря в весенний период менялись в диапазоне от <0.1 до 9.7 нг/л, составив в среднем 1.8 нг/л. В поверхностном слое воды и на глубине 10 метров самые высокие концентрации ХОП обнаружены по траверзу Адлера (9.7 нг/л и 9.3 нг/л соответственно), в придонном слое воды (8.9 нг/л) – в районе пос. Южная Озерейка. К осени уровень загрязнения водной толщи исследуемого участка моря снизился в среднем до 0.8 нг/л при диапазоне концентраций <0.1 - 4.5 нг/л. Наиболее высокое загрязнение пестицидами наблюдалось в поверхностном слое воды. В поверхностном и придонном слоях воды самая высокая концентрация ХОП обнаружена по траверзу Большие Сочи – 1.8 нг/л, на глубине 10 метров – по траверзу Геленджика (1.3 нг/л).

В донных отложениях прибрежной части Черного моря концентрации хлорорганических пестицидов весной варьировали в диапазоне <0.1 - 3.3 мкг/кг, составив в среднем по исследуемому участку 0.5 мкг/кг сухой массы. Пространственное распределение загрязнения ХОП характеризовалось наибольшим загрязнением донных отложений, отобранных по траверзу пос. Архипо-Осиповка (3.3 мкг/кг). В осенний период содержание хлорорганических пестицидов в донных отложениях моря находилось в диапазоне от <0.1 до 7.2 мкг/кг, в среднем составив 2.3 мкг/кг сухой массы.

Таким образом, результаты исследований по накоплению ХОП в воде и донных отложениях северо-восточной части Черного моря показали, что, несмотря на официальный запрет использования ХОП, введенный в начале 70-х годов прошлого века, эти загрязняющие вещества до сих пор обнаруживаются в основных элементах экосистемы Черного моря.

Исследование влияния температуры на дифференцированное определение в смеси содержания молочной и серной кислот в среде неводных растворителей методом потенциометрического титрования

Куваева А.О.

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

E-mail: Mia181193@mail.ru

В сульфатно-целлюлозной промышленности в процессе обработки черных щелоков выделяется фракция, в которой наблюдается совместное присутствие молочной кислоты с большим выходом и серная кислота.

Цель данной работы - исследование влияния температуры на величину скачка титрования смеси содержащей молочную и серную кислоту.

Получены дифференциальные кривые титрования со скачками (рис.1), отвечающие последовательному осаждению серной и молочной кислот.

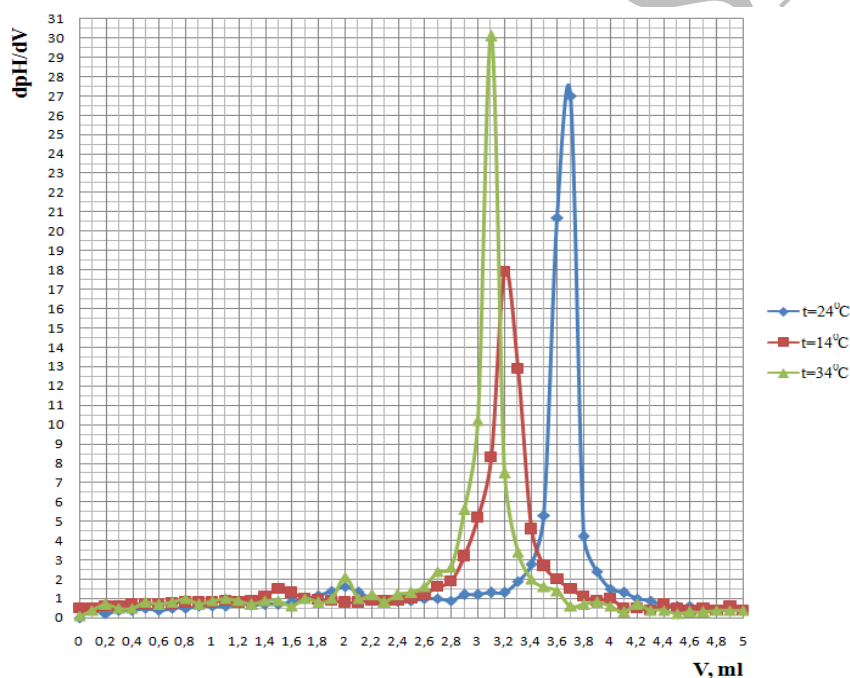


Рис.1. Дифференциальные кривые титрования серной и молочной кислот в мольном отношении 1:1 (0,01М) раствором 0,1 М NaOH в неводной среде этиленгликоля и ацетона методом потенциометрического титрования.

Таблица 1. Результаты измерений.

Температура определения молочной/серной кислот	24 ⁰ С	14 ⁰ С	34 ⁰ С
Содержание кислоты, мг	20,5±0,3 9,2±0,3	27,0±0,2 7,8±0,3	18,7±0,1 9,2±0,2
Относительная ошибка, %	26% 24%	28% 5%	10% 24%

Получение сорбционных материалов с варьируемой порозностью

Лебедев А.Н., Карсункина А.С.

Самарский национальный исследовательский университет
им. академика С.П. Королева, Самара, Россия
E-mail: alexeylebedev1996@mail.ru

Материал «металлорезина» – это блочный материал с варьируемой порозностью, изготовленный путем холодного прессования, определенным образом уложенной и дозированной по весу металлической проволоочной спирали (X18H10T). Данный материал разработан в СГАУ (Самарский университет) и широко используется в качестве демпфирующего и шумопоглощающего материала, а также как носитель для микро- и наночастиц катализаторов. Следует отметить, что возможность варьирования порозности и, как следствие, газодинамического сопротивления слоя материала, а также возможность формирования оксидных слоев различного строения при сохранении высокой удельной поверхности материала делает перспективным его применение в качестве сорбционного материала.

Целью работы является изучение возможности использования материала «металлорезина» в качестве сорбционного материала для концентрирования микропримесей высококипящих органических соединений.

Для сравнительной оценки были изготовлены ряд образцов материала «металлорезины» с различной обработкой поверхности, в том числе с обработкой в 20%-ном растворе соляной кислоты без оксидирования и с последующим оксидированием при температурах 350⁰С; 500⁰С и 700⁰С.

Полученные образцы были изучены методом растровой электронной микроскопии (рисунок 1).

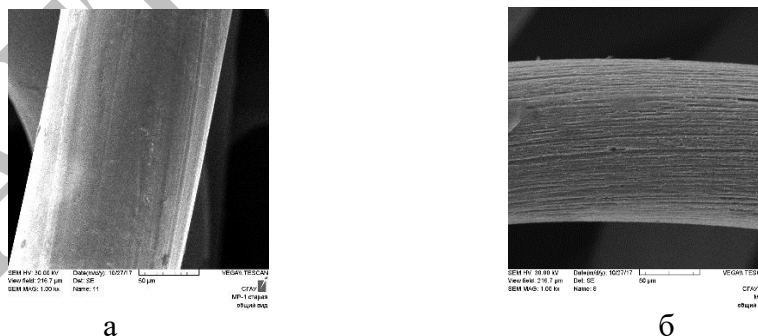


Рис. 1. Фотографии образцов материала «металлорезина» без обработки (а) и оксидированного при 700⁰С (б), сделанные с использованием растрового электронного микроскопа.

Была изучена сорбционная способность образцов сорбционного материала на основе «металлорезины» по отношению к высококипящему органическому соединению – диоктилфталату (ДОФ). Экспериментально установлено, что количество ДОФ, десорбированного с образца необработанной «металлорезины», примерно в 10 раз меньше, чем с остальных образцов. Причем количество ДОФ, десорбированного с образцов без термической обработки и оксидированных при различных температурах, отличается незначительно.

Хроматографическое определение меропенема в биологических жидкостях с предварительным концентрированием на принципах дисперсионной жидкостной микроэкстракции

Лебединец С.А., Почивалов А. С., Вах. К.С., Булатов А.В.
*Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: sonyalebedinets@yandex.ru*

Карбапенемы - относительно новый класс антибиотиков, которые имеют широкий спектр антимикробной активности и используются при лечении различных инфекционных заболеваний. К числу карбапенемов, широко используемых в медицинской практике, относится меропенем (Рис.1). При применении меропенема в терапии предпочтителен постоянный контроль его содержания в биологических жидкостях пациентов (моча, плазма крови) с целью регулирования режимов дозирования лекарственных препаратов. Учитывая, что концентрации меропенема в биологических жидкостях низкие, а сама матрица может оказывать отрицательное влияние на анализ, эффективные методы предварительного концентрирования и извлечения аналита из матрицы пробы являются неотъемлемой частью его определения.

Для определения меропенема в биологических жидкостях человека была использована дисперсионная жидкостно-жидкостная микроэкстракция (ДЖЖМЭ), которая подразумевает использование вспомогательного полярного вещества-диспергатора, хорошо смешивающегося как с водной, так и с органической фазой. Диспергатор способствует увеличению площади массообмена между фазами и быстрому наступлению равновесия в системе, что, в свою очередь, увеличивает производительность анализа. Среди других преимуществ ДЖЖМЭ можно выделить дешевизну, высокую эффективность экстракции, простоту и безопасность метода пробоподготовки, который позволяет существенно снизить объемы реагентов, время и трудозатраты на анализ. Для извлечения и концентрирования меропенема в данной работе использовали первичный амин. При его смешении с водой образовывалась мицеллярная фаза, однако при добавлении диспергатора-ацетонитрила наблюдалось разрушение мицелл и образование эмульсии. Для разрушения эмульсии использовали центрифугирование, а сконцентрированный в органической фазе аналит направляли на ВЭЖХ анализ. Были исследованы параметры, влияющие на эффективность экстракции, такие как объем экстрагента, тип и объем диспергатора, время проведения экстракции. Диапазон определяемых концентраций составил 0.05 – 50 мг/л.

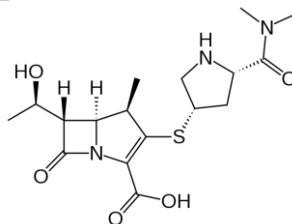


Рис.1. Химическая структура меропенема.

Проточно-инжекционное амперометрическое определение щавелевой кислоты на углеродном электроде, покрытом плёнкой из нафiona с иммобилизованными наночастицами палладия

Шайдарова Л.Г., Лексина Ю.А., Челнокова И.А., Даминдарова Д.Р.,
Казакова В.А., Будников Г.К.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет им. А.М. Бутлерова,
Казань, Россия*

E-mail: leksina_yulia@mail.ru

Щавелевая кислота (ЩК) и ее соли играют значительную роль в организме человека. Высокочувствительное определение ЩК в биологических жидкостях очень важно для лечения и диагностики заболеваний, таких как почечнокаменная болезнь, диарея. Поэтому разработка быстрых и простых методов определения концентрации ЩК остается актуальной задачей на сегодняшний день.

Для количественного определения ЩК и оксалатов используют различные физико-химические методы. Среди электрохимических методов анализа применяется метод вольтамперометрии, однако ЩК и оксалаты окисляются на индикаторных электродах с высоким перенапряжением. Этот недостаток удается устранить при использовании химически модифицированных электродов (ХМЭ) с электрокаталитическими свойствами. Преимуществами данного метода являются высокая чувствительность, простота проведения анализа и невысокая стоимость оборудования. Сочетание методологии проточного анализа с электрокаталитическими свойствами ХМЭ позволяет повысить чувствительность, селективность, воспроизводимость и экспрессность определения.

В настоящей работе установлена каталитическая активность наночастиц палладия, электроосажденных на поверхности углеродного электрода, модифицированного пленкой из нафiona, при окислении ЩК. При этом регистрируется многократный прирост тока по сравнению с током окисления модификатора и уменьшение перенапряжения окисления кислоты по сравнению с немодифицированным электродом. Поэтому каталитический отклик ХМЭ на основе пленки из нафiona с иммобилизованными частицами палладия использовали для амперометрического определения ЩК в условиях проточно-инжекционного анализа (ПИА).

Линейная зависимость аналитического сигнала композитного электрода от концентрации ЩК наблюдается в интервале от 5.0×10^{-7} моль/л до 5×10^{-3} моль/л. Предел обнаружения, рассчитанный по $3s$ -критерию, составляет 3.5×10^{-7} моль/л. Использование амперометрического отклика этого модифицированного электрода в условиях ПИА позволяет понизить нижнюю границу определяемых содержаний ЩК до 5×10^{-7} моль/л, улучшить воспроизводимость измерений, экспрессность и повысить производительность анализа до 180 проб/ч. Предлагаемый способ проточно-инжекционного определения ЩК использовали при анализе урины.

Хромато-масс-спектрометрическое исследование примесного состава высокочистых серы и селена

Лесина Ю.А.¹, Созин А.Ю.²

¹*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

²*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Десятых Российской академии наук, Нижний Новгород, Россия*

E-mail: leiss95@yandex.ru

Высокочистые сера и селен с низким содержанием примесей востребованы для получения оптических материалов. Для разработки и совершенствования технологий глубокой очистки серы и селена важной является информация об их примесном составе. Перспективным методом определения молекулярных примесей в этих веществах является хромато-масс-спектрометрия. Этот метод обладает возможностью быстрого проведения идентификации примесей и определение их на низком уровне концентраций. Целью работы являлось определение примесей в высокочистой сере и селене с использованием метода хромато-масс-спектрометрии. В работе исследовали примесный состав высокочистых серы и селена. Пробоподготовку осуществляли извлечением примесных веществ из газовой фазы при дистилляции серы и селена. Выделенные примеси конденсировали в ампулу из молибденового стекла, охлаждаемую жидким азотом. После извлечения в ампулу к концентрату примесей в качестве матричного компонента добавляли высокочистый гелий. Анализ полученных образцов выполняли с использованием хромато-масс-спектрометра Agilent 6890/MSD 5973N. Пробу из ампулы вводили в прибор с помощью вакуумной системы, выполненной из трубок нержавеющей стали внутренним диаметром 4 мм и включающей мембранные краны. Дозирование пробы в хроматографическую колонку осуществляли автоматическим краном-дозатором Valco EH2C6WEZPH-CER5, функционировавшим в защитной атмосфере гелия. Ее объем составлял 50 мкл. Для разделения примесей использовали капиллярную адсорбционную колонку GS-GasPro 60 м × 0.32 мм с модифицированным силикагелем и колонку с сорбентом политриметилсилилпропином 25 м × 0.26 мм, $df = 0.25$ мкм. В качестве газ-носителя использовали гелий. Его линейная скорость в колонках составляла 30 см/с. Идентификацию примесей проводили сравнением их масс-спектров с масс-спектрами базы данных NIST. В образцах серы установлены примеси постоянных газов, диоксида углерода, углеводородов C₁–C₈, сероводорода, диоксида серы, сероокиси углерода, сероуглерода, закиси азота, эфиров, тиофенов, азотосодержащих углеводородов. В образцах селена установлено присутствие хлорметана, сероуглерода, сероокиси углерода, толуола, бензола, хлорбензола, дихлорбензола, триметилхлорсилана, диметилдифторсилана, этилгидридселена. Концентрации выделенных в газовую фазу из серы и селена примесей составляли 10⁻⁴–10⁻⁶ об.%. Полученные пределы обнаружения примесей находятся в интервале 1·10⁻⁴–5·10⁻⁶ мол.%.

Детоксикация осадков сточных вод

Луннов М.С.,¹ Васина Я.А.²

¹8«Б» класс МБОУ «Школа № 113», Нижний Новгород, Россия

²ФГБОУ ВО «Нижегородский государственный архитектурно-строительный университет», г. Нижний Новгород, Россия

Контроль природных и сточных вод, а также детоксикация осадков сточных вод с тяжелыми металлами являются важной частью мониторинга загрязнений в окружающей среде. Провели анализ мелких рек Нижнего Новгорода: Борзовки (Станкозавод), Левинки (Московский район), Ржавки (Красная Этна), Рахмы (ул. Заречная), Старки (ул. Бринского) с применением комплексных соединений [1]. Органолептически доказано только вода из Борзовки имеет явно выраженный металлический запах. Комплексометрически определена общая жесткость от 3 до 5 мэкв/л, содержания ионов кальция до 200 мг/л, ионов магния до 100 мг/л. По сухому остатку преобладают ионы железа (III). Кислотность в границах рН 7-8,6. Фотометрически определены ионы аммония до 1 мг/л по методике с реактивом Несслера.

Природная L-α-аминоуксусная кислота (глицин) и гидроксид меди (II) использованы, чтобы доказать способность связывания тяжелых металлов нетоксичными природными аминокислотами [2]. Для синтеза хелата был выбран метод количественного анализа осаждение комплекса из раствора, метод кристаллизации (высушивания на воздухе), а состав комплекса доказывали гравиметрическим методом. Соотношение $n(\text{CuO}) : n(\text{Хелата}) = 0,006754 \text{ моль} : 0,006157 \text{ моль} = 1,097 : 1$ доказывает образование хелатного комплекса глицината меди (II) 1:1.



Список литературы

- [1] ГОСТ 2874-88. Вода питьевая. Методы анализа. - Сб. гос. стандартов. - М.: Изд-во стандартов, 1994. - 226с.
- [2] Яблоков, В.А. Исследование термической стабильности глицина и его комплекса с медью / В.А. Яблоков, ИЛ. Смельцова, И.А. Зеляев, С.В. Митрофанова // Приволжский науч. жур. №4. Изд. Н.Новгород: ННГАСУ, 2007 - №4. -С.115-121.

Самомодифицирование сенсора и его контроль с использованием динамической импедансометрии и метода главных компонент

Максютова Э.И., Дубровский Д.И., Тихонова А.А., Сидельников А.В.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

E-mail: elzesh@gmail.com

Импедансная спектроскопия является высокочувствительным методом исследования границ раздела фаз у поверхности электрода.

Задачи исследования электрохимических систем «электрод/раствор» можно разделить на два типа: в одних случаях – это определение физико-химических параметров (константы скорости реакций, коэффициенты диффузии и др.) с последующим установлением природы протекающих процессов, в других случаях – это исследование кинетики процессов.

Известно, что спектры импеданса, регистрируемые при протекании различных процессов в электрохимической ячейке (перенос заряда, полубесконечная квазисферическая диффузия, диффузия в конечной области, нефарадеевские процессы в условиях сорбции/десорбции вещества на электроде и др.) имеют различный вид.

Весьма актуальной проблемой в современной электроаналитической химии является распознавание и количественное определение оптически активных изомеров, биологическая активность которых зависит от строения молекулы. Наибольшую популярность в вольтамперометрическом анализе энантиомеров получила химическая модификация сенсоров с использованием различных супрамолекулярных структур, наночастиц, полимеров, которые придают электродам высокую селективность и перекрестную чувствительность.

В работе представлены результаты вольтамперометрического распознавания энантиомеров L- и D-триптофана с использованием электрохимически активированных сенсоров. Для определения факторов селективности были изучены системы «электрод/раствор» методом импедансной спектроскопии без электрохимической активации и в условиях активации сенсора в растворе энантиомера. С использованием метода главных компонент были построены графики счетов массивов мнимой составляющей импеданса.

Было установлено, что при электрохимической активации сенсора наблюдаются перегибы МГК-кинетической кривой импеданса, которые свидетельствуют об изменении состояния сенсорного слоя в ходе активации в растворе энантиомера.

Работа выполнена при поддержке РФФИ: грант № 17-43-020232 р-Поволжье-а.

**Использование органо-модифицированных электродов
для вольтамперометрического определения
некоторых психоактивных веществ**

Мезенцева О.Л., Слепченко Г.Б.

НИ Томский политехнический университет, г.Томск, Россия

e-mail: Mezentseva.asp@gmail.com

Модификация поверхности электродов играет немаловажную роль для увеличения чувствительности и селективности получаемых аналитических сигналов. Однако, процесс модификации достаточно трудоемок, требует точного подбора условий. Данную проблему можно решить за счет создания, исследования и внедрения в практику новых модифицированных сенсоров с учетом подбора условий спонтанной модификации поверхностей электродов арилдиазоневыми солями, с последующей пришивкой антител против психоактивных веществ. На кафедре биотехнологии и органической химии Томского политехнического университета получены уникальные соли арилдиазония – арендиазоний тозилаты $ArN_2^+TsO^-$ (АДТ), которые хорошо растворимы в воде и ряде органических растворителей, в сравнении с применяемыми ранее тетрафторборатами.

Данная работа посвящена изучению возможности использования органо-модифицированных электродов для вольтамперометрического определения некоторых психоактивных веществ, таких, как бензонал и его галогенпроизводных, в частности о-фторбензонал (галонал), представляющий на данный момент интерес в качестве гепатопротекторного средства в комплексной терапии алкоголизма. Выбраны условия получения органо-модифицированного стеклоуглеродного электрода. Спонтанную модификацию поверхности проводили путем погружения заранее механически обработанной и обезжиренной поверхности стеклоуглеродного электрода в раствор АДТ с концентрацией 0,3 мг/л в течение 10 секунд.

Впервые получены аналитические сигналы производных барбитуровой кислоты с использованием модифицированных различными солями арилдиазония стеклоуглеродного электрода. Вольтамперограммы получены на фоне 0,1М сульфата натрия, режим регистрации - дифференциально-импульсный, развертка катодная в диапазоне потенциалов от -0,8 до -1,8В, со скоростью развертки 50мВ/сек, время накопления на электроде – 30 секунд.

Изучено влияние тозилатных солей, содержащих различные радикалы: -NH₂, -COOH, -NO₂ на аналитический сигнал о-фторбензонала. Получены градуировочные зависимости о-фторбензонала на органо-модифицированных стеклоуглеродных электродах с различным составом тозилатных солей.

Сравнение наклона градуировочных зависимостей показало, что для данной группы органических веществ в качестве модификатора предпочтительнее использовать АДТ с карбоксильным радикалом. Полученная градуировочная зависимость линейна на всем диапазоне определяемых

концентраций. В то же время аналитические сигналы на СУЭ без модификации и с использованием АДТ с $-\text{NO}_2$ радикалом не показало значительных различий, а использование в качестве модификатора АДТ с $-\text{NH}_2$ радикалом неприемлемо при данных условиях и концентрациях определяемого вещества, т.к. отсутствует линейность. Таким образом, осуществлен подбор вида модификатора для определения о-фторбензола.

**Модель кинетики сорбции на торфе
ионов железа(III) и меди(II) из сточных вод**

Дремичева Е.С.¹, Мялкин И.В.²

¹Казанский государственный энергетический университет, Казань, Россия

²Выксунский филиал Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС", Выкса, Россия

E-mail: i.v.myalkin@gamil.com

В связи с ростом промышленного производства происходит увеличение потребления природной воды и, как следствие, повышение объема образующихся сточных вод. Недостаточно очищенные сточные воды являются основным источником загрязнения и засорения естественных водоемов, приводят к существенным физико-химическим изменениям свойств и состава воды, делая ее непригодной для хозяйственного и бытового потребления. Приведем описание модели. Для установления модели, оптимально описывающей сорбцию меди и железа на торфе, сравнивались коэффициенты корреляции для каждого иона. Установлено, что сорбция ионов меди наилучшим образом описывается моделью псевдопервого порядка, а ионов железа – моделью псевдвторого порядка. Полученные новые данные о кинетике сорбции позволяют расширить область представлений о механизме взаимодействия торфа с ионами тяжелых металлов, а именно меди (II) и железа (III). Таким образом, использование торфа в качестве сорбента для доочистки промышленных стоков от ионов тяжелых металлов позволяет значительно снизить их содержание, но снижение до нормативов (ПДК для воды 2-й категории по меди и железу составляет 0,3 и 0,1 мг/дм³ соответственно) для сброса в городскую водоотводящую сеть пока не достигнуто. Установлено, что торф обладает селективностью по отношению к ионам железа и меди, поэтому время контакта должно подбираться индивидуально, так как в некоторых случаях наблюдается процесс десорбции ионов металлов из сорбента обратно в раствор. Полученные результаты обработки экспериментальных данных с помощью уравнений диффузионной кинетики показывают, что механизм процесса сорбции ионов железа (III) и меди (II) торфом достаточно сложен [1]. Общий вклад в результирующую скорость процесса вносят как диффузионные процессы, так и стадия химического взаимодействия между сорбентом и функциональными группами торфа.

Фотометрический контроль содержания арсенат- и арсенит-ионов в питьевой воде с использованием индикаторов различных классов

Наянова Ю.В., Елипашева Е.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: julja.nayanova@yandex.ru

Мышьяк и его соединения в настоящее время рассматриваются как наиболее опасные токсиканты. Максимальное допустимое суточное потребление по оценке ВОЗ составляет 0.05 мг на 1 кг массы тела. Основное поступление мышьяка в окружающую среду связано с хозяйственной деятельностью человека. Значительное количество мышьяка выбрасывается в атмосферу при работе энергетических установок, сжигающих природное топливо. Мышьяк попадает в почву и грунтовые воды с полей, так как некоторые его соединения используют в сельском хозяйстве как средства защиты растений. Поэтому необходимо знать содержание соединений мышьяка для того, чтобы оценить его воздействие на окружающую среду. В этой связи очевидна актуальность разработки высокочувствительных и избирательных аналитических методик определения мышьяка.

В работе рассмотрены индикаторы различных классов, а именно метиленовый голубой (тиазиновый), вариаминовый синий (дифениламиноновый), сафранин Т (феназиновый) и индигокармин (индигоидный). Реакционную способность каждого из определяемых оксоанионов мышьяка по отношению к приведенным красителям оценивали, используя в расчетах относительное количество вступившего в реакцию индикатора. Проведено сравнение возможности отдельного определения арсенат- и арсенит-ионов с использованием вышеуказанных реагентов.

Выполнен анализ минеральной воды «Ессентуки № 17», «Ессентуки № 4», «Новотерская целебная», «Славяновская», «Нарзан», «Красноусольская», «Архыз», «Рычал-Су». Содержание определяемых компонентов соответствует требованиям нормативных документов.

Применение индикаторов сафранина Т, вариаминового синего и индигокармина для фотометрического определения хрома (III) и хрома(VI)

Николаева А.А., Елипашева Е.В.

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

E-mail: nyura.pankratova.94@mail.ru

В настоящее время существенное внимание уделяется разработке методик определения концентраций тяжелых элементов, которые исключают использование вредных веществ. Это непосредственно связано с химическим загрязнением биосферы, нередко приводящим к интоксикациям и ухудшению основных медико-демографических показателей состояния здоровья населения. Один из токсичных элементов, который загрязняет биосферу является хром. Определение хрома - одна из важнейших задач экологического контроля качества питьевой воды, так как соединения хрома, особенно Cr(VI), токсичны и обладают канцерогенным действием.

Существует много методик определения хрома в воде. Не смотря на их хорошую точность, они включают этап пробоподготовки, что увеличивает время анализа и использование дополнительных, нередко, органических реагентов и как правило определяют суммарное содержание хрома.

В качестве реагентов применяли индикаторы – Сафранин Т (класс феназиновых красителей), вариаминовый синий (краситель дифениламинового класса) и индигокармин (относится к индигоидным красителям). С целью нахождения оптимальных условий анализа, эксперимент проводили, варьируя кислотность среды. Разработана фотометрическая методика избирательного определения катионов Cr³⁺ с индикаторами: Сафранином Т при различной кислотности среды; Вариаминовым Синим при pH=2-3 H₂SO₄; Индигокармином при pH=8.4 KOH. Разработанная методика с применением индикатора индигокармина позволяет уйти от использования сильных кислот, влияющих на окружающую среду.

Объектами анализа являлась питьевая вода централизованных систем питьевого водоснабжения. Вследствие этого изучено мешающее влияние макро- и микрокомпонентов питьевой воды. Поведение выбранных нами ионов в принятых условиях эксперимента не оказывают мешающего влияния на определение Cr³⁺ и Cr(VI).

Газохроматографическое определение диэтилфталата в парфюмерии

Николаев А.Р.

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

Научное общество учащихся, Нижний Новгород, Россия

E-mail: noobiksaibot@gmail.com

Диэтилфталат широко применяется в качестве фиксатора запаха парфюмерной продукции, а также в качестве денатурирующей добавки в спирт, используемый в парфюмерно-косметической продукции. Диэтилфталат способен приводить к аллергии, экземе, также это вещество обладает тератогенными, мутагенными, гонадотропными свойствами, приводит к поражению нервной, дыхательной систем, накапливается в организме. Таким образом весьма актуальной является проблема надежного определения диэтилфталата в парфюмерной продукции.

Для определения диэтилфталата нами использован метод газовой хроматографии с пламенно-ионизационным детектированием. Для разделения компонентов пробы использованы капиллярные колонки с неподвижной фазой полидиметилфенилсилоксан. Идентификация аналита проводилась по времени удерживания, которое было определено при хроматографировании образца сравнения – раствора диэтилфталата в гексане. Для избежания попадания воды из образца парфюмерии использована жидкофазная экстракция. Установлено, что наиболее подходящими растворителями для исследования парфюмерных композиций являются алканы: гексан, октан. Для предотвращения попадания высококипящих органических компонентов (масел и др.) в хроматографическую колонку снижена температура испарителя до 170°C. Достигнут предел обнаружения $1 \cdot 10^{-5}\%$, что достаточно для контроля содержания диэтилфталата в исследуемой продукции. Разработанная методика успешно апробирована при анализе реальных образцов парфюмерной продукции. Диэтилфталат обнаружен в образцах реплик духов.

Определение содержания йода и брома в термальных водах Узбекистана

Пардаева Н.Ж., Нормуродов Б.А., Тожиев П.Ж., Касимов Ш.А., Гелдиев Ю.А.

Термезский государственный университет, Термез, Узбекистан

E-mail: sh_kasimov@rambler.ru

Содержание ионов йода и брома определяли из артезианских вод методами потенциометрического титрования [1, 2]. Для деминерализации термальных вод добавляли 20 мл 2,5%-ного раствора известкового молока. Смесь подогревали от 25 до 60°C и порциям добавляли от 1,0 до 2,0% ного раствора силиката натрия при постоянном перемешивании смеси в течение от 5 до 20 минут. В наших исследованиях минерализация воды было 145,68 г/дм³. Далее проводили

соответствующих количественных анализы жидких и твердых фаз. В твердой фазе содержание йода и брома не обнаружено. Состав деминерализованной термальной воды представлен в таблице.

Таблица. Данные состава и свойств термальной воды до и после деминерализации

№	Минеральные соли, г/дм ³	Йод, г/дм ³	Бром, г/дм ³	D, г/дм ³
Термальная вода до деминерализация				
1	145,68	0,0158	0,12834	1,1386
2	119,62	0,0136	0,21364	1,1062
3	121,48	0,0145	0,20462	1,1201
4	222,01	0,0180	0,21915	1,1485
5	132,25	0,0123	0,14813	1,1328
6	145,16	0,0151	0,12344	1,1402
Термальная вода после деминерализация				
1	98,33	0,0172	0,13108	1,1371
2	85,61	0,0139	0,21814	1,1043
3	86,18	0,0150	0,21005	1,1758
4	125,28	0,0192	0,22287	1,1474
5	84,92	0,0129	0,15316	1,1305
6	86,44	0,0159	0,13005	1,1373

Из данных, представленных в таблице видно, что количество йода и брома повышается. Это по йоду от 12,10 мг/дм³ до 19,20 г/дм³ и по бромю от 123,44 до 222,87 г/дм³. Это изменение получается за счет снижения количества солей натрия, магния и железа в воде.

Список литературы

- [1] Нормуродов Б.А., Мавлонов А.С. Подземные промышленные йод, бромные воды // Материалы 1-Республиканской конференции «Зеленая химия» - в интересах устойчивого развития, СамГУ, -2012, -С. 491.
- [2] Ишанходжаев С., Умбаров И.А., Кулматов Р.А., Менгтураев М.М. Исследование окисления ионов йода потенциометрическим методом // Узбекский химический журнал.-2000. -№6. –С. 14-16.

Исследование содержания йода и брома в Сурхандарьинских артезианских водах

Пардаева Н.Ж., Нормуродов Б.А., Касимов Ш.А.,
Тожиев П.Ж., Гелдиев Ю.А.

Термезский государственный университет, Термез, Узбекистан

E-mail: sh_kasimov@rambler.ru

В Узбекистане проявления подземных вод с повышенным содержанием брома и йода связаны с определенными геологическими структурами и вскрыты в пределах платформы (плато Устюрт и Бухара-Каршинский артезианский бассейн) и эциплатформенного орогена (Сурхандарьинский и Ферганский артезианские бассейны). В пределах этих территорий отмечено нефтегазопоявление, но наличие вод с повышенным содержанием микрокомпонентов для месторождений нефти и газа не обязательно. В

определении йодных и бромных ионов можно применять электрохимические методы [1].

Содержание ионов йода и брома определяли из артезианских вод Сурхандарьинского скважин методами потенциометрического титрования, основанными на изменении состояния окисления. При определении бромид ионов в отсутствие других галогенидов перспективным представляется применение стеклянного индикаторного электрода с Na – функцией в паре с обычным – каломельным электродом с солевым мостиком из геля агар-агара, приготовленного на 0,1 М NH₄NO₃. Стандартное отклонение результатов определения брома в органических соединениях, содержащих два галогена (-30 % Br), +0,3 %. Оптимальный интервал определения брома в присутствии хлора задается молярными отношениями Cl: Br от 0,5: 1,5 до 1,7: 0,3 и Br: J от 0,7: 1,3 до 1,8: 0,2. Ограничения в составе смесей по содержанию J⁺ полностью снимаются, если перед определением Br ~ йодид ионы окислить и удалить элементный йод экстракцией или кипячением.

Таблица. Данные электрохимического исследование ионов йода и брома из подземных промышленных вод.

№	pH	φ,В	Среднее содержание йода, мг/л	Среднее содержание брома, мг/л	Минерализация воды, г/л
1	6,8	0,465	15,8	128,34	145,68
2	6,5	0,471	16,3	145,82	126,18
3	6,3	0,487	13,6	213,64	119,62
4	5,9	0,495	11,8	235,94	133,22
5	5,6	0,508	14,5	204,62	121,48

Список литературы

[1] Хасанов А.С., Калабугин Л.А. Йодо-бромные воды Узбекистана. Т.: ФАН. - 1983. -152 с.

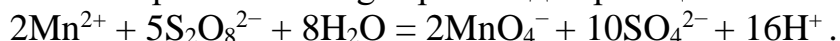
Аспекты применения окислителей при молекулярно-абсорбционном спектроскопическом определении содержания марганца в водах

Петрова О.Н., Лоханина С.Ю., Трубачева Л.В.

Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия

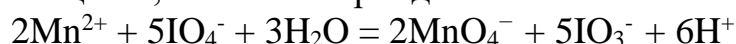
E-mail: swetlei@mail.ru

Большинство методик измерения содержания марганца (II), основанных на применении метода молекулярно-абсорбционной спектроскопии, предусматривают окисление ионов Mn²⁺ до перманганат-ионов. В качестве окислителя в азотнокислой среде в аттестованных методиках [1, 2] применяется персульфат аммония. При добавлении этого реагента к раствору аналита в присутствии катализатора – ионов Ag⁺ происходит реакция окисления:



Высокое значение редокс-потенциала $E_{S_2O_8^{2-}/SO_4^{2-}}^0$ [3] обусловил широкое применение персульфата в количественном химическом анализе. Однако, определение содержания ионов Mn^{2+} невозможно без устранения мешающего влияния ряда компонентов: хлорид-ионов, ионов железа, органических веществ. Процесс пробоподготовки приводит к увеличению продолжительности анализа и снижению точности результатов измерений.

Одним из окислителей, использование которых возможно без устранения влияния мешающих веществ, является периодат калия:



Проведено исследование модельных растворов ионов марганца (II) с концентрациями от 0,1 до 5,0 мг/дм³, с различным содержанием хлорид-ионов (от 10 до 400 мг/дм³), органических веществ от 0,05 до 0,90 мг/дм³ (щавелевой кислоты) и ионов железа (II), (III) с общей концентрацией от 0,05 до 1,0 мг/дм³.

Установлено, что применение в качестве окислителя периодата калия в ходе реализации молекулярно-абсорбционного спектроскопического метода определения содержания ионов марганца (II) имеет ряд существенных преимуществ: растворы имеют устойчивую окраску во времени; отсутствие достаточно трудоемкой и токсичной процедуры пробоподготовки (кипячение пробы с концентрированными серной и азотной кислотами); не требуется устранения хлорид-ионов, органических веществ и ионов железа.

Список литературы

- [1] ПНД Ф 14.1:2.61 – 96 МВИ массовой концентрации Mn^{2+} в природных и сточных водах фотометрическим методом с применением персульфата аммония. - М.ФБУ «ФЦАО», 2004 – 16 с.
- [2] ГОСТ 4974-72 Вода питьевая. Методы определения содержания марганца. – М.: Изд-во стандартов, 1971.- 8с.
- [3] Рабинович В.А., Хавин З.Я. Краткий химический справочник / Под ред. А.А. Потехина и А.И. Ефимова. - Л.: Химия, 1991. - 432 с.

Вольтамперометрическое определение метионина на стеклоуглеродном электроде, модифицированном полиарилефталидом

Проворова Ю.Р., Зильберг Р.А.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

E-mail: provorova-96@mail.ru

Вольтамперометрия - распространенный электрохимический метод исследования и анализа органических соединений. Успехи в этой области электроанализа связаны с появлением нового поколения электродов – химически модифицированных электродов. Химическая модификация электродной поверхности придает ей особые свойства, способствующие повышению чувствительности, селективности и воспроизводимости метода.

Поэтому разработка новых химически модифицированных электродов является актуальной задачей.

При модификации на поверхность электрода наносят химические соединения, полимерные пленки, которые существенным образом изменяют способность последнего к вольтамперометрическому отклику в результате появления специфических свойств.

В настоящей работе для вольтамперометрического определения метионина использовали стеклоуглеродный электрод, модифицированный полиарилефталидом (ПАФ).

Измерения проводили в стандартной трехэлектродной термостатированной (25 °С) электрохимической ячейке с модифицированным ПАФ стеклоуглеродным индикаторным электродом диаметром 2 мм. Используемый в качестве модификатора ПАФ содержит в мономерных звеньях основной цепи полимера чередующиеся дифениленоксидные и дифениленсульфидные фрагменты.

Метионин – 2-амино-4-(метилтио)бутановая кислота окисляется на стеклоуглеродном электроде, модифицированном ПАФ, в диапазоне потенциалов от 1 до 2 В.

Для выбора оптимальных условий эксперимента было изучено влияние рН фонового электролита, скорости развертки потенциала, времени выдерживания электродов в анализируемом растворе, концентрации метионина на величины токов и форму вольтамперограмм.

Максимальные значения токов наблюдаются при $\text{pH} \approx 7$, поэтому в качестве фонового электролита использовали фосфатный буферный раствор $\text{KH}_2\text{PO}_4 + \text{Na}_2\text{HPO}_4$ ($\text{pH} = 6,86$).

Оптимальным временем выдерживания электрода в анализируемом растворе 60 с. При дальнейшем выдерживании процесс адсорбции электроактивного вещества на поверхности модифицированного ПАФ электрода становится равновесным, и величина максимального тока пика окисления метионина практически не изменяется.

Таким образом, нами изучено вольтамперометрическое поведение метионина на модифицированном полиарилефталидом стеклоуглеродном электроде и выбраны оптимальные условия регистрации вольтамперограмм.

Работа выполнена при поддержке РФФИ: грант № 16–13–10257.

Фотометрическое определение сурьмы (III,V) с использованием индикатора сафранин Т

Санышева Д.А., Лутошкина К.А., Елипашева Е.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: orlova_ka@inbox.ru

Человеческий организм получает ежедневно с питьевой водой, определенное количество сурьмы. Она обладает способностью накапливаться в жизненно важных органах: печень, почки, легкие, сердце, головном и спинном мозгах, и может подвергаться биотрансформации с увеличением токсичности. Из-за способности накапливаться в биологических тканях сурьма и ее соединения отнесены к высоко-опасным химическим веществам. Различные формы сурьмы имеют разную токсичность: в частности, Sb(V) и Sb(III). Следовательно, представляет интерес их отдельного определения.

Разработана фотометрическая методика отдельного определения сурьмы(III,V) с использованием индикатора сафранин Т. Найдены оптимальные условия (концентрация реагентов, кислотность среды, аналитические длины волн) и изучены предельные возможности избирательного фотометрического определения Sb(III) и Sb(V) с использованием сафранина Т.

Установлено допустимое массовое отношение сопутствующих ионов в природной воде. Проведен анализ модельных растворов. Относительная погрешность не превышает 10%.

Изучение взаимодействия рутина с ионами хрома (III)

Сарсенбекова А.Ж., Халитова А.И., Кенжетаева С.О., Копжасарова А.Б.,

Жалелов Т.А., Жантурганов Н.Ж.

Карагандинский государственный университет

им. академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан

E-mail: chem_akmaral@mail.ru

В последнее время внимание исследователей в качестве объектов для создания лекарственных средств привлекают природные соединения, сочетающие промышленную доступность их источников с биологической активностью. В этом плане особый интерес представляют природные полифенолы, обладающие широким спектром биологической активности, и которые благодаря наличия в их структуре различных реакционноспособных центров и функциональных групп, имеют широкие синтетические возможности для дальнейших химических модификаций [1]. В этой связи поиск новых веществ с антиоксидантной активностью во многих случаях ведется среди

флавоноидов, представляющих собой многочисленную группу природных полифенолов.

Флавоноиды являются биологически активными соединениями, проявляющими Р-витаминную активность и способными восстанавливать нарушенную проницаемость капилляров, увеличивая их резистентность. Широкий спектр биологической активности и малая токсичность флавоноидов позволяют рассматривать их как наиболее перспективные соединения для практического использования. Предполагается, что биологическая активность органического лиганда может быть увеличена, когда он скоординирован с приемлемым металлом ионом; из-за его возможности вести себя как свободный радикал-акцептор. Это предположение было подтверждено при изучении комплексообразования флавоноидов с ионами многих металлов [2].

В настоящей работе спектрофотометрическим методом исследовано взаимодействие рутина с ионами хрома (III). Как известно, хром относится к числу элементов, жизненно необходимых человеку и животным. Он оказывает потенциальное действие на инсулин и, таким образом, влияет на метаболизм углеводов, липидов и белка. Нами были изучены условия комплексообразования хрома (III) с рутином в водно-этанольных растворах, определены оптимальные условия формирования комплекса.

Полученные результаты могут послужить базой для создания веществ с различными формами физиологической активности.

Список литературы

- [1] В.А. Костюк, А.И. Потапович. Биорадикалы и биоантиоксиданты. Минск: БГУ, 2004. 179 с.
[2] R.F.V. de Souza, W.F. De Giovani. // Redox Report. 2004. №1. P. 97-102.

Возможности ионохроматографического определения хлоруксусных кислот в водных растворах с использованием различных сорбентов, кондуктометрического и диодно-матричного детекторов

Сироткин Р.Г., Елипашева Е.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

E-mail: roman_sirotkin94@mail.ru

Хлоруксусные кислоты являются одними из наиболее опасных загрязнителей питьевых вод. Они относятся к токсикантам антропогенного происхождения. Основные источники попадания хлоруксусных кислот в окружающую среду – предприятия химического синтеза, лакокрасочной, фармацевтической отраслей. Кроме того, они образуются при хлорировании природных вод. Главная проблема при определении хлоруксусных кислот заключается в их разделении с постоянно присутствующими в воде

«матричными» примесями неорганических анионов. Также сложность состоит в низком содержании хлоруксусных кислот в водах различного происхождения, для их надежного детектирования необходима хроматографическая система, обладающая достаточной чувствительностью. Весьма актуальными задачами являлись выбор оптимального сорбента для контроля содержаний хлоруксусных кислот в различных типах воды, а также подбор элюента и способа детектирования.

В работе применяли 2-х колоночный вариант ионной хроматографии с аминокислотным элюентом (содержащим 1 мМ тирозина и 1 мМ гидроксида калия). Разделение моно-, ди- и трихлорацетата осуществляли на различных сорбентах («ANIEKS-N», «ОКА-I», «ХИКС» «КАНК-Аст») в присутствии смеси «стандартных» анионов (фторид-, хлорид-, нитрат-, бромид- и сульфат-ионы). Сопоставлены возможности кондуктометрического и диодно-матричного детекторов.

Предлагается использовать анионит «КАНК-Аст», аминокислотный элюент и кондуктометрическое детектирование для определения хлоруксусных кислот в водах различного происхождения.

Экстракция катионов металлов в системах вода – оксиэтилированный нонилфенол – высаливатель

Станкова А.В.

*Пермский государственный национальный исследовательский университет,
Пермь, Россия*

E-mail: stankova11@mail.ru

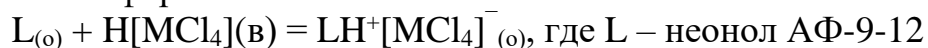
Поверхностно-активные вещества широко используются в экстракции неорганических и органических веществ. При извлечении катионов металлов, анионные ПАВ могут выступать в роли катионообменного экстрагента, а катионные и неионные ПАВ – в роли анионообменного экстрагента.

Образование второй жидкой фазы возможно при нагревании водных растворов оксиэтилированных ПАВ выше определенной температуры (точки помутнения), действия неорганических солей или некоторых органических веществ (высаливание), а также совместного действия температуры и высаливателя. Представляло интерес установить как природа высаливателя и температура осуществления процесса влияет на закономерности распределения катионов металлов в системах вода – оксиэтилированный ПАВ – высаливатель – неорганическая кислота.

В работе исследована экстракция катионов подгруппы галлия (Ga^{3+} , In^{3+} , Tl^{3+}) и Fe^{3+} в системах на основе неанола АФ-9-12 ($C_9H_{19}C_6H_4(OCH_2CH_2)_{12}OH$). Выбор катионов металлов обусловлен их способностью экстрагироваться в виде галогенидных ацидокомплексов. В качестве высаливателей использованы

Na₂SO₄ (при 25°C), NaCl (при 60°C), (NH₄)₂SO₄ (при 25 и 60°C), оптимизацию температурно-концентрационных параметров экстракции осуществляли на основании фазовых диаграмм соответствующих систем вода – неол АФ-9-12 – высаливатель.

Экстракция изученных катионов металлов осуществляется по анионообменному механизму в виде хлоридных ацидокомплексов с участием протонированной формы ПАВ:



Во всех исследованных системах наблюдается количественное извлечение Tl³⁺. In³⁺ экстрагируется количественно в системе с NaCl при концентрации HCl и H₂SO₄ более 0,25 моль/л. В остальных исследованных системах степень извлечения In³⁺ не превышает 40%. Экстракция Ga³⁺ и Fe³⁺ незначительная, лишь при использовании в качестве высаливателя NaCl степень извлечения Ga³⁺ более 80%, Fe³⁺ более 45%.

Проведенные исследования показали, что высаливатели, участвующие в процессе экстракции (NaCl), в большей степени влияют на экстракцию катионов металлов, чем индифферентные высаливатели. Влияние температуры при одном высаливателе незначительно, увеличение высаливающей способности солей приводит лишь к росту степени концентрирования за счет уменьшения объема экстракта.

Анализ пентакарбонила железа методом масс-спектрометрии высокого разрешения с индуктивно связанной плазмой

Стешин М.О.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
ФГБУН Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: maksimka_tan@yahoo.com*

Пентакарбонил железа (ПКЖ) Fe(CO)₅ является исходным веществом для получения высокочистого железа и его оксидов в виде порошков, пленок методом разложения в газовой фазе. Новым применением ПКЖ является его использование в качестве рабочего вещества для получения высокообогащенных изотопов железа. Такое применение ПКЖ требует детального изучения его примесного состава.

Масс-спектрометрия с ионизацией в индуктивно связанной плазме (ИСП-МС), позволяет одновременно определять в пентакарбониле железа более 60 элементов с низкими пределами обнаружения. Наиболее вероятными примесями в ПКЖ являются карбонилы других переходных металлов. Целью работы являлась разработка методики анализа пентакарбонила железа методом ИСП-МС высокого разрешения с низкими пределами обнаружения.

Анализ ПКЖ методом ИСП-МС требует перевода пробы в раствор. Разложение пентакарбонила осуществлялось с помощью раствора 20% HNO_3 . Выделяющийся при этой реакции CO захватывает пары $\text{Fe}(\text{CO})_5$, которые улавливаются раствором концентрированной азотной кислоты, эффективно разлагающей карбонил. Схема установки приведена на рис. 1.

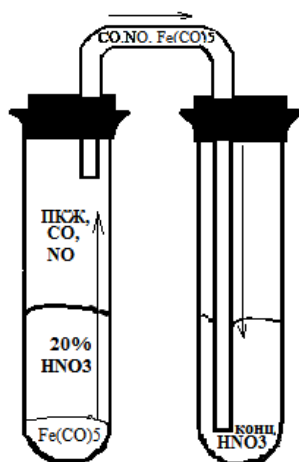


Рис. 1. Схема перевода ПКЖ в раствор.

Использование высокочистых реактивов и посуды из ПФА, позволяет реализовать низкий уровень фона, а двухстадийный перевод проб в раствор, позволяет достигать степень извлечения ПКЖ более 95%.

Пределы обнаружения для широко распространенных примесей в ПКЖ составили $10^{-6} \div 10^{-5}\%$, для менее распространенных примесей Bi , Cd , Co , Nb , Ti , Tl , W - $10^{-7}\%$. При анализе фракций, полученных при дистилляционной очистке, обнаружено концентрирование примеси никеля в легких фракциях, а примесей Cr , Mo и W в тяжелых.

Мультисенсорная система на основе графитового и платинового электродов для распознавания препаратов метионина различных производителей

Тихонова А.А., Галимханова Р.В., Максютова Э.И., Сидельников А.В.
Бакирский государственный университет, Уфа, Россия
E-mail: nastya.girl.2010@mail.ru

Электроаналитическая химия в настоящее время находит широкое применение во многих жизненно важных сферах деятельности человека для определения органических и неорганических соединений в различных объектах, в том числе для анализа фармацевтических препаратов. Наряду с определением содержания микропримесей (нормируемых и ненормируемых) в фармацевтических препаратах, в настоящее время актуальной задачей является

создание высокоэффективных аналитических методов для идентификации биологически активных веществ и лекарственных препаратов, оценки их качества, а также для достижения безопасной среды обитания человека за счет контроля качества медицинских препаратов.

Метионин – алифатическая серосодержащая α -аминокислота, входящая в число незаменимых аминокислот и содержащаяся во многих белках и пептидах. Метионин является незаменимой аминокислотой, т.е. не синтезируется в организме человека, а поступает либо из продуктов питания, либо из лекарственных препаратов и биологически активных добавок.

На современном фармацевтическом рынке все чаще стали появляться фальсифицированные лекарственные препараты, которые могут не только не обладать необходимым фармакологическим действием, но и проявлять побочные действия.

В связи с этим весьма актуальной является разработка методов экспресс-контроля качества и идентификации биологически активных веществ и лекарственных средств, а также скрининг их на присутствие фальсифицированной и контрафактной продукции.

В работе предложена мультисенсорная система на основе непрерывно функционирующих графитового и платинового электродов для вольтамперометрического распознавания лекарственных препаратов метионина различных производителей в условиях электрохимической активации сенсоров.

Представлены визуальные «отпечатки» лекарственных препаратов метионина различных производителей с различным составом вспомогательных веществ, позволяющие отличить их друг от друга по вольтамперометрическим данным.

Установлено, что при 500 циклах активации формировалась чувствительность сенсоров, и они позволили распознать растворы лекарственных средств различных производителей.

Таким образом, электрохимическая активация сенсоров способна повышать чувствительность сенсоров и создавать мультисенсорные системы на их основе для идентификации лекарственных препаратов различных производителей.

Работа выполнена при поддержке РФФИ: грант № 17-43-020232 р-Поволжье-а.

Методы очистки воды от ионов меди

Трус И.Н., Гомеля Н.Д., Бортник Е.В., Воробьева В.И.

Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт имени Игоря Сикорского», Киев, Украина

E-mail: inna.trus.m@gmail.com

Сегодня достаточно остро стоит вопрос загрязнения воды тяжелыми металлами. Среди металлов-токсикантов выделена приоритетная группа, к которой относятся: кадмий, медь, никель, ртуть, свинец, хром и цинк как наиболее опасные для здоровья человека [1]. Одним из основных источников загрязнителей сточных вод тяжелыми металлами является гальванические производства. Удаление ионов тяжелых металлов из воды возможно различными методиками: термическими, химическими (реагентными), адсорбционными, ионообменными. Применение этих методов зависит от масштабов производства, концентрации металлов в сточной воде, а также от их стоимости [2]. Наиболее распространенным методом, который применяется для удаления ионов тяжелых металлов является реагентный способ.

Традиционная методика реагентной очистки воды основана на использовании сульфида натрия. Однако в результате его применения сульфид начинает гидролизовать, выделяется сероводород (данный процесс нельзя устранить даже добавлением щелочи к растворам). В качестве альтернативы сульфида натрия для осаждения и извлечения ионов меди из исследуемого раствора было решено использовать ферроцианид калия. Ведь, как известно, ферроцианиды тяжелых металлов имеют очень низкую растворимость.

Рабочие растворы были приготовлены на основе водопроводной и дистиллированной воды. К растворам добавляли сульфат меди (II) с концентрацией 5 мг/дм³, раствор ферроцианида калия с концентрациями 1-15 мг/дм³. Потом пробы перемешивали, отстаивали в течение двух часов, фильтровали на фильтре «синяя лента» и измеряли остаточные концентрации меди (II), которые оказались выше уровней ПДК. Для увеличения седиментационных свойств твердой фазы использовали катионный флокулянт Zetag - 7547. Брли раствор CuSO₄ объемом 150 см³ и концентрацией 5 мг/дм³, добавляли ферроцианид калия с концентрацией 5 и 7 мг/дм³. Пробы отстаивали 2 часа и время от времени перемешивали. Затем добавляли флокулянт с концентрациями 1; 3; 5; 10 мг/дм³, и ждали еще 30 минут. Далее делали все то же, что и ранее. После проведения данных исследований удалось установить, что при соблюдении всех необходимых условий для проведения процесса, степень очистки может достигать 98%.

Список литературы

- [1] Будников Г. К. // Соросовский образовательный журнал. 1998. №5. С. 23.
[2] Сомин В.А., Полетаева М.А., Комарова Л.Ф. // Ползуновский вестник. – 2008. №3. С.205-209.

**Ингибирование атмосферной коррозии металлов композициями
на основе отходов растительного сырья**

Воробьева В.И., Чигиринец Е.Э., Трус И.Н., Фатеев Ю.Ф., Фроленкова С.В.
*Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический
институт имени Игоря Сикорского», Киев, Украина*
E-mail: inna.trus.m@gmail.com

Летучие ингибиторы коррозии давно и успешно используются для защиты металлов во влажных атмосферах [1]. Рациональное использование промышленных отходов является одним из перспективных направлений при создании новых средств противокоррозионной защиты, в том числе и летучих ингибиторов атмосферной коррозии. Поэтому целесообразным является исследование в качестве ЛИАК изопропанольных экстрактов растительного сырья: жмыха, кистей гроны и косточки винограда, шрота рапса, подсолнуха, шишек хмеля. В общем случае эффективность летучих ингибиторов определяется не только ингибирующими свойствами, т.е. способностью соединений изменять кинетику коррозионно-электрохимических реакций, но так же летучестью и распределением вещества между водной и газовой фазами. Поэтому эффективность ЛИАК оценивали в первом случае в условиях периодической конденсации влаги, после предварительной обработки металлических образцов ЛИАК, в течение 21 суток. Высокая растворимость ЛИАК, с одной стороны, обуславливает легкость насыщения капли сконденсировавшейся воды его парами и превращения ее, таким образом, в раствор ингибитора, с другой - облегчает десорбцию ЛИАК в воду и вытеснение его с поверхности металла.

Анализ полученных данных свидетельствует, что все исследуемые растительные экстракты обеспечивают высокий уровень противокоррозионной защиты, как в условиях периодической конденсации влаги после предварительной обработки стали ЛИАК, так и в случае экспонирования стали над водными растворами ЛИАК. Степень защиты стали в первом случае для кистей винограда, шрота рапса и шишек хмеля составляет 75,2, 90,05 и 70,6 %, соответственно. При исследовании эффективности по второй методике, степень защиты несколько выше и составляет 77,3, 92,3 и 73,0 % соответственно, для выше перечисленных растительных экстрактов. Таким образом, очевидно изопропанольные экстракты, за счет высокого давления насыщенных паров над растворами способны создавать в поверхностной влаге концентрации, близкие к объемным, за время меньшее, чем необходимо для формирования на стали очагов коррозии, что приводит к высокой эффективности противокоррозионной защиты [1].

Список литературы

[1] Chygyrynets O.E., Vorobyova V.I. // Chemistry and Chemical Technology. 2014. V. 8. №. 2. P. 235–242.

**Определение матричного состава стекол системы Ge–Se–Te
методом АЭС-ИСП**

Фадеева Д.А.

*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: atstsky@yandex.ru*

Халькогенидные стекла системы Ge–Se–Te являются перспективными объектами оптического материаловедения. Характеристики стекол сильно зависят от содержания матричных элементов. Содержание макрокомпонентов в стеклах обычно определяют методами рентгенофлуоресцентного и рентгеноспектрального анализа. Данные методы требуют идентичных анализируемым пробам наборов образцов сравнения, приготовление которых является трудоемкой сложной задачей. Поэтому актуальной является разработка новых методик определения макрокомпонентов в халькогенидных стеклах.

Цель работы – исследование возможностей метода АЭС-ИСП для определения макрокомпонентов в высокочистых стеклах Ge–Se–Te с высокой точностью.

Для приготовления растворов сравнения использовали элементарные Ge, Se и Te чистотой $6N$, взвешенные с относительной погрешностью не более 0.1 %. Образцы сравнения готовили совместным растворением навесок германия, селена и теллура в смеси азотной (68 мас. %) и фтористоводородной (40 мас. %) кислот, очищенных дистилляцией без кипения. Во избежание бурного протекания реакций и, следовательно, потерь элементов, процесс растворения проводили последовательно. Пробы стекол Ge–Se–Te растворяли в смеси $\text{HNO}_3 + \text{HF}$ при нагревании.

В рамках разработки методики определения матричных компонентов выявлены факторы, влияющие на точность результатов анализа. Выбран оптимальный рабочий диапазон концентраций макрокомпонентов в растворе (10–100) мкг/мл , в котором градуировочные функции линейны, а относительное стандартное отклонение аналитического сигнала минимально ($S_r \approx 0.002$); выбраны аналитические линии Ge, Se, Te и условия анализа, обеспечивающие максимальную точность результатов. Проанализированы и сформированы методические подходы, позволяющие повысить точность результатов определения матричных элементов по сравнению с характерной для метода АЭС-ИСП точностью. Градуировочные зависимости строили в относительных концентрациях. Установлено, что методом АЭС-ИСП можно определять матричные компоненты в стеклах системы Ge–Se–Te с относительной погрешностью 0.002–0.003. По достигнутым метрологическим характеристикам определения макрокомпонентов стекол метод АЭС-ИСП не уступает рентгеновским и не требует наборов твердых адекватных образцов сравнения.

Вольтамперометрическое определение триптофана на стеклоуглеродном электроде, модифицированном полиариленфталидом

Мурзина К.А., Хаблетдинова А.И., Яркаева Ю.А., Зильберг Р.А.
Башкирский государственный университет, Башкортостан, Россия
E-mail: aigulik17@mail.ru

Триптофан (β -(β -индолил)- α -аминопропионовая кислота - незаменимая аминокислота. Поскольку триптофан относится к числу незаменимых аминокислот — его дефицит в рационе, может вызывать симптомы, характерные для белковой недостаточности: потерю веса и нарушение роста у детей. В сочетании с недостатком в пище ниацина, отсутствие триптофана также может вызывать пеллагру, заболевание, которое характеризуется дерматитом, диареей, деменцией и приводящее к смерти. Это заболевание встречается довольно редко, однако дефицит триптофана может легко к нему привести. Также дефицит триптофана в диете может привести к снижению уровня серотонина. Низкий уровень серотонина связан с депрессией, раздражительностью, беспокойством, нетерпеливостью, импульсивностью, неспособностью сосредоточиться, перееданием, ухудшением памяти и бессонницей. Поэтому очень важен контроль триптофана в пищевых продуктах, фармацевтических препаратах, БАДах и живых организмах, в особенности, человеческих.

В настоящей работе для вольтамперометрического определения триптофана использовали стеклоуглеродный электрод, модифицированный полиариленфталидом (ПАФ). Полиариленфталиды отличаются высокой термостойкостью, хемостойкостью, хорошей растворимостью, пленкообразованием, механической прочностью, кроме того, они проявляют специфические электрофизические свойства. Это уникальное сочетание химических, физических и механических свойств полиариленфталидов делает их перспективными полимерными материалами для модифицирования электродов.

Было изучено электрохимическое поведение триптофана на стеклоуглеродном электроде, модифицированном ПАФ. В условиях анодной вольтамперометрии на фоне фосфатно-буферного раствора триптофан окисляется (рис.1) в диапазоне потенциалов 1–2 В с переносом двух электронов. Максимальные значения токов наблюдаются при $\text{pH} \approx 7$, поэтому в качестве фонового электролита использовали фосфатный буферный раствор $\text{KH}_2\text{PO}_4 + \text{Na}_2\text{HPO}_4$ ($\text{pH} = 6,86$).

Линейные вольтамперограммы растворов с различным содержанием определяемого соединения, полученные на модифицированном ПАФ СУЭ при скорости развертки потенциала 1 В/с. Видно, что с увеличением концентрации триптофана максимальные токи пиков на линейных вольтамперограммах возрастают.

**Хиральные сорбенты на основе супрамолекулярных структур
циануровой кислоты с индуцированной хиральностью**

Шайхитдинова Ю.Ф., Сухарева Д.А., Гуськов В.Ю.
Башкирский государственный университет, Уфа, Россия
E-mail: ms.shaihitdinova94@gmail.com

Многие природные соединения, обладающие важными биологическими и фармацевтическими свойствами, являются оптически активными. Одним из методов разделения энантиомеров является хиральная хроматография.

Любое хиральное распознавание требует, чтобы на поверхности был избыток одного из энантиомеров. Несколько лет назад в литературе появились данные о возможности некоторых гетероциклических соединений образовывать на поверхности твердых тел супрамолекулярные структуры с наличием одного из двух гомохиральных доменов. К таким соединениям относится циануровая кислота. Сама молекула циануровой кислоты ахиральна, однако ее супрамолекулярная структура на поверхности твердых тел при самосборке формирует гомохиральные домены. При отсутствии внешнего воздействия количество право- и левовращающих доменов одинаково. Возникает вопрос, возможно ли внешним воздействием индуцировать формирование только одного хирального домена и получить поверхность с макроскопической хиральностью. Целью данной работы было создание хирального сорбента на основе супрамолекулярных структур на основе циануровой кислоты.

Исходной поверхностью была выбрана графитированная термическая сажа, модификатором служила циануровая кислота.

Для того, чтобы модифицирование поверхности исходного адсорбента циануровой кислотой приводило к формированию на поверхности Carboblack C слоев супрамолекулярной структуры с преобладанием одного из видов хиральных супрамолекулярных кластеров применялось индуцирование хиральности с помощью механического размешивания раствора.

Исследование проводилось на хроматографе Цвет-500М с пламенно-ионизационным детектором. Диапазон исследуемых температур варьировался от 60 до 120°C. В качестве аналитов были выбраны 2-хлорбутан и 2-бутанол. Из полученных хроматограмм был рассчитан фактор селективности.

Было обнаружено, что исследуемый адсорбент проявляет энантиоселективность к молекулам аналита в широком интервале температур. Наилучшее разделение было достигнуто для 2-хлорбутана при 70°C ($\alpha=2,26$). Времена удерживания и параметры разделения уменьшаются с увеличением температуры, что закономерно для хиральной хроматографии и связано с различием в энергии адсорбции энантиомеров. Таким образом, мы показали, что внешнее воздействие механическим размешиванием раствора индуцирует хиральность супрамолекулярных структур циануровой кислоты на поверхности графитированной термической сажи.

**Ресурсосберегающие технологические процессы водоподготовки
с использованием водорастворимых полимеров**

Шестак И.В., Воробьева Е.В.

Институт общей и неорганической химии НАН Беларуси,

Минск, Республика Беларусь

E-mail: Irishka.Shastak@gmail.com

Одним из основных источников загрязнения окружающей среды являются сбрасываемые в природные водоемы промышленные сточные воды, в которых содержатся нефтепродукты, тяжелые металлы, взвеси, загрязнители, образующиеся после продувки и промывки оборудования и др. Основной путь уменьшения сброса в водоемы загрязненных вод – повторное их использование в водооборотных системах промышленных предприятий при условии реагентной водоподготовки с использованием ингибиторов солеобразования для стабилизации безосадочного режима работы водооборотных циклов.

Критериями выбора ингибиторов солеобразования для водооборотных систем с циркуляцией промышленных сточных вод являются высокая эффективность ингибирующего действия в щелочных растворах, индифферентность по отношению к примесям, а также экологическая безопасность, которая определяется отсутствием токсичности и способностью к биоразложению. Среди широкого спектра используемых в настоящее время ингибиторов данным критериям отвечают водорастворимые полимеры.

В работе проведена оценка эффективности полиакриловой кислоты (ПА) с различной молекулярной массой (ММ): 1000 (ПА₁), 2100 (ПА₂), 4000 (ПА₄), 5000 (ПА₅), 8000 (ПА₈), 15000 (ПА₁₅); полиметакриловой кислоты с ММ 4000 (ПМА₄); сополимера акриловой и малеиновой кислоты с ММ 3000 (СП₃). Эффективность ингибиторов оценивали сравнением индукционного периода осадкообразования (I), который определяли на модельном лабораторном оборудовании при одинаковых условиях для всех полимеров. Установлено, что наиболее высокие значения I, что свидетельствует о высокой эффективности ингибирующего действия, наблюдаются при введении ПА₄ и ПА₅. Молекулы полимеров, содержащих карбоксильные группы, способны встраиваться в кристаллическую решетку карбонатов, изменяя размер и форму растущего кристалла, что препятствует росту и агрегации кристаллических частиц. ПМА₄ и СП₃ также увеличивают индукционный период, однако в меньшей степени по сравнению с ПА, что может быть обусловлено более низким относительным содержанием карбоксильных групп в полимерной цепи.

Таким образом, с точки зрения экономии природных водных ресурсов, целесообразно применение сточных вод в водооборотных системах. Для предотвращения осадкообразования в таких системах целесообразно использовать водорастворимые полимеры, эффективно ингибирующие кристаллизацию солей.

Спектрофотометрическое определение жесткости воды

Шолина А.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: dz.nastenka@mail.ru*

Среди систем теплоснабжения котельные остаются, самым востребованным вариантом получения энергии и тепла. Одной из причин аварий на котельных является нарушение водоподготовки – недостаточное смягчения воды. Таким образом, жесткость воды является важнейшим показателем качества воды, применяемой в системах теплоснабжения. При высокой жесткости воды на поверхностях теплообмена будет появляться накипь, ухудшающая перенос тепла и существенно снижающая эффективность работы котла [1]. Цель настоящей работы – повышение чувствительности и точности определения жесткости воды за счет применения спектрофотометрического метода.

В имеющихся в доступных научных источниках публикациях не найдено информации о спектрофотометрических методиках определения общей жесткости, они нацелены на раздельное определение ионов кальция и магния, в то время как общая жесткость определяется их совокупностью. В настоящей работе предложена методика спектрофотометрического определения общей жесткости воды с использованием метилтимолового синего.

Оптимизировали условия определения ионов кальция и магния в индивидуальных растворах. Определили молярные коэффициенты светопоглощения, состав и константы устойчивости продуктов реакции метилтимолового синего с кальцием и магнием. Установили, что оптимальные условия для определения ионов кальция и магния разные. В связи с этим для дальнейшей работы выбрали длину волны изобестической точки. В оптимальных условиях построили градуировочные зависимости для определения ионов кальция, магния и общей жесткости. Рассчитали пределы обнаружения C_{\min} и минимальную определяемую концентрацию C_n для ионов кальция, магния и общей жесткости. Подтвердили пригодность последней зависимости для определения общей жесткости воды с разным соотношением ионов кальция и магния. Изучили мешающее влияние ионов алюминия и железа на результаты определения общей жесткости, при этом установили, что в тех концентрациях, в которых алюминий и железо могут присутствовать в воде, они не будут влиять на результаты анализа. Определили общую жесткость дистиллированной и водопроводных вод. Полученные результаты хорошо согласуются с данными визуального титрования.

Список литературы

[1] Семенова И.В., Суровяткина Д.Г. // Современные проблемы науки и образования. 2015. Т. 2.

Получение оксида хрома(III) из отработанных хроматсодержащих растворов

Эркабаев Ф.И., Исмаилова Н.А.

Институт общей и неорганической химии АН РУз, Ташкент, Узбекистан

На предприятиях для получения соединений металлов производится окисление и гидрометаллургическая обработка различных руд [1]. В промышленности хром тоже производится вышеуказанным методом. Сырьем для производства Cr_2O_3 служит хромит или хромистый железняк. Щелочное разложение хромита, сопровождающийся окислением, позволяет получить растворимые соединения шестивалентного хрома, а Cr_2O_3 получают его восстановлением [2]. В промышленности Cr_2O_3 используется для получения хрома алюминотермическим способом, а также в качестве пигмента, катализатора, полирующего материала, для окраски стекла, керамики и др. целей. Как известно, загрязнение электролитов хромирования приводит их в негодность, которые очень трудно поддаются регенерации. Экологически необходимо и экономически выгодно использование отработанных растворов для получения товарных материалов.

Результаты исследований по восстановлению ионов шестивалентного хрома до хрома(III) из отработанных хроматсодержащих растворов и выделения гидроксида хрома(III) с последующим получением оксида хрома(III), подтверждают целесообразность применения данной технологии для переработки высокотоксичных отработанных растворов хрома. Согласно разработанному нами временному технологическому регламенту, переработка отработанного хроматсодержащего раствора и выделения оксида хрома(III) состоит из следующих стадий: загрузка отработанного хроматсодержащего раствора с концентрацией хромат ионов около 50 г/л и нейтрализация едким натром; выделение осадка гидроксида железа и восстановление шестивалентного хрома древесными опилками в присутствии серной кислоты; осаждение ионов SO_4^{2-} в присутствии $\text{Ca}(\text{OH})_2$, с последующим выделением в виде $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$; одщелачивания и выделение $\text{Cr}(\text{OH})_3$, последующей сушкой и обжигом; измельчение и затаривание продукта.

В таблице приведены результаты анализов полученного пигмента хрома из отработанных хроматсодержащих растворов.

Таблица. Физико-химические показатели полученного пигмента хрома.

№ п/п	Наименование показателей	Образец	Марка т, ГОСТ 2912-79
1	Внешний вид	зеленый порошок	зеленый порошок
2	Содержание Cr_2O_3 , % (не менее)	98	98
3	Примеси нерастворимые	не более 1 %	не более 1 %
4	рН водной вытяжки	6,5	6-8
	Укрывистость, г/м ² , не более	14,5	14

Список литературы

- [1] Ноорганик материаллар кимёвий технологияси. А.А.Исмаилов, Т.Л.Атакузиёв, Н.П.Исмаилов, Ф.М.Мирзаев.- Т.: Узбекистан, 2002.- 251 с.
 [2] М.Е.Позин. Технология минеральных солей.- Л.: химической литер, 1961.-425 с.

Влияние природы органического восстановителя на степень восстановления ионов шестивалентного хрома

Эркабаев Ф.И.

Институт общей и неорганической химии АН РУз, Ташкент, Узбекистан

С целью определения влияния природы древесных опилок для сравнения эффективности были проведены опыты по восстановлению ионов шестивалентного хрома из отработанных гальванических растворов с применением в качестве восстановителя древесных опилок сосны, березы, тополя, стебли хлопчатника, а также лигнина хлопчатника.

Опыты проводились при следующих условиях: содержание ионов шестивалентного хрома в исходном растворе - 50 г/л; количество исходного хроматсодержащего раствора - 200 мл; количество органического восстановителя 10 г; количество добавляемой концентрированной серной кислоты - 15 г, без предварительного нагрева с перемешиванием, продолжительность – 1,5 часа. Количественное определение содержания ионов хрома проводили фотоколориметрическим методом. Результаты экспериментов приведены в таблице.

Таблица. Влияние природы органического восстановителя на степень восстановления ионов шестивалентного хрома ю ($V_{p-ра} = 200$ мл, ДОП-10 г, $H_2SQ_4=15$ г, $\tau = 1,5$ ч).

Органический восстановитель	Исходная концентрация хрома в р-ре, мг/л			Конечная конц-я хрома в р-ре, мг/л		
	Cr ⁶⁺	Cr _{общ}	Cr ³⁺	Cr ⁶⁺	Cr _{общ}	Cr ³⁺
Опилки сосны	44500	50000	5500	46,0	49954	49800
Опилки березы	44500	50000	5500	64,5	49891	49760
Опилки тополя	44500	50000	5500	50,0	49910	49850
Лигнин хлопчатника	44500	50000	5500	29340	49890	18005
Стебли хлопчатника	44500	50000	5500	148,0	49880	49710

Примечание. За счет потери хрома в процессе восстановления небольшое отклонение концентрации $C_{Cr_{общ}}$ до восстановления и после него.

Из таблицы следует, что природа органического восстановителя существенно не влияет на степень восстановления шестивалентного хрома. Во всех рассмотренных случаях, кроме лигнина, содержание ионов шестивалентного хрома в результате реакции понизилась с 50000 мг/л до 46-148 мг/л.

СЕКЦИЯ 4

Теоретическая и квантовая химия, фотохимия и спектроскопия

Conformational properties of cyanocyclohexane: gas electron diffraction (GED) and quantum chemical calculations (QC)

Kuzmina L.E.¹, Tran Dinh Phien², Shlykov S. A.¹¹Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Ivanovo, Russia²Institute of Research and Development, Duy Tan University, 03 Quang Trung, Da Nang, Viet Nam

E-mail: Luba-8may@mail.ru

The geometry and vibrational calculations for cyanocyclohexane **1** were performed using DFT (with B3LYP, B3LYP-D3 and M062X functionals) and MP2 methods with the 6-311G** and cc-pVTZ basic sets. The DFT methods in combination with both, B3LYP and B3LYP-D3, functionals resulted in the relative Gibbs energies from ca. 0.3 to 0.7 kcal/mol that corresponds to some domination of the Eq conformer, 59 to 77 mol.%. The two basis sets, 6-311G** and cc-pVTZ, applied with the M06-2X functional yielded in slightly opposite estimates, 41 and 51 mol.%, respectively. At the same time, all the second order perturbation theory calculations coincide in Ax conformer preference, 60-70 mol.%. From the GED data, the ratio of the conformers at T=287 K was found to be Eq:Ax=62(8):38(8)%, corresponding to $\Delta G^\circ=0.28(19)$ kcal/mol.

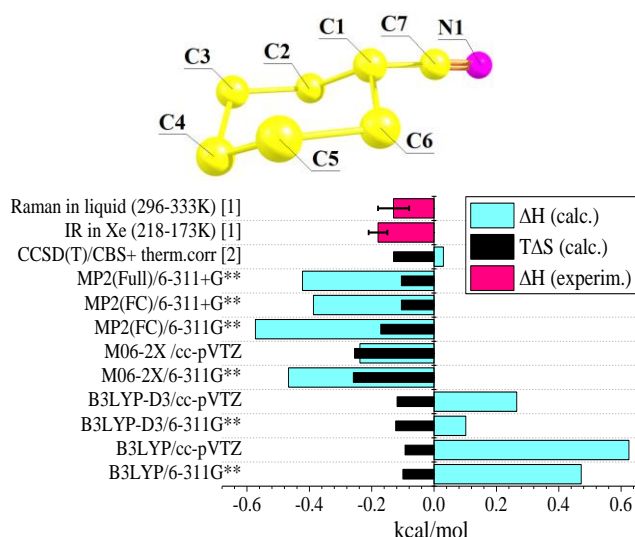
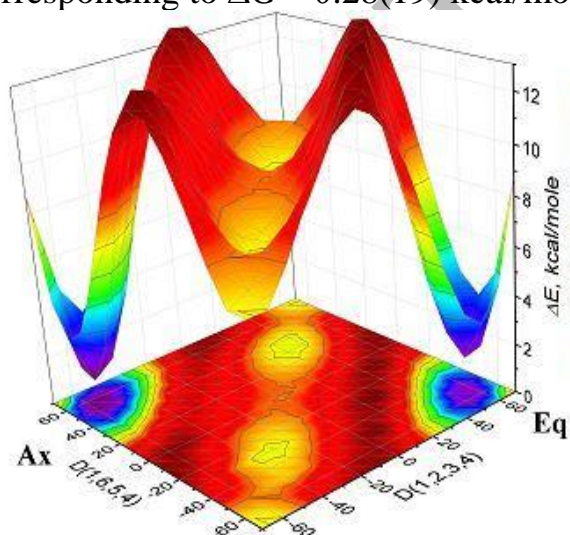


Fig. 1. 3-D presentation of calculated (M062X/6-311G**) relative energy surface of **1**, shown as a function of two dihedral angles.

Fig. 2. Calculated and experimental thermodynamic parameters of gaseous **1** at room temperature.

The axial-to-equatorial pathway energy surface of **1** obtained by scan of two opposite dihedral angles of the ring is plotted in Fig.1. Contributions of calculated

and experimental enthalpies $\Delta_r H$ and calculated $T\Delta_r S$ of gaseous **1** at room temperature to Gibbs energies $\Delta_r G$ for $E_x \leftrightarrow A_x$ equilibrium are compared in Fig.2.

References

- [1] Durig J.R., Ward R.M. et al. // *J. Mol. Struct.* 2010. V. 967(1). P. 99-111.
 [2] Belyakov A.V. et al. // *J. Mol. Struct.* 2017. V. 1132. P. 149–156.

Quantum chemical studies on corrosion inhibition effect of 2-Methyl-5-(propan-2-yl)phenol

V.I Vorobyova¹, O.E. Chygyrynets¹, M.I. Skiba², Pichachi V.V.¹

¹*National Technical University of Ukraine «Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute», Kyiv, Ukraine.*

²*Ukrainian State Chemical-Engineering University, Gagarin Ave. 8, Dnipro, Ukraine, 49005*

E-mail: vorobyovavika1988@gmaim.com

A systematic approach is needed for characterization of the interaction between the organic inhibitor molecule and the metal or alloy. Such an approach would include elucidation of the interaction by molecular orbital (MO) calculations of the relevant parameters. There are many quantum chemical studies on the inhibition of corrosion with an organic inhibitor [1,2]. The adsorption capacity of carvacrol was evaluated using quantum chemical calculations. Electronic parameters of reactivity are calculated. The electronic parameters calculated include: the highest occupied molecular orbital and lowest unoccupied molecular orbital are often referred to as the HOMO and LUMO, respectively, energy gap, electronegativity, hardness, electrophilicity index.

Table 1. Calculated quantum chemical properties for the 2-Methyl-5-(propan-2-yl)phenol

Molecule	I	A	χ , (eV)	η , (eV)	S	ω , (eV)	ε	ΔE	ΔN
Carvacrol	9.269	-0.235	4.5171	4.7524	0.21	1.236	0,809	0.00025	0.24

The quantum-chemical calculations were carried out to predict the adsorption activity of the developed components. The calculated results show that all the molecules (constituting different extract major constituents) have high propensity for donating electrons, have low $\Delta\varepsilon$ and η (high reactivity), are good nucleophiles which is characterized by low values of ω , and the energy change associated with the charge transfer to the mild steel surface ΔE , are all favourable (negative). Thus, from Table 1, all the molecules studied act as electron acceptors except ΔE which acts as electron donor. If $\Delta N < 3.6$, the inhibition efficiency enhances with increasing electron-donating ability to the metal surface as in Lukovits's work. Since Carvacrol is more electronegative than the densely packed steel surface, the charge would flow to Carvacrol from steel surface ($\Delta N < 0$), which has been verified by the explicitly calculated charge transfer.

References

1. Gökhan Gece. The use of quantum chemical methods in corrosion inhibitor studies. *Corrosion Science*, 50, (2008), 2981–2992.
2. V.I. Vorob'iova, O.E. Chyhyrnyets', O.I. Vasyl'kevych, Mechanism of formation of the protective films on steel by volatile compounds of rapeseed cake, *Materials Science*, 50, (2015), 726–735.

Синтез композитных катализаторов на основе соли железа на цеолите

Ахметкаримова Ж.С.¹, Мулдахметов Ж.Х.¹, Аринова А.Е.¹, Ордабаева А.Т.¹, Исабекова Д.С.²

¹Институт органического синтеза и углехимии РК, Караганда, Казахстан

²Карагандинский государственный технический университет,

Караганда, Казахстан

E-mail: zhanarnf@mail.ru

Нанесение активных добавок на поверхность носителя проводили в два этапа: насыщение цеолита солью железа с последующим удалением влаги и термическая обработка при высоких температурах.

Для получения композитных железосодержащих катализаторов сульфат железа ($\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$) растворяли в дистиллированной воде и добавили к синтетическому цеолиту. Перемешивание проводили в течение 60 минут при комнатной температуре и упарили на роторном испарителе. Модифицирование полученного образца проводили в условиях термической обработки (при температуре 750°C , длительность 30 минут) с целью перевода металлов в оксидную форму. В ходе, которого происходит формирование каталитически активных центров, с образованием оксида железа (гематит) [1].

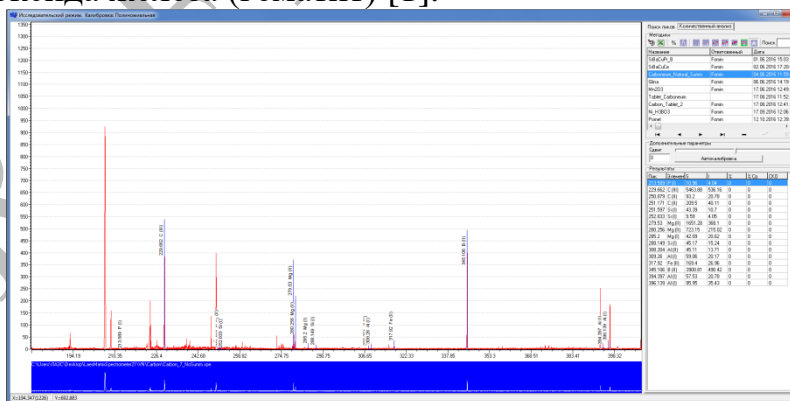


Рисунок 1. Атомно-эмиссионный спектр катализатора $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{ZSM}$

Анализируя атомно-эмиссионный спектр катализатора $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{ZSM}$ следует, отметить наличие таких элементов как, алюминий, кремний формирующих пористую структуру цеолита. Несмотря на незначительное количество нанесенного железа ($>5\%$), спектр демонстрирует присутствие его (пик 317,92; площадь (S) 169,40; наличие (I) 26,96%) на носителе.

Таким образом, согласно данным атомно-эмиссионной спектроскопии гематит нанесен на цеолит, представлен в виде катализатора Fe₂O₃/ZSM.

Список литературы

[1] Ахметкаримова Ж.С. Теория и практика переработки тяжелого углеводородного сырья Центрального Казахстана. Караганда: «Форма Плюс», 2016. 365 с.

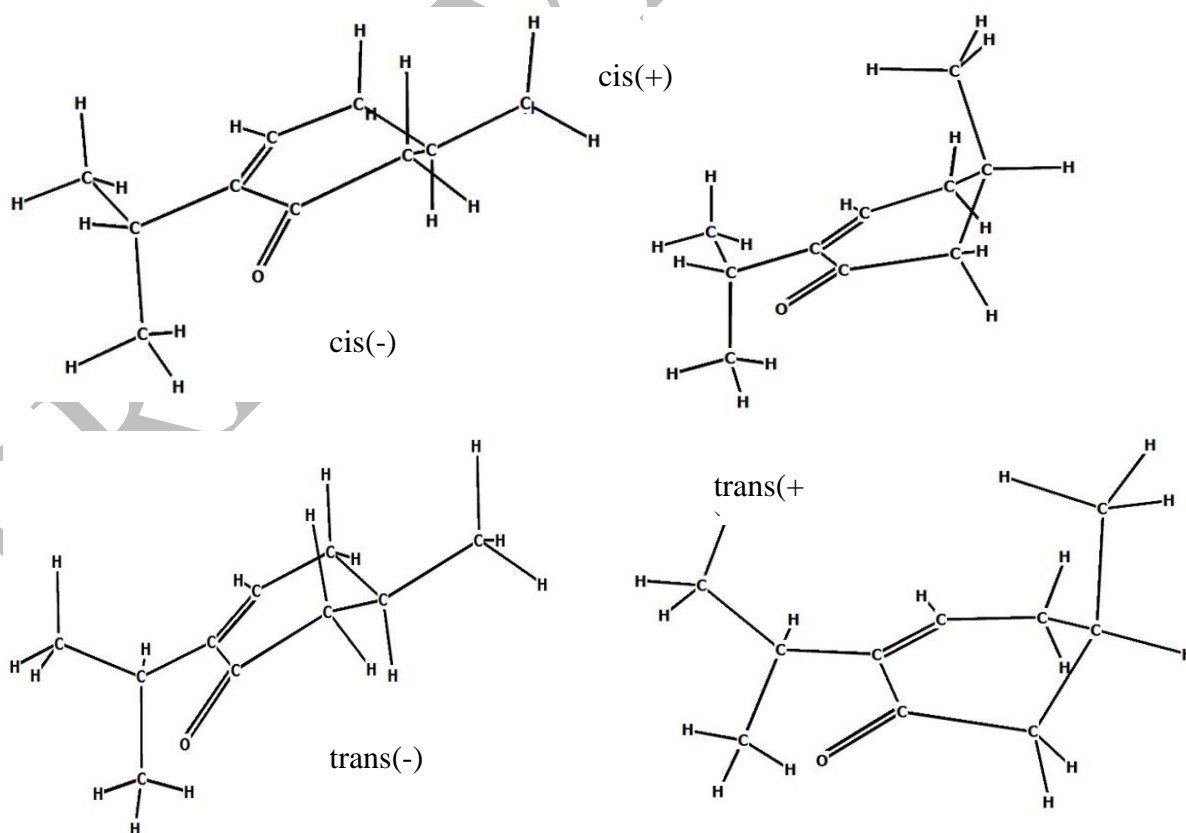
Оценка конформационной заселенности (R)-4-ментенола

Белкина Н.В.¹, Вакулин И.В.¹, Вакулина А.И.²

¹Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

²Уральский государственный экономический университет, Екатеринбург, Россия

Показано, что (R)-4-ментенон, являющийся удобным исходным для синтеза целого спектра феромонов, обладает необычной реакционной способностью в сравнении с другими еновыми системами. Необычное поведение (R)-4-ментенона может быть связано с ограниченностью вращения *i*Pr группы и ее стерическим влиянием на доступность электронов С=С связи. С использованием квантово-химических неэмпирических приближений различного уровня сложности оценена относительная устойчивость конформаций (R)-4-ментенона.



Самым устойчивый конформер cis(-) характеризуется экваториальной ориентацией метильной группы в 4 положении и диэдральным углом *iPr* группы HCCC(=O) 24°. Очевидно при таком значении угла *iPr* группа оказывает наиболее экранирующее влияние на C=C связь в цикле по сравнению с конформерами trans(+) и trans(-).

Таблица 1.

	ΔG^{298} , кДж/моль			
	cis(+)-cis(-)	trans(+)-trans(-)	trans(+)-cis(+)	trans(-)-cis(-)
B3LYP/6-31G(d,p)	5.96	5.88	1.06	1.13
MP2/6-31G(d,p)	2.40	2.27	0.10	0.16
B3LYP/6-311++G(2d,p)	5.41	5.60	2.57	2.37
MP2/6-311++G(d,p)	8.31	8.00	1.54	1.85
G4 (MP2)	4.04	3.79	2.64	2.87

Все остальные конформеры менее выгодны, однако разница в энергии между ними составляет не более 8,3 кДж/моль, в зависимости от использованного метода расчета. Интересно отметить, расчетные значения полученные в методах DFT наиболее близки к результатам высокоточного композитного метода G4(MP2).

Таблица 2. Заселенность конформеров при 298К по данным расчетов в G4 (MP2)

Конформер	Cis(-)	Trans(-)	Cis(+)	Trans(+)
w (%)	63.4	19.9	12.4	4.3

Несмотря на незначительную разность энергий, заселенности указанных конформеров заметно отличаются. Так доля наиболее устойчивого конформера Cis(-) почти в 2 раза больше суммарной доли всех остальных конформеров и в 3 раза больше ближайшего по устойчивости Trans(-), но обладающего иной ориентацией *iPr* группы (Табл.2).

Зависимость конформационной заселенности (R)-4-ментанола от температуры

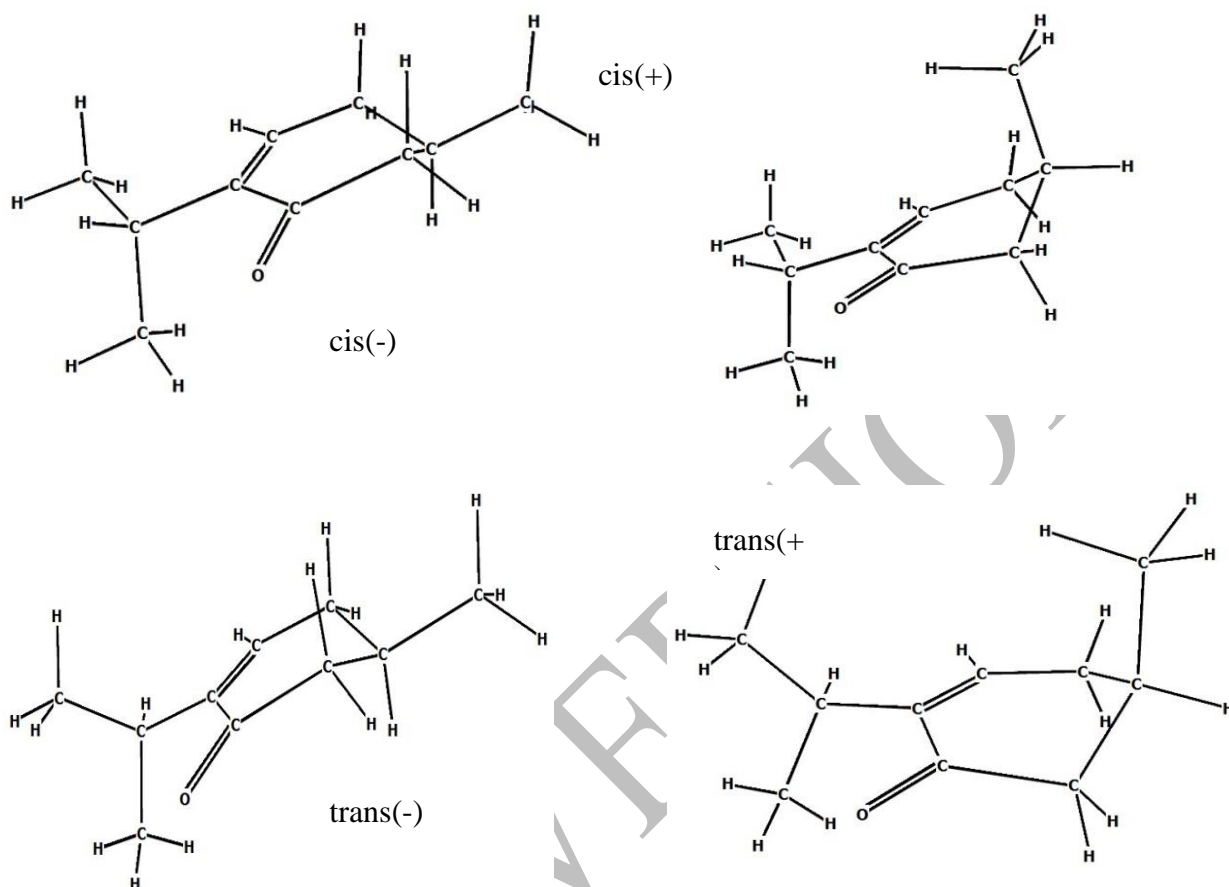
Белкина Н.В.¹, Вакулин И.В.¹, Талипова Г.Р.¹, Вакулина А.И.²

¹Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

²УРГЭУ, Екатеринбург, Россия

По данным ЯМР спектроскопии в спектрах ¹³C сигналы конформеров (R)-4-ментенона проявляются при понижении температуры. Поэтому с использованием квантово-химического приближения B3LYP/6-311++G(2d,p)

рассмотрена зависимость заселенности конформеров (R)-4-ментенона от температуры.

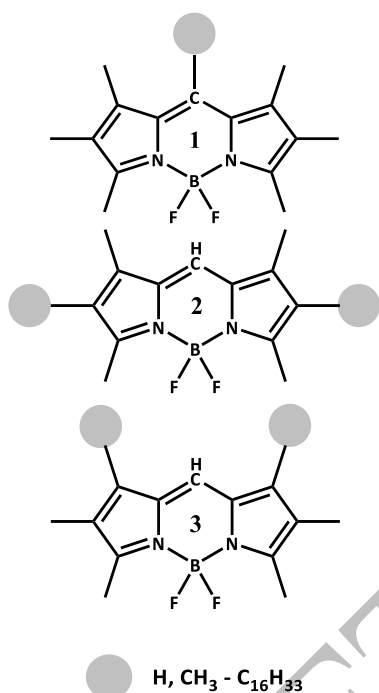


Относительная устойчивость других конформеров отличается от cis(-) не более чем на 7,97 кДж/моль по данным V3LYP/6-311++G(2d,p). При этом с ростом температуры разность в заселенности указанных конформеров уменьшается. Интересно отметить, что в первую очередь увеличивается доля конформера cis (+), в котором метильная группа занимает аксиальное положение. Доля конформеров trans(+) и trans(-) в которых угол *iPr* группа повернута на 180° мало изменяется с ростом температуры (табл.1).

Таблица 1. Заселенность конформеров при разных T (K) по данным расчетов в V3LYP/6-311++G(2d,p)

Конформер	Доля. %				
	243	273	298	323	373
Cis(-)	67.11	62.69	59.42	56.08	50.47
Trans(-)	24.98	26.13	26.65	26.98	26.99
Cis(+)	6.74	9.29	11.58	13.56	17.51
Trans(+)	1.18	1.90	2.54	3.37	5.03

Сравнительный квантово-химический анализ эффектов алкилирования BODIPY

Бочаров П.С.^{1,2}, Ксенофонтов А.А.¹, Гусева Г.Б.¹, Антина Е.В.¹¹ Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия² Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, РоссияE-mail: bochpavl@gmail.com

Результаты экспериментальных исследований показали, что на фотофизические свойства BODIPY значительное влияние оказывают позиции присоединения, разветвленность и длина C_n-цепи алкильных заместителей. Для изучения эффектов алкилирования нами проведено квантово-химическое исследование серии алкилзамещенных BODIPY, различающихся позициями присоединения – по *ms*-спейсеру (1), β -(2) или α -(3) положениям пиррольных ядер неразветвленных алкильных групп с длиной C_n-цепи, варьируемой в диапазоне n = 0–16. Решаемые задачи сводились к: 1) определению наиболее выгодной конформационной формы 1-, 2- и 3-BODIPY (в зависимости от угла поворота (0–360°) C_n-цепи относительно BODIPY домена; 2) выбору метода расчета (B3LYP/6-311++G(d,p),

CAMB3LYP/6-311++G(d,p), wB97X-D/6-311++G(d,p)), дающего наиболее точное описание геометрического и электронного строения 1-, 2- и 3-BODIPY в сопоставлении с данными PCA; 3) геометрической оптимизации (wB97X-D/6-311++G(d,p)) 1-, 2- и 3-BODIPY; 4) TDDFT анализу (PCM(CH₂Cl₂)/CAMB3LYP/6-311++G(d,p)) для предсказания практически значимых спектрально-люминесцентных свойств и возможностей применения 1-, 2- и 3-BODIPY в качестве флуоресцентных красителей в различных областях науки и техники. Анализ результатов геометрической оптимизации систем 1-, 2- и 3-BODIPY показал, что удлинение C_n-цепи в α - и β -положениях не только приводит к стабилизации структуры BODIPY, но и делает молекулы 2- и 3-BODIPY менее полярными и более планарными по сравнению с 1-BODIPY. Данные TDDFT анализа позволяют заключить, что увеличение длины C_n-цепи *ms*-заместителя вызывает рост значения ВЗМО–НСМО щели 1-BODIPY по сравнению с 2- и 3-аналогами, что может свидетельствовать о большем фотофизическом потенциале *ms*-алкилзамещенных BODIPY. Полученные результаты представляют интерес для предсказания и направленного синтеза новых BODIPY структур с практическими значимыми свойствами.

Выражаем благодарность Межведомственному суперкомпьютерному центру РАН (г. Москва) за предоставленные ресурсы на кластере MBC 100K.

Моделирование УФ-вид спектров поглощения β -дикетонатов дифторида бора с ароматическими заместителями

Гельфанд Н.А., Вовна В.И.

Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия

E-mail: gelfand.na@dvfu.ru

β -Дикетонаты дифторида бора, или ОВО флуорофоры, – борорганические координационные соединения, известные своими фотофизическими и фотохимическими свойствами, в частности, яркой люминесценцией и синтетическими возможностями [1,2], жидкокристаллическими и механохромными свойствами [3,4].

Интерпретация оптических спектров соединений этого класса посредством время-зависимого метода функционала плотности (TDDFT) широко распространена, однако выбор функционала не столь очевиден. Включение в структуру молекулы заместителей с протяженной ароматической системой обуславливает локализацию высшей занятой молекулярной орбитали на таком заместителе и появление переходов с полным либо частичным внутримолекулярным переносом заряда. Для описания переходов такого типа популярны функционалы с низким процентным содержанием Хартри-Фоковского обмена (B3LYP, PBE0) зачастую оказываются неприменимыми [5].

В рамках данной работы мы проанализировали влияние заместителя на форму и положение спектральных полос ряда комплексов дифторида бора с ароматическими группами, используя функционалы B3LYP и CAM-B3LYP. В комплексах с двумя и более интенсивными электронными переходами оказывается проблематичным воспроизвести соотношение интенсивностей переходов и энергетический интервал между ними. Тем не менее, функционал CAM-B3LYP позволяет относительно верно учесть соотношение интенсивностей и форму спектральных полос.

Квантово-химические расчеты выполнены с использованием ресурсов ЦКП «Центр данных ДВО РАН» (г. Хабаровск, <http://lits.ccfefbras.ru>), ЦКП «Дальневосточный вычислительный ресурс» ИАПУ ДВО РАН (г. Владивосток, <https://cc.dvo.ru>), кластера ИХ ДВО РАН (<http://www.ich.dvo.ru/super.html>).

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 16.5904.2017/8.9).

Список литературы

- [1] S. Guieu, J. Pinto, V.L.M. Silva, J. Rocha and A.M.S. Silva // *European J. Org. Chem.* 2015. V. 2015. P. 3423–3426.
- [2] H. Maeda and Y. Naketa // *Org. Biomol. Chem.* 2008. V. 6. P. 3091–3095.
- [3] I. Sánchez, J. A. Campo, J. V. Heras, M. Cano and E. Oliveira // *Inorganica Chim. Acta.* 2012. V. 381. P. 124–136.
- [4] X. Sun, X. Zhang, X. Li, S. Liu and G. Zhang // *J. Mater. Chem.* 2012. V. 22. P. 17332.
- [5] A.D. Laurent, D. Jacquemin // *Int. J. Quantum Chem.* 2013. V. 113. P. 2019–2039.

**Квантово-химическое исследование кинетики реакций окисления
сернистых радикалов оксидом азота(IV)**

Губочкин Н.С., Фомичев Д.А.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: nekit-kat@yandex.ru

Загрязнение атмосферы сероводородом и его производными является серьёзной экологической проблемой, потому большой интерес представляют реакции окисления этих веществ, протекающие в атмосфере, а также возможность воспроизведения данных реакций искусственно.

Кроме того, процесс окисления серосодержащих органических веществ оксидом азота(IV) на данный момент не изучен до конца, хоть и существует несколько гипотез в отношении механизма данных реакций.

Целью данной работы является квантово-химическое исследование описанных ниже реакций на основе имеющихся экспериментальных данных [1], [2].

Для проведения расчетов использована реакция следующего типа:



где R = H, Met, Ph и др.

В ходе работы были использованы такие методы как: ROHF, DFT, CCSD с различными базисными наборами для поиска лучшего соответствия экспериментальным данным. В результате обнаружено переходное состояние, соответствующее прямому переносу атома кислорода от атома азота к атому серы. Данный процесс характеризуется высокой энергией активации и потому протекает медленнее других возможных процессов, приводящих к аналогичному результату, поэтому необходимо предварительное фотохимическое воздействие на реагирующую систему, чтобы провести её именно по данному пути.

Список литературы

- [1] Scott C. Herndon and A. R. Ravishankara // J. Phys. Chem. A, 110, 106-113, 2006.
[2] G. Black // J. Chem. Phys., 80, 1103, 1984.

Квантово-химическое моделирование гидрирования фенилацетилена на поверхности палладия

Данилов Ф.О., Шамсиев Р.С.

*Московский технологический университет (ИТХТ им. М.В. Ломоносова),
Москва, Россия*

E-mail: fillcolens@mitht.ru

Очистка промышленно получаемого стирола от примеси фенилацетилена является практически важным процессом. Эффективным способом очистки ацетиленовых примесей является селективное гидрирование фенилацетилена до стирола. Совершенствование технологии селективного гидрирования невозможно без детальной информации о механизме процесса. В настоящем докладе представлены результаты квантово-химического моделирования механизма гидрирования молекулы фенилацетилена в стирол на поверхности палладия.

Расчеты выполнены в скалярно-релятивистском методе функционала плотности DFT-PBE с использованием базиса L11. В качестве модели активного центра катализатора рассмотрен двухслойный плоский кластер Pd₃₀ с 4 поверхностными атомами H.

Исходными структурами для изучения стадий гидрирования фенилацетилена были выбраны адсорбционные комплексы, в которых ацетиленовая группа молекулы фенилацетилена координирована по π, σ -типу.

Рассмотрены следующие возможные маршруты реакции гидрирования:



Согласно расчетам, маршрут C, связанный с 1,2-гидридным переносом в адсорбированной молекуле фенилацетилена маловероятен по причине образования термодинамически устойчивого интермедиата PhCH=C. Маршруты A и B имеют близкие активационные параметры, однако расчеты частоты оборотов катализатора свидетельствуют о предпочтительности маршрута A.

Исследование выполнено при поддержке РФФИ (грант № 16-33-60190).


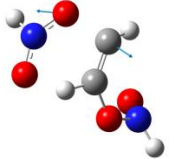
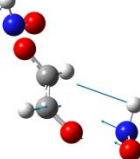
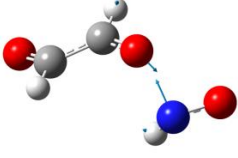
Квантово-химическое изучение реакции фотохимического окисления ацетилена нитросоединениями

Дегтяренко А.И., Минасян Ю. В., Плехович С.Д., Зеленцов С.В.
 Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
 Нижний Новгород, Россия
 E-mail: anastasiadegtyarenko@mail.ru

Изучение механизма реакции окисления алкинов нитросоединениями провели с помощью программы Gaussian03 методом uB3LYP/6-31g+(d) на примере реакции взаимодействия ацетилена с HNO_2 в триплетном состоянии.

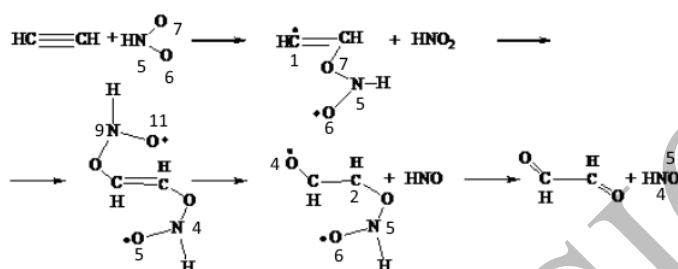
Установили, что окисление протекает в 4 этапа. Определили энергии активации исследуемых реакций. Рассчитали геометрии переходных состояний по значениям мнимых частот.

Таблица 1. Схемы реакций окисления алкинов нитросоединениями и переходные состояния со значениями мнимой частоты

$\text{HC}\equiv\text{CH} + \text{H}-\text{N}(\text{O}\cdot)_2 \longrightarrow \text{HC}=\text{CH}(\text{O}\cdot)-\text{N}(\text{O}\cdot)_2$	 $239.67i \text{ cm}^{-1} (\text{T1})$
$\cdot\text{CH}=\text{CH}(\text{O}\cdot)-\text{N}(\text{O}\cdot)_2 + \text{H}-\text{N}(\text{O}\cdot)_2 \longrightarrow \text{HC}=\text{CH}(\text{O}\cdot)-\text{N}(\text{O}\cdot)_2 + \text{H}-\text{N}(\text{O}\cdot)_2$	 $1083.39i \text{ cm}^{-1} (\text{T1})$
$\text{HC}=\text{CH}(\text{O}\cdot)-\text{N}(\text{O}\cdot)_2 \longrightarrow \text{HC}=\text{CH}(\text{O}\cdot) + \text{H}-\text{N}(\text{O}\cdot)_2$	 $126.59i \text{ cm}^{-1} (\text{T1})$
$\text{HC}=\text{CH}(\text{O}\cdot)-\text{N}(\text{O}\cdot)_2 \longrightarrow \text{HC}(\text{O})-\text{CH}(\text{O}) + \text{H}-\text{N}(\text{O}\cdot)_2$	 $480.05i \text{ cm}^{-1} (\text{T1})$

Изучение механизма окисления алкинов нитросоединениями на примере реакции взаимодействия ацетилена с HNO₂

Дегтяренко А.И., Минасян Ю. В., Плехович С.Д., Зеленцов С.В.
 Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
 Нижний Новгород, Россия
 E-mail: anastasiadegtyarenko@mail.ru



В данной работе описана реакция окисления алкинов нитросоединениями. Методом uB3LYP/6-31g+(d) изучили механизм окисления на примере реакции взаимодействия ацетилена с HNO₂ в триплетном состоянии. В работе изучались этапы окисления, геометрия переходных состояний и были определены энергии активации, а так же спиновая плотность участников реакции.

Таблица 1. Распределение спиновой плотности и геометрические структуры переходных состояний и продуктов реакций

	Переходное состояние	Продукты
1.	1.C=0.933085 4.N=0.439091 5.O=0.482103 6.O=0.310671	1.C=0.966063 5.N=0.445870 6.O=0.475859 7.O=0.322927
2.	2.C=0.465848 5.N=0.444975 6.N=0.381936 7.O=0.522876 8.O=0.371409	4.N=0.424040 5.O=0.462259 9.N=0.425810 11.O=0.489689
3.	5.N=0.426804 6.N=0.448572 7.O=0.459206 8.O=0.443106	2.C=0.591103 3.O=0.143826 4.O=0.293407 5.N=0.405798 6.O=0.535612
4.	2.C=0.570003 4.O=0.245888 5.N=0.660691 6.O=0.667940	4.N=0.448572 5.O=0.443106

Исследование продуктов конверсии SiF₄ в SiCl₄ методом ИК-фурье-спектроскопии

Ермаков А.А., Сенников П.Г., Трошин О.Ю.

*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,
Нижний Новгород, Россия*

E-mail: ermakovarthur93@yandex.ru

В некоторых современных технологиях получения оптоволоконных и полупроводниковых устройств предполагается использование тетрахлорида кремния, обогащенного изотопом кремний-28. Представляет интерес изучение реакции хлорирования тетрафторида кремния, для получения тетрахлорида с заданным содержанием изотопа кремния-28. В качестве хлорирующего агента может быть использован трихлорид алюминия. Однако среди продуктов реакции



можно ожидать появления примесей фтор(хлор)силанов $^{28}\text{SiF}_3\text{Cl}$, $^{28}\text{SiF}_2\text{Cl}_2$, $^{28}\text{SiFCl}_3$, кислородных производных $^{28}\text{Si}_2\text{Cl}_6\text{O}$, $^{28}\text{Si}_2\text{F}_6\text{O}$, хлоро- и фтороводорода

Для оптимизации условий проведения процесса (1) и определения указанных соединений в смеси использовался метод ИК-Фурье спектроскопии.

Для разделения компонентов смеси, полученной по (1), использовался метод перегонки. Было показано, что в верхней части аппарата для перегонки концентрируются не вступивший в реакцию $^{28}\text{SiF}_4$ и примеси CO_2 и HCl . Были зарегистрированы примеси фтор(хлор)силанов $^{28}\text{SiFCl}_3$, $^{28}\text{SiF}_3\text{Cl}$, и $^{28}\text{SiF}_2\text{Cl}_2$. В средней фракции эти примеси присутствовали в значительно меньших количествах. Понижение температуры проведения реакции (1) приводит к появлению в спектрах интенсивных полос, относящихся к фторхлорсиланам. Было показано также, что увеличение мольной доли $^{28}\text{SiF}_4$ сопровождается увеличением интенсивности полос, относящихся к $^{28}\text{SiF}_3\text{Cl}$ и $^{28}\text{SiF}_2\text{Cl}_2$.

Орто-дисульфо- и дикарбоновые кислоты бензола - сильные протонодоноры

Игнатова А.В., Иванов С.Н., Лапыкина Е.А., Гиричева Н.И., Федоров М.С.

Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

E-mail: nastya_ignatova97@mail.ru

Ароматические дикислоты, содержащие сульфо- и карбоксильные группы, представляют практический интерес в качестве кислотных катализаторов, а также протонодоноров для полимерных мембран в химических источниках тока. Эти соединения обладают повышенной

протонодонорной функцией и могут быть «привиты к полимерной матрице» из нафiona, который используется в качестве протонообменной мембраны [1].

Методом B3LYP/cc-pVTZ (пакет Gaussian 09) проведена оценка геометрического строения конформеров 1,2-бензолдикарбоновой (1,2-БДКК) и 1,2-бензолдисульфоновой (1,2-БДСК) кислот и их депротонированных форм, рассчитаны энергии Гиббса ($\Delta_r G_{298}^\circ$, ккал/моль) депротонирования кислот в газовой фазе и водной среде (расчет РСМ). Для *орто*-замещенных дикислот характерно образование конформеров двух типов: с внутримолекулярной водородной связью (ВВС) - наиболее устойчивые и без ВВС – менее устойчивые (табл.1).

Таблица 1. Значения энергии Гиббса ($\Delta_r G_{298}^\circ$, ккал/моль) депротонирования кислот в газовой фазе и водной среде

1,2-БДКК (с ВВС)		1,2-БДКК		1,2-БДСК (с ВВС)		1,2-БДСК	
$(\Delta_r G_{298}^\circ)_I$		$(\Delta_r G_{298}^\circ)_I$		$(\Delta_r G_{298}^\circ)_I$		$(\Delta_r G_{298}^\circ)_I$	
газ	вода	газ	вода	газ	вода	газ	вода
309.4	266.5	330.4	278.4	299.7	256.1	304.6	257.0
$(\Delta_r G_{298}^\circ)_{II}$		$(\Delta_r G_{298}^\circ)_{II}$		$(\Delta_r G_{298}^\circ)_{II}$		$(\Delta_r G_{298}^\circ)_{II}$	
437.0	299.9	416.3	285.2	405.0	277.2	383.4	264.7

В 1,2-БДКК образуется сверхсильная водородная связь ($r(\text{O}-\text{H}) = 1.188 \text{ \AA}$), что приводит к увеличению энергии, необходимой для отрыва протона во второй стадии депротонирования. В случае 1,2-БДСК такой анион не образуется, так как *орто*-группы SO_3H не лежат в одной плоскости.

Образование ВВС облегчает отрыв первого протона, но значительно затрудняет отщепление второго от ионов кислот. Величины $(\Delta_r G_{298}^\circ)_{II}$ конформеров с ВВС для второй стадии выше, чем для конформеров той же молекулы без ВВС. Судя по наименьшей величине $\Delta_r G_{298}^\circ = 264.7$ ккал/моль более сильными кислотными свойствами в воде обладают конформеры 1,2-БДСК без ВВС.

Список литературы

- [1] Sakai H., Tokumasu T. // J. Phys. Chem. A 2014. **118**. P. 275. Shimoaka T., Wakai C., Sakabe T., Yamazaki S. Hasegawa T. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2015. **17**. P. 8843.

Особенности плазменного усиления люминесценции мезогенных комплексов лантаноидов

Карякин М.Е., Князев А.А. Галяметдинов Ю.Г.

Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия

E-mail: belgesto@list.ru

Одним из перспективных путей увеличения эффективности люминесценции соединений лантаноидов является использование поверхностных плазмонов металлических наноструктур. Однако, из-за специфического характера поверхностного плазмона, металлические наноструктуры, на расстояниях от 1 до 10 нм, могут уменьшать люминесценцию хромофора. Поэтому для уменьшения эффекта гашения и усиления эффективности люминесценции используют спейсеры для отделения хромофора от наноструктур. Однако, наличие диэлектрического слоя (спейсера) между люминесцентным материалом и металлическими наноструктурами препятствует созданию электролюминесцентных устройств с люминесценцией усиленной поверхностным плазмоном.

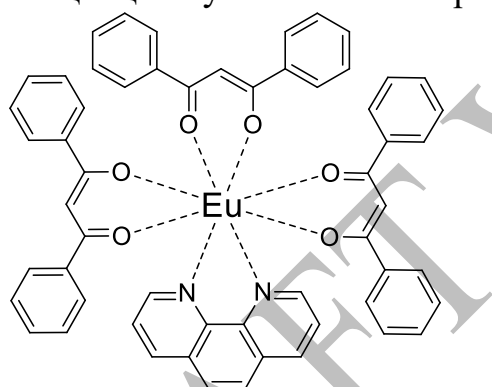


Рис. 1 – Структура комплекса $\text{Eu}(\text{CPDK}_{3-\text{Ph}})_3\text{Phen}$

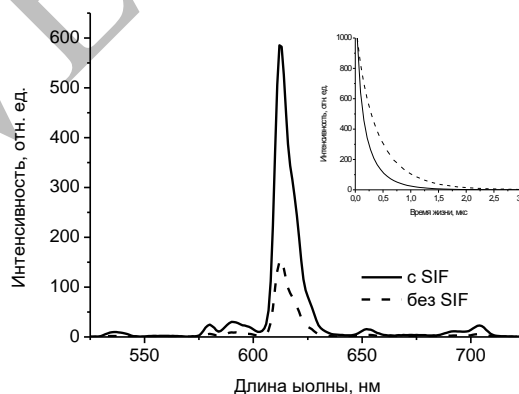


Рис. 2 – Спектры люминесценции пленок комплекса $\text{Eu}(\text{CPDK}_{3-\text{Ph}})_3\text{Phen}$ на SIF и стекле (вставка – время жизни комплекса)

Для создания наногетероструктур с эффективным плазмонным резонансом, методом восстановления из раствора были получены подложки с наноразмерными кластерами серебра, которые имели широкий пик поглощения с максимумом в области 420 нм. Методом напыления при вращении на полученные наногетероструктуры были нанесены тонкие пленки комплекса $\text{Eu}(\text{CPDK}_{3-\text{Ph}})_3\text{Phen}$ (Рис. 1). Было обнаружено увеличение интенсивности люминесценции комплекса европия(III) в 4 раза и скорости излучательного перехода в 8 раз поверхностным плазмоном наночастиц серебра, без использования дополнительных слоев спейсеров (рис. 2).

Работа выполнена при финансовой поддержке грант РФФИ №17-03-00258_a

Компьютерное моделирование молекулы феноксиметилпенициллина

Касымова М.С., Абуляисова Л.К.

Казахдинский государственный университет им. Е. А. Букетова,

Казахстан

E-mail: maral.kasymova.77@mail.ru

В рамках программы ChemBio3D Ultra 14.0 смоделирована структура молекулы природного антибиотика из группы пенициллина [1, 2] - феноксиметилпенициллина $C_{19}H_{24}N_2O_5S$ (рисунок 1).

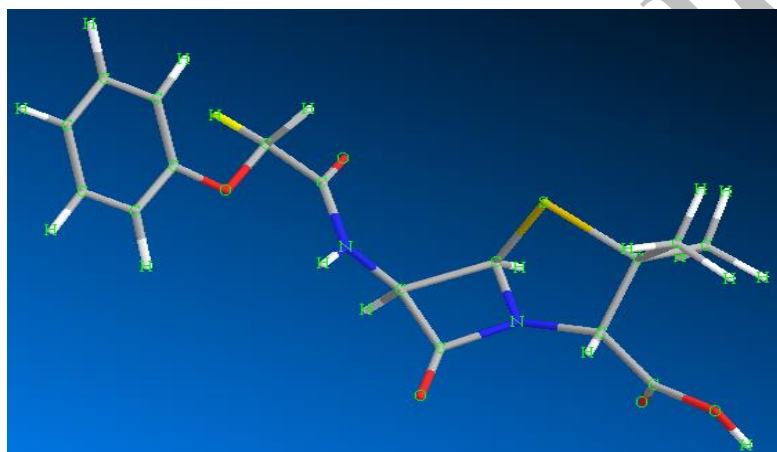


Рис.1. 3D-структура молекулы феноксиметилпенициллина.

Значения компонентов общей стерической энергии молекулы в минимуме энергии, определенных методом силового поля MM2, приведены в таблице.

Таблица 1. Значения вкладов в стерическую энергию молекулы феноксиметилпенициллина (метод MM2)

Энергия	Значение, ккал/моль
Растяжение валентных связей	3,58
Изгиб валентных углов	48,90
Внутреннее вращение	7,48
не-1,4-ван-дер-ваальсовские взаимодействия	-9,27
1,4-ван-дер-ваальсовские взаимодействия	12,76
Диполь-дипольные взаимодействия	-8,40
Полная стерическая	54,37

Список литературы

- [1] Егоров И.С. Основы учения об антибиотиках. - М.: Наука, 2004. - 528 с.
 [2] Хоменко А.И., Шадурская С.К. Антибиотики: химиотерапия инфекционных заболеваний. - Ростов на Дону: Феникс, 2002. - 92 с.

Диагностика тромбоэмболии легочных артерий методом инфракрасной спектроскопии сыворотки крови

Красникова О.В., Гордецов А.С.

Нижегородская государственная медицинская академия,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: lala-g@yandex.ru

Большими темпами увеличивается число гемодинамически значимой тромбоэмболии легочных артерий (ТЭЛА), которая в настоящее время является одним из самых распространенных острых потенциально жизнеугрожающих и инвалидизирующих состояний и стойко доминирует в структуре сердечно-сосудистой заболеваемости и причин смертности населения развитых стран мира [1]. Поэтому актуальным остается вопрос диагностики данной патологии.

Методом инфракрасной спектроскопии сыворотки [2] крови было обследовано 40 больных на базе ГБУ «Специализированная кардиохирургическая больница» (г. Нижний Новгород). Пациенты были разделены на 2 группы: А – группа контроля, В – пациенты с ТЭЛА. В качестве диагностических параметров выбрали отношения высот пиков полос поглощения друг на друга [3]: 1160/1165 (Параметр 1), 1165/1070 (Параметр 2), 1165/1150 (Параметр 3), 1165/1050 (Параметр 4), 1100/1050 (Параметр 5), 1025/1165 (Параметр 6).

Результаты обработки ИК-спектров крови приведены в таблице 1:

Таблица 1. Изменение параметров ИК-спектров крови при ТЭЛА

Параметр см ⁻¹ /см ⁻¹	Параметр 1	Параметр 2	Параметр 3	Параметр 4	Параметр 5	Параметр 6
Группа А	1,41±0,11	0,82±0,21	0,54±0,06	0,64±0,18	0,28±0,17	1,74±0,29
Группа В	1,85±0,26*	0,28±0,13*	0,39±0,07*	0,25±0,13*	0,58±0,10*	4,47±1,70*

* - различия достоверны с группой контроля (p≤0,05)

Таким образом, метод ИК-спектроскопии позволяет проводить диагностику тромбоэмболии легочных артерий. Предложенный способ является неинвазивным, то есть позволяет без внутреннего вмешательства в организм больного провести диагностику данного заболевания.

Список литературы

- [1] Кириенко, А.И. Венозный тромбоз в практике терапевта и хирурга / А.И. Кириенко, Е.П. Панченко, В.В. Андреяшкин. – М.: Планида, 2012. – С. 336.
- [2] Гордецов А.С. Инфракрасная спектроскопия биологических жидкостей и тканей // Современные технологии в медицине. 2010. №1. С. 84-98.
- [3] Красникова О.В., Гордецов А.С., Немирова С.В., Медведев А.П. Патент РФ на изобретение № 2527346 от [27.08.2014](#) г. "Способ диагностики тромбоэмболии легочных артерий"

Отнесение сигналов ^1H ЯМР-спектра дипептида $\alpha\text{-Ala-}\alpha\text{-Ala}$ в цвиттер-ионной форме с помощью квантово-химических расчетов методом DFT/GIAO

Курбатова М.С.¹, Баранников В.П.¹, Гиричева Н.И.²

¹Институт химии растворов им Г.А. Крестова, Российская академия наук,
Иваново, Россия

²Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

E-mail: msk@isc-ras.ru

В настоящей работе с помощью квантово-химических расчетов в рамках теории функционала плотности (DFT) в приближении GIAO (Gauge Including Atomic Orbital) выполнено моделирование химических сдвигов ЯМР ^1H в цвиттер-ионе дипептида $\alpha\text{-Ala-}\alpha\text{-Ala}$. Геометрическая оптимизация дипептида проведена с использованием метода DFT/B97D/6-311++G(2d,2p) – рис. 1.

Экспериментальный спектр $\alpha\text{-Ala-}\alpha\text{-Ala}$ ($C_m=0.02$ моль/кг) зарегистрирован на ЯМР-спектрометре «Bruker Avance» с рабочими частотами 500 (^1H) и 125.2 МГц (^{13}C). При калибровке химических сдвигов в спектре в качестве внутреннего стандарта использованы остаточные сигналы растворителя D_2O .

В табл. 1. приведены расчетные и экспериментальные значения химических сдвигов ^1H и их отнесение для цвиттер-иона $\alpha\text{-Ala-}\alpha\text{-Ala}$. Для обеих групп $-\text{CH}_3$ в теоретическом спектре ЯМР присутствует 3 сигнала: ~ 2 , ~ 1.5 , ~ 1 ppm, в то время как экспериментальные данные указывают на наличие 2 пиков: ~ 1.2 и ~ 1.4 ppm. Так, возникают существенные трудности при попытке соотнести сигналы от групп $\text{CH}_3[\text{NH}_3^+]$ и $\text{CH}_3[\text{COO}^-]$. Стоит отметить хорошую воспроизводимость сигналов от амидной группы NH-CO и от группы $\text{CH}[\text{NH}_3^+]$.

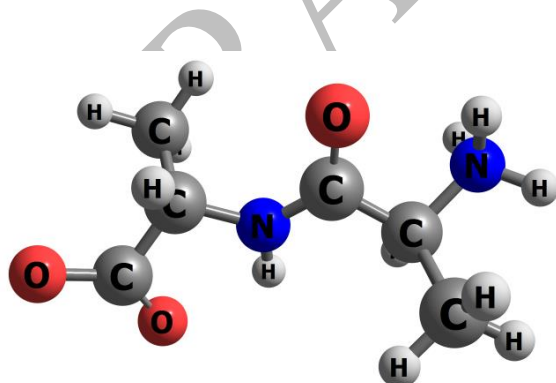


Рис. 1. Оптимизированная структура цвиттер-иона дипептида $\alpha\text{-Ala-}\alpha\text{-Ala}$

Таблица 1. Соотнесение химических сдвигов в цвиттер-ионе дипептида $\alpha\text{-Ala-}\alpha\text{-Ala}$

отнесение	значения химических сдвигов ^1H для цвиттер-иона $\alpha\text{-Ala-}\alpha\text{-Ala}$, ppm	
	расчет	эксперимент
NH-CO	8.490	8.166
CH ₃ [NH ₃ ⁺]	1.606	1.443
	1.196	1.456
	2.246	
CH[NH ₃ ⁺]	4.052	3.959
CH ₃ [COO ⁻]	1.469	1.263
	0.935	1.248
	2.149	
CH[COO ⁻]	4.251	3.974

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (Грант № 15-43-03003_р_центр_а)

Устойчивость порфириноидов к действию УФ- и видимого излучения

Лихонина А.Е.

НИИ Макроциклических соединений, Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

E-mail: talanovaanastasiya@mail.ru

Порфирины (H_2P) и их аналоги являются перспективными материалами, которые могут применяться в катализе, в качестве фоточувствительных устройств и сенсоров, а также препаратов в фотодинамической терапии. Фотоустойчивость является одной из ключевых характеристик порфиринов и их аналогов, определяющих применимость этих макрогетероциклов (МГЦ).

В настоящей работе исследовано влияние строения макроциклов и природы среды на скорость фоторазложения порфириноидов под действием УФ- и видимого излучения в средах с различными свойствами – N,N-диметилформамиде (ДМФА), бензоле или воде, и уксусной кислоте (НОАс).

Для исследования фоторазложения под действием УФ-квантов растворы облучали с помощью ртутно-кварцевой лампы, излучающей в диапазоне длин волн 230-400 нм. Для изучения фотодеструкции в видимом свете, растворы МГЦ облучались светодиодными лампами с длинами волн 660 ± 15 и 740 ± 15 нм, в зависимости от расположения первой полосы в ЭСП исследуемых соединений. Степень фотодеструкции оценивали по убыли оптической плотности длиноволновой Q-полосы в ЭСП. Молекулы с повышенной NH-активностью, такие как инвертированные порфирины, корролы и некоторые другие порфириноиды с неплоской структурой, способны образовывать H-ассоциаты с электронодонорными растворителями, например, ДМФА. Оказалось, что H-ассоциированные формы значительно менее устойчивы к действию как УФ- [1], так и видимого света.

В среде протонодонорной НОАс могут образовываться одно- и двукратно протонированные формы порфириноидов в зависимости от строения макроцикла и природы заместителей. Нами показано, что под действием УФ - излучения процесс фоторазложения проходит быстрее для катионных форм несимметричного строения, нежели для симметричных [1]. В видимом свете практически все H_2P весьма устойчивы, за исключением третбутилфталоцианина, который образует ассоциат с молекулой кислоты по внешнему атому азота.

Также к действию УФ-света нами были протестированы моно-, ди- и трикатионные производные хлорина e_6 в ДМФА, воде и НОАс. Все три образца оказались более устойчивыми в водной среде. Наибольшей фотоустойчивостью во всех трех растворителях обладало монокатионное производный хлорина e_6 ; он же оказался наиболее устойчивым к действию видимого излучения в водной среде.

Список литературы

[1] Березин Д. Б., Лихонина А. Е. // Журнал общей химии. 2017. Т. 87. №5. С. 788-794.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ (проект № 15-13-00096).

Основная тенденция совершенствования «взрывной» фотолитографии

Лысич Д.В.^{1,2}, Зеленцов С.В.¹

¹ *Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

² *АО Научно-производственное предприятие «Салют»,
Нижний Новгород, Россия*

E-mail: ldv892551@mail.ru

Возрастает роль «взрывной» фотолитографии для получения металлических проводников нано размеров, поэтому усовершенствование данной технологии актуально.

На первой стадии «взрывной» фотолитографии на подложке формируется резистная маска из позитивного фоторезиста. Методом CVD на полученную заготовку осаждается материал металлического проводника. «Взрыв» литографической маски осуществляется при обработке образца органическим растворителем (ацетоном, диметилформамидом). В нем фоторезист набухает и увеличивает свои размеры. Он удаляет материал металлического проводника над защищенными маской участками. Напыленный материал металлического проводника в пробельных участках резистной маски остается без изменений. В результате образуется металлический проводник из напыленного материала.

К преимуществу «взрывной» фотолитографии относится то, что ее можно применять в тех случаях, когда слой находящийся под фоторезистом, очень чувствителен к травителю и может частично стравиться при проявлении.

Недостатки этого метода:

1. необходимость разработки специальных растворителей, в которых фоторезистная пленка набухает и «взрывает» слой находящийся над ней;
2. удаление избытка металла приводит к деформации сформированных элементов металлической разводки.

Основной тенденцией совершенствования «взрывной» фотолитографии является разработка метода свободного от указанных недостатков. Одним из таких методов является получение полностью сухого процесса «взрывной» фотолитографии, применяя, например, полисульфоны, полиметилметакрилат. При нагревании до 300 °С они разлагаются до мономеров и испаряются. В данном методе отсутствует влага, воздух, поэтому его можно использовать для получения рельефа изображения из сверхпроводящего материала. В сухом процессе «взрывной» фотолитографии полностью исключены стадии фотолитографических процессов с использованием щелочных растворов, поэтому его можно использовать также для получения рельефа из халькогенидов, например ZnSe.

Оценка биологической активности потенциальных антимиотических агентов - бензоксепинсодержащих аналогов колхицина методом молекулярного докинга

Малеев А.А., Бухвалова С.Ю., Федоров А.Ю., Игнатов С.К.

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

E-mail: maleev.alexandr@yandex.ru

Колхицин (Рис. 1) — алкалоид трополонового ряда, обладающий уникальным биологическим свойством связываться с колхициновым сайтом тубулина, препятствуя митозу опухолевых клеток. Из-за высокой неспецифической токсичности колхицин не может быть применен в лечении раковых опухолей, поэтому одной из главных задач медицинской химии является поиск и синтез молекул, аналогичных колхицину и обладающих более высокой противоопухолевой активностью.

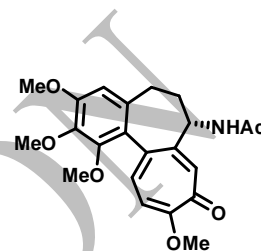
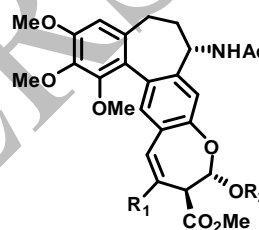


Рис. 1

С целью поиска таких молекул нами был проведен расчет энергии связывания и структуры координационных комплексов 36 потенциально активных оксепиноаллоколхициноидов в колхициновом сайте тубулина методом молекулярного докинга. Расчет выполнен при помощи программы Autodock 4.2 [1].



- 1) R₁ = Pr, R₂ = Bu
- 2) R₁ = Pr, R₂ = Et
- 3) R₁ = Ph, R₂ = Bu
- 4) R₁ = Ph, R₂ = Et
- 5) R₁ = Ph, R₂ = Me

Рис. 2

Геометрия молекул колхициноидов была предварительно оптимизирована при помощи программы Gaussian 03 [3] методом DFT (B3LYP/6-31G(d,p)). Энергии Гиббса связывания 5 наиболее активных молекул приведены в таблице. Эти соединения синтезированы, их структура подтверждена методом ¹H- и ¹³C-ЯМР-спектроскопии. В настоящий момент их активность исследуется биологическими методами.

Таблица. Рассчитанные энергии Гиббса связывания производных 1-5 с аминокислотными остатками колхицинового сайта тубулина.

Соединение	$\Delta G^0_{\text{связ}}$, ккал/моль	Аминокислотные остатки, участвующие в образовании водородных связей с лигандом
Колхицин	-8.66	Val α 181
1	-9.98	Val α 181, Ser α 178
2	-9.78	Val α 181, Ser α 178
3	-9.87	Asn α 101
4	-9.45	Asn α 101
5	-9.42	Asn α 101

Список литературы

[1] G.M. Morris, R. Huey, W. Lindstrom, M.F. Sanner, R.K. Belew, et al. *Journal of Computational Chemistry*, **2009**, 30, 2785–2791.

[2] R.B. Ravelli, B. Gigant, P.A. Curmi, I. Jourdain, S. Lachkar, A. Sobel, M. Knossow. *Nature*, **2004**, 428, 198–202.

[3] Gaussian 03, Revision C.02, M. J. Frisch et al. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.

Методы рефрактометрии и ИК-спектроскопии отражения в исследовании растительных масел и их купажей

М. И. Мельникова, Л. В. Плотникова, А. П. Нечипоренко, М. В. Успенская
Университет ИТМО, 197101, г. Санкт-Петербург, Россия
E-mail: melnikova-69@yandex.ru

Жирно-кислотный состав масел, полученных из растительного сырья, является важнейшей характеристикой их пищевой ценности. Однако в последние годы растительные масла рассматриваются не только как повседневный пищевой продукт, но и как функциональное питание, обладающее лечебно-профилактическими свойствами. Одним из путей целенаправленного подхода к подбору жирно-кислотного состава этих продуктов, является составление сбалансированных смесей (купажирование) растительных масел с повышенной биологической и фармакологической эффективностью.

В данной работе исследовались купажи с варьируемым соотношением масел промышленного производства методом ИК-спектроскопии нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО). Выбор масляных пар осуществлялся по результатам анализа методом рефрактометрии (показателя преломления, йодного числа) трех групп масел (22 наименования), классифицированных по типу доминирующей ненасыщенной кислоты – олеиновой, линолевой, линоленовой. Зависимость (рис. 1а) отражает прирост содержания С=C связей в составе жирных кислот триглицеридов, при переходе исследуемых образцов от первой группы к третьей.

На рисунке 1б приведены данные по изменению йодного числа при смешивании в варьируемых соотношениях (0-30-50-80-100 %) оливкового масла (гр. № 1) с виноградным и кедровым, относящимся к группе № 2 и льняным (гр. № 3). Наблюдаемые различия в характере полученных кривых и их нелинейность позволяют связать это с изменением размера и структуры образующихся ассоциатов триглицеридов, обусловленных их жирно-кислотным составом и соотношением.

Исследование методом ИКС НПВО показало, что наиболее заметно различия в составе купажей проявляются в областях спектров, где регистрируются валентные колебания С=C связей (1653 см^{-1}), СН-группировок при двойной связи ($\nu_{\text{=CH}} = 3008\text{ см}^{-1}$) и СН₂-групп (2923 и 2853 см^{-1}). С увеличением ненасыщенности жирных кислот в триглицеридах и их

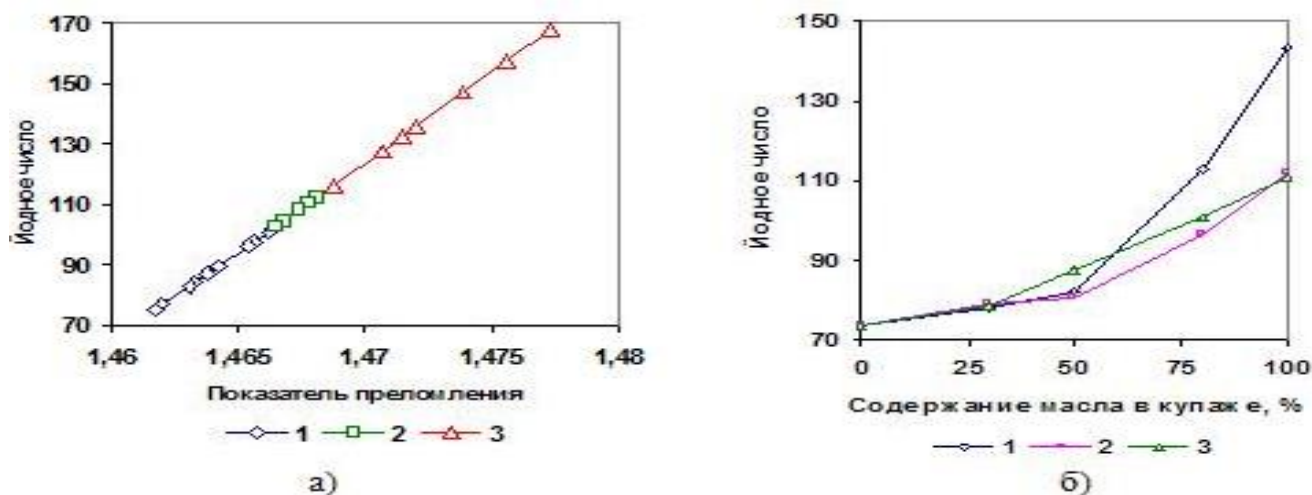


Рисунок 1 – Результаты рефрактометрического анализа: а) серии растительных масел по группам: № 1 – олеиновая; № 2 – линолевая; № 3 – линоленовая; б) серии купажей – оливковое масло +: 1 – льняное; 2 – виноградное; 3 – кедровое

содержания в купажах увеличивается интенсивность полос 1653 и 3008 см^{-1} и снижается интенсивность полос 2923 и 2853 см^{-1} . Характер изменения интенсивности полос для всех серий купажей отвечает характеру изменения для них йодного числа и показателя преломления, полученных методом рефрактометрии. Сдвиги максимумов характеристических полос и изменение вязкости в сериях купажей подтверждают возможность формирования ассоциатов триглицеридов разного размера и структуры в модельных системах.

Квантово-химическое моделирование реакции фотоокисления олефинов ароматическими нитросоединениями в триплетном состоянии

Минасян Ю.В., Дегтяренко А.В., Плехович С.Д., Зеленцов С.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: yram6@rambler.ru

Выполнено моделирование реакций взаимодействия ароматических нитросоединений: *para*- ClNO_2Ph , *meta*- ClNO_2Ph и *ortho*- ClNO_2Ph в триплетном состоянии с этиленом. Определены энергии активаций исследованных реакций. Установлено, что минимальная энергия активации для *ortho*-соединения, максимальная для *para*-соединения. Рассчитаны геометрии переходных состояний, которые охарактеризованы наличием одной мнимой частоты. Истинность переходных состояний подтверждена методом IRC. Выводы о механизме протекания реакции основаны на распределении спиновой

плотности в переходном состоянии, в исходных реагентах и в продуктах реакции.

Таблица.1. Энергии активации исследуемых реакций.

$C_2H_4+para-PhClNO_2$		$C_2H_4+ortho-ClPhNO_2$		$C_2H_4+meta-PhClNO_2$	
Реакция №1		Реакция №1		Реакция №1	
T_1	17.57	T_1	3.77	T_1	-
Реакция №2		Реакция №2		Реакция №2	
T_2	36.40	T_2	55,22	T_2	-

Таблица.2. Геометрии переходных состояний исследуемых реакций.

Переходное состояние со значением мнимой частоты 202.68 cm^{-1} (T_1)	Переходное состояние со значением мнимой частоты 194.22 cm^{-1} (T_1)	Переходное состояние со значением мнимой частоты 195.78 cm^{-1} (T_1)
		Н.Д.
Переходное состояние со значением мнимой частоты 209.29 cm^{-1} (T_1)	Переходное состояние со значением мнимой частоты 354.48 cm^{-1} (T_1)	

Механизм реакции окисления *para*- $ClPhNO_2$ олефинов в триплетном состоянии

Минасян Ю.В., Дегтяренко А.И., Плехович С.Д., Зеленцов С.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: yram6@rambler.ru

Квантово-химическим методом: DFT B3LYP 6-31G+d установлен механизм реакции окисления ароматическими нитросоединениями (*para*- $ClPhNO_2$) этилена, на примере, распределения спиновой плотности. Определили, что на первой стадии в качестве соединения в триплетном состоянии выступает нитросоединение. Спиновая плотность в котором локализована на атомах кислорода (Табл.1). Координируясь по двойной связи происходит образование бирадикального аддукта. На второй стадии

происходит разложение продукта первой стадии с последующим образованием окиси этилена и нитросоединения находящегося в триплетном состоянии.

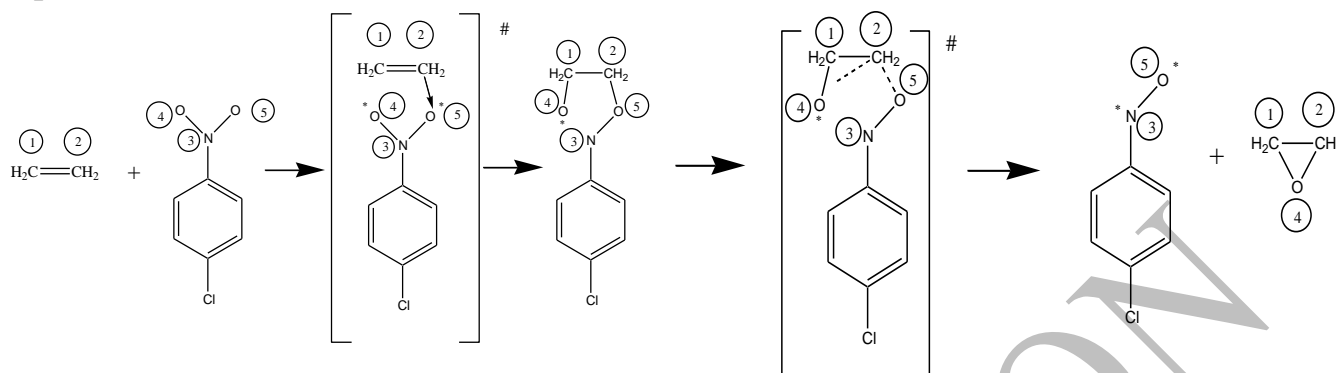


Рис.1. Схематическое изображение протекания реакции окисления этилена *para*-ClPhNO₂

Табл.1. Распределение спиновой плотности в исследуемой реакции

№ атома	<i>para</i> -ClPhNO ₂ (T)	Переходное состояние (TS ₁)	Para-C ₈ H ₁₀ NO ₂ (T)	Переходное состояние (TS ₂)	Para-ClPhNO(T)
(1)C	-	0.209	-0.047	-0.124	-
(2)C	-	0.346	0.018	0.114	-
(3)N	0.424	0.474	0.773	0.371	0.908
(4)O	0.723	0.476	0.868	0.414	-
(5)O	0.710	0.474	0.163	0.223	0.794

Механизм фотохимического переноса атома водорода от амина к нитросоединению

Овсянников Д.В., Фомичёв Д.А.

Национальный исследовательский университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: amidius.1992@gmail.com

Вопрос о механизме фотохимического переноса атома водорода — сложная теоретическая задача. Предложены разные варианты протекания данного процесса [1-3].

Подобные реакции наблюдаются для различных кислородсодержащих органических соединений, в том числе, для нитросоединений. Их триплетные термы лежат очень близко к синглетным, что увеличивает вероятность интеркомбинационной конверсии. К примеру, для

нитробензола установлен квантовый выход по триплетному состоянию 0.67 [4].

Механизм переноса водорода, предположительно, состоит из следующих стадий: возбуждение нитросоединения, интеркомбинационная конверсия, образование эксиплекса, перенос атома водорода и распад на радикальную пару. Методами квантовой химии смоделирована реакция триплетного нитрометана с монометиламином в качестве донора водорода. Оптимизация геометрий проводилась на уровне uB3LYP/6-311g*, вычисление энергий — на уровне EOM-CCSD/cc-pVDZ. Особый интерес представляет предреакционный комплекс — эксиплекс — и энергия его образования.

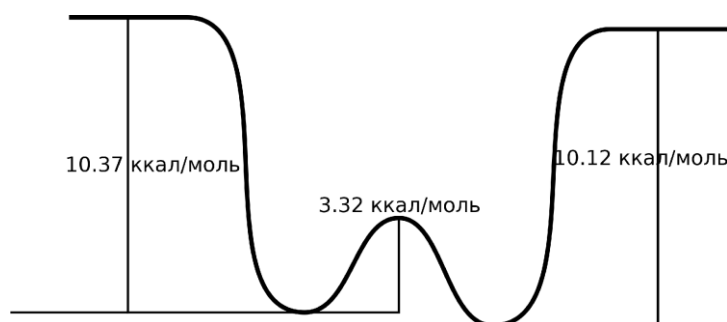


Рис. 1 ППЭ профиль реакции триплетного нитрометана

В результате получился профиль поверхности потенциальной энергии, представленный на рис. 1. Две молекулы сходятся из бесконечно большого расстояния и образуют предреакционный комплекс, разница энергий составляет 10.37 ккал·моль⁻¹. Энергия активации переноса атома

водорода внутри образовавшегося комплекса 3.32 ккал·моль⁻¹. Далее, образовавшиеся радикалы расходятся на бесконечно большое расстояние. Разница энергий для такого процесса 10.12 ккал·моль⁻¹.

В работе изучена структура предреакционного комплекса нитрометана с монометиламином в триплетном и синглетном электронном состояниях. Анализ электронной плотности показывает, что существует критическая точка, соответствующая нековалентному взаимодействию между атомами азота амина и кислорода нитрогруппы. Результаты позволяют сделать вывод о механизме протекания реакции через образование эксиплекса с дальнейшим переносом атома водорода.

Список литературы

- [1] Nanci C. de Lucas, Mônica M. E., Caio L. F., Rodrigo J. C., Simon J. G., José Carlos Netto-Ferreira, David E. N. // Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. 2009. Т. 201. С. 1-7.
- [2] Costela A, García-Moreno I., Dabrio J., Sastre R. // Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. 1997. Т. 109. С. 77-86.
- [3] Görner H., Döpp D. // J. Chem. Soc., Perkin Trans. Т. 2. 2002. С. 120–125
- [4] Hurley, R.; Testa, A. C. // J. Am. Chem. Soc. 1968. Т. 90. С. 1949.

Теоретическое исследование электронных спектров поглощения 1-аминонафталин-8-сульфокислоты и ряда её производных

Первухина Н.В., Федоров М.С.

Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

E-mail: pervukhina.nv@mail.ru

В данной работе приводятся результаты теоретических исследований электронных спектров поглощения 1-аминонафталин-8-сульфокислоты (АНСК) и ряда её производных, которые образованы путём замещения атома водорода в группе $-NH_2$. Нами были использованы методы квантовой химии DFT и TDDFT уровня B3LYP/6-311++G(d,p). Расчеты проводились в программе Gaussian09.

Как видно из рисунка 1, максимальные длины волн (λ_{max}) в спектрах поглощения исследуемых соединений имеют довольно близкие значения, и максимальное отличие в этих значениях составляет 34 нм. Следует отметить, что λ_{max} коррелирует с разницей в энергии граничных орбиталей соединений (табл. 1).

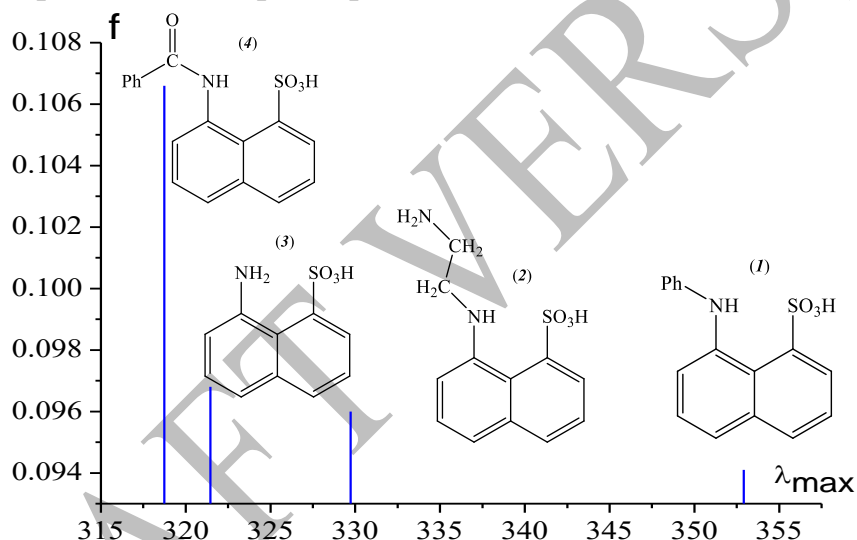


Рис. 1. Величины λ_{max} (нм) в спектрах поглощения молекул АНСК и её производных

Таблица 1. Разница в энергиях граничных орбиталей соединений 1-4

Соединение	1	2	3	4
$\Delta E_{VMO-HOMO}$, эВ	4.04	4.25	4.31	4.36

Наименьшую величину λ_{max} имеет соединение 4 с заместителем $-C(O)-Ph$, а наибольшую – соединение 1 с фенильным заместителем. Соединения 2 и 3 имеют средние величины λ_{max} , однако, из рисунка видно, что эти значения ближе к соединению 4. Такое заметное отличие в оптических свойствах соединения 1 может быть связано с тем, что в нем возможно π -сопряжение между ароматическими фрагментами. Таким образом, замещение водород на аминогруппе позволяет управлять оптическими характеристиками исследуемых соединений, однако их изменение, в частности изменение λ_{max} в спектрах поглощения, невелико, даже в случае ароматических заместителей (1, 4).

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект №16-33-00386 мол_а).

**Квантово-химические расчеты структурных и энергетических параметров
3,5-диметокси-4-гидроксибензальдегида**

Пичахчи В.В.¹, Фатеев Ю.Ф.¹, Чигиринец Е.Э.¹

¹ *Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт», Украина, Киев*

² *Государственное высшее учебное заведения «Украинский государственный химико-технологический университет», Украина, Днепрпетровск*

E-mail: mawka94@bigmir.net

Несмотря на успехи, достигнутые в разработке общей теории ингибирования коррозии процесс целенаправленного синтеза ингибитора, за счет теоретического прогнозирования адсорбционной способности остается не достаточно изученным. Используя вычислительные методы квантовой химии, можно получить информацию на уровне электронного строения молекул и металлической поверхности. Механизм взаимодействия «ингибитор - металл» может быть обоснован с помощью простого кластерного приближения. В качестве объекта исследования было рассмотрено соединения класса альдегидов – 3,5-диметокси-4-гидроксибензальдегид. Квантово-химические расчеты молекулярных диаграмм проводили по программе *HyperChem Version Professional Release 6.03*. (рис.1). Энергетические характеристики молекулы представлены в табл. 1.

Таблица 1. Энергетические параметры молекул 3,5-диметокси-4-гидроксибензальдегида на основе квантово-химических расчетов

3,5-диметокси-4-гидроксибензальдегид	$E_{ВЗМО}$	$E_{НСМО}$	Дипольный момент μ	$\Delta E = E(ВЗМО) - E(НСМО)$
	-9,380447	-0,6478	2,472	10,032

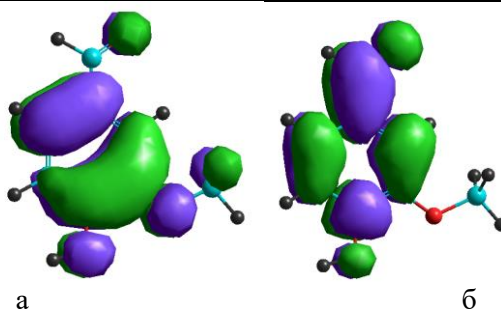


Рис. 1. Графическое представление электронной и орбитальной плотностей молекулярных орбиталей 3,5-диметокси-4-гидроксибензальдегида, по данным квантово-химических расчетов

Взаимодействие ванилина с поверхностью металла, вероятно, будет происходить по атомам кислорода фенольной (-0,217 эВ) и алкоксильной группы (-0,265 эВ), поскольку они имеют наиболее отрицательный заряд и именно на них наблюдается скопление электронной плотности. Также возможно частичное взаимодействие за счет атомов углерода ароматического кольца. Весомый вклад во взаимодействие молекулы ванилина с поверхностью металла будет, вероятно, играть соседнее расположение метокси- и фенольной групп.

**Исследование масляных и CO₂-экстрактов растительного сырья
оптическими методами**

*Плотникова Н.А., Нечипоренко У.Ю., Плотникова Л.В., Успенская М.В.,
Ишевский А.Л.*

*Университет ИТМО
E-mail: ljusja@mail.ru*

В данной работе методами инфракрасной спектроскопии нарушенного полного внутреннего отражения (ИКС НПВО) и рефрактометрии исследовались: серия промышленных CO₂-экстрактов масел (14 наименований) и экспериментальная серия масляных экстрактов, полученных по традиционной технологии (водяная баня – 90°C, экстрагент – нерафинированное подсолнечное масло Дары Кубани), шротов и сухого измельченного (<0,5 мм) лекарственного и пряно-ароматического растительного сырья разной природы (зверобой, аир, имбирь, календула, крапива). Графическая обработка данных показала линейную связь между всеми рефрактометрическими параметрами экстрактов – % (относ.) жира, показатель преломления, йодное число в обеих рассматриваемых сериях образцов, независимо от анатомической части растения взятой для анализа (трава, цветы, корневая система). Отмечено, что экстракция жидкой двуокисью углерода, позволяющая получать экологически чистый, натуральный концентрат (98–99 % при чистоте продукта 99,9 %) природных биоактивных комплексов и компонентов намного эффективней традиционных методов.

ИК-спектры, приведенные на рисунке «а», подтверждают данные о том, что при масляной экстракции белки и углеводы не извлекаются из растительного сырья. Об этом свидетельствует отсутствие полос поглощения в спектрах экстрактов, соответственно, в областях 1690–1540 и 1030–990 см⁻¹ по сравнению со спектрами шрота и сухого сырья. Однако наличие этих полос

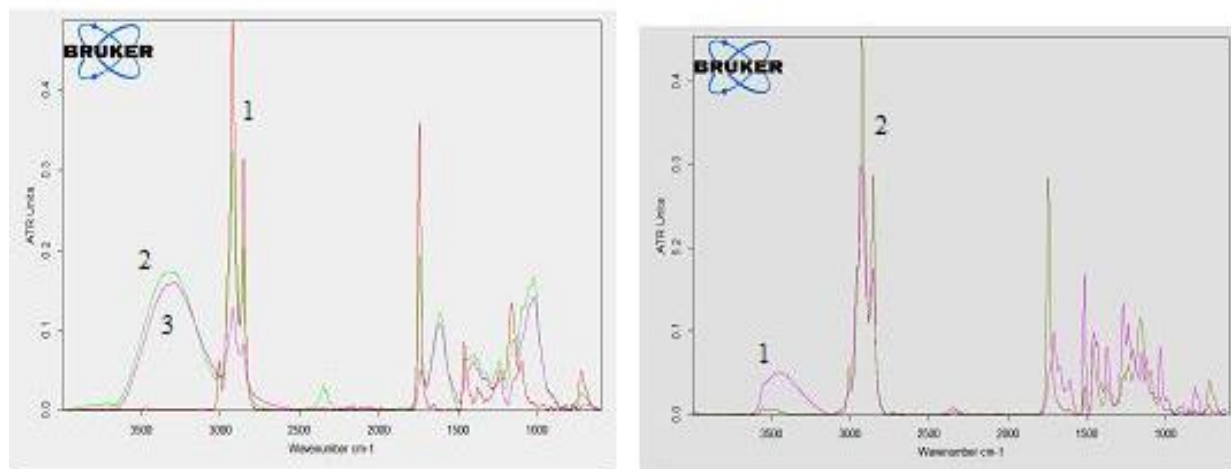


Рисунок – ИК-спектры: а) Календула - масляный экстракт (1), шрот (2), сухое сырье (3);
б) Имбирь – исходный CO₂-экстракт (1), разбавленный маслом Дары Кубани (2)

(рис. «б») в спектре CO₂-экстракта имбиря и их исчезновение при разбавлении подсолнечным маслом говорит о возможности частичного извлечения фрагментов липопротеиновых и гликолипидных комплексов, подвергшихся деструкции в результате «взрыва» диоксида углерода при резком сбросе давления в ходе экстракции.

Клеточная структура такого сырья оказывается разорванной, рыхлой и пористой, облегчая выход полезных веществ [1]. При разбавлении CO₂-экстракта масляной основой имеет место разрушение нативных химических связей фрагментов комплексов, что и отражается в изменении спектральных характеристик образцов. Спектр разбавленного CO₂-экстракта близок к спектрам масляной вытяжки и масла-экстрагента.

Список литературы

- [1] Стасьева О.Н., Латин Н.Н., Касьянов Г.И. CO₂-экстракты компании Караван – новый класс натуральных пищевых добавок. – Краснодар: КНИИХП, 2008. –

Квантово-химический расчет протонного обмена в системе ·СН₂ОН радикал – ион гидроксония

Еськова Е.В., Пущина А.В., Пустолайкина И.А.

Карагандинский государственный университет имени Е.А.Букетова,

Караганда, Казахстан

E-mail: irinamorozo@mail.ru

В кислых водных растворах оксиметильного радикала ЭПР-спектроскопически был зафиксирован протонный обмен с константой скорости $k=1,76 \cdot 10^8$ л/моль·с при 17°C [1]. Обмен был объяснен реакцией:



Целью данного исследования ставилось квантово-химическое моделирование реакции (1) для установления структуры переходного состояния

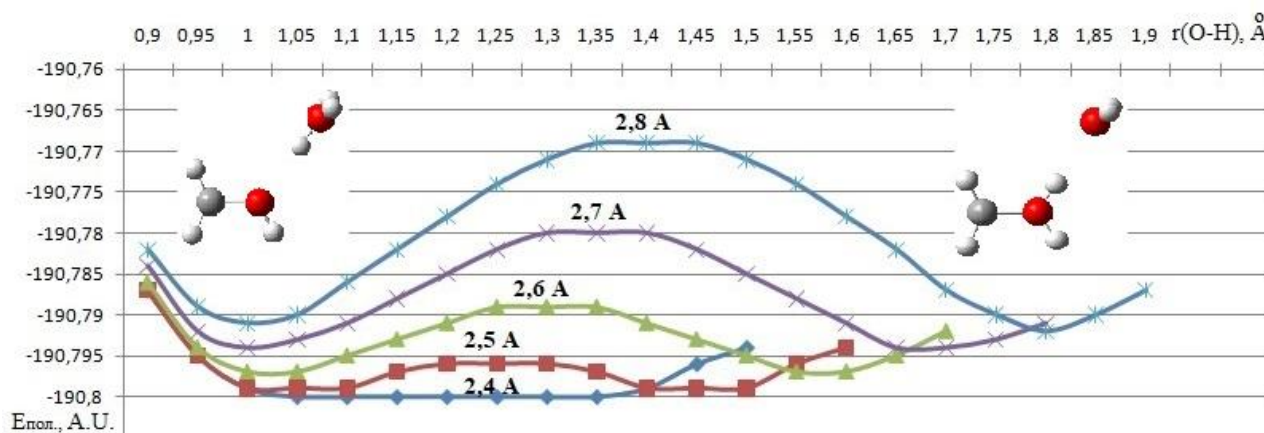


Рис. 1. Изменение полной энергии системы вдоль пути реакции (1).

и оценки энергии активации. С помощью программы Gaussian-2009 [2] был выполнен расчет переноса протона от иона гидроксония к $\cdot\text{CH}_2\text{OH}$ радикалу методом UHF в базисе 6-31G с учетом сольватации в рамках макроскопической модели СРСМ (растворитель – вода) при варьировании длины водородного мостика $R(\text{O}\dots\text{O})=2,4-2,8\text{\AA}$ (рис. 1).

Было найдено, что строение переходного состояния в каждом случае представляет собой структуру $\cdot\text{CH}_2\text{OH}\dots\text{H}^+\dots\text{H}_2\text{O}$ с равноудаленным от обоих реакционных партнеров протоном H^+ . Энергия активации была оценена как разница в полных энергиях переходного и исходного состояний системы. Данная величина составила: $E_{\text{акт.}}(2,8\text{\AA})=60,39$ кДж/моль, $E_{\text{акт.}}(2,7\text{\AA})=36,76$ кДж/моль, $E_{\text{акт.}}(2,6\text{\AA})=21,00$ кДж/моль, $E_{\text{акт.}}(2,5\text{\AA})=7,88$ кДж/моль, $E_{\text{акт.}}(2,4\text{\AA})<1$ кДж/моль. Отмечена сильная зависимость энергии активации исследуемого процесса от длины водородного мостика $R(\text{O}\dots\text{O})$.

Список литературы

- [1] Fischer H. // Molecular Physics. 1965. 9:2. 149-152.
 [2] Frisch, M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. Gaussian 09, Revision C.01. Wallingford: Gaussian, Inc. 2009. 245 p.

Теоретическая оценка константы скорости реакции протонного обмена в кислых водных растворах оксиметильного радикала

Пущина А.В., Еськова Е.В., Пустолайкина И.А.

*Карагандинский государственный университет имени Е.А. Букетова,
 Караганда, Казахстан*

E-mail: irinamorozo@mail.ru

Для теоретической оценки константы скорости химической реакции удобно использовать уравнение Эйринга (теория переходного состояния):

$$k(T) = \frac{K_B T}{h} e^{\left(-\frac{E_{\text{акт.}}}{RT}\right)}, \quad (1)$$

где $K_B=1,38\cdot 10^{-23}$ Дж/К; $h=6,626\cdot 10^{-34}$ Дж/с; $R =8,314$ Дж/(моль·К), $E_{\text{акт.}}$ – энергия активации.

Энергия активации реакции протонного обмена в кислых растворах оксиметильного радикала



была оценена квантово-химически [1] методом UHF в базисе 6-31G с учетом сольватации в рамках макроскопической модели СРСМ (растворитель – вода) как разница в полных энергиях переходного и исходного состояний системы.

Было показано, что величина $E_{\text{акт.}}$ сильно зависит от расстояния между атомами кислорода реакционного комплекса $\cdot\text{CH}_2\text{OH} \dots \text{H}_3\text{O}^+$, поэтому расчет константы скорости (1) исследуемой реакции протонного обмена (2) был выполнен для разных значений длины водородного мостика $R(\text{O}\dots\text{O})$.

Температура была взята 17°C (310K) [2]. Полученные значения представлены в таблице 1.

Таблица 1. Расчетное значение константы скорости $k(T)$.

	R(O...O), Å						
	2,5	2,6	2,63	2,7	2,8	3,0	3,4
$E_{акт.}$, кДж/моль	7,88	21,00	26,26	36,76	60,39	110,27	212,666
$k(T)$, л/моль·с	$3,07 \cdot 10^{11}$	$1,91 \cdot 10^9$	$2,51 \cdot 10^8$	$4 \cdot 10^6$	463,04	$1,93 \cdot 10^{-6}$	$1,21 \cdot 10^{-23}$

Из представленных в таблице 1 данных видно, что с ростом длины водородного мостика энергия активации растет, а скорость процесса замедляется. ЭПР-спектроскопически константа скорости протонного обмена в кислых водных растворах $\cdot\text{CH}_2\text{OH}$ радикала была оценена как $k=1,76 \cdot 10^8$ л/моль·с [2]. Сравнение расчетных значений константы с экспериментальной величиной позволяет предположить, что перенос протона в исследуемой системе происходит при длине водородного мостика $R(\text{O} \dots \text{O}) \approx 2,6-2,7$ Å.

Список литературы

- [1] Frisch, M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. Gaussian 09, Revision C.01. Wallingford: Gaussian, Inc. 2009. 245p.
 [2] Fischer H. // Molecular Physics. 1965. 9:2. 149-152.

Изучение сорбции ионов меди квантово-химическим методом

Турабджанов С.М., Рахимова Л.С., Юсупова Д., Бекназарова И.К.
 Ташкентский государственный технический университет им. Ислама
 Каримова, Ташкент, Узбекистан
 E-mail: latofat.2011@mail.ru

Синтез новых ионообменных полимеров на основе местного сырья для извлечения меди из медьсодержащих стоков является актуальной проблемой. Целесообразно использовать химическую информацию об их строении и свойствах, чтобы с помощью компьютерных вычислительных технологий определить круг новых молекул, в которых можно ожидать проявление заданных свойств и характеристик. Для этого необходимо решить задачу количественной взаимосвязи между структурой и активностью, структурой и свойствами молекулы, а также установить соотношения, которые связывают характеристику того или иного свойства с известными химическими свойствами молекул-молекулярной геометрией, дипольным моментом, зарядами на атомах и т.д. [1]. Кванто-химические расчеты, выполненные в пакете программ OpenMX 3.7, показали, что синтезированные ионообменные

полимеры на основе фурфурола и дифенилоксида образуют устойчивые комплексы с ионами Cu^{2+} .

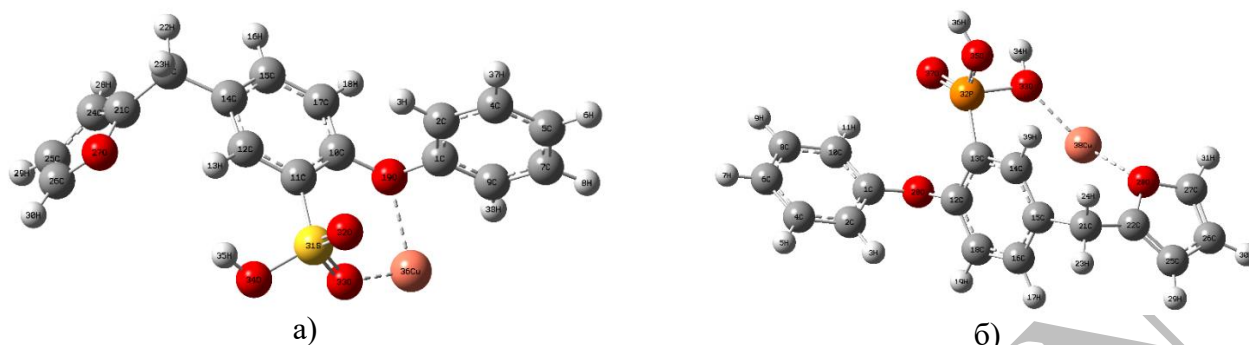


Рис.1. Комплексообразования полученных ионообменных полимеров с ионами Cu^{2+} (а-сульфокатионитом, б-фосфорнокислым катионитом).

Надо отметить, что самые устойчивые комплексы в сульфокатионите наблюдаются между атомами O и $-\text{SO}_3\text{H}$, также между атомами O и $-\text{PO}_3\text{H}_2$ в фосфорнокислом катионите.

Таблица 1. Результаты измерений.

Ионообменный полимер	Энергия сорбции, мэВ(кЖ/моль)	Длина соединений, Å	Угол, градус
Сульфокатионит	2211,36 (213,36)	$\text{Cu} - \text{O}_{19} = 2,17$ $\text{Cu} - \text{O}_{33} = 1,90$	$\angle \text{O}_{19}\text{-Cu-O}_{33} = 86,9$
Фосфорнокислый катионит	1606,16 (154,97)	$\text{Cu} - \text{O}_{28} = 2,30$ $\text{Cu} - \text{O}_{33} = 2,11$	$\angle \text{O}_{28}\text{-Cu-O}_{33} = 141,6$

Из данных таблицы видно, что в процессе комплексообразования ионообменных полимеров с ионами меди длина соединений составляет 2 Å.

Список литературы

[1] Соложенкин П.М. // Труды научного симпозиума «Неделя горняка-2013». 2013. С. 397-424.

Квантово-химическое моделирование механизмов реакций N-алкиланилинов с бензолсульфонилхлоридом в газовой фазе и растворителе

Романова Ю.М., Троицкая Д.Е., Кочетова Л.Б.

ФГБОУ ВО «Ивановский государственный университет», Иваново, Россия

E-mail: kochetova_lb@mail.ru

Проведено квантово-химическое моделирование механизмов реакций вторичных жирноароматических аминов – N-метиланилина и N-этиланилина с бензолсульфонилхлоридом в газовой фазе, в условиях неспецифической сольватации молекул реагентов водой, а также реакции N-метиланилина с бензолсульфонилхлоридом при специфической сольватации нуклеофила молекулой воды путем расчета поверхностей потенциальной энергии указанных процессов. Моделирование проводили с помощью программного пакета Firefly 7.1G [1] методами DFT//B3LYP/6-311G(d,p) и RHF/6-31G(d).

Установлена невозможность тыловой атаки нуклеофила на сульфонильный реакционный центр в газофазной реакции N-метиланилина с бензолсульфонилхлоридом. В зависимости от моделируемой среды, в рассмотренных реакциях могут реализовываться: маршрут с фронтальной атакой молекулы алкиланилина на реакционный центр, маршрут с аксиальной атакой нуклеофила, идущей с уменьшением угла атаки по мере сближения молекул реагентов, либо равновероятны оба указанных маршрута. Найдено, что рассмотренные реакции протекают по механизму S_N2 с образованием единственного переходного состояния на любом из возможных маршрутов. Геометрическая конфигурация активированных комплексов определяется маршрутом реакций: при реализации фронтальной атаки нуклеофила образуется активированный комплекс в виде тетрагональной пирамиды; при аксиальной атаке нуклеофила образуется переходное состояние с конфигурацией, промежуточной между тригонально-бипирамидальной и тетрагонально-пирамидальной.

Рассчитаны энергии активации изученных процессов, в газовой фазе они существенно превышают значения, полученные экспериментально; энергия активации реакции с участием N-этиланилина существенно выше, чем реакции с участием N-метиланилина, что объясняется ростом стерических затруднений с увеличением размера заместителя в аминогруппе. Показано, что в реакции N-метиланилина с бензолсульфонилхлоридом учет сольватации нуклеофила молекулой воды мало влияет на энергетiku, а учет неспецифической сольватации повышает энергетический барьер реакции, тогда как в реакции N-этиланилина с бензолсульфонилхлоридом неспецифическая сольватация понижает энергию активации.

Список литературы

- [1] Granovsky A.A. Firefly version 7.1.G, www <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>.

Магнитные и оптические свойства наночастиц Mn:CdS/ZnS

Сагдеев Д.О.¹, Шамилов Р.Р.¹, Воронкова В.К.², Суханов А.А.², Галяметдинов Ю.Г.^{1,2}

¹Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия

²Казанский физико-технический институт им. Завойского КазНЦ РАН,
Казань, Россия

E-mail: demsagdi@yandex.ru

Парамагнитные квантовые точки (КТ) – наночастицы полупроводника, легированные парамагнитными ионами, представляют интерес в качестве перспективных материалов для спинтроники и биомедицины [1].

Нами проведён синтез парамагнитных КТ Mn:CdS и Mn:CdS/ZnS – ядро/оболочка в органической среде. Изучено влияние наращивания оболочки ZnS на люминесцентные свойства наночастиц. Методом ЭПР-спектроскопии исследовано положение парамагнитных ионов в кристаллической решётке КТ.

Обнаружено, что на спектрах ЭПР наночастиц (рис. 1а и б) имеется два типа сигналов: хорошо разрешённые сигналы с тонкой и сверхтонкой структурой от одиночных ионов марганца и одна уширенная линия от кластеров MnS в нанокристаллах CdS [2]. Наращивание оболочки ZnS приводит к снижению интенсивности сигнала от кластеров в два раза, предположительно, в результате распада кластеров MnS при высоких температурах синтеза [3].

На спектрах люминесценции исследованных наночастиц (рис. 1в) присутствует интенсивный пик излучения от ионов марганца с максимумом при 600 нм. На спектре люминесценции КТ Mn:CdS/ZnS, дополнительно появляется пик излучения запрещённой зоны на длине волны 450 нм в результате повышения доли излучательной рекомбинации экситонов CdS за счет пассивации поверхности.

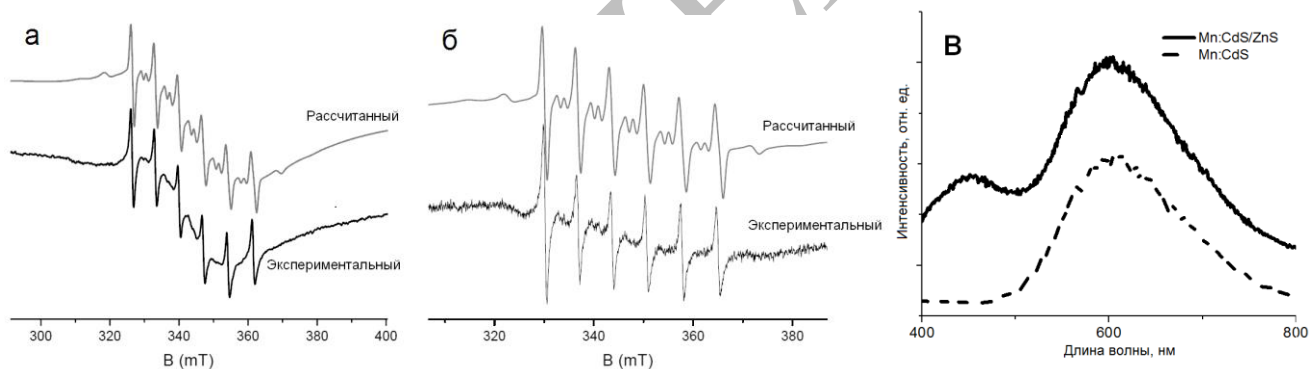


Рис. 1. Экспериментальные и рассчитанные спектры ЭПР наночастиц: а) ядер Mn:CdS, б) ядро-оболочка Mn:CdS/ZnS, в) спектры фотолюминесценции

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 17-03-00258-А.

Список литературы

- [1] Сагдеев Д.О., Шамилов Р.Р., Воронкова В.К., Суханов А.А., Галяметдинов Ю.Г. // Вестник технологического университета. 2016. Т. 19 (14). С 36-38.
- [2] Nistor S.V., Stefan M., Nistor L. C., Kuncser V., Ghica D., Vlaicu I. D. // J. Phys. Chem. C. 2016. 120 (26). pp 14454–14466.
- [3] Zeng R., Shen R. // Chem. Phys. Let. 2013. 559. pp 50-55.

Электронные спектры поглощения производных порфирина. Эксперимент и теория

Солдатова К.М., Гиричева Н.И., Смирнова А.И., Усольцева Н.В.
Ивановский государственный университет, Иваново, Россия
E-mail: parrabol@mail.ru

Получены электронные спектры поглощения (ЭСП) симметрично замещенного 5,10,15,20-тетра-(4-метоксифенил)порфирина (соединение **1**) и мезо-алкоксиарил-замещенных порфиринов А₃В-типа с различными заместителями X во фрагменте «В» и различной длиной заместителей R=C_nH_{2n+1} (n=8, 16, соединения **2–4**). Методом теории функционала плотности (TD-DFT) с использованием гибридного функционала B3LYP/6-311G** выполнен расчет ЭСП указанных соединений. Анализ экспериментальных спектров поглощения показал, что длина алкоксильного заместителя не влияет на полосы поглощения, на основании чего расчет теоретических спектров проводился с соединениями, содержащими метокси-группу во фрагменте А. Следует отметить, что рассчитанные ЭПС качественно воспроизводят экспериментальные спектры. При сравнении спектров поглощения соединений с различными заместителями X было выявлено, что и данные заместители не изменяют ЭСП. Это подтверждается анализом молекулярных орбиталей, вовлеченных в рассматриваемые электронные переходы. В то же время природа заместителя X определяет величину дипольного момента соединения, разную способность к образованию межмолекулярных водородных связей и других свойств соединения.

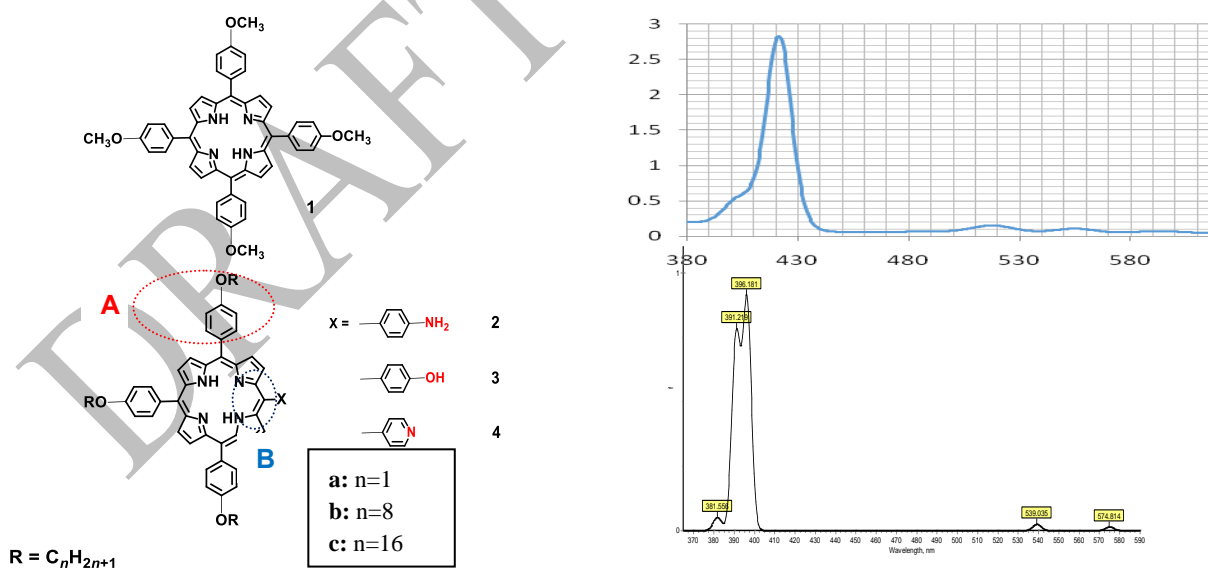


Рис. 1. Структурные формулы исследуемых порфиринов **1–4** и экспериментальный (сверху) и теоретический (снизу) электронные спектры поглощения соединения **4**.

Работа поддержана программой Минобрнауки РФ (грант №16.1037.2017/4.6).

Электронные спектры поглощения анионов 1,8-нафтосультама и его замещенных: TDDFT исследования

Суворова О.А., Федоров М.С., Кораблева М.С.

Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

E-mail: suvorovaolga1995@yandex.ru

1,8-нафтосультам и его замещенные обладают возможностью к флуоресценции, что может определить ряд направлений их практического использования. Данные о характере зависимости оптических свойств соединений от их структуры могут быть полезны при разработке и создания на их основе новых функциональных материалов и биологически активных соединений на их основе. В нашей предыдущей работе теоретически было исследовано геометрическое и электронное строение, а также оптические свойства ряда замещенных и производных 1,8-нафтосультама [1].

В данной работе выполнено теоретическое моделирование (B3LYP/6-311++G**) электронных спектров анионных форм 1,8-нафтосультама и его замещенных, так как их молекулы, например, в водном растворителе способны подвергаться диссоциации с образованием протона и аниона. На рисунке приведены величины максимальных длин волн поглощения (λ_{\max}) для анионных форм соединений в газовой фазе и водном растворителе (PCM).

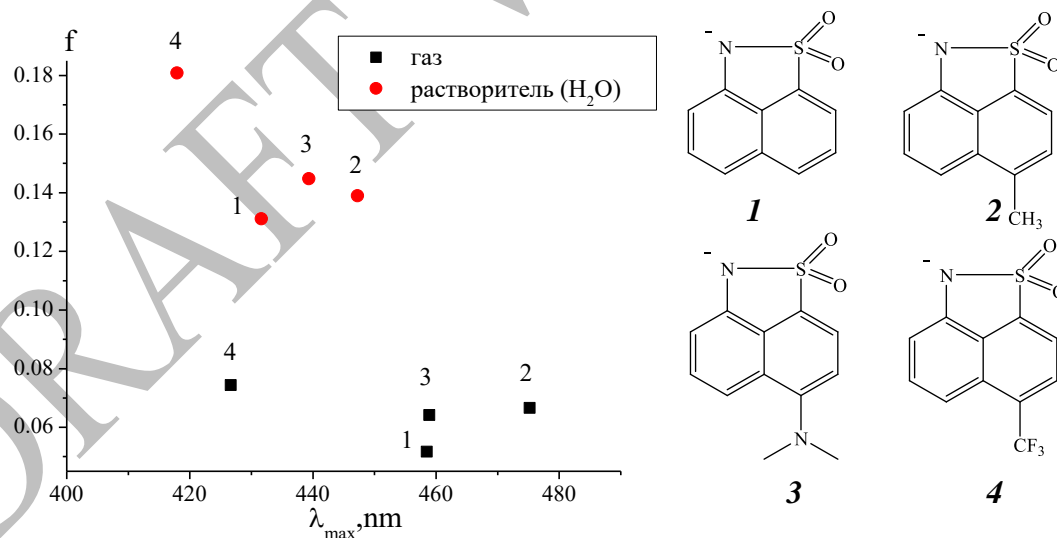


Рис. 1. Сравнительная диаграмма λ_{\max} в спектрах поглощения

Расчеты предсказывают поглощение для всех исследуемых соединений в видимой области спектра. Максимальные длины волн поглощения соединений в газовой фазе находятся в более широком диапазоне, чем для соединений в водном растворителе (50 и 30 нм соответственно). Водный растворитель, смоделированный в рамках

модели РСМ, проявляет гипсохромный эффект по-разному выраженный для соединений 1-4.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект №16-33-00386 мол_а).

Список литературы

[1] Fedorov M.S., Giricheva N.I., Lapykina E.A., Suvorova O.A. // Opt. Spectrosc. (2017) 123: 231.

Влияние концентрации модельного поллютанта на фотокаталитическую активность наночастиц ZnO

Улесова Д.А.¹, Соснин И.М.¹, Писарева В.С.¹, Романов А.Е.^{1,2}, Викарчук А.А.¹

¹Тольяттинский государственный университет, Тольятти, Россия

²Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: ulesovadiana@mail.ru

В работе изучено влияние исходной концентрации модельного поллютанта на фотокаталитическую активность наночастиц ZnO. Исследования фотокаталитической активности частиц проводили в водном растворе фенола под действием электромагнитного излучения. Полученные результаты для различной исходной концентрации фенола представлены на рисунке 1.

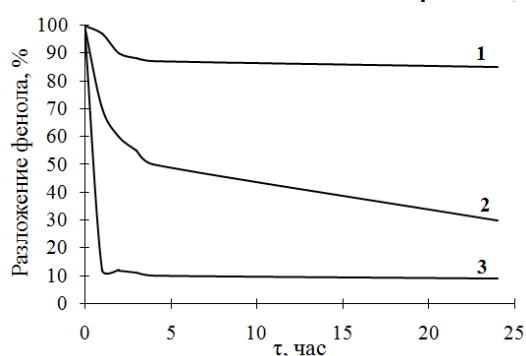
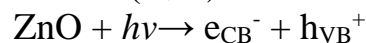


Рис. 1. Фотокаталитическая активность наночастиц ZnO под действием излучения при различных концентрациях фенола:

1. исходная концентрация фенола 150 мг/л;
2. исходная концентрация фенола 45 мг/л;
3. исходная концентрация фенола 1 мг/л

взаимодействии электрона e_{CB}^- с молекулой кислорода O_2 формируются супероксид анион-радикалы $O_2^{\cdot-}$. При высоких концентрациях фенола значительное количество молекул органического загрязнителя адсорбируется на поверхности ZnO, в результате чего фотоны не могут достичь поверхности фотокатализатора. Это приводит к уменьшению образования высокореакционных радикалов $\cdot OH$ и снижению фотокаталитической активности наночастиц ZnO.

С увеличением концентрации фенола до 150 мг/л, эффективность фотокаталитического разложения уменьшается. Фотокаталитическая реакция инициируется, когда фотон света достигает поверхности ZnO. Фотовозбуждение приводит к образованию электронно-дырочных пар в зоне проводимости (e_{CB}^-) и валентной зоне (h_{VB}^+)



При взаимодействии дырки h_{VB}^+ с молекулой воды H_2O генерируются гидроксильные радикалы $\cdot OH$, а при

С уменьшением концентрации органического загрязнителя до 45 мг/л скорость фотокаталитического разложения увеличивается. Однако, была найдена оптимальная концентрация фенола 1 мг/л, при которой под действием излучения происходит быстрая генерация электронов и дырок, что приводит к увеличению активности наночастиц ZnO в реакции фотодеструкции фенола.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России 16.2314.2017/4.6 «Разработка комбинированной технологии и создание образцов инновационного оборудования предназначенных для глубокой очистки сточных вод промышленных предприятий от опасных токсических загрязнений».

Исследование флуоресцентных свойств комплексных соединений цинка с 3,3',4',5,7-пентагидроксифлавоном

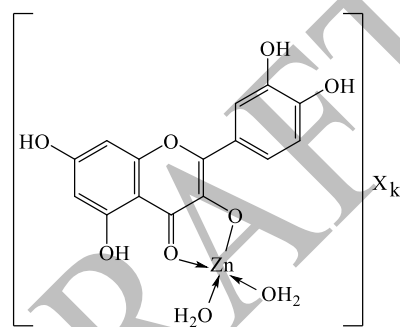
Улесова Д.А., Писарева В.С.

Тольяттинский государственный университет, Тольятти, Россия

E-mail: ulesovadiana@mail.ru

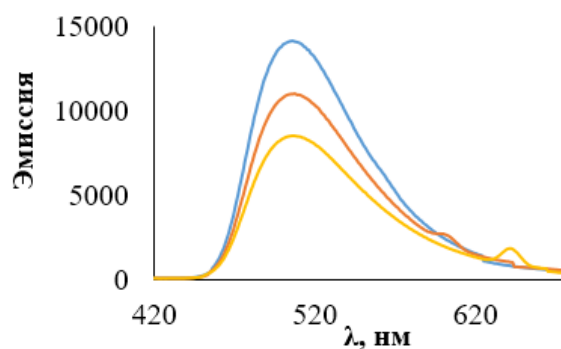
Метод флуоресценции широко применяется в различных прикладных биологических и биомедицинских исследованиях.

В рамках данной работы изучены флуоресцентные свойства комплексных соединений цинка с 3,3',4',5,7-пентагидроксифлавоном (рис.1). Эмиссионные спектры флуоресценции получены на спектрофлуориметре Shimadzu RF-6000.



X = CH₃COO, NO₃, Cl, SO₄; k = 1,2

а)



б)

Рис.1. а) общая структурная формула комплексных соединений;

б) эмиссионный спектр флуоресценции комплексных соединений цинка с 3,3',4',5,7-пентагидроксифлавоном

Цинковые комплексы 3,3',4',5,7-пентагидроксифлавона обладают флуоресцирующими свойствами в области 510-540 нм. Знание длины волны флуоресценции поможет идентифицировать комплексные соединения в ходе биологических и медицинских исследований, кроме того, они могут найти широкое применение в качестве красителей для визуального распознавания клеточных мембран биологической системы.

Решение обратной задачи химической кинетики для процесса окисления кумола

Улитин Н.В., Биктимиров Д.Р., Терещенко К.А., Харлампики Х.Э.
 Казанский национальный исследовательский технологический университет,
 Казань, Россия
 E-mail: n.v.ulitin@mail.ru

Задачами работы являлись: 1) создание кинетической модели некаталитического окисления кумола в реакторе идеального смешения; 2) решение обратной задачи химической кинетики по установлению параметров температурных аррениусовских зависимостей неизвестных констант скоростей реакций. Кинетическую модель процесса разработали с использованием закона действующих масс на основе кинетической схемы, представленной в табл. 1.

Таблица 1. Кинетическая схема процесса некаталитического окисления кумола

Инициирование цепной реакции	
$ROOH \rightarrow RO^{\bullet} + OH^{\bullet}$ [1-3],	$ROOR \rightarrow 2RO^{\bullet}$ [1, 4],
$RH + ROOH \rightarrow R^{\bullet} + RO^{\bullet} + H_2O$ [2],	$O_2 + RH \rightarrow HO_2^{\bullet} + R^{\bullet}$ [1, 3]
Продолжение цепной реакции	
$R^{\bullet} + O_2 \rightarrow RO_2^{\bullet}$ [1, 2],	$RO^{\bullet} + RH \rightarrow R^{\bullet} + ROH$ [1, 2],
$RO_2^{\bullet} + RH \rightarrow ROOH + R^{\bullet}$ [1, 2],	$C_6H_5C(CH_2)CH_3 + O_2 \rightarrow C_6H_5COCH_3 + HCOH$ [3],
$ROH \rightarrow C_6H_5C(CH_2)CH_3 + H_2O$ [1, 4],	$RO^{\bullet} \rightarrow C_6H_5COCH_3 + CH_3^{\bullet}$ [1],
$ROOH + R^{\bullet} \rightarrow ROH + RO^{\bullet}$ [1, 2],	$ROOH \rightarrow C_6H_5OH + CH_3COCH_3$ [1, 3]
$HCOH + 0.5O_2 \rightarrow HCOOH$ [1, 4],	
Обрыв цепной реакции	
$2RO_2^{\bullet} \rightarrow ROOR + O_2$ [1, 2],	$2RO^{\bullet} \rightarrow ROOR$ [2],
$CH_3^{\bullet} + OH^{\bullet} \rightarrow CH_3OH$ [2],	$RO^{\bullet} + R^{\bullet} \rightarrow ROR$ [2],
где $R = C_6H_5(CH_3)_2C^{\bullet}$.	$2R^{\bullet} \rightarrow RR$ [1, 2],

Параметры температурных зависимостей неизвестных констант скоростей реакций определили в результате решения обратной кинетической задачи методом Хука-Дживса, минимизировав функционал расхождения между экспериментальными данными из работы [3] и результатами расчета по модели. Погрешность расчета по модели не превысила погрешность экспериментальных данных, поэтому модель адекватна.

Список литературы

- [1] Закошанский В.М. Фенол и ацетон: анализ технологий, кинетики и механизма основных реакций. СПб.: ХИМИЗДАТ. 2009. 608 с.
 [2] Chianese A. // Chem. Eng. Commun. 1982. V. 17. P. 261-271.
 [3] Дахнави Э.М. Оптимизация совместного производства фенола и ацетона, комплексная переработка побочных продуктов в реагенты нефтедобычи: дис. докт. хим. наук. 2011. Казань. 297 с.
 [4] Денисов Е.Т. Константы скорости гомолитических жидкофазных реакций. М.: Наука. 1971. 712 с.

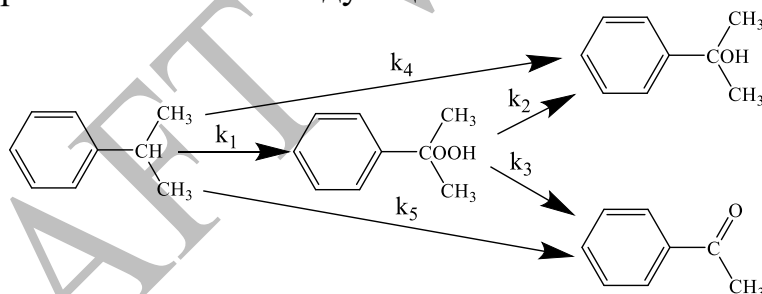
Моделирование процесса окисления кумола в программной среде UniSim Design

Нурмуродов Т.Ш., Улитин Н.В., Зиятдинов Н.Н.,
Харлампиди Х.Э., Терещенко К.А.

Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия

E-mail: n.v.ulitin@mail.ru

В настоящее время основным способом получения фенола является разложение гидропероксида кумола, образующегося при окислении кумола [1]. Существующий технологический процесс окисления кумола осложнен: 1) многократными рециклами потоков, что создает необходимость их многократного нагрева и охлаждения; 2) образованием побочных продуктов, что снижает скорость и селективность процесса. Целью данной работы стало моделирование технологического процесса окисления кумола в программной среде UniSim Design. Среда UniSim Design является модульной средой технологического моделирования, которая применяется для расчетов (в том числе и оптимизационных) технологических схем и оборудования [2]. Технологическая схема процесса включила в себя: 1) теплообменник; 2) окислительную колонну, состоящую из 5 секций тарельчатого типа; 2) линию ректификации и дистилляции; 3) линию конденсации паров после окислительной колонны. Изменение концентраций веществ в окислительной колонне моделировали согласно следующей кинетической схеме [3]:



Используемые при моделировании температурные зависимости кинетических констант $k_1 \div k_5$ приняты по результатам работы [3]. Разработанная модель процесса окисления кумола количественно описала имеющиеся в работе [3] экспериментальные данные о значениях концентраций веществ и температуры на различных участках технологической схемы.

Список литературы

- [1] L. Pilato. Phenolic Resins: A Century of Progress // L. Pilato. Springer Verlag Berlin Heidelberg. 2010. 545 p.
- [2] <https://www.honeywellprocess.com/en-US/explore/products/advanced-applications/unisim/Pages/unisim-design-suite.aspx>
- [3] Дахнави Э.М. Оптимизация совместного производства фенола и ацетона, комплексная переработка побочных продуктов в реагенты нефтедобычи: дис. докт. хим. наук. 2011. Казань. 297 с.

Выявление электронных эффектов моно- и бизамещения 1-имино-1H-изоиндол-3-амина

Филиппова А.А., Кернер А.А., Чернова А.А., Знойко С.А., Вашурин А.С.

Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия

E-mail: anna.filippova96@gmail.com

Жидкофазные системы на основе тетрапиррольных макрогетероциклов нашли свое применение в различных областях: фотокатализ, фотовольтаика, сенсорика, биохимия, медицина. При создании таких структур с заданными свойствами на основе металлокомплексов фталоцианинов важную роль играет природа периферических заместителей.

Цель настоящей работы – выявить влияние электронных и структурных эффектов периферических заместителей на макроциклический лиганд.

На первом этапе работы проведена оценка натуральных зарядов. Исследуемые молекулы фталоцианинов состоят из четырех одинаковых частей. Т.к. приоритетной являлась задача оценки роли периферического фрагмента, то для упрощения квантово-химических расчетов (метод HF/3-21G) был выбран один из четырех фрагментов макромолекулы: 1-имино-1H-изоиндол-3-амин замещенного сульфонафтокси фрагментами (рис. 1).

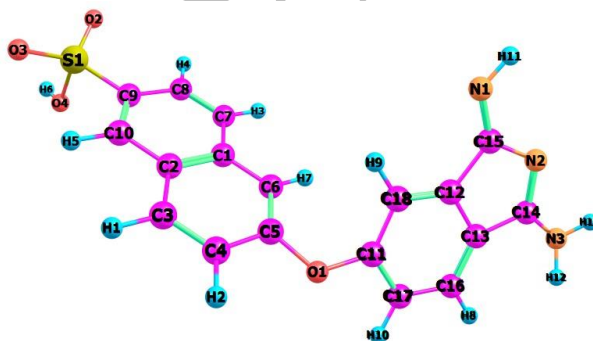


Рис. 1. Структура молекулы монозамещенного 1-имино-1H-изоиндол-3-амина.

На основании полученных данных можно сделать вывод о том, что при монозамещении 1-имино-1H-изоиндол-3-амина моно- и дисульфонафталиновый фрагменты являются электронодонирами по отношению к изоиндольной части. Введение триазольного фрагмента усиливает насыщение заместителя электронной плотностью, что приводит к нарушению равномерности ее распределения в сопряженной π -системе фталоцианинового макроцикла. Далее проведен NBO анализ (метод DFT) замещенного 1-имино-1H-изоиндол-3-амина, который позволил установить электронную природу влияния периферии на аннелированные бензольные кольца изоиндольных фрагментов макроцикла.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ (МК-161.2017.3)

Влияние растворителя на энергетические параметры фотоокисления сероводорода с помощью нитрометана

Фомичев Д.А., Овсянников Д.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: xomachiner@gmail.com

В работе по исследованию реакции фотовосстановления нитросоединений аминами [1] было выдвинуто предположение о наличии стадии переноса заряда между реагентами, предшествующей непосредственно переносу атома водорода. В рамках изучения схожей по природе реакции фотоокисления сероводорода с помощью нитрометана предпринята попытка обнаружить перенос заряда через влияние полярности растворителя на энергетические параметры реакции с использованием уровня теории PBE0/6-311++G** и модели растворителя COSMO. На рис. 1 изображён график зависимости энергии активации и энтальпии от диэлектрической константы растворителя.

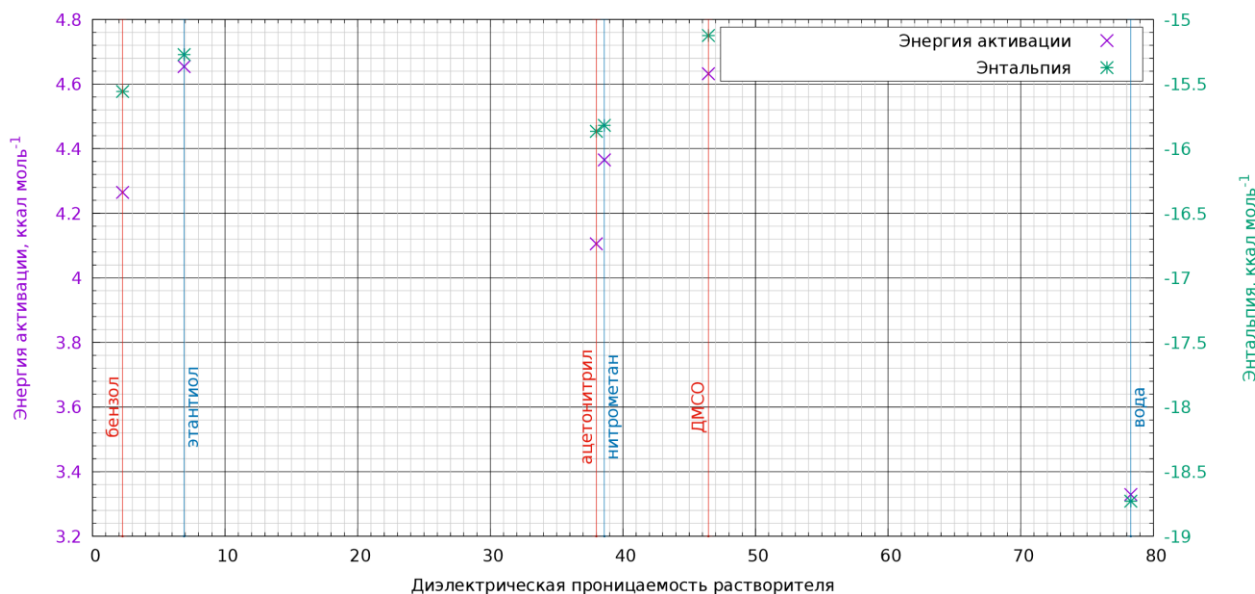


Рис. 1: Зависимость энергетических параметров реакции от диэлектрической проницаемости растворителя.

Как можно заключить из вида графика, энергетика реакции практически не зависит от растворителя в широком диапазоне значений диэлектрической проницаемости. Единственным исключением из этого правила является вода, для которой значение энтальпии и энергии активации несколько меньше чем для остальных растворителей. Поскольку влияние растворителя на рассматриваемую реакцию незначительно, можно предположить отсутствие переноса заряда, что подтверждается отсутствием осцилляций заряда при моделировании реагентов методом RT-TDDFT PBE0/6-311++G** в течении 20 фемтосекунд.

Список литературы

- [1] Görner H., Döpp D. // J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2. 2002. Т. 1. С. 120-125. 10.1039/B107328C

Квантово-химическое моделирование водородных связей в системе фоторезист – фенолформальдегидная смола

Чернуха В.А., Фомичёв Д.А, Зеленцов С.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: valeria.chernuxa@yandex.ru

В системе фенолформальдегидная смола — *орто*-нафтохинондиазид — вода образуются водородные связи [1] [2]. В ходе нашей работы были произведены квантово-химические расчёты в программе NWChem [3] методом Хартри-Фока в базисе 3-21G++ и выяснено, что фенолформальдегидная смола образует следующие типы водородных связей: между гидроксильной группой и карбонильной группой *орто*-нафтохинондиазида, между крайними гидроксильными группами и водой и между гидроксильными группами внутримолекулярно с образованием структуры в виде полукольца, и этот вид связи преобладает.

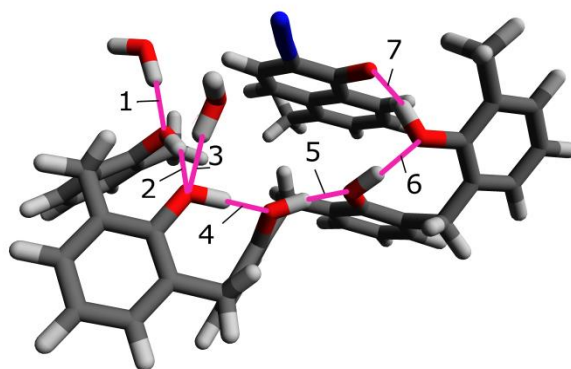


Рис. 1. Модель *орто*-нафтохинондиазида с водой и пентамером фенолформальдегидной смолы: белые атомы — Н, серые — С, красные — О, синие — N, розовые линии — водородные связи.

В дальнейшей работе планируется рассчитать энергии этих водородных связей, а также продолжить квантово-химические расчёты, но в лучшем базисе.

Список литературы

- [1] Влияние межмолекулярных водородных связей на качество фоторезистных масок / В.И. Лебедев [и др.] // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – 2014. – № 4-1.
- [2] Зеленцов С.В. //Фотохимические реакции органических соединений: Учебно-методическое пособие. 2007.
- [3] Valiev, M.; Bylaska, E.J.; Govind, N.; Kowalski, K.; Straatsma, T.P.; Van Dam, H.J.J.; Wang, D.; Nieplocha, J.; Apra, E.; Windus, T.L.; de Jong, W.A. NWChem: A comprehensive and scalable open-source solution for large scale molecular simulations. Computer Physics Communications 2010, 181, 1477–1489. bibtex: valiev_nwchem: 2010.

Теоретическое описание кинетики радикально инициируемой полимеризации стирола с участием ферроцена или титаноцендихлорида

Шиян Д.А.¹, Тахаутдинова А.В.¹, Терещенко К.А.¹, Улитин Н.В.¹, Колесов С.В.²
¹Казанский национальный исследовательский технологический университет,

Казань, Россия

²Уфимский Институт химии Российской академии наук, Уфа, Россия

E-mail: n.v.ulitin@mail.ru

Добавление ферроцена (Cp_2Fe) или титаноцендихлорида (Cp_2TiCl_2) в реакционную массу инициируемой пероксидом бензоила (ПБ) или азобисизобутиронитрилом полимеризации стирола (Ст) меняет скорость полимеризации и молекулярные характеристики полистирола (среднечисленную M_n и среднемассовую M_w молекулярные массы, стереоизомерный состав) [1, 2]. Нами были предложены кинетические схемы данных процессов, объясняющие эти эффекты за счет реакций механизмов Organometallic Mediated Radical Polymerization (OMRP) и Atom Transfer Radical Polymerization (ATRP), реакции металлоцена с инициатором, реакций образования и роста цепи на координационных активных центрах. На основе предложенных схем, с использованием закона действующих масс и метода производящих функций разработали кинетические модели рассматриваемых процессов. Константы скоростей реакций определили в результате решения обратной кинетической задачи методом Хука-Дживса, минимизировав функционал расхождения между экспериментальными данными и результатами расчета по моделям (рис. 1, 2).

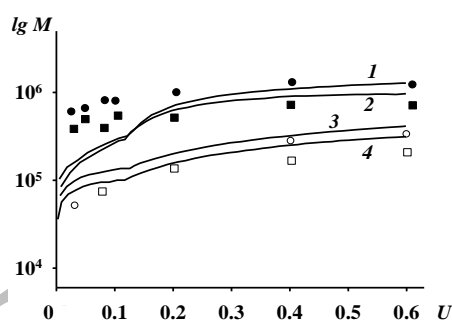


Рис. 1. M_w (1, 2, ●, ■) и M_n (3, 4, ○, □) полистирола (Ст-ПБ- Cp_2TiCl_2): $T = 333$ (1, 3, ●, ○), 348 (3, 4, ■, □) К, $[\text{Ст}]_0 = 8.7$ моль/л, $[\text{ПБ}]_0 = 1$ ммоль/л, $[\text{Cp}_2\text{Fe}]_0 = 0.5$ ммоль/л; U – конверсия стирола; точки – эксперимент, линии – расчет

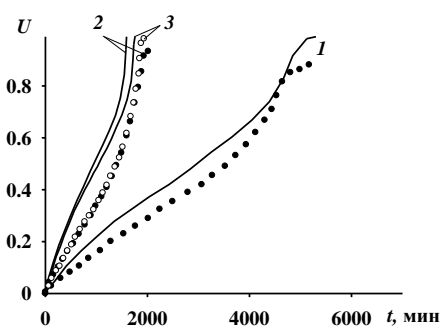


Рис. 2. Кинетические кривые процесса Ст-ПБ- Cp_2Fe : $T = 333$ К, $[\text{Ст}]_0 = 8.7$ моль/л; $[\text{ПБ}]_0 = [\text{Cp}_2\text{TiCl}_2]_0 = 1$ ммоль/л (1); $[\text{ПБ}]_0 = 20$ ммоль/л, $[\text{Cp}_2\text{TiCl}_2]_0 = 1$ ммоль/л (2), $[\text{ПБ}]_0 = 20$ ммоль/л, $[\text{Cp}_2\text{TiCl}_2]_0 = 0.5$ ммоль/л (3), точки – эксперимент, линии – расчет

Исследование выполнено в рамках государственного задания на 2017-2019 гг. (инициативный научный проект № 10.5548.2017/8.9).

Список литературы

[1] Колесов С.В., Сигаева Н.Н., Абдулгалимова А.У., Прокудина Е.М., Спивак С.И., Монаков Ю.Б. // Вестник Башкирского университета. 2005. Т. 10. С. 30-34.

[2] Колесов С.В., Сигаева Н.Н., Газеева Д.Р., Ермолаев Н.Л., Юмагулова Р.Х. // Вестник Башкирского университета. 2009. Т. 14. С. 746-

Устойчивость водородосвязанных комплексов типа $A \cdots X \cdots A$

Чернова Е.М.¹, Шпилевая К.Е.², Гиричева Н.И.¹

¹Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

²Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия

E-mail: 31ksenia@mail.ru

Межмолекулярная водородная связь (ВС) – один из ключевых типов взаимодействий. Ее образование может способствовать возникновению жидкокристаллических свойств систем.

В данной работе рассмотрены свойства Н-комплексов типа $A \cdots X \cdots A$, где А – п-н-пропилноксикоричная кислота, Х – 4,4'-бипиридил (В), 1,2-бис(4-бипиридил)этан (С).

При расчетах пользовался метод DFT с функционалом B97D и базисным набором 6-311++G** (программа Gaussian09).

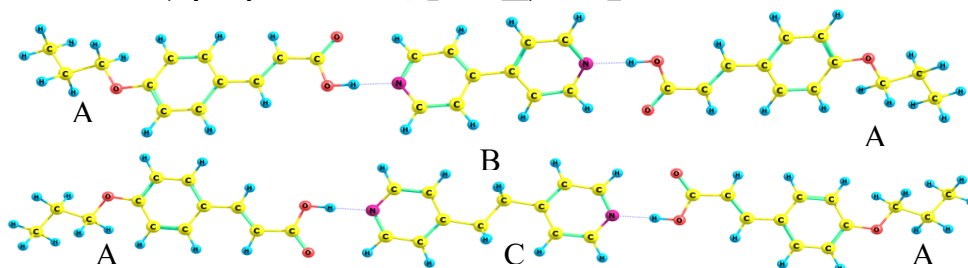


Рис.1. Геометрическое строение комплексов $A \cdots B \cdots A$ и $A \cdots C \cdots A$.

На основании значений $E_{\text{МВ}}$ ($A \cdots B \cdots A$ - 26.9 ккал/моль, $A \cdots C \cdots A$ - 27.9 ккал/моль) и характеристик ВС можно заключить, что в Н-комплексах возникает межмолекулярная ВС средней силы.

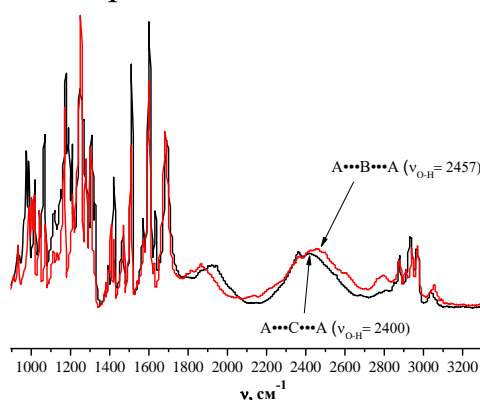


Рис. 2. ИК-спектры А-В и А-С при соотношении компонентов 2:1.

Образование Н-комплексов из индивидуальных соединений основано на интерпретации ИК-спектров. Наличие широких полос при ≈ 2450 и 1900 cm^{-1} ,

характерно для ИК-спектров всех Н-комплексов с O–H···N типом водородных связей. Отсутствие полос при 1740 и 3500 см⁻¹, соответствующих валентным колебаниям $\nu(\text{C}=\text{O})$ и $\nu(\text{O}-\text{H})$ мономера кислоты, указывает на то, что все молекулы кислоты связаны в Н-комплексы. Частота $\nu(\text{O}-\text{H}) = 2457 \text{ см}^{-1}$ в комплексе A···B···A выше, а частота при $\approx 1900 \text{ см}^{-1}$ ниже, чем в комплексе A···C···A, что свидетельствует о большей прочности ВС в последнем, что также подтверждается расчетами $E_{\text{ММВ}}$.

Рассмотренные комплексы благодаря анизотропии электронных и геометрических параметров и прочности межмолекулярных ВС представляют системы, способные к проявлению ЖК свойств.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства Образования и Науки РФ (проект № 4.7121.2017/8.9).

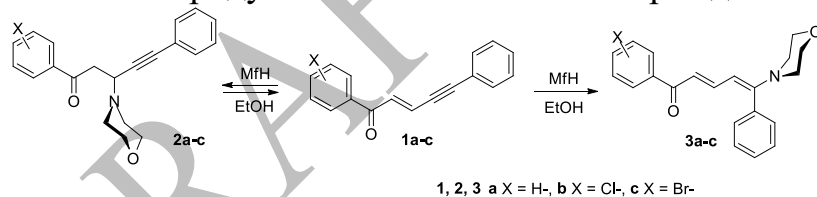
Теоретическое квантово-химическое обоснование механизма реакции нуклеофильного присоединения морфолина к 1,5-диарилпент-2-ен-4-ин-1-онам

Щеголева А.И., Григорьева О.Б.

Тольяттинский государственный университет, г. Тольятти, Россия

E-mail: groly@yandex.ru

В работе проведено квантово-химическое моделирование механизмов реакции нуклеофильного присоединения морфолина к 1,5-диарилпент-2-ен-4-ин-1-онам. Реакция нуклеофильного присоединения морфолина к 1,5-диарилпент-2-ен-4-ин-1-онам имеет два реакционных пути, приводящих к образованию продуктов кинетического и термодинамического контроля [1,2].



Моделирование исходных структур и переходных состояний, визуализация полученных структур осуществлялась в программе GaussView 5.0.9, расчеты проводились в Gaussian 09. Оптимизация геометрии и расчет колебаний исследуемых структур осуществлялись в рамках теории функционала плотности методом B3LYP 6-311G(d,p) с учетом влияния растворителя (метанол) на уровне континуальной модели IEFPCM. Поиск структуры переходных состояний осуществлялся методом линейного синхронного транзита (TS) методом B3LYP 6-311G(d,p). Соответствие найденной структуры истинному переходному состоянию фиксировалось наличием мнимой частоты в спектре колебаний и их характером. Расчет термодинамических параметров всех полученных структур осуществлялся с учетом эмпирического фактора (коэффициент 0,9804) для данного базиса.

Согласно расчетам, обе реакции протекают в две стадии с образованием интермедиата. Структуры переходных состояний и интермедиатов обоих процессов были установлены. Также рассчитаны термодинамические характеристики данных процессов, указывающие на энергетическое преимущество образования продукта 4,5-присоединения, что согласуется с экспериментальными данными.

Работа выполнена в сотрудничестве с межвузовским научно-исследовательским центром по теоретическому материаловедению (руководитель МНИЦТМ д.х.н., проф. Блатов В.А.).

Список литературы

- [1] Голованов А.А. Синтез 5-амино-1,5-диарилпента-2,4-диен-1-онов. / Голованов А.А., Один И.С., Вологжанина А.В., Бекин В.В., Небритова А.Е. // ЖОрХ 2014, Т. 50, Вып. 7, С. 963-967.
- [2] Golovanov A.A. Nucleophilic Addition of Heterocyclic Amines to Conjugated Enyne Ketones. / Golovanov A.A., Odin I.S., Chertov A. Yu., Grigor'eva O.B., Pisareva V.S. // Rus. J. Org. Chem. 2015, 51/12 P. 1688-1692.

Фотохимическое восстановление металлов в системе полиоксометаллат/поливинил-N-пирролидон

Щелоков М.А., Зеленцов С.В., Леонов Е.С.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: mr.shchelokov@mail.ru*

Известно, что полиоксометаллаты (ПОМ) способны под действием света присоединять два электрона с образованием анионов ПОМ [1]. Система $H_3[PMo_{12}O_{40}]$ и поливинил-N-пирролидон (ПВП) является сильной каталитической базой, которая может быть применена во многих сферах производства.

При облучении УФ светом водный раствора смеси $H_3[PMo_{12}O_{40}]$ и ПВП приобретает синий цвет, вследствие отрыва ПОМ атомом металла двух неспаренных электронов у атома азота ПВП. Изменения в спектрах доказывают, что мы наблюдаем эффект фотохромизма, которое можно применить в качестве «эффекта памяти» в электронных устройствах.

В данной работе рассматривается фотохимическое восстановление металлов в присутствии ПОМ и ПВП. Металлы могут увеличивать скорость окислительно-восстановительных реакций в системе ПОМ/изопропиловый спирт [2]. Система ПОМ/ПВП/металл является потенциальной базой для создания электронных оптических устройств. Известны работы [1-3], в которых описана потенциальная реализация таких устройств.

После облучения УФ светом фотохимически восстановленные ионы ПОМ восстанавливают ионы металлов с образованием наночастиц металла. Мы считаем, что такое влияние металлов объясняется поверхностным плазмонным резонансом. Из-за оптических особенностей некоторых металлов, электроны совершают коллективный переход между двумя энергетическими состояниями за счет поглощенной энергии в условиях полного внутреннего отражения внешнего излучения. Лучшее всего плазмонный эффект проявляется у серебра [3].

Список литературы

- [1] T. Yamase, Chem. Rev., 1998, 98 (1), 307-326.
 [2] W.Zhou, M. Cao, Sh. Su, N. Li, X. Zhao, J. Wang, X. Li, Ch. Hu, J. Mol. Catal. A: Chem., 2013, 371, 70-76.
 [3] S. Shanmugam, B. Viswanathan, T.K. Varadarajan, Nanoscale Res. Lett., 2007, 2, 175-183.

Ab-initio исследование основности некоторых аминов

Ыбрахим С.А., Курманова А.Ф., Кутжанова К.Ж., Пустолайкина И.А.
 Карагандинский государственный университет им. Е.А. Букетова,
 Караганда, Казахстан
 E-mail: alfiya_kurmanova@mail.ru

Амины, подобно аммиаку, являются основаниями. Они реагируют с разбавленными кислотами с образованием солей: Известно, что замена атомов водорода на алкильные группы увеличивает основность азота. Это согласуется с электронодонорной природой алкильных групп, стабилизирующих сопряженную кислоту амина R_3NH^+ и тем самым повышающим его основность.

При исследовании кислотно-основных свойств вторичных аминов методами квантовой химии наибольшую информацию можно получить из анализа их граничных молекулярных орбиталей, расчетных величин сродства к протону и электрону, а также потенциалов ионизации соответствующих атомных образований (таблица 1) [1].

Таблица 1. Энергетические параметры ряда аминов, по данным UHF 3-21G – расчетов (Gaussian09)

Молекула	$E_{полн}$, а.е.	Сродство к протону, а.е.	Сродство к электрону, а.е.	Потенциал ионизации, а.е.
Аммиак	-55,8722	0,3616	-0,2403	-0,2959
Метиламин	-94,6816	0,3776	-0,2322	-0,2656
Диметиламин	-133,4948	0,3879	-0,1889	-0,2435
Метилэтиламин	-172,3152	0,3922	-0,1841	-0,2378
Диэтиламин	-211,1342	0,3988	-0,1782	-0,2303

Анализ приведенных в таблице расчетных квантово-химических данных, показывает, что процесс протонирования приведенных изолированных молекул является экзотермическим, что приводит к выигрышу энергии в ходе процесса.

Коэффициент корреляции Пирсона для зависимость сродства к протону и потенциала ионизации достаточно велик (от $R=0,839$ - $0,8803$), что позволяет говорить о наличии хорошей корреляции между константой основности и квантово-химическими энергетическими данными исследованных аминов.

Анализ диаграмм ВЗМО и НВМО молекул аммиака и его производных аминов, позволяющие предсказать возрастание основности с увеличением атомов углерода в заместителях. Энергии НВМО всех рассматриваемых молекул положительна, следовательно они – нуклеофилы и стремятся присоединить протон на неподеленную электронную пару азота. Причем с увеличением атомов углерода в амине эта способность возрастает.

Список литературы

[1] Пустолайкина И.А., Курманова А.Ф., Кутжанова К.Ж., Моделирование протонного обмена в ассоциатах воды, аммиака и муравьиной кислоты // Структура и динамика молекулярных систем : сб. статей. – Москва : ИФХЭ РАН, 2016. – Вып. XXIII. – С.186-191.

Изучение воздействия электрического поля на фрагмент структуры альбумина

Янкова Ю. Н., Люткин А. С., Орлов В.Ю.

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова,

Ярославль, Россия

E-mail: lola1995happy@mail.ru

На сегодняшний день активно развиваются квантово-химические методы моделирования биологических макромолекул с целью изучения их структуры в процессах электродиализа, где под внешними факторами происходит изменение пространственного расположения. В первую очередь в подобных процессах учитываются такие факторы, как внешнее электрическое поле, применение разнообразных растворителей и материалов мембран.

Ранее [1] нами было изучено влияние растворителя (воды) на фрагмент белка альбумина, состоящего из 10 аминокислотных последовательностей (*глутаминовая кислота – валин – глутамин – лейцин – лейцин – глутаминовая кислота – серин – глицин – глицин – глицин*). Однако особое влияние в процессе электродиализа на структуру белка может оказывать разность потенциалов. Нами было проведено квантово-химическое моделирование структуры белка под действием электрического поля, создаваемого катодом и анодом. В качестве последних использовали различное количество атомов лёгких

элементов – Li и Cl (от 1 до 10). Расчёты проводились в программном комплексе FireFly Gamess [2] с использованием полуэмпирического метода PM3. Была проведена оптимизация вышеуказанных систем, для каждой из них рассчитаны силовые и термодинамические параметры. Показано, что катод и анод, содержащие каждые по 3 атома Li и Cl, оказывают наибольшее влияние на пространственное расположение белка (отмечено, что происходит наибольшее изменение геометрических параметров – длины связей, торсионные и валентные углы).

Список литературы

- [1] Петров А.С., Орлов В.Ю., Люткин А.С. // XX Всероссийская конференция молодых учёных-химиков (с международным участием): тезисы докладов (Нижний Новгород, 18–20 апреля 2017 г.). С. 384.
- [2] Электронный ресурс: <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/downloads.html>

DRAFT VERSION

СЕКЦИЯ 5

Физическая химия

Kinetics and thermochemistry of an unusual $[2\pi+2\sigma+2\sigma]$ -cycloaddition of quadricyclane with tetracyanoethylene and 4-phenyl-1,2,4-triazoline-3,5-dione

Kornilov D.A.¹, Anikin O.V.¹, Shulyat'ev A.A.¹, Kiselev V.D.¹

¹Kazan Federal University, Kazan, Russia

E-mail: Dima_himik2@mail.ru

An unusual combination of the high strain energy of quadricyclane (tetracyclo[3.2.0.0^{2,7}.0^{4,6}]heptane), which equals 328 kJ mol⁻¹ [1], and its high thermal stability [2] has attracted attention of researchers. The most peculiar feature of quadricyclanes is their ability to participate in $[2\pi+2\sigma+2\sigma]$ cycloaddition reactions, which are to some extent similar to $[2\pi+2\sigma]$ cycloadditions of dienophiles with strained cyclopropane ring systems (bicyclo[2.1.0]pentane [3], bicyclobutane [4]). Quadricyclanes can form adducts with various activated dienophiles containing C=C, C≡C, C=O, C=S, C=Si, C=N, N=N bonds [5].

Kinetic parameters of unusual $[2\pi+2\sigma+2\sigma]$ cycloaddition reactions of quadricyclane (**1**) with tetracyanoethylene (**2**) and 4-phenyl-1,2,4-triazoline-3,5-dione (**3**) are determined experimentally. In addition, the enthalpies of **1+2** reaction in solution in 1,4-dioxane (-236.6 ± 1.0 kJ·mol⁻¹) and **1+3** reaction in toluene (-255.0 ± 2.8 kJ·mol⁻¹) are determined calorimetrically and shown to be the largest by absolute magnitude among all known cycloaddition reactions involving these dienophiles. Solvent effect on the rate of **1+3** reaction in 11 solvents was studied and found to be moderate and similar to that for the conventional Diels-Alder and ene reactions. The difference in rate constants of reaction of **1** with different dienophiles can be up to 9 orders of magnitudes and is mainly caused by the difference in the activation enthalpies. This difference is not correlated with the standard enthalpies of reactions and is likely a result of high sensitivity of the $[2\pi+2\sigma+2\sigma]$ reaction rates to the energy of donor-acceptor interactions between the reactants.

This research was funded by the Ministry of Education and Science of Russian Federation (grant 4.6223.2017/9.10).

References

- [1] Hall H.K., Smith C.D., Baldt J.H. // Journal of the American Chemical Society. 1973. V. 95. P. 3197-3201.
- [2] Hammond G.S., Turro N.J., Fischer A. // Journal of the American Chemical Society. 1961. V. 83. P. 4674-4675.
- [3] Gassman P.G., Mansfield K. // Chemical Communications. 1965. P. 391.
- [4] Cairncross A., Blanchard E.P. // Journal of the American Chemical Society. 1966. V. 88. P. 496-504.
- [5] Petrov V.A., Vasil'ev N.V. // Current Organic Synthesis. 2006. V. 3. P. 215-259.

Cyclic and acyclic N=N bonds in reactions with some alkenes, cyclic dienes, cycloheptatriene and cyclooctatetraene

Kornilov D.A.¹, Anikin O.V.¹, Kolesnikova A.O.¹, Kiselev V.D.¹

¹*Kazan Federal University, Kazan, Russia*

E-mail: Dima_himik2@mail.ru

The reactions of 1,3-dienes and enes with 4-phenyl-1,2,4-triazoline-3,5-dione, **1**, and *trans*-diethyl azodicarboxylate, **2**, containing N=N reaction centers, found increasing interest because of the synthesis of a wide range of urazole derivatives as well as a great difference in the reaction rates and even in the directions. It was observed that dienophile **1** in the Diels-Alder reaction is 5-6 orders of magnitude more active than its structural analog, *N*-phenylmaleimide with a C=C bond [1]. Acyclic dienophile **2** also has a N=N reaction center, however, its activity in these reactions is almost 7 orders of magnitude lower than in its reactions with **1** [2]. It was noted that in the presence of steric hindrance, dienophile **2** reacts preferably by the ene type, whereas **1** reacts easier by the Diels-Alder reaction [2].

The kinetics of the Diels-Alder reactions of 4-phenyl-1,2,4-triazoline-3,5-dione **1**, *trans*-diethyl azodicarboxylate **2** and tetracyanoethene **3** with 1,3-cyclohexadiene **4**, cycloheptatriene **5**, 1,3-cycloheptadiene **6**, cyclooctatetraene **7**, and 1,3-cyclooctadiene **8** in a range of temperatures and pressures has been studied. The values of enthalpy, entropy, and volume of activation, as well as enthalpy and volume of reaction have been obtained. The values of the observed reaction rates **5+1** and **7+1** have been compared with the known rate of norcaradiene **17** formation in equilibrium **5** \rightleftharpoons **17**, and bicyclo[4,2,0]-octa-2,4,7-triene **20** in equilibrium **7** \rightleftharpoons **20**. It follows from the kinetic data that the rate of the tautomer **17** delivery from **5** is much greater than the rate of the dienophile **1** dissipation in reaction **5+1**. In contrast, the rate of the tautomer **20** delivery is *less* than that of the dienophile **1** dissipation in reaction **7+1**. This corresponds to the fact that the consecutive reaction of **5** \rightarrow **17** (+**1**) \rightarrow **15** is indeed possible as opposed to the consecutive reaction **7** \rightarrow **20** (+**1**) \rightarrow **22**.

This research was funded by the Ministry of Education and Science of Russian Federation (grant 4.6223.2017/9.10).

References

- [1] Kiselev V.D., Shakirova I.I., Kornilov D.A., Kashaeva H.A., Potapova L.N., Konovalov A.I. // *Journal of Physical Organic Chemistry*. 2013. V. 26. P. 47-53.
 [2] Kiselev V.D., Kornilov D.A., Lekomtseva I.I., Konovalov A.I. // *International Journal of Chemical Kinetics*. 2015. V. 47. P. 289-301.

Растворимость метотрексата в биорелевантных средах

Агафонов М.А.¹, Терехова И.В.²

¹Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

²Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия

E-mail: agafonov_m.a@mail.ru

Метотрексат, ранее известный как аметоптерин, является цитостатическим препаратом из группы антиметаболитов, антагонистов фолиевой кислоты. Он оказывает выраженное иммунодепрессивное действие, используется для лечения раковых и аутоиммунных заболеваний. Для процесса абсорбции будет доступен только лекарственный препарат в растворимой форме. Поэтому, растворимость и скорость растворения являются одними из важнейших свойств определяющих биодоступность препарата.

Известно, что метотрексат плохо растворим в воде. В связи с этим, цель работы заключалась в оценке растворимости и скорости растворения метотрексата в биорелевантных средах, моделирующих биологические жидкости желудочно-кишечного тракта. Это позволяет спрогнозировать поведение метотрексата *in vivo*.

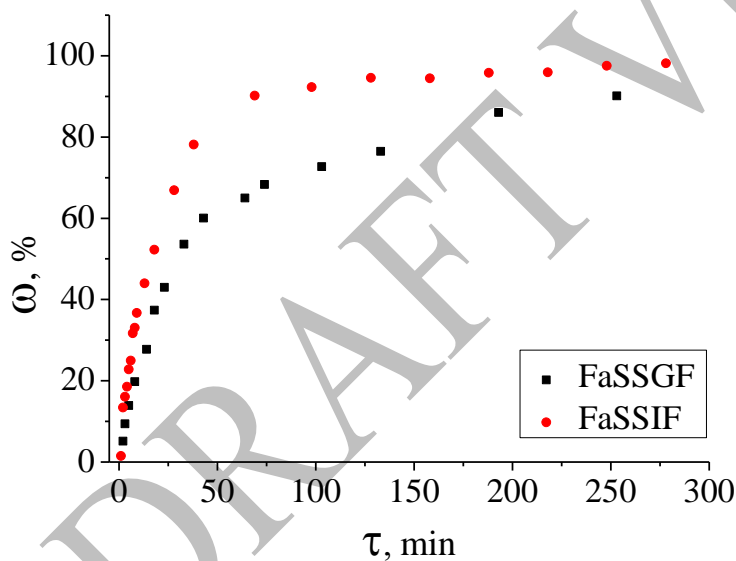


Рис. 1. Профили растворения метотрексата в биорелевантных средах

в качестве биорелевантных сред были выбраны FaSSGF (pH=1.6), имитирующая желудочный сок, и FaSSIF (pH=6.5), моделирующая среду тонкого кишечника. Для сравнения, растворимость метотрексата была определена в солянокислом (pH=1.6) и фосфатном (pH=6.5) буферных растворах.

Показано, что состав биорелевантных сред оказывает существенное влияние на растворимость и скорость растворения метотрексата. Наилучшие показатели растворимости и скорости растворения

наблюдаются в буфере FaSSIF, что обусловлено присутствием мицелл таурохолата натрия и лецитина. Процессы комплексообразования метотрексата с компонентами биорелевантных сред были исследованы методами ¹H ЯМР и УФ-спектроскопии в области концентраций сурфактанта до и после ККМ. Было обнаружено и проанализировано взаимодействие метотрексата с мицеллами таурохолата натрия.

Термодинамическое исследование и низкотемпературная рентгенография гевеина

Амосов А.А., Гусарова Е.В., Шупилова А.С., Князева С.С.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород*

E-mail: AmosovAleksey@mail.ru

Гевеин – это пептид, состоящий из сорока трёх аминокислотных остатков. Содержится в вакуолярной фракции каучукового латекса *Hevea brasiliensis*. Обладает фунгицидным действием против некоторых штаммов грибов, что является физиологической необходимостью в условиях произрастания растения.

Исследуемый образец находился в кристаллическом состоянии и представляет собой твёрдый раствор состава $\text{Hev}_{0,8}\text{M}-\text{Hev}_{0,1}\text{P}-\text{Hev}_{0,1}\cdot 40\text{H}_2\text{O}$.

Для определения термодинамических функций гевеина были использованы вакуумная адиабатическая калориметрия и дифференциальная сканирующая калориметрия. Для расчета абсолютной энтропии и энтропии образования изучена температурная зависимость теплоемкости в интервале температур 6–345 К. Теплоемкость в интервалах температур 6-222 К и 226-345 К монотонно и практически линейно увеличивается с ростом температуры, а в температурном диапазоне 222-226 К наблюдается пик на кривой теплоемкости. Фазовый переход при $T_{\text{tr}} = 223$ К обусловлен изменением положения молекул пептида относительно друг друга, что вызывает переход из низкотемпературной гексагональной в высокотемпературную орторомбическую сингонию кристаллов гевеина. Методом дифференциальной сканирующей калориметрии было показано, что данный фазовый переход является обратимым. Также были рассчитаны энтальпия и энтропия фазового перехода.

Методом низкотемпературного порошкового рентгенофазового анализа проведено исследование теплового расширения гевеина до (150-200 К) и после (225-300 К) фазового перехода. Построены зависимости параметров элементарной ячейки от температуры. В программном комплексе DTS рассчитаны коэффициенты теплового расширения для обеих форм пептида в соответствующих интервалах температур в пределах 150-300 К. На основе полученных данных построены фигуры коэффициентов теплового расширения в плоском и объёмном виде.

Химическая термодинамика терполимеров монооксида углерода и α -олефинов

Афонин П.Д., Смирнова Н.Н.

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

E-mail: pavel_aphonin@live.ru

Поликетоны на основе монооксида углерода и олефинов, представляют новое поколение функциональных полимеров. Термостабильность, газонепроницаемость и биоразлагаемость, а также высокая химическая стойкость делают эти полимеры пригодными для создания пищевой упаковки, защитных покрытий для контейнеров, труб и шлангов. В настоящее время наиболее интенсивно начинают изучаться поликетоны на основе СО и двух полиолефинов, свойства которых более полно, чем поликетоны на основе монооксида углерода и одного олефина отвечают требованиям промышленности.

В данной работе впервые методами адиабатической вакуумной и дифференциальной сканирующей калориметрии были изучены температурные зависимости теплоёмкости $C_p^0 = f(T)$ ряда образцов терполимеров «монооксид углерода-этилен-пропилен» (мольное содержание пропановых звеньев в макромолекулах 13.3 и 23.4 мол%) и «монооксид углерода-этилен-бутен-1» (мольное содержание бутановых звеньев 10.7, 14.6 и 46 мол%) в области 6 – (550-550) К; на кривых $C_p^0 = f(T)$ были выявлены физические превращения и определены их термодинамические параметры; на основе полученных данных о теплоёмкости были рассчитаны стандартные термодинамические функции в изученном интервале температур. В усовершенствованном калориметре сгорания со статической бомбой и изотермической оболочкой были определены энергии сгорания всех изученных терполимеров, по полученным данным об энергиях сгорания были рассчитаны энтальпия сгорания ΔH_c^0 и стандартные термодинамические параметры образования (энтальпия ΔH_f^0 , энтропия ΔS_f^0 , энергия Гиббса ΔG_f^0 образования) при $T = 298.15$ К, что в свою очередь позволило рассчитать стандартные термодинамические параметры синтеза указанных терполимеров «монооксид углерода-этилен-пропилен» и «монооксид углерода-этилен-бутен-1» в широком интервале температур.

Полученные в настоящей работе, а также литературные данные о термодинамических свойствах сополимеров «монооксид углерода-этилен» и «монооксид углерода-пропилен» позволили построить изотермы зависимостей «термодинамическое свойство-состав», что даёт возможность прогнозировать свойства ещё неизученных поликетонов данного ряда.

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного задания в сфере научной деятельности Министерства образования и науки РФ («Ведущие научные исследователи», 4.6138.2017/6.7).

Влияние состава вольфрам-молибден оксидных катализаторов на их активность в реакции окисления этанола

Агаева К.Х., Багиев В.Л.

*Азербайджанский Государственный Университет Нефти и Промышленности,
Баку, Азербайджан*

E-mail: yagif_bagiev@yahoo.com

В последние годы все большее внимание ученых обращается к реакциям превращения этанола в различные мономеры такие ацетальдегид, уксусная кислота, ацетон, этилацетат и др. Ранее проведенными нами исследованиями было показано, что молибден содержащие катализаторы проявляют высокую активность в реакциях окисления этанола. В данной работе представлены результаты исследований реакции окисления этанола на вольфрам-молибден оксидных катализаторах различного состава.

Вольфрам-молибден оксидные катализаторы готовили методом совместного осаждения из водных растворов аммония молибденовокислого и ванадата аммония. Полученную смесь выпаривали, высушивали и затем прокачивали при 550⁰С в течение 10 часов. Таким образом, были приготовлены девять катализаторов с отношением элементов от 9:1 до 1:9. Активности синтезированных катализаторов были изучены на проточной установке с кварцевым реактором в интервале температур 150-450⁰С. Объемная скорость подачи исходного сырья составляла 1800 ч⁻¹. Для исследований были использованы катализаторы с размером зерен 1.5-2.0 мм.

Продуктами реакции парофазного окисления этанола на изученных катализаторах являются ацетальдегид, этилен, уксусная кислота, углекислый газ и при очень высоких температурах монооксид углерода. Проведенные исследования показали, что активности катализаторов сильно зависят от отношения элементов, входящих в их состав. Установлено, что изменение отношения вольфрама к ванадию по-разному влияет на выходы продуктов реакции. Так с увеличением содержания молибдена в образцах выход ацетальдегида проходит через максимум на катализаторе W:Mo=5:5 (33.83%). Выход же продукта дегидратации этилена слегка уменьшается и при малых содержаниях молибдена резко понижается до 4.85% на катализаторе W:Mo=1:9. Также выявлено, что выход уксусной кислоты сначала растет до 10.72% на катализаторе W:Mo=7:3. Дальнейшее увеличение содержания молибдена в катализаторе приводит к снижению выхода уксусной кислоты. Продукт глубокого окисления углекислый газ образуется в небольших количествах (выход углекислого газа не превышает 3.42%) и с уменьшением содержания вольфрама в катализаторе его выход снижается до 1.66% на катализаторе W:Mo=1:9.

Таким образом, проведенные исследования показали, что катализаторы богатые вольфрамом активны в реакции дегидратации этанола до этилена, в то время как катализаторы богатые молибденом проявляют высокую активность в реакции образования ацетальдегида.

Исследование фазового состава медь оксидных систем

Мамедова С.Г., Багиев В.Л.

*Азербайджанский Государственный Университет Нефти и Промышленности,
Баку, Азербайджан*

E-mail: vagif_bagiev@yahoo.com

Ранее нами было показано, что медь-хром оксидные катализаторы проявляют высокую активность в реакции превращения этанола. Было установлено, что активность этих катализаторов зависит от атомного отношения меди к хрому. В связи с этим нами в настоящей работе изучен фазовый состав медь-хром оксидных катализаторов различного состава.

Медь оксидные катализаторы готовили смешением водных растворов меди хрома азотнокислого. Полученный маточный раствор выпаривали и высушивали при температуре 100°C, после чего переносили в фарфоровую чашку и прокаливали при температуре 200-300°C до полного выделения оксидов азота. После этого катализатор прокаливали при температуре 550°C в течение 10 часов. Рентгенографические исследования были проведены на автоматическом порошковом дифрактометре «D2 Phaser» фирмы «Bruker» (CuK_α-излучение, Ni-фильтр, $5 \leq 2\theta \leq 75^\circ$). Таким образом были исследованы девять Cr-Cu-O катализаторов, приготовленных в различных соотношениях компонентов, удовлетворяющих следующим условиям:

$$m \text{ Cr} / n \text{ Cu}, \text{ где } m, n = 1 \div 9, m+n = 10.$$

Анализ и интерпретация дифракционных картин в системе Cr -Cu- O показал, что во всех соотношениях (mCr / nCu) образцы состоят из трех фаз, а именно из Cr₂O₃, CuO и CuCr₂O₄. При этом надо отметить, что во всех образцах сохраняется процентное соотношение компонентов, чему свидетельствует закономерное изменение интенсивностей рефлексов на дифракционных картинках.

Нами также по программе DIFFRAC.EVA на приборе «D2 Phaser» рассчитаны степени кристалличности всех образующихся фаз, результаты которых представлены в таблице 1. Как видно из таблицы, кристалличность Zn -Cu -O и Ce -Cu- O систем практически не меняется с изменением состава, в то время как для Cr -Cu- O системы кристалличность снижается от 79,2% на образце 1Cr - 9Cu до 62% на образце 9Cr - 1Cu.

Таблица 1. Кристалличность образцов в каталитической системе Cr -Cu-O.

Соотношение катализаторе	Cr:Cu	в	1:9	2:8	3:7	4:6	5:5	6:4	7:3	8:2	9:1
Кристалличность, %			41.6	41.9	50.2	57.3	64.4	67.1	69.7	73.3	71.2

С увеличением содержания меди в составе катализатора кристалличность образцов возрастает с 41.6% на образце Cr:Cu=1:9 до 73.3% на образце Cr:Cu=8:2 и после чего снижается до 71.2% на образце Cr:Cu=9:1.

Исследование фазового поведения в лиотропных жидкокристаллических системах

Бажанова А.И., Осипова В.В., Галяметдинов Ю.Г.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия*



E-mail: bazhena95@gmail.com

В последние время достигнут значительный прогресс в синтезе наноматериалов за счет процессов самоорганизации в лиотропных жидкокристаллических (ЛЖК) системах [0]. Лиотропные мезофазы позволяют контролировать концентрацию, размер и структуру коллоидных наночастиц на микромасштабном уровне [0]. Поэтому целью исследования был синтез систем на основе неионного поверхностно-активного вещества (ПАВ) и исследование влияния введения иона металла на тип и температурный диапазон существования мезофазы.

Лиотропные мезофазы были получены на основе неионного ПАВ – монододецилового эфира нонаэтиленгликоля ($C_{12}EO_9$) и соли – гексагидрат нитрата лантана – $La(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$, растворителем являлись тяжелая вода (D_2O).

По данным поляризационно-оптической микроскопии (ПОМ) определяли тип мезофазы и температуры фазовых переходов (Таблица 1).

Таблица 1 – Состав систем и фазовые характеристики

Система	Метод ПОМ, Тф.п., °С	Тип мезофазы	
$C_{12}EO_9 / H_2O$	47,4-48,9	Н	
$C_{12}EO_9 / La(NO_3)_3 \cdot 6H_2O / D_2O$	61-66	Н	

Анализ данных приведенных в таблице показал, что в трехкомпонентной системе, по-сравнению с бинарной, температурный диапазон существования мезофазы увеличивается на 17 градусов. Что возможно связано с более плотной упаковкой агрегатов с мезофазе, содержащей ион металла. Для более точной интерпретации необходимо проведение дальнейших исследований.

Список литературы

- [1] Klaiber A., Polarz S. // ACS Nano. 2016. № 10. P. 10041 — 10048.
[2] Soler-Illia G.J.A.A., Sanchez C., Lebeau B. // Chemical Review. 2002. № 102. P. 4093 — 4138.

Химическая термодинамика C₆₀Br₂₄

Безднин А.Е.¹, Маркин А.В.¹, Смирнова Н.Н.¹, Семенов К.Н.²

¹Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: andrej-bezdnin@yandex.ru

Фуллерены C₆₀ и C₇₀ находят широкое применение в самых разнообразных областях науки и техники: материаловедение, механика, машиностроение, строительство, электроника, оптика, медицина, фармакология, а также в продуктовой и косметической промышленности. На базе молекулярных форм углерода – фуллеренов возможно конструирование новых типов наноструктурных углеродных материалов, обладающих ценными свойствами. Среди большого количества уникальных свойств фуллерена C₆₀ выделяют его чрезвычайно высокую устойчивость к механическим и химическим воздействиям. Эти обстоятельства в значительной степени и определяют интерес к получению новых производных фуллеренов и исследованию их свойств.

В данной работе впервые было проведено комплексное исследование стандартных термодинамических свойств бромфуллерена C₆₀Br₂₄. Методом адиабатической вакуумной калориметрии определена температурная зависимость теплоёмкости C_p(T) в интервале 5 – 350 К. В интервале 228 – 236 К выявлено полиморфное фазовое превращение, определены его термодинамические характеристики.

Для низкотемпературной теплоёмкости исследуемого соединения была проведена мультифрактальная обработка, фрактальная размерность D в функции теплоёмкости и установлена цепочечно–плоскостная топология структуры изученного образца.

В этой работе также были рассчитаны стандартные термодинамические функции C_p^o(T), H^o(T)–H^o(0), S^o(T) и G^o(T)–H^o(0) для различных физических состояний в области от T → 0 до 350 К, а также определены стандартная энтальпия образования в кристаллическом состоянии и энтропия бромирования фуллерена C₆₀ при T = 298.15 К. Полученные значения были сопоставлены с литературными данными для Li₁₂C₆₀, C₆₀ и C₆₀H₃₆.

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного задания в сфере научной деятельности Министерства образования и науки РФ (“Ведущие научные исследователи”, 4.6138.2017/6.7).

Проводимость растворов электролитов с добавками водных дисперсий многослойных углеродных нанотрубок

Вавилов Е.С., Бирюков А.И., Ковалев И.Н., Толчев А.В.

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

E-mail: prozerber@mail.ru

В данной работе представлены результаты исследования влияния многослойных углеродных нанотрубок (МУНТ), полученных по методике [1] на удельную электрическую проводимость (УЭП) растворов сульфата натрия, алюминия, меди, цинка и никеля. Электрофизические исследования дисперсий МУНТ проводили с помощью импедансметра Z - 1500J в диапазоне частот 10 Гц до 2 МГц при нормальных условиях. Годографы импеданса растворов солей приведены на рис. 1.

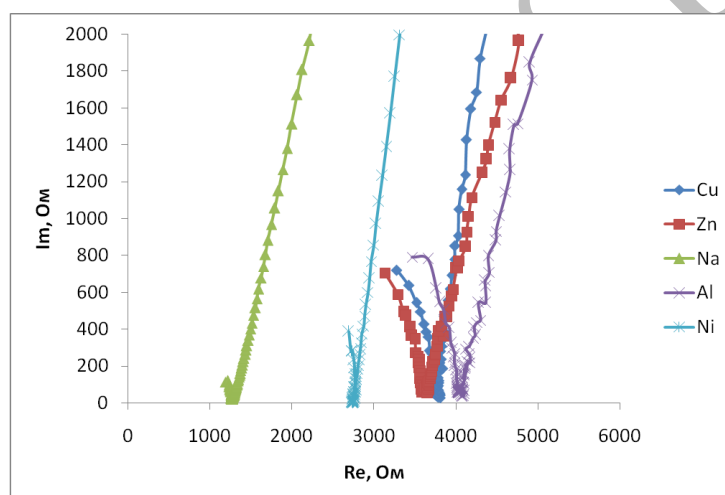


Рис. 1. Годограф импеданса растворов солей с добавками МУНТ.

Анализ годографов импеданса дисперсий МУНТ в исследуемых растворах указывает на изменения емкости ячейки и удельной проводимости растворов с равной концентрацией компонентов (0.1 М – соли; 100 мг/л – МУНТ). Наблюдаемые изменения, по-видимому, зависят от размеров ионов металлов (табл.1) и их способности образовывать сольватные оболочки.

Таблица 1. Результаты измерений.

Ион, Me ⁿ⁺	Ионный радиус R, Å	УЭП и, См*м ⁻¹
Na ⁺	0.98	0.182
Zn ²⁺	0.83	0.085
Ni ²⁺	0.78	0.063
Cu ²⁺	0.70	0.061
Al ³⁺	0.57	0.057

[1] Вавилов Е. С., Ковалев И. Н. // Бутлеровские сообщения 2015. т. 44. № 12 С. 196 – 198.

**Исследование жидкокристаллической системы лецитин/
пропиленгликоль/ вода/вазелиновое масло с экстрактом малахита**

Валиева И.А., Саутина Н.В., Галяметдинов Ю.Г.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия*

E-mail: kuznetsova.irina95@yandex.ru

Лиотропные жидкие кристаллы (ЛЖК), представляющие собой композиции амфифильных веществ и растворителей, используются в медицине как транспортные средства доставки лекарственных препаратов, как флуоресцирующие метки из наночастиц в больных клетках, при создании матриц для катализаторов, материалов оптоэлектроники, а также играют большую роль в косметических средствах. Жидкий экстракт малахита является новым источником минералов для истощённого эпидермиса. Наиболее важный микроэлемент содержащийся в этом эликсире – медь, которая играет антирадикальную функцию, увеличивая производство коллагена и эластина в фибробластах.

Целью данного исследования является синтез и исследование ЛЖК системы на основе лецитина для доставки экстракта малахита в эпидермис.

Разработана жидкокристаллическая транспортная система лецитин/пропиленгликоль/ вода / вазелиновое масло. Найдены оптимальные соотношения компонентов, получена фазовая диаграмма. Методом поляризационно-оптической микроскопии показано, что для нее характерен ламеллярный тип мезофазы. Определена оптимальная концентрация экстракта малахита, которая может быть пролонгировано высвобождена из системы. Измерена удельная электропроводность водных растворов экстракта малахита и размер частиц. Показано, что с увеличением концентрации экстракта удельная электропроводность возрастает, что свидетельствует о том, что малахит находится в растворе в виде заряженных частиц ионов Cu^{2+} .

Полученная транспортная система может быть использована для доставки биологически активных и лекарственных веществ, в том числе экстракта малахита, в верхние слои кожи.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-33-00247 мол_а.

Кристаллическая структура и кислородная нестехиометрия сложных оксидов, образующихся в системе Nd-Ca-Fe-O

Вахромеева А.Е.

Уральский федеральный университет имени первого
Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

E-mail: Maruska1393n@mail.ru

Многокомпонентные твердые растворы на основе ферритов РЗ и ЩЗ металлов являются объектом многочисленных исследований в связи с возможностью их практического применения в различных областях техники, в качестве электродов ВТ ТОТЭ, кислородных датчиков, катализаторов дожигания выхлопных газов, кислородных мембран.

Для изучения кристаллической структуры образующихся сложных оксидов в системе Nd-Ca-Fe-O по глицерин-нитратной технологии было синтезировано 60 образцов с различным соотношением по металлическим компонентам. По результатам РФА установлено, что в исследуемой системе образуется пока только два ряда сложных оксидов. Сложные оксиды состава $\text{Nd}_{1-v}\text{Ca}_v\text{FeO}_{3-\delta}$ в условиях эксперимента образуются в интервале $0.0 \leq v \leq 0.35$. Рентгенографические данные указанного твердого раствора были проиндексированы в рамках орторомбической ячейки с пространственной группой $Pbnm$ (рис. 1а).

Область гомогенности оксидов $\text{Ca}_{2-p}\text{Nd}_p\text{FeO}_{4\pm\delta}$ лежит в интервале составов $0.9 \leq p \leq 0.95$. Данный твердый раствор имеет также орторомбическую структуру, но кристаллизуется в пространственной группе $Stca$ (рис. 1б).

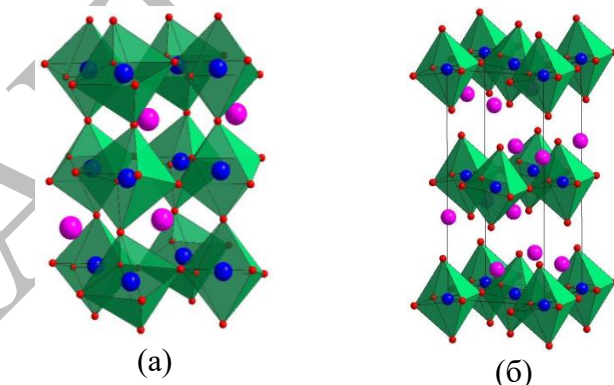


Рис. 1. Кристаллическая структура сложных оксидов:
(а) $\text{Nd}_{1-v}\text{Ca}_v\text{FeO}_{3-\delta}$ ($0.0 \leq v \leq 0.35$); (б) $\text{Ca}_{2-p}\text{Nd}_p\text{FeO}_{4\pm\delta}$ ($0.9 \leq p \leq 0.95$).

Кислородная нестехиометрия оксидов $\text{Nd}_{1-v}\text{Ca}_v\text{FeO}_{3-\delta}$ ($0.0 \leq v \leq 0.35$) была изучена методом термогравиметрического анализа в интервале 298–1373 К на воздухе. Абсолютное значение кислородной нестехиометрии было определено методом прямого восстановления в токе водорода в ТГ-установке. Результаты показали, что данные сложные оксиды практически не обмениваются кислородом с газовой фазой: $\delta \approx 0.05-0.06$ при 298 и 1373 К.

Выражаю благодарность своим научным руководителям к.х.н. Аксеновой Т.В., к.х.н. Урусовой А.С., проф. Черепанову В.А.

Энергетика сольватации и структура эфира 18-краун-6 в неводных растворителях

Волкова М.А., Кузьмина И.А., Погонин А.Е., Кузьмина К.И., Белова Н.В.,
Шарнин В.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия*

E-mail: mariia.a.volkova@gmail.com

Выполнено квантово-химическое исследование строения различных конфигураций молекулы эфира 18-краун-6 (18К6) в свободном состоянии, метаноле (MeOH), этаноле (EtOH), диметилсульфоксиде (DMSO), диметилформамиде (DMF) и ацетонитриле (AN). Для наиболее устойчивой конфигурации 18К6 (C_i) проведен расчет межъядерных расстояний, величин валентных углов между связями, а также величин зарядов на атомах в молекуле макроцикла в свободном и сольватированном состояниях. Замена амфотерных растворителей (MeOH, EtOH) на апротонные (DMSO, DMF, AN) приводит к увеличению расстояния между донорными атомами краун-кольца, что в свою очередь может оказать влияние на изменение устойчивости координационных соединений 18К6 с ионами металлов в случае смены состава растворителя MeOH, EtOH \leftrightarrow DMSO, DMF, AN [1].

Проведено сравнение энтальпий сольватации 18К6 $\Delta_{\text{solv}}H^0(18К6)$ в изучаемых растворителях, полученных калориметрическим методом [2-4], и учитывающих как универсальные, так и специфические типы взаимодействий растворитель-растворенное вещество с $\Delta_{\text{solv}}H^0(18К6)$, рассчитанных методом квантово-химического моделирования с использованием модели самосогласованного реактивного поля (PCM), которая учитывает только универсальную составляющую сольватации. Установлено, что в амфотерных растворителях энергетика сольватации 18К6 определяется, в основном, универсальными взаимодействиями между реакционными центрами краун-эфира и молекул растворителя. В апротонных растворителях вклады от универсальных и специфических взаимодействий в энтальпии сольватации макроцикла практически равнозначны.

Список литературы

- [1] Хираока М. Краун-соединения. М.: Мир. 1986. 363 с.
- [2] Кузьмина И.А., Усачева Т.Р., Шарнин В.А., Волкова М.А. // Ж. физ. химии. 2013. Т. 87. С. 1090-1092.
- [3] Голиков А.Н., Кузьмина И.А., Шарнин В.А. // Ж. физ. химии. 2005. Т. 79. 2055-2056.
- [4] Голиков А.Н., Кузьмина И.А., Шарнин В.А. // Изв. Вузов «Химия и химическая технология». 2007. Т. 50. С. 38-40.

Особенности окисления 1,1'-диэтилферроцена бис-о-семихинолятом дихлороолова(IV) в органических растворителях

Галкина М.С.¹, Фомин В.М.¹, Поддельский А.И.²

¹Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

²Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: niih325@bk.ru

Известно, что орто- и пара-хиноны являются сильными окислителями в кислой среде. Представляло интерес сравнить их окислительные способности по отношению к ферроцену с окислительными способностями бис-о-семихинолятом дихлороолова(IV) ((3,6-SQ)₂SnCl₂), который является анион-радикалом.

Установлено, что 1,1'-диэтилферроцен (ДЭФ) окисляется (3,6-SQ)₂SnCl₂ в отсутствие сильных кислот в ацетонитриле при T=23 °C до катиона Fc⁺(C₂H₅)₂, об образовании которого свидетельствует появление полосы поглощения с λ_{\max} 648 нм в электронном спектре реакционной смеси. В присутствии сильных кислот, например, хлорной, окисление проходит со значительно более высокой скоростью. Поскольку реакция ДЭФ с (3,6-SQ)₂SnCl₂ в ацетонитриле протекает очень быстро, для изучения кинетики реакции использовался смешанный растворитель (AcN-H₂O(2:1)). Разбавление ацетонитрила водой приводит к замедлению процесса, что связано с дезактивацией (3,6-SQ)₂SnCl₂ как окислителя за счет образования водородных комплексов с водой. Полученные результаты свидетельствуют о том, что процесс описывается кинетическим уравнением реакции первого порядка по исходной концентрации каждого из реагентов.

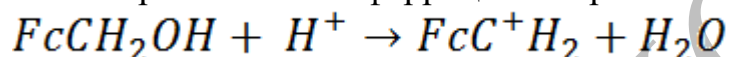
Поведение реагирующей системы было изучено также методом ЭПР. В спектре ЭПР (3,6-SQ)₂SnCl₂ в растворе ацетонитрила при 295 К наблюдается сигнал от исходного бис-о-семихинолята дихлороолова(IV), в котором проявляется широкая линия от самого комплекса и примесный узкий сигнал от восстановленной формы. После добавления 1,1'-диэтилферроцена широкая линия исходного комплекса олова исчезает, интенсивность узкого спектра возрастает примерно в 10 раз. После многократного разбавления наблюдалась сверхтонкая структура в спектре ЭПР, обусловленная взаимодействием неспаренного электрона с четырьмя эквивалентными протонами в положениях 4 и 5 двух хиноновых лигандов в анион-радикальной частице [(3,6-SQ)(3,6-Cat)SnCl₂]. Такой вид спектра говорит о делокализации неспаренного электрона между двумя хелатными лигандами – о-семихинолятом (3,6-SQ) и катехолатом (3,6-Cat). Характеристики ЭПР спектра реакционной смеси «(3,6-SQ)₂SnCl₂+Et₂Fc» в ацетонитриле и смешанном растворителе ((ацетонитрил – вода, 2:1) не отличаются, следовательно, вода не влияет на состояние данного реагента. Обсуждается механизм реакции.

Получение и свойства α -ферроценилкарбениевого иона

Геворгян В.А., Галкина М.С., Фомин В.М.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: niih325@bk.ru

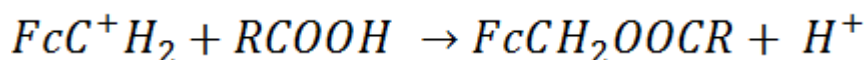
Известно, что ферроцен и его производные широко используются в биомедицине. В настоящей работе приводятся результаты исследования по использованию ферроценилметанола (ФМ) для получения препаратов с комплексом медицинских свойств. Важно, что ФМ легко протонируется сильными кислотами с образованием α -ферроценилкарбениевого иона.



Поэтому целью настоящей работы являлось подбор условий получения этих ионов с высоким выходом и последующее изучение реакции катиона с аскорбиновой кислотой (1), ацетилсалициловой кислотой (2) и аминокислотами (3) (глицин и аланин) для получения соединений, которые обладали бы комплексом лечебных свойств.

Показано, что выход α -ферроценилкарбениевого иона зависит от целого ряда факторов, а именно от природы используемых растворителей и кислот и соотношения концентрации реагентов. Как правило, протонирование различных веществ сильными кислотами изучают в условиях их значительного избытка по отношению к металлокомплексу. Нами для получения высокого выхода карбокатиона используются апротонные растворители (AcN, Diox), где в избытке берется не кислота, а ферроценилметанол по отношению к кислоте $c_{\text{ФМ}}^0/c_{\text{НСЮ}_4}^0 = 200$. При избытке ФМ протонирование протекает значительно быстрее и максимальная по интенсивности полоса поглощения карбокатиона фиксируется сразу. Показано, что в этих условиях наблюдается образование α -ферроценилкарбениевого иона с высоким выходом, который характеризуется появлением полосы поглощения с $\lambda_{\text{max}} = 600 \text{ нм}$ в электронном спектре реакционной смеси, который ранее не был известен.

Карбокатионы являются высокореакционно-способными частицами и способны взаимодействовать с различными p -донорами электронов. Поэтому представляло интерес изучить реакции α -ферроценилкарбениевого иона, прежде всего, с биологически важными кислотами (1-3). Установлено, что добавки кислот (1-2), приводит к снижению интенсивности полосы поглощения карбокатиона, что связано с протеканием следующей реакции.



Реакцию с аминокислотами провести не удалось, так как не удалось подобрать для них апротонных растворителей.

Влияние катиона в составе протонных ионных жидкостей на электропроводность полимерных электролитов

Глушенкова Е.В.^{1,2}, Шмуклер Л.Э.², Сафонова Л.П.²

¹*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия*

²*Институт химии растворов Российской академии наук, Иваново, Россия*
E-mail: ekaterina.glushe@inbox.ru

Ионные жидкости это соли, находящиеся в жидком состоянии в широком интервале температур (обычно ниже 100°C), а в ряде случаев ниже комнатной. Успешным является их применение в электрохимии для создания токопроводящих полимеров, полупроницаемых мембран, проводящих гелей. Среди множества ионных жидкостей особый интерес представляют протонные ионные жидкости (ПИЖ), отличительной особенностью которых является наличие на катионе доступного протона, который отвечает за образования водородных связей.

В настоящей работе было изучено влияние природы катиона в составе ПИЖ на электропроводность протонпроводящих гелевых электролитов и мембран, полученных из гелей.

В качестве ПИЖ были выбраны трифторацетаты диэтиламмония (DEA) триэтиламмония (TEA), диметилэтиламмония (DMEA), диизопропилэтиламмония (DPEA), триэтаноламмония (TEOA), трибутиламмония (TBA)), полученные по реакции нейтрализации эквимольных количеств трифторуксусной кислоты (TFA) и оснований Бренстеда без использования каких-либо растворителей. Полимерные гелевые электролиты получали путем включения пластификатора (раствора ПИЖ в диметилформамиде (DMФА)) в сополимер поливинилиденфторид-со-гексофторопропилен (PVdF-HFP). Мембраны получали методом разлива из соответствующих гелей.

Методы исследования: спектроскопия электрохимического импеданса (Solartron 1260A) в комплекте с электрохимическим интерфейсом (Solartron SI1287A); вискозиметрия (BROOKFIELD марки DV-II+), дифференциальная сканирующая калориметрия (NETZCH DSC 204 F1), ИК-спектроскопия (ИК-Фурье спектрометр Bruker Vertex V80).

В работе определена электропроводность растворов ПИЖ в DMФА, полимерных гелевых электролитов, приготовленных на их основе, и мембран, полученных из этих гелей в широком температурном интервале. Выявлено, что природа катиона в составе допанта влияет на величины электропроводности полимерных электролитов. Методом ИК-спектроскопии исследованы процессы протонирования при переходе от растворов к мембранам.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-03-00640).

Термодинамические свойства привитого сополимера хитозана с поли(2-этилгексилакрилатом)

Горюнова П.Е., Смирнова Н.Н., Сологубов С.С., Маркин А.В.
Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: polina_gorunova93@mail.ru

Актуальной задачей современного материаловедения является создание биоразлагаемых полимеров, способных при соответствующих условиях биодеградировать на безвредные для окружающей среды компоненты. Среди природных полимеров особое место занимают хитин и его деацетилированное производное - хитозан (ХТЗ). Интерес к нему связан с уникальными физиологическими и экологическими свойствами, такими как биосовместимость, биоразлагаемость, гипоаллергенность, отсутствие токсичности. Но, несмотря на перечисленный комплекс свойств, крупномасштабное использование хитозана затруднено, что в значительной мере обусловлено его недостаточной механической прочностью.

Высокая комплексообразующая способность и наличие реакционноспособных групп в макромолекуле дают возможность комбинирования хитозана с различными синтетическими полимерами. Поэтому одним из перспективных направлений является синтез привитых сополимеров хитозана с поли(2-этилгексилакрилатом) (ПЭГА), в которых может быть достигнуто совмещение и усиление свойств каждого из компонентов, а именно улучшение физико-химических свойств хитозана и создание новых материалов на базе соединений с уже известными эксплуатационными характеристиками.

В данной работе впервые изучена температурная зависимость теплоёмкости привитого сополимера ХТЗ с ПЭГА в интервале температур 6–350 К методом адиабатической вакуумной калориметрии и их термического поведения в области 350–500 К методом дифференциальной сканирующей калориметрии; выявлены возможные физические переходы и определены их термодинамические характеристики; рассчитаны стандартные термодинамические функции C_p° , $H^\circ(T) - H^\circ(0)$, $S^\circ(T) - S^\circ(0)$ и $G^\circ(T) - H^\circ(0)$ в области температур от $T \rightarrow 0$ до 350 К; экспериментально определена энергия сгорания, рассчитаны стандартные энтальпия сгорания, энтальпия образования и энергия Гиббса образования при $T = 298.15$ К. Полученные значения были сопоставлены с аналогичными данными для ХТЗ и ПЭГА.

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного задания в сфере научной деятельности Министерства образования и науки РФ («Ведущие научные исследователи», 4.6138.2017/6.7).

Термодинамические свойства мио-инозитола

Гусарова Е.В., Шипилова А.С., Князева С.С.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: gusarova_ev@bk.ru*

Мио-инозитол ($C_6H_{12}O_6$) представляет собой сахарный спирт, синтезируемый из глюкозы во многих тканях организма. Он является витаминоподобным веществом, часто называемым витамином B_8 . Мио-инозитол выступает в качестве важного передатчика сигнала во внутриклеточных сигнальных каскадах в форме различных инозитолфосфатов и фосфатидилинозитоловых липидов, участвуя в передаче сигнала от рецептора инсулина, расщеплении жиров и снижении уровня холестерина в крови. Исследуемый образец мио-инозитола приобретен в фирме NutriVitaShop. С целью фазовой идентификации был проведен рентгенофазовый анализ порошка витамина B_8 (дифрактометр рентгеновский XRD-6000 фирмы Shimadzu). Также было проведено титрование Карла-Фишера, которое показало, что содержание воды в образце вещества ниже предела обнаружения. Исходя из результатов вышеуказанных исследований, можно заключить, что наш образец мио-инозитола представляет собой индивидуальное кристаллическое соединение с содержанием основного вещества не менее 99%. Для определения термодинамических функций были использованы вакуумная адиабатическая калориметрия (БКТ-3.0), калориметрия сгорания и метод Quartz Crystal Microbalance. Для расчета абсолютной энтропии и энтропии образования мио-инозитола изучена температурная зависимость теплоемкости в интервале температур 8-340 К. Теплоемкость монотонно увеличивается с ростом температуры, не проявляя видимых аномалий. Оценена характеристическая температура Дебая $\theta_D = 271.5$ К и фрактальная размерность образца $D = 1.5$, значение которой указывает на цепную структуру соединения. С помощью калориметрии сгорания была получена энтальпия сгорания мио-инозитола. Затем, исходя из полученных данных, была рассчитана его энтальпия образования. Исходя из полученных данных, с помощью уравнения Гиббса-Гельмгольца рассчитана функция Гиббса образования соединения. Методом QCM получена энтальпия сублимации витамина B_8 . Значения всех термодинамических функций мио-инозитола представлены в работе [1].

Методом низкотемпературной порошковой рентгенографии проведено исследование теплового расширения витамина B_8 в интервале температур 150-450 К. В программном комплексе DTS рассчитаны коэффициенты теплового расширения. На основании полученных данных построены фигуры коэффициентов теплового расширения при различных температурах.

Список литературы

[1] A.V. Knyazev, V.N. Emel'yanenko, A.S. Shipilova, D.H. Zaitsau, M.I. Lelet, S.S. Knyazeva, E.V. Gusarova, M.A. Varfolomeev. Thermodynamic properties of myo-inositol // Journal of Chemical Thermodynamics. 2018, V. 116, P. 76-84.

Влияние гидрофобизирующих добавок на электрокинетический потенциал частиц косметических пигментов

Евграфова А.А., Булидорова Г.В

Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия
E-mail: evgrafova95_95@mail.ru

Работа посвящена поиску методов модификации технологических характеристик пигментов, использующихся как компоненты косметических средств. Для исследования выбраны пигменты, допущенные к применению в пищевом, фармацевтическом и косметическом производстве (охра, оксид цинка, диоксид титана, тальк), а также гидрофобизаторы.

Измерена плотность частиц порошков. Двумя методами оценен средний размер частиц порошков, охарактеризована полидисперсность по размерам. Исследовано осаждение дисперсий пигментов в стесненном режиме. Измерен электрокинетический потенциал частиц, исследовано влияние модификации поверхности (гидрофобизации) на величину ζ -потенциала. Оценена прессуемость пигментов с гидрофобизированной поверхностью.

Исследовано влияние гидрофобизаторов метилсиликоната калия и полидиметилсилоксана на электрокинетический потенциал частиц. Показано, что при адсорбции полидиметилсилоксана абсолютные значения ζ -потенциала снижаются вследствие экранирования. При адсорбции на поверхности частиц метилсиликоната калия абсолютные значения ζ -потенциала возрастают более чем в два раза, проходя через экстремум в области концентраций 0,1%. Подтверждено, что гидрофобизация поверхности частиц может улучшить прессуемость пигментов и повысить прочность прессованных изделий. Показана корреляция уплотняемости порошков и их электрокинетического потенциала.

Список литературы

- [1] Zetasizer Nano ZS [Электронный ресурс] / Режим доступа: <http://www.malvern.com/ru/products/product-range/zetasizer-range/zetasizer-nano->[2] Гидрофобизация. Теория и практика [Электронный ресурс] / Режим доступа: <http://www.estateline.ru/>, свободный.

Синтез, идентификация и энтальпии сорбции сложных эфиров пентаэритрита

Емельянов В.В., Красных Е.Л.

Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

E-mail: dragonage2rus@mail.ru.

Одним из объектов промышленного производства является пентаэритрит. Помимо широкого спектра применения, это вещество выделялось своей полной токсической безопасностью при использовании, включая контакт с живыми организмами.

Огромный интерес представляют и сложные эфиры пентаэритрита. Сложные эфиры пентаэритрита и насыщенных жирных кислот отличаются высокой термической стойкостью. Консистентные смазки, содержащие сложные эфиры пентаэритрита соответствующей вязкости и стабильные загустители, дают удовлетворительные результаты при применении в интервале температур от -46 до $+205$ °С. Стойкость к окислению и антикоррозионные свойства сложных эфиров пентаэритрита можно легко улучшить добавлением присадок. [1]. Так же, они могут служить пластификаторами для ПВХ, а также могут служить в качестве фаз в хроматографии.

Для создания процессов крупнотоннажного производства сложных эфиров пентаэритрита отсутствует база данных их термодинамических характеристик, способах очистки и идентификации.

В данной работе получены следующие результаты:

- разработаны методики синтеза и выделения высокочистых сложных эфиров пентаэритрита с кислотами C_2-C_5 различного строения;
- разработаны методики хроматографического разделения и анализа составов смесей;
- рассчитаны логарифмические индексы Ковача и характеристики сорбции для сложных эфиров пентаэритрита с кислотами C_2-C_5 различного строения и с различной степенью замещения гидроксильных групп;
- методом переноса определены давления насыщенных паров синтезированных эфиров и на основании полученных давлений рассчитаны энтальпии испарения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-08-00383 а.

Список литературы

[1] «Новейшие достижения нефтехимии и нефтепереработки. Том V» Редакторы: А. Н. Джорджи, Е. С. Левина, Б. Ф. Тициан Технический редактор З. И. Яковлева, Издательство «Химия», 1965г. 472 с.

Синтез и люминесцентные свойства квантовых точек дисульфида меди и индия и их гибридов

Жукова К.О., Шамилов Р.Р., Галяметдинов Ю.Г.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия*

E-mail: ksu1316@mail.ru

Коллоидным методом были получены и изучены безкадмиевые квантовые точки CuInS_2 и их гибридов $\text{CuInS}_2/\text{ZnS}$ – ядро/оболочка, пригодные для биологических исследований [1]. Подбор оптимальных условий синтеза проводился путем отбора проб через определенные промежутки времени при температуре 230°C . Наибольшее значение квантового выхода (КВ) для наночастиц CuInS_2 составило 3,5% для времени синтеза 20 минут.

С целью увеличения эффективности люминесценции на полученные наночастицы наращивалась оболочка из ZnS . Найдено оптимальное количество компонентов ядра и оболочки для гибридных КТ $\text{CuInS}_2/\text{ZnS}$ с максимальной люминесценцией, которое составило 1:2 в мольном соотношении. Наращивание оболочки ZnS привело к дополнительному повышению квантового выхода до 16,4% и сдвигу пика люминесценции в коротковолновую область.

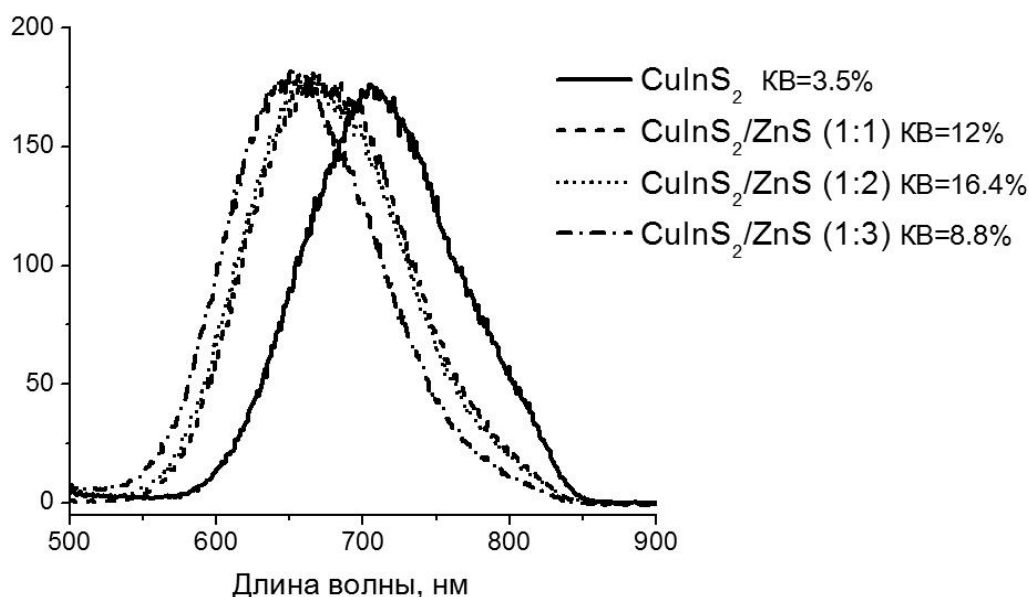


Рис.1. Нормированные спектры люминесценции КТ CuInS_2 и $\text{CuInS}_2/\text{ZnS}$ ($\lambda_{\text{возб}} = 300 \text{ nm}$).

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 17-03-00258-А.

Список литературы

[1] Chen C.-W., Wu D.-Y., Chan Y.-C., Lin C. C., Chung P.-H., Hsiao M., Liu R.-S. // J. Phys. Chem. 2015. V. 119. P. 2852-2860.

Устойчивость комплексов оснований Шиффа пиридоксаль-5-фосфата и гидразидов пиридинкарбоновых кислот с ионом Ni^{2+} в водном растворе

Завалишин М.Н., Гамов Г.А.

Ивановский государственный химико-технологический университет,

Иваново, Россия

E-mail: zavalishin00@list.ru

Одной из самых больших экологических проблем современности является загрязнение солями тяжелых металлов окружающей среды, в частности, соединениями никеля. При отравлениях тяжелыми металлами при лечении используют хелатирующие препараты, способные связывать ионы металлов в малотоксичные комплексы. В качестве хелатирующих агентов возможно использование оснований Шиффа - производных пиридоксаль-5-фосфата. Целью настоящей работы являлось исследование устойчивости комплексов иона Ni^{2+} с гидразонами, образованными пиридоксаль-5-фосфатом и пиридинкарбогидразидами в водном растворе при рН 7,4, соответствующей рН плазмы крови.

Константы устойчивости и стехиометрия координационных соединений иона Ni^{2+} и оснований Шиффа пиридоксаль-5-фосфата и пиридин-4-карбогидразида (изониазида), пиридин-3-карбогидразида, пиридин-2-карбогидразида при рН 7.4 были определены спектрофотометрическим методом (Таблица 1)

Таблица 1. Константы устойчивости и стехиометрия комплексов оснований Шиффа пиридоксаль-5-фосфата и пиридин-4-карбогидразида (изониазида), пиридин-3-карбогидразида, пиридин-2-карбогидразида с ионом Ni^{2+} при рН 7.4.

ML	Стехиометрия M:L	$\lg \beta'$
Ni^{2+} PLP-INH	1:2	10.50±0.10
Ni^{2+} PLP-NH	1:2	10.64±0.15
Ni^{2+} PLP-PH	1:1	7.22±0.06

Комплексы в зависимости от природы лиганда имеют разную стехиометрию. Ион никеля (II) образует комплекс с гидразоном пиридоксаль-5-фосфата и пиридин-2-карбогидразидом состава 1:1. В данном соединении гетероатом азота и карбонильный атом кислорода остатка пиколинкарбогидразида расположены рядом друг с другом. Вероятно, они способны к образованию координационных связей с ионом металла. Таким образом, данный гидразон выступает в качестве четырехдентантного лиганда. Присоединение второй молекулы лиганда ограничивается координационным числом иона Ni^{2+} (6).

Работа выполнена в НИИ Термодинамики и кинетики химических процессов Ивановского государственного химико-технологического университета.

Влияние широкозонного проводника на оптические свойства наночастицы CdSe

Заппарова Л.Р., Осипова В.В., Галяметдинов Ю.Г.

Казанский национальный исследовательский технологический университет, Россия, Казань, Россия

E-mail: lesyarsk@mail.ru

Квантовые точки (КТ), представляющие собой люминесцентные нанокристаллы полупроводников, являются высокоперспективным материалом в различных областях анализа, оптики, электроники, биологии и даже медицины [1], выступая основой люминесцентного сигнала. Поэтому целью данного исследования является изучение влияния наращивания оболочки из широкозонного проводника на оптические свойства наночастицы CdSe.

На первом этапе исследования коллоидным методом синтеза были получены наночастицы CdSe в этанольной среде. Для повышения люминесценции и пассивации поверхностных дефектов ядро CdSe покрывали слоем более широкозонного полупроводника CdS с близкой структурой и составом. Далее происходило формирование оболочки ZnS на гибридной структуре «ядро-оболочка» CdSe-CdS. Спектры люминесценции КТ CdSe, CdSe/CdS, CdSe/CdS/ZnS в гексане представлены на рисунке 1.

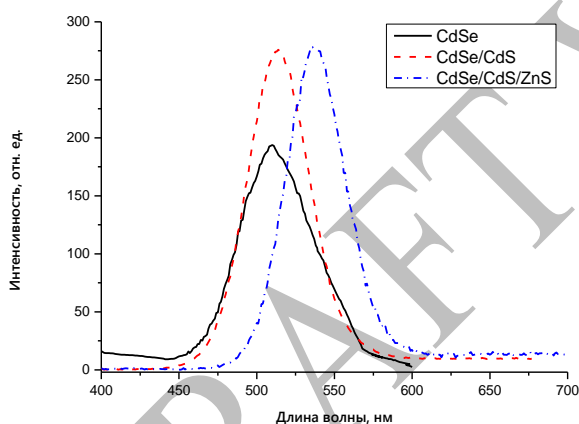


Рис. 1 Спектры люминесценции КТ CdSe, CdSe/CdS, CdSe/CdS/ZnS.

коррелирует с люминесцентными исследованиями, показывающими значительное смещение пика люминесценции для CdSe/CdS/ZnS.

Таким образом, наращивание оболочки из широкозонного проводника приводит к сужению пика люминесценции, делает его более симметричным за счет узкого распределения по размерам гибридных систем CdSe/CdS и CdSe/CdS/ZnS и как следствие к увеличению интенсивности люминесценции.

Список литературы

[1] Pisheh H.S. // Chem. Mater. 2016. Vol. 85. P. 334–339.

Анализ спектров люминесценции (рис. 1) показал, что при наращивании обеих оболочек CdS и ZnS происходит батохромный сдвиг в спектре люминесценции относительно ядер CdSe. По данным динамического светорассеивания диаметр при наращивании первой оболочки CdS изменяется на 2 нм, а при последующем наращивании оболочки ZnS на 7 нм, что коррелирует с люминесцентными исследованиями, показывающими значительное смещение пика люминесценции для CdSe/CdS/ZnS.

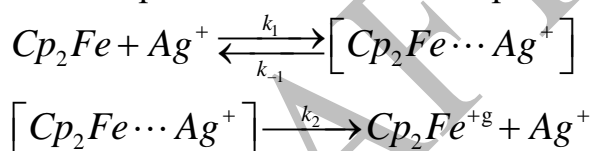
Особенности окисления ферроцена и его производных ионами серебра

Калиничева Я.А., Галкина М.С..

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: niih325@bk.ru

До настоящего времени в литературе появляется немало работ, в которых приводятся сведения по реакциям ферроцена и его производных с различными соединениями. Однако исследований кинетического характера, проливающих свет на механизм протекания изучаемых реакций, как правило, практически нет. В данном сообщении приводятся результаты изучения кинетических закономерностей и механизма окисления ферроцена и некоторых его производных ионами серебра Ag^+ . В качестве растворителя использовались этанол и ацетонитрил, в которых хорошо растворяется как ферроцен, так и $AgNO_3$. Установлено, что реакция Cp_2Fe с Ag^+ легко протекает при комнатной температуре и приводит к появлению катиона ферроцения Cp_2Fe^+ , фиксируемого по полосе поглощения с $\lambda_{max}=618$ нм в электронном спектре реакционной смеси. Добавки октена-1, способного образовывать π -комплексы с Ag^+ , приводят к торможению реакции, что связано, скорее всего, с появлением стерических препятствий и снижением редокс-потенциала Ag^+ за счет σ -компоненты связи Ag^+ -алкен, образующейся при взаимодействии связывающей π -орбитали алкена и вакантной 5 s-орбитали серебра. Показано, что зависимость начальной скорости окисления ферроцена от концентрации реагентов описывается уравнением $W_0=k_{эфф}[Cp_2Fe]_0[Ag^+]_0$, которое с учетом свойств реагентов позволяет предположить следующий механизм реакции



Кинетический анализ этого механизма приводит к уравнению для скорости реакции: $W=Kk_2[Cp_2Fe][Ag^+]$, которое идентично установленному экспериментально ($k_{эфф}=k_2K$). Ожидалось, что ион Ag^+ вследствие своих малых размеров будет легко окислять 1,1'-бисдифенилфосинферроцен (ДФФ), имеющий два объемных заместителя, которые создают большие стерические препятствия для его окисления H_2O_2 и п-хиноном в присутствии кислоты. Полученные нами данные свидетельствуют о том, что ДФФ не окисляется ионом Ag^+ ни в этаноле, ни в ацетонитриле, ни в растворе ацетонитрила с водой, несмотря на высокий редокс-потенциал окислителя, что связано со специфическими взаимодействиями компонентов реакционной смеси между собой.

Фазовые равновесия в системе Fe-Al-O при температуре 1273 К

Кимяшов А.А., Ряшенцев Д.С.

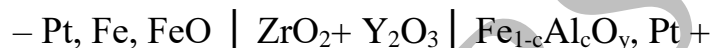
Челябинский государственный университет

E-mail: kimyshov@rambler.ru

Диаграмма состояния системы Fe-Al-O наиболее обстоятельно исследована при температурах выше 1500 К. Установлено, что герцинит образует с магнетитом неограниченный ряд твердых растворов со структурой шпинели.

При температурах ниже 1500 К информация о термодинамических свойствах системы ограничена и противоречива. По данным одних авторов шпинельный раствор распадается при 1273 К, по другим – близка к 1173 К.

В настоящей работе методом ЭДС исследованы фазовые равновесия в системе Fe-Fe₃O₄-FeAl₂O₄ при температурах 1100–1300 К. Были измерены ЭДС гальванических элементов

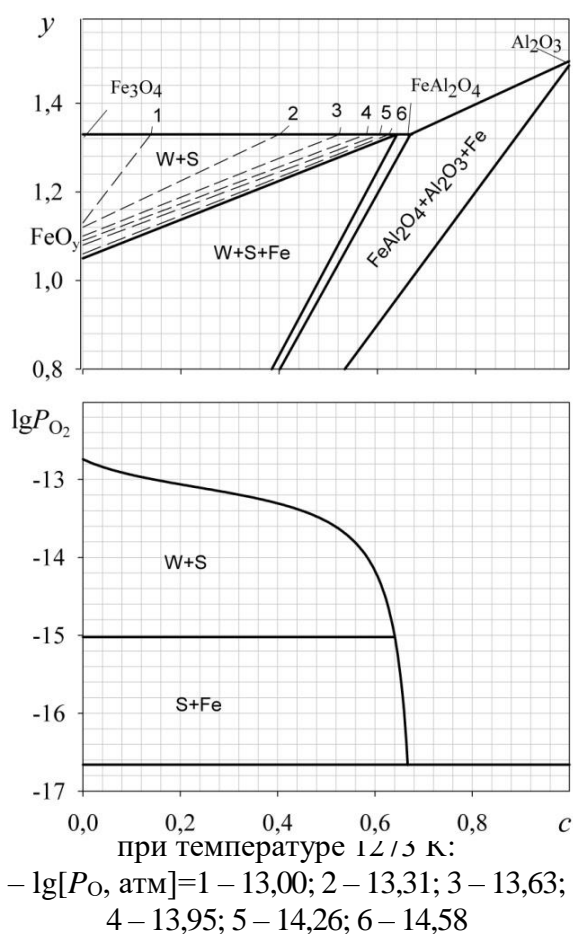


с образцами исследуемых веществ, валовый состав которых выражается формулой Fe_{1-c}Al_cO_y. Электродом сравнения служила равновесная смесь железа и вюстита (Fe, FeO). По значениям ЭДС, используя уравнение Нернста, определяли равновесные образцам давления кислорода.

На основании полученных данных построены изотермические сечения диаграммы состояния системы Fe-Al-O при различных температурах в интервале 1100–1300 К. Для иллюстрации одно из них для 1273 К приведено на рисунке.

Верхняя часть диаграммы характеризует фазовый состав системы в координатах $y = \frac{O}{Fe+Al} - c = \frac{Al}{Fe+Al}$ (здесь символами элементов обозначены их мольные доли). Нижняя часть диаграммы показывает при каких давлениях кислорода реализуется заданное равновесие.

Как видно из диаграммы, при температуре 1273 К магнетит и герцинит неограниченно растворяются друг в друге. По нашим оценкам шпинельный раствор распадается на две фазы при температуре 1084 К и $\lg P_{O_2} = -17,81$.



Описание химического взаимодействия в четырехкомпонентной взаимной системе Li,Na,Cs||F,Cl конверсионным методом

Козырева М.С., Сухаренко М.А. Гаркушин И.К.

Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

E-mail: maruska-r@yandex.ru

В трехкомпонентных взаимных системах, ограничивающих данную четырехкомпонентную систему Li,Na,Cs||F,Cl (рис. 1), в точках полной конверсии протекают следующие реакции обмена:

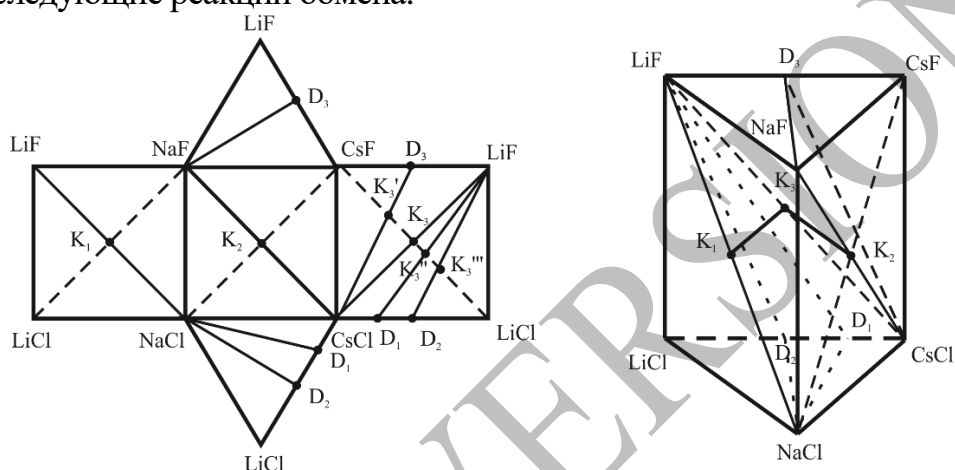


Рис.1 Развертка и остов составов четырехкомпонентной взаимной системы Li,Na,Cs||F,Cl

Точка K₁: NaF+LiCl → LiF+NaCl

$$\Delta_f H^\circ_{298} = \Delta_f H^\circ_{298}(\text{LiF}) + \Delta_f H^\circ_{298}(\text{NaCl}) - \Delta_f H^\circ_{298}(\text{NaF}) - \Delta_f H^\circ_{298}(\text{LiCl}) = -614,671 - 411,412 + 574,086 + 408,650 = -43,347 \text{ кДж}$$

$$\Delta_f G^\circ_{298} = \Delta_f G^\circ_{298}(\text{LiF}) + \Delta_f G^\circ_{298}(\text{NaCl}) - \Delta_f G^\circ_{298}(\text{NaF}) - \Delta_f G^\circ_{298}(\text{LiCl}) = -586,400 - 384,384 + 542,572 + 384,112 = -44,100 \text{ кДж}$$

Точка K₂: NaCl+CsF → NaF+CsCl

$$\Delta_f H^\circ_{298} = \Delta_f H^\circ_{298}(\text{NaF}) + \Delta_f H^\circ_{298}(\text{CsCl}) - \Delta_f H^\circ_{298}(\text{NaCl}) - \Delta_f H^\circ_{298}(\text{CsF}) = -574,086 - 442,688 + 411,412 + 554,756 = -50,606 \text{ кДж}$$

$$\Delta_f G^\circ_{298} = \Delta_f G^\circ_{298}(\text{NaF}) + \Delta_f G^\circ_{298}(\text{CsCl}) - \Delta_f G^\circ_{298}(\text{NaCl}) - \Delta_f G^\circ_{298}(\text{CsF}) = -542,572 - 413,998 + 384,384 + 525,652 = -46,534 \text{ кДж}$$

Точка K₃: CsF + LiCl → LiF + CsCl

$$\Delta_f H^\circ_{298} = \Delta_f H^\circ_{298}(\text{LiF}) + \Delta_f H^\circ_{298}(\text{CsCl}) - \Delta_f H^\circ_{298}(\text{CsF}) + \Delta_f H^\circ_{298}(\text{LiCl}) = -614,671 - 442,688 + 554,756 + 408,650 = -93,953 \text{ кДж}$$

$$\Delta_f G^\circ_{298} = \Delta_f G^\circ_{298}(\text{LiF}) + \Delta_f G^\circ_{298}(\text{CsCl}) - \Delta_f G^\circ_{298}(\text{CsF}) + \Delta_f G^\circ_{298}(\text{LiCl}) = -586,400 - 413,998 + 525,652 + 384,112 = -90,634 \text{ кДж}$$

Кроме реакций обмена, в трехкомпонентной взаимной системе Cs, Li||F,Cl протекают реакции образования двойных соединений: Точка K₃' – 2CsF+LiCl→CsCl+LiCsF₂ (D₃); Точка K₃'' – 2CsF+3LiCl→LiF+2LiCs₂Cl₃ (D₁); Точка K₃''' – CsF+2LiCl→LiF+LiCsCl₂ (D₂). Исходя из приведенных расчетов, можно сделать вывод, что в четырехкомпонентной взаимной системе Li,Na,Cs||F,Cl образуются две линии конверсии K₁K₃ и K₂K₃, которые сходятся в точке полной конверсии K₃.

**Термодинамический анализ реакций гидрирования-дегидрирования
потенциальных органических носителей водорода.**

Коннова М.Е., Чернова М.М., Востриков С.В., Пимерзин А.А.
Самарский государственный технический университет, Самара, Россия
E-mail: mariaknv@gmail.com

Жидкие органические носители (ЛОНС-Liquid Organic Hydrogen Carrier) являются новыми и перспективными материалами для аккумулирования водорода. Хранение и высвобождение водорода в таких системах основано на реакции гидрирования-дегидрирования (HYD) - (DHYD) подходящих органических соединений, а перспектива внедрения таких систем возникает при накоплении более 5.0 % мас. водорода.

Термодинамический анализ реакций HYD-DHYD позволяет существенно сократить временные затраты на поиск наиболее подходящих органических ЛОНС. Для многих гетероциклических соединений, способных участвовать в реакциях HYD-DHYD, эти сведения отсутствуют или требуют уточнения.

В качестве объектов исследования в данной работе были выбраны индолин и N-метилиндол. Каталитическое гидрирование-дегидрирование проводили в автоклаве на Ni, Pd и Pt-катализаторах при варьировании температуры в диапазоне от 140 до 220°C, давления от 5 до 20 атм, соотношения H₂/сырье от 0 до 10. Исходные индолин или N-метилиндол растворяли в n-гексане в количестве 2 % масс. Полностью гидрированные производные индолина и N-метилиндола затем использовали в качестве реагентов для реакции DHYD. Для каждой системы достижение состояния равновесия доказывалось неизменностью состава реакционной массы во времени. Анализ продуктов реакции осуществляли методом ГХ, идентификацию полученных компонентов проводили методом ГХМС.

На основании составов равновесных смесей были рассчитаны константы равновесия гидрирования-дегидрирования и термодинамические характеристики 15 реакций в газовой и жидкой фазах, протекающие в системах с участием индолина или N-метилиндола. Выполнено сопоставление полученных термодинамических характеристик с имеющимися литературными данными. Выявлены параметры (температура и давление), в которых достигается исчерпывающее HYD индолина и N-метилиндола и DHYD октагидроиндола и N-метилоктагидроиндола.

Сделаны выводы о возможности использования индолина и N-метилиндола в качестве потенциальных жидких органических носителей водорода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Правительства Российской Федерации, постановление №220 от 9 апреля 2010 года, грант №14.Z50.31.0038.

Термодинамические свойства композита на основе полифенилхиноксалина и наночастиц оксида железа (III)

Коткова П.С., Смирнова Н.Н., Перевезенцев А.А., Маркин А.В.
Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: polly.kotkova@gmail.com

Одним из наиболее перспективных и быстро развивающихся направлений современной химии является исследование композитов. Большой интерес исследователей обусловлен, с одной стороны, огромными возможностями построения композитов самой разнообразной архитектуры, составом армирующего наполнителя и матрицы, а с другой стороны – обоснованными ожиданиями широких перспектив их практического использования, например, в машиностроении, медицине, авиации и космонавтики и других областях. Благодаря своей структуре композиты могут быть использованы в качестве катализаторов ряда реакций в широкой области температур.

В данной работе впервые было проведено комплексное исследование стандартных термодинамических свойств композита на основе полифенилхиноксалина и наночастиц оксида железа (III). Методами адиабатической вакуумной и дифференциальной сканирующей калориметрии определена температурная зависимость теплоемкости C_p^0 композита в интервале 6-520 К. В изученной области температур образец находится в стеклообразном и высокоэластическом состояниях. В интервале 280-350 К было выявлено расстеклование аморфной части композита.

Для низкотемпературной теплоемкости исследуемого композита проведена мультифрактальная обработка, определена фрактальная размерность D и установлена пространственная топология структуры.

В этой работе также были рассчитаны значения стандартных термодинамических функций композита: теплоемкости, энтальпии, энтропии и функции Гиббса нагревания в интервале от $T \rightarrow 0$ до 480 К и сопоставлены стандартные термодинамические функции композита на основе полифенилхиноксалина и наночастиц оксида железа с аддитивной смесью, состоящей из этих компонентов, и установлено, что рассчитанные значения отличаются между собой и что композит не является механической смесью.

Работа была выполнена при финансовой поддержке Государственного задания в сфере научной деятельности Министерства образования и науки РФ («Ведущие исследователи», 4.6138.2017/6.7).

Инкапсуляция билирубина в циклодекстринах и получение гибридных функциональных материалов на их основе

Кочергин Б.А., Романова Г. Н., Соломонов А.В., Гончаренко А.А., Румянцев Е.В.
Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
E-mail: kocherginba1992@mail.ru

Билирубин, линейный тетрапиррол, основной желчный пигмент организма. При высоких концентрациях токсичен, а при низких — выступает в роли антиоксиданта. Последние исследования показывают перспективы создания противораковых препаратов на основе билирубина [1, 2]. Однако его избыток в организме может привести к возникновению ряда заболеваний, таких как гипербилирубинемия, синдром Жильбера, Дабина-Джонсона, Криглера-Найара, Ротора, связанных с нарушением метаболизма пигмента. Очевидно, что требуется разработка методов выведения билирубина из организма, переводя его из нерастворимой формы. Билирубин в организме находится в «ridge tile»-конформации, стабилизированной шестью внутримолекулярными водородными связями. Разрушения этих связей можно добиться путем связывания билирубина с макроциклическими рецепторами на основе циклодекстрина, способных инкапсулировать гостевые молекулы различных размеров, повышая их растворимость в полярных средах без токсического действия. В этой связи изучение параметров реакций образования комплексов включения билирубин-циклодекстрин потенциально позволит контролировать биораспределение желчного пигмента. Закрепление циклодекстрина на поверхности и в объеме различных наночастиц неорганической природы позволит обеспечить простой способ выведения билирубина из организма, а также разработать *ex vivo* системы для его удаления.

Таким образом, цель данной работы заключается в исследовании межмолекулярных взаимодействий билирубина с альфа-, бета- и гамма-циклодекстринами. Для достижения цели были использованы методы компьютерного моделирования, спектроскопии поглощения и флуоресценции. Для структурной идентификации полученных наночастиц использовали ИК-спектроскопию, рентгено-структурный анализ. Также был проведен компьютерный расчет методом молекулярного докинга с использованием программ Python Molecular Viewer и AutoDock 4.2, который показал самопроизвольность формирования комплексов с изменением конформации билирубина, разрывом внутримолекулярных водородных связей с образованием новых с молекулами циклодекстринов.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации № МК-2124.2017.3 (2017 – 2018).

Список литературы

- [1] A. Solomonov, Y. Marfin. *Febs Journal* 284 (2017) S1 385.
- [2] Yonghyun Lee, Soyoung Lee, Dong Yun Lee, Byeongjun Yu, Wenjun Miao, and Sangyong Jon. *Angew. Chem. Int. Ed.* 55 (2016), 1 – 6.

Трехкомпонентная система $\text{LiCl-LiVO}_3\text{-Li}_2\text{WO}_4$

Буланова А.В.¹, Кравец Н.С.¹, Гаркушин И.К.², Губанова Т.В.²

¹Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия

²Самарский государственный технический университет, Самара, Россия
E-mail: kuro169tengu@gmail.com

Методом дифференциального термического анализа изучены фазовые равновесия в трехкомпонентной системе $\text{LiCl-LiVO}_3\text{-Li}_2\text{WO}_4$. Установлен эвтектический состав: 55 мол. % LiCl , 30 мол. % LiVO_3 , 15 мол. % Li_2WO_4 с температурой плавления 568 °С. По методу аддитивности рассчитали некоторые физико-химические свойства. Исходные данные по индивидуальным веществам взяты из [1] (табл. 1).

Таблица 1. Термодинамические характеристики исходных солей и эвтектический состав эвтектики трехкомпонентной системы $\text{LiCl-LiVO}_3\text{-Li}_2\text{WO}_4$

Вещество	M , г/моль	$\Delta_m H_{\text{мол}}$, кДж/моль	$\Delta_m S_{\text{мол}}$, Дж/моль·К	ρ , кг/м ³	x , мол.доли	ω , масс.доли
LiCl	42.4	19.748	22.38	2.068	0.55	0.247
LiVO_3	105.9	26.7	0.282	5.5	0.3	0.337
Li_2WO_4	261.7	28.451	28.074	3.71	0.15	0.416

Расчет мольной и удельной энтальпий плавления эвтектических составов провели по формулам (1) и (2):

$$\Delta_m H_{\text{уд}}(E) = \sum \omega_i \cdot \Delta_m H_{\text{уд}, i} \quad (1)$$

$$\Delta_m H_{\text{мол}}(E) = \sum x_i \cdot \Delta_m H_{\text{мол}, i} \quad (2)$$

где $\Delta_m H_{\text{уд}}(E)$ – удельная энтальпия плавления эвтектического состава, Дж/г; $\Delta_m H_{\text{мол}}(E)$ – мольная энтальпия плавления эвтектического состава, Дж/моль; $\Delta_m H_{\text{уд}, i}$ – удельная энтальпия плавления компонента, Дж/г; $\Delta_m H_{\text{мол}, i}$ – мольная энтальпия плавления компонента, Дж/моль; ω_i – массовая доля i -го компонента; x_i – мольная доля i -го компонента.

Аналогично рассчитаны масса сплава, энтропия плавления и плотность эвтектического состава. Результаты расчетов представлены в табл. 2.

Таблица 2. Характеристики эвтектики в исследованной системе, рассчитанные по правилу аддитивности

Точка	$t_{\text{пл}}$, °С	$\Delta_m H_{\text{уд}}$, Дж/г	$\Delta_m H_{\text{мол}}$, Дж/моль	$\Delta_m S_{\text{уд}}$, Дж/г·К	$\Delta_m S_{\text{мол}}$, Дж/моль·К	$\rho_{\text{уд}}$, кг/м ³	$M_{\text{спл}}$, г/моль
Е	472	160.2	23139	0.27	25.4	3890	39.255

Список литературы

[1] Глушко В.П. Термические константы веществ / Ресурс интернет: - <http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html/welcome.html>.

Твердые растворы $\text{Nd}_{2-x}\text{Ca}_x\text{CoO}_{4-\delta}$ и $\text{Nd}_{2-y}\text{Ca}_y\text{O}_3$: структура и свойства

Крохина Т.Г., Урусова А.С., Аксенова Т.В., Черепанов В.А.

Уральский федеральный университет им. Первого Президента России

Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

E-mail:tomila-mila@mail.ru

Многокомпонентные твердые растворы на основе кобальтитов редкоземельных и щелочноземельных металлов являются объектом многочисленных исследований в связи с возможностью их практического применения в различных областях техники.

Синтез образцов для исследования проводили по глицерин-нитратной технологии при температуре 1373 К на воздухе. Фазовый состав полученных образцов контролировали рентгенографически. Уточнение структурных параметров из дифрактограмм осуществляли методом полнопрофильного анализа Ритвелда в программе "Fullprof 2008".

Методом рентгеновской порошковой дифракции установлено, что введение кальция в позицию неодима в $\text{Nd}_2\text{CoO}_{4-\delta}$ приводит к образованию твердых растворов общей формулой $\text{Nd}_{2-x}\text{Ca}_x\text{CoO}_{4-\delta}$. Однофазные оксиды $\text{Nd}_{2-x}\text{Ca}_x\text{CoO}_{4-\delta}$ образуются в интервале составов $0.7 \leq x \leq 1.0$. Кристаллическая структура однофазных оксидов была проиндексирована в тетрагональной симметрии (пр. гр. $I4/mmm$). Для всех однофазных образцов из рентгенографических данных рассчитаны параметры элементарных ячеек, уточнены координаты и длины связей атомов в кристаллической решетке. Внутри области гомогенности наблюдается монотонное уменьшение параметров и объема элементарных ячеек, что связано с размерным эффектом ($r_{\text{Nd}^{3+}}=1.27 \text{ \AA}$ и $r_{\text{Ca}^{2+}}=1.06 \text{ \AA}$). Замещение ионов неодима меньшими по размеру ионами кальция, приводит к постепенному уменьшению длины связи В-О и, как следствие, к уменьшению параметров элементарной ячейки.

Методом йодометрического титрования было определено абсолютное значение кислородной нестехиометрии для $\text{Nd}_{2-x}\text{Ca}_x\text{CoO}_{4-\delta}$ ($x=0.7; 0.8; 0.9, 1.0$). Показано, что содержание кислорода в твердых растворах $\text{Nd}_{2-x}\text{Ca}_x\text{CoO}_{4-\delta}$ практически не изменяется с увеличением содержания кальция в образцах.

Область гомогенности оксидов $\text{Nd}_{2-y}\text{Ca}_y\text{O}_3$ лежит в интервале составов с $0.0 \leq y \leq 0.1$. Подобно крайнему члену ряда, твердые растворы $\text{Nd}_{2-y}\text{Ca}_y\text{O}_3$ имеют гексагональную структуру и кристаллизуются в пространственной группе $P-3m1$.

Поляризованная люминесценция ЖК комплекса европия (III)

Крупин А.С., Хайруллина Р.Р., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.

Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия

E-mail: krupin_91@mail.ru

Комплексы лантаноидов (III) имеют большую практическую значимость для производства излучающих материалов с высокой чистотой излучающего цвета и являются перспективными для использования в качестве компонентов органических светоизлучающих диодов, плоских и гибких дисплеев, оптических волноводов, люминесцентных биозондов, перестраиваемых лазеров, солнечных батарей и т.д. Жидкокристаллические (ЖК) соединения лантаноидов в этом аспекте представляют еще больший интерес, вследствие возможности объединения ориентационного поведения ЖК мезофазы с монохроматической люминесценцией некоторых ионов Ln^{3+} и создания multifunctional материалов с необычными практическими свойствами.

В данной работе впервые изучено влияния ориентации мезофазы комплекса европия (III) (рис. 1), проявляющих смектический А мезоморфизм, на его люминесцентные свойства (рис. 2).

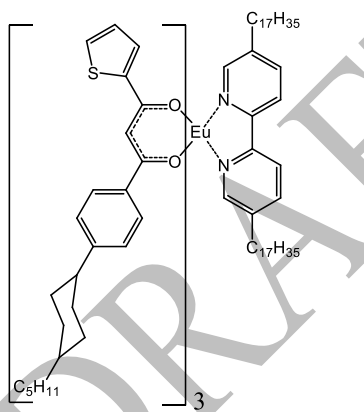


Рис. 1. Структура комплексов лантаноидов (III).

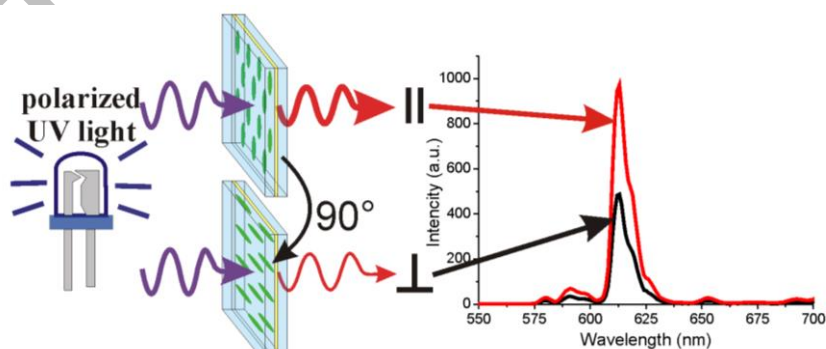


Рис. 2. Спектры поляризованной люминесценции комплекса европия.

Показано, что наличие ЖК свойств у комплекса $Eu(III)$ позволяет получать материалы с регулируемой интенсивностью поляризованной люминесценции. При этом степень упорядоченности образца зависит от способа ориентации. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №16-03-00443.

Влияние оксидов тиомочевины на процесс гидроксилирования кумарина пероксидом водорода в водных растворах

Кузнецова А.А.¹, Молодцов П.А.¹, Макарова А.С.², Макаров С.В.²

¹*Ивановский государственный химико-технологический университет
Иваново, Россия*

²*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия
E-mail: AlenaKuznec@yandex.ru*

Диоксид тиомочевины (ДОТМ, $(\text{NH}_2)_2\text{CSO}_2$) широко применяется во многих областях химии и химической технологии [1,2]. Ранее нами установлено, что диоксид и триоксид тиомочевины (ТОТМ, $(\text{NH}_2)_2\text{CSO}_3$) в смеси с пероксидом водорода могут быть использованы для гидроксилирования терефталевой кислоты [3].

В настоящей работе спектрофлуорометрическим методом показано, что указанные серосодержащие соединения активируют пероксид водорода и в другой реакции - гидроксилировании кумарина, протекающей с образованием 7-гидроксикумарина, причем скорость этого процесса значительно выше, чем скорость гидроксилирования терефталевой кислоты. Установлено также, что, в отличие от реакции образования гидрокситерефталевой кислоты, в которой участвуют продукты распада ДОТМ и ТОТМ – цианамид и дициандиамида, в реакцию с кумарином вступают исходные ди- и триоксид тиомочевины.

Показано, что диоксид тиомочевины в слабокислых водных растворах является более эффективным активатором пероксида водорода, чем триоксид тиомочевины. Предложены механизмы реакций гидроксилирования кумарина системами пероксид водорода – ДОТМ (ТОТМ).

Список литературы

[1] Makarov S. V., Makarova A. S., Silaghi-Dumitrescu R. Sulfoxylic and thiosulfurous acids and their dialkoxy derivatives, in Patai's Chemistry of Functional Groups, The Chemistry of Peroxides. Vol. 3 Part 1. 2014. P. 265.

[2] Makarov S.V, Horvath A. K., Silaghi-Dumitrescu R., Gao Q., Chem. Eur. J. 2014, 20, P. 14164 – 14176.

[3] Власова Е.А., Кузнецова А.А., Головашова Е.С., Макаров С.В., Журн. общей химии, 2017, 87, N 4, 565-569.

Структурные и электроповерхностные свойства пористых стекол марки 8В-НТ в водных растворах FeCl_3

Кузнецова А.С., Ермакова Л.Э., Волкова А.В.

*Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия*

E-mail: a_kuznetsova95@mail.ru

Среди различных технологических методов, используемых для удаления тяжелых металлов, таких как ионы Fe^{3+} , из сточных вод, адсорбция является

одним из наиболее экономически эффективных. В качестве адсорбентов рассмотрены высококремнезёмный пористые стекла (ПС). Стоит отметить, что понимание механизмов сорбционных процессов на границе раздела твёрдое тело – жидкость и умение ими эффективно управлять основывается на информации о структурных и электроповерхностных свойствах адсорбентов. Поэтому представляло интерес исследовать структурные, электрокинетические и адсорбционные характеристик микро- и макропористых стекол марки 8В-НТ (радиусы пор 1.5 нм и 16 нм) в растворах, содержащих специфически сорбирующиеся ионы железа (III) в интервале концентраций 10^{-5} - 0.5 М.

Коэффициент структурного сопротивления β , отражающий вклад непроводящего скелета в электропроводность мембраны, для МАП стекол, не содержащих вторичного кремнезема, практически не зависел от вида электролита и не менялся во времени. Для МИП стекол при перемещении мембран из HCl к раствору FeCl₃ наблюдалось уменьшение величины β , однако при повторных перемещениях к HCl, затем FeCl₃ и снова в HCl величина β возвращалась к изначальному значению в соответствующем растворе. Значение электрокинетического потенциала (ζ) для исследованных ПС в растворах FeCl₃ были найдены методами микроэлектрофореза и потенциала течения. Установлено, что высокая специфичность ионов железа (III) к поверхности пористого стекла приводит к появлению положительной области ζ -потенциала вследствие сверхэквивалентной адсорбции противоионов в штерновском слое. Характер концентрационных зависимостей величин ζ , найденных разными методами, одинаков. Обнаружено, что положение ИЭТ зависело от метода определения ζ -потенциала, что связано, по-видимому, с различным строением двойного электрического слоя (ДЭС) на открытой поверхности частиц ПС и в поровых каналах мембран. Показано, что эффективность удаления ионов железа (III) возрастает с уменьшением начальной концентрации раствора FeCl₃. Экспериментальные данные проанализированы с помощью моделей Ленгмюра и Фрейндлиха. Величина предельной адсорбции ионов Fe³⁺ из разбавленных растворов составляет 3.4×10^{-11} моль/см².

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 17-03-01011а. Исследования проведены с использованием оборудования Ресурсного Центра СПбГУ «Методы анализа состава вещества» и Междисциплинарного Ресурсного Центра по направлению «Нанотехнологии».

Исследование трехкомпонентной системы CsF-CsBr-Cs₂MoO₄

Кузнецова А.С., Брумм Д.А., Сухаренко М.А.

Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

E-mail: kznva_anna@mail.ru

Методом дифференциального термического анализа проведено экспериментальное исследование трехкомпонентной системы CsF-CsBr-Cs₂MoO₄ (рис.1). Соединение конгруэнтного плавления D (Cs₃FMoO₄) разбивает исследуемую систему на два стабильных треугольника, в каждом из которых образуется тройная эвтектика.

В симплексе CsCl-CsF-D тройная эвтектика E₁ – вырожденная, и оказывается очень сильно прижата к двойной стороне CsF-CsCl. Путем добавления 1% экв. Cs₂MoO₄ к двойной эвтектике e₂ определен состав тройной эвтектики: 1% экв. Cs₂MoO₄, 50% экв. CsCl, 49% экв. CsF. Температура плавления тройной эвтектики составила 438°C.

В симплексе CsCl-Cs₂MoO₄-D тройная эвтектика E₂ также оказывается сильно прижата к двойной стороне CsCl-Cs₂MoO₄. Ее координаты выявили путем последовательного изучения двух политермических разрезов: QP (Q [55% CsCl, 45% Cs₂MoO₄]; P [40% CsCl, 15% CsF, 45% Cs₂MoO₄]) и Cs₂MoO₄ → E₂ → E₂. Температура плавления тройной эвтектики составила 561°C, состав: 2% CsF + 53% CsCl + 45% Cs₂MoO₄.

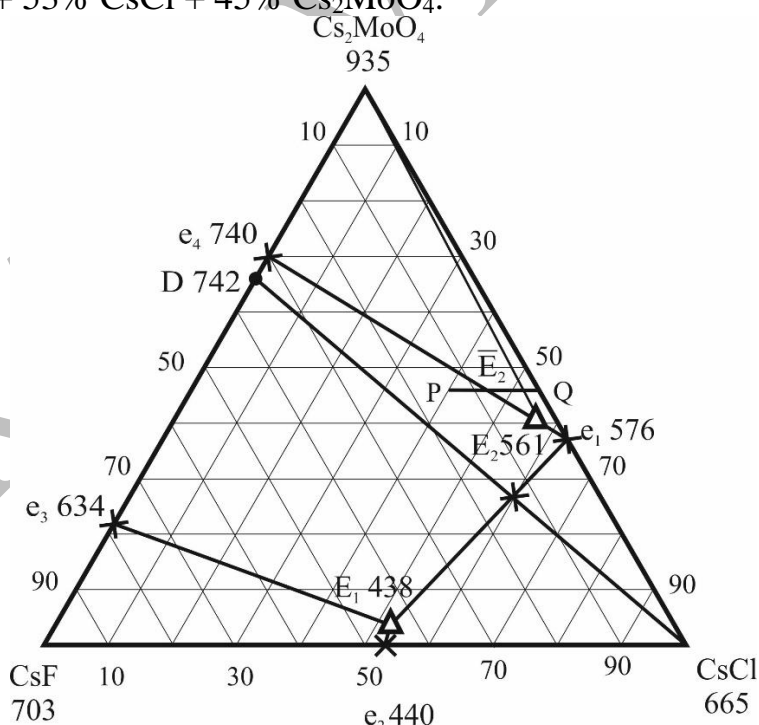


Рис. 1. Проекция фазового комплекса трехкомпонентной системы CsF-CsCl-Cs₂MoO₄ на треугольник составов

Ликвидус системы CsF-CsBr-Cs₂MoO₄ представлен шестью полями кристаллизации: хлорида цезия в α и β модификациях, фторида цезия, молибдата цезия в α и β модификациях, соединения D.

Исследование физико-химии воднокислых растворов хитозана методом электропроводности

Кузьмина Д.А., Климова М.Н., Саломатина Е.В., Смирнова Л.А.
Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: kuzminadasha1994@mail.ru

Одним из наиболее распространенных возобновляемых органических соединений на Земле, относящихся к классу полисахаридов, наряду с целлюлозой является хитин. Он может быть превращен во многие производные, наиболее доступным из которых является хитозан поли((1,4)-2-амино-2-дезоксид-β-D-глюкоза). Хитозан является предметом многочисленных научных и прикладных исследований, касающихся разработки новейших материалов в области биомедицины, очистки сточных вод, тканевой инженерии. Интерес к нему вызван его уникальными физиологическими и экологическими свойствами – биосовместимостью, способностью к биодеструкции, физиологической активностью, доступностью сырьевых источников. Получение новых сведений о физико-химических свойствах растворов хитозана представляют важную и актуальную задачу.

Целью работы являлось экспериментальное определение эквивалентной электропроводности воднокислых растворов хитозана и его степени и константы диссоциации при спиральной конформации и конформации клубка макромолекул. Экспериментально определили эквивалентную электропроводность при бесконечном разбавлении воднокислых раствором хитозана с различным значением рН среды, определяющим конформационное состояние его макромолекул. Они составили $276,1 \pm 3,5$ и $346,5 \pm 5,1 \text{ Ом}^{-1} \cdot (\text{моль экв})^{-1} \cdot \text{см}^2$ для спиральной конформации макромолекул и конформации клубка, соответственно. Определены степень и константы диссоциации хитозана в водных растворах УК: при спиральной конформации макромолекул константа диссоциации хитозана составляет $(3,68 \pm 0,18) \cdot 10^{-5}$, а при конформации клубка – $(0,46 \pm 0,07) \cdot 10^{-5}$. Исследование показало, что различие в значениях основных характеристик диссоциации хитозана в растворе при разных конформациях макромолекул, обусловлено их структурными особенностями.

Макромолекула-клубок удерживает внутри своей координационной сферы заключенный в ней растворитель. В такой системе λ , α и K будут определяться диссоциацией амино-групп, находящихся лишь на внешней поверхности координационной сферы. При спиральной конформации повторяющееся звено хитозана состоит из двух зеркально расположенных в пространстве пиранозных звеньев, в результате амино-группа одного звена будет направлена в спираль, а соседнего – во внешнюю среду (растворитель). В результате в макромолекулах спиральной конформации, по сравнению с клубком, резко возрастает доля амино-групп, определяющих λ раствора, α и K .

Импедансная спектроскопия пленок полианилина

Ламакина О.С., Фадейкина И.Н.

Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

E-mail: lamakina94@mail.ru

Среди проводящих полимеров полианилин (ПАНИ) выделяется широким спектром свойств, позволяющих использовать его в различных прикладных областях: сенсоры, топливные элементы, катализаторы, электрохромные устройства и многое другое. Значительный интерес представляет изучение электроактивных свойств ПАНИ. В представленной работе был использован ПАНИ, полученный путем электрохимической полимеризации [1]. Образцы ПАНИ исследовались на импедансметре Z-500PRO [2].

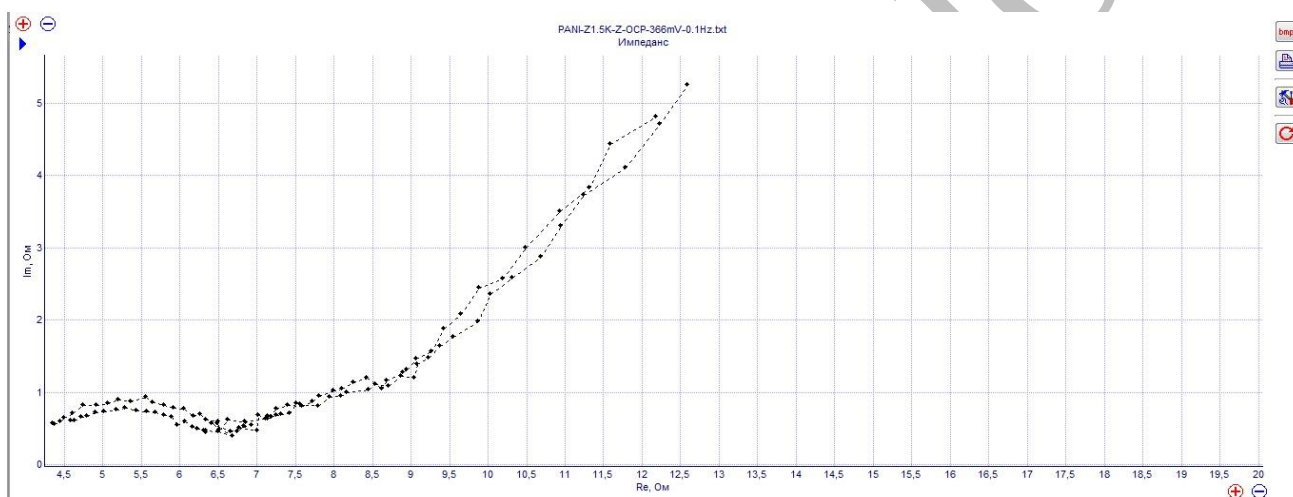


Рис. 1. Зависимость мнимой составляющей импеданса от действительной, с потенциалом 0 и 366 мВ, относительно хлорсеребряного электрода

На кривой (рис. 1) область в диапазоне от 4,5 до 6,5 Ом соответствует процессам сопротивления, следующая область от 7 до 9 Ом означает, что произошло взаимодействие поверхности электрода с раствором, линия в диапазоне от 9 до 12,5 Ом соответствует импедансу Варбурга, т.е. импедансу идеальной линейной полубесконечной диффузии.

Таким образом, импедансная спектроскопия является одним из наиболее успешных методов исследования проводящих полимеров. Импедансный спектр ПАНИ позволяет увидеть процессы происходящие на электродах и сделать вывод об электрофизических свойствах полимера.

Список литературы

[1] Фадейкина И.Н., Ламакина О.С. Получение функциональных плёнок полианилина методом электрохимического синтеза и исследование влияния концентрации мономера// Материалы 22 научно-практ. конф., Дубна, 2015г.

[2] Буянова Е.С., Емельянова Ю.В. Импедансная спектроскопия электролитических материалов: учебное пособие, Екатеринбург, 2008. С. 37-41

Структурные и функциональные характеристики сложных оксидов на основе ниобата лантана, полученных двойным замещением



Левина А.А., Богдан Н.О., Буянова Е.С.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: la34370@yandex.ru

Сложные оксиды, кристаллизующиеся в низшей симметрии, считающиеся перспективными ионными проводниками благодаря наличию высокой протонной и кислородной проводимости, широко изучаются в последние годы [1]. Одни из представителей таких соединений – ортониобаты редкоземельных элементов (РЗЭ), характеризующиеся как перспективные материалы для использования в качестве электролитов мембран электрохимических сенсоров, газоразрядных мембран и конверторов, компонентов топливных элементов, и т.д. [2]. Путем частичного замещения в таких материалах одного элемента другим рядом исследователей были получены твердые растворы, обладающие улучшенными электропроводящими свойствами по сравнению с составами, взятыми за основу соответствующих исследований [3, 4].

Целью настоящего исследования стало получение и изучение основных структурных и электрохимических характеристик твердых растворов на основе ниобата лантана LaNbO_4 , замещенных двумя элементами: Вi в позицию La и W в позицию Nb.

Образцы состава $\text{La}_{1-x}\text{Bi}_x\text{Nb}_{1-y}\text{W}_y\text{O}_{4\pm\delta}$ ($x=0.1-0.5$, $y=0.1-0.2$, $\Delta x, y=0.1$) были синтезированы по стандартной керамической технологии. Конечная температура синтеза составила 1200°C . Состав конечных продуктов контролировали методом РФА.

Все полученные образцы имеют моноклинную структуру (пр. гр. $I2/b$). Однако на всех дифрактограммах обнаружены дополнительные рефлексы, указывающие на присутствие небольшого количества примесных фаз.

Транспортные характеристики полученных составов были исследованы методом импедансной спектроскопии, по данным которой построены температурные зависимости общей проводимости образцов.

Список литературы

- [1] Вельмузов А.П., Князев А.В. // Журнал неорганической химии. 2014. Т. 58. С. 982-987.
 [1] Jacobson A. J. // Chem. Mater. 2010. V. 22, № 3. P. 660-674.
 [2] Siqueira K. P. F., Moreira R. L., Dias A. // Chem. Mater. 2010. V. 22. P.2668-2674.
 [3] Magrasso A., Fontaine M.-L., Bredesen R. et al. // Solid State Ionics. 2014. V. 262. P.382-387.
 [4] Li C., Bayliss R. D., Skinner S. J. // Solid State Ionics. 2014. V. 262. P. 530-535.

Термодинамическое исследование $\text{Ph}_4\text{SbOC}(\text{O})\text{CCPh}$ и $\text{Ph}_3\text{Sb}(\text{OC}(\text{O})\text{CCPh})_2$

Лякаев Д.В.¹, Афанасьев М.А.¹, Смирнова Н.Н.¹, Шарутин В.В.², Маркин А.В.¹

¹Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

²Южноуральский национальный исследовательский государственный университет, Челябинск, Россия

lyakaev94@mail.ru

В настоящее время существует огромное количество металлоорганических соединений с различными свойствами. В частности, органические соединения сурьмы находят широкое применение в самых разнообразных областях практической деятельности: в качестве лекарственных препаратов, биоцидов, фунгицидов, антиоксидантов, добавок к маслам. Высокую эффективность сурьмаорганические соединения проявляют в качестве реагентов и катализаторов тонкого органического синтеза и фотокатализаторов в деградации органических веществ. Получение новых комплексов этого металла и исследование их физико-химических свойств представляют важную и актуальную задачу.

В данной работе впервые было проведено комплексное исследование стандартных термодинамических свойств $\text{Ph}_4\text{SbOC}(\text{O})\text{CCPh}$ и $\text{Ph}_3\text{Sb}(\text{OC}(\text{O})\text{CCPh})_2$. Методами адиабатической вакуумной и дифференциальной сканирующей калориметрии определены их температурные зависимости теплоемкостей $C_p(T)$ в интервале 5–480 К. В изученном температурном интервале было выявлено, что образцы существуют в кристаллическом и жидком состояниях; определены и проанализированы стандартные термодинамические характеристики плавления.

В этой работе также были рассчитаны стандартные термодинамические функции $C_p^\circ(T)$, $H^\circ(T) - H^\circ(0)$, $S^\circ(T)$ и $G^\circ(T) - H^\circ(0)$ для кристаллического и жидкого состояний изученных соединений в области от $T \rightarrow 0$ до 480 К, а также определены стандартные энтропии образования при $T = 298.15$ К в кристаллическом состоянии.

Для низкотемпературной теплоемкости исследуемых соединений проведена мультифрактальная обработка, определена фрактальная размерность D в функции теплоемкости и установлена цепочечно-слоистая топология структуры изученных образцов.

Все полученные данные о термодинамических свойствах изученных соединений были проанализированы и сопоставлены с литературными данными для Ph_5Sb и других соединений ряда Ph_3SbX_2 . Получены практически важные зависимости типа «термодинамическое свойство – состав».

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного задания в сфере научной деятельности Министерства образования и науки РФ («Ведущие научные исследователи», 4.6138.2017/6.7).

Твердые растворы $Ba_{1-x}Pr_xFe_{1-y}Co_yO_{3-\delta}$: кристаллическая структура и свойства

Макарова А.Э., Волкова Н.Е., Гаврилова Л.Я.
 Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
 E-mail: annumakarova23@gmail.com

Целью данной работы является изучение структуры, кислородной нестехиометрии и электротранспортных свойств оксидных фаз $Ba_{1-x}Pr_xFe_{1-y}Co_yO_{3-\delta}$. Синтез образцов проводили по глицерин-нитратной технологии. Заключительный отжиг проводили при 1100°C на воздухе в течение 120 часов с промежуточными перетираниями и с последующим медленным охлаждением до комнатной температуры. Фазовый состав полученных оксидов определяли рентгенографически. Уточнение структуры анализируемых образцов проводили методом полнопрофильного анализа Ритвелда с помощью программы "Fullprof 2008". Кислородную нестехиометрию сложных оксидов изучали методом термогравиметрического анализа, абсолютное значение кислородного дефицита определяли методом йодометрического титрования. Общую электропроводность и коэффициент термо-ЭДС образцов определяли 4-х контактным методом в широком диапазоне температур на воздухе.

Согласно данным РФА, область существования твердых растворов $Ba_{1-x}Pr_xFe_{1-y}Co_yO_{3-\delta}$ существенно зависит от концентрации ионов в А- и В-подрешетках (таблица 1). Рентгенограммы всех однофазных оксидов были проиндексированы в рамках кубической ячейки пр.гр. $Rm\bar{3}m$. Увеличение концентрации празеодима приводит к уменьшению параметра элементарной ячейки $Ba_{1-x}Pr_xFe_{1-y}Co_yO_{3-\delta}$, что определяется размерными эффектами, в то время как содержание кобальта несущественно влияет на величину параметра a .

Таблица 1. Области гомогенности оксидов $Ba_{1-x}Pr_xFe_{1-y}Co_yO_{3-\delta}$.

x	y
0.1	0 – 0.8
0.2	0 – 0.7
0.3	0 – 0.6
0.4	0 – 0.3
0.5	0 – 0.25
0.6	0.1 – 0.2

Установлено, что индекс кислородной нестехиометрии возрастает с увеличением концентрации бария и ростом температуры. Результаты ТГА показали, что обмен кислородом между сложным оксидом и газовой фазой начинается вблизи 400°C . Установлено, что зависимость общей электропроводности от температуры имеет экстремальный характер и ее максимум достигается вблизи 400°C . Коэффициент Зеебека положителен во всем исследуемом интервале температур, что свидетельствует о преимущественно дырочном типе проводимости.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-53-45010 ИНД_а.

Исследование производства анилина с целью усовершенствования процесса

Макаров И.М., Иванова Э.С., Курунина Г.М.
*Волжский политехнический институт (филиал) ГОУ ВПО
Волгоградского Государственного Технического Университета,
Волжский, Россия
e-mail: galinal@mail.ru*

Каталитическое восстановление ароматических нитросоединений водородом вытесняет другие методы получения ароматических аминов в крупнотоннажных производствах. Металлы платиновой группы, часто входят в состав катализаторов, которые используются в реакциях гидрирования. Исследование катализаторов на основе оксидов РЗЭ представляет большой практический и научный интерес.

Нами исследованы реакции получения анилина гидрированием нитробензола на каталитических системах, содержащих в своем составе платину и оксиды редкоземельных элементов [1]. Следует сказать, что оксиды РЗЭ из-за слабой их изученности в каталитических реакциях пока находят ограниченное применение в этой области химической промышленности, но со временем они найдут широкое применение в химическом и нефтехимическом синтезе. Выбранный процесс характеризуется множеством положительных факторов: высокой степенью селективности, высоким выходом продукта, мягкими условиями реакции.

Из литературных данных известно, что для данной гетерогенно-каталитической реакции, протекающей в системе газ-жидкость-твердый катализатор, существенное значение имеет гидродинамический режим движения компонентов системы. В качестве реактора использовали стеклянный сосуд «утка», который является реактором периодического действия. Реакцию проводили в лаборатории при комнатной температуре и атмосферном давлении, изучение кинетики осуществляли по объему поглощенного водорода. Гидрирование на катализаторах, содержащих в своем составе оксиды редкоземельных элементов, идет быстрее по сравнению с аналогичными реакциями на катализаторах, содержащих в своем составе платину и оксид алюминия. Расчет кинетических параметров показал, что изучаемая реакция имеет псевдопервый порядок по *n*-нитробензолу. Полученные результаты могут быть использованы для расчета реакторного узла производства анилина с целью усовершенствования изучаемого процесса в промышленности.

Список литературы

[1] Butov, G.M., Zorina, G.I., Kurunina, G.M. Hydrogenation of aromatic nitro compounds on the 1 % Pt catalysts containing oxides of rare earth elements (REE) / 21st International Congress of Chemical and Process Engineering, CHISA 2014 and 17th Conference on Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction, PRES 2014,1, pp. 236-239.

**Кинетика окисления урацила озон-кислородной смесью
в водных растворах**

Максютова А.А., Исмоилова Г.С., Моисеева Е.Д., Зимин Ю.С.
Башкирский государственный университет, Уфа, Россия
E-mail: ajm-ajms@mail.ru

Известно, что окислительные повреждения нуклеиновых кислот приводят к генетическим мутациям и, как следствие, к тяжелым формам заболеваний. Окисление нуклеиновых кислот является естественным процессом, однако накопление мутагенных мономерных звеньев этих кислот и непрерывные окислительные повреждения активными формами кислорода ведут к серьезным разрушениям их структуры. Для понимания механизмов разрушения нуклеиновых кислот и нахождения путей их предотвращения в настоящее время проводятся серьезные научные исследования. При этом в качестве моделей часто используются урацил и его производные. Стоит подчеркнуть, что среди активных форм кислорода, способных необратимо изменять структуру мономеров нуклеиновых кислот, практически (имеется лишь работа [1]) не представлен озон, который в последние годы находит широкое применение в профилактике и терапии многих болезней. В связи с изложенным целью настоящей работы явилось изучение кинетики окисления урацила (У) озон-кислородной смесью в водных растворах.

Кинетику реакции изучали методом «опыт – точка» при равных начальных концентрациях реагентов: $[Y]_0 = [O_3]_0$. За расходом урацила следили спектрофотометрическим методом по уменьшению интенсивности полосы, относящейся к поглощению сопряжения $-C=C-C=O$ урацильного кольца. Анализ кинетических кривых расхода урацила показал, что они достаточно хорошо линейризуются в координатах уравнения реакции второго порядка:

$$1/[Y] = 1/[Y]_0 + k \cdot t,$$

где k – константа скорости реакции озона с урацилом. С помощью барботажной установки установлено, что на 1 моль израсходованного урацила приходится 1 моль поглощенного озона. Полученные результаты однозначно свидетельствуют о первом порядке реакции по урацилу и первом порядке – по озону:

$$V = - d[Y]/dt = k [Y] [O_3].$$

В настоящей работе изучена температурная зависимость (287-312 К) константы k скорости реакции второго порядка и определены активационные параметры окислительного процесса.

Список литературы

[1] Зимин Ю.С., Хайруллина Л.Р., Кутлугильдина Г.Г., Мустафин А.Г. // Журнал физической химии. 2015. Т. 89, № 12. С. 1864-1866.

Фазовые равновесия в квазибинарной системе $\text{LiKCrO}_4\text{-LiRbCrO}_4$

Малышев Г.М., Сидоров А.А., Бурчаков А.В.

Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

E-mail: malyshev-greg@yandex.ru

Квазибинарная система $\text{LiKCrO}_4\text{-LiRbCrO}_4$ является стабильной секущей в трехкомпонентной системе Li,K,Rb||CrO_4 . Информация о фазовых равновесиях для элементов ограничения указана в следующих источниках: [1,2]. Системы Li,K||CrO_4 и Li,Rb||CrO_4 содержат соединения LiKCrO_4 и LiRbCrO_4 с конгруэнтным типом плавления; в этих системах осуществляются эвтектические равновесия. Компоненты K_2CrO_4 и Rb_2CrO_4 неограниченно смешиваются в жидком и твердом состоянии в соответствующей двухкомпонентной системе.

T-x диаграмма квазибинарной системы $\text{LiKCrO}_4\text{-LiRbCrO}_4$ представлена на рис. 1. Здесь α , β и γ - соответственно низко-, средне- и высокотемпературные полиморфные модификации твердого раствора состава $\text{LiK}_y\text{Rb}_{1-y}\text{CrO}_4$ ($0 < y < 1$). В системе наблюдается неинвариантное равновесие перитектоидного типа: $\gamma + \beta \rightleftharpoons \alpha$. На основании анализа диаграммы твердый раствор состава $\text{LiK}_a\text{Rb}_{1-a}\text{CrO}_4$ (где $0 < a < 0,4$) имеет две полиморфные модификации, а раствор состава $\text{LiK}_b\text{Rb}_{1-b}\text{CrO}_4$ (где $0,4 < b < 1$) - три полиморфные модификации.

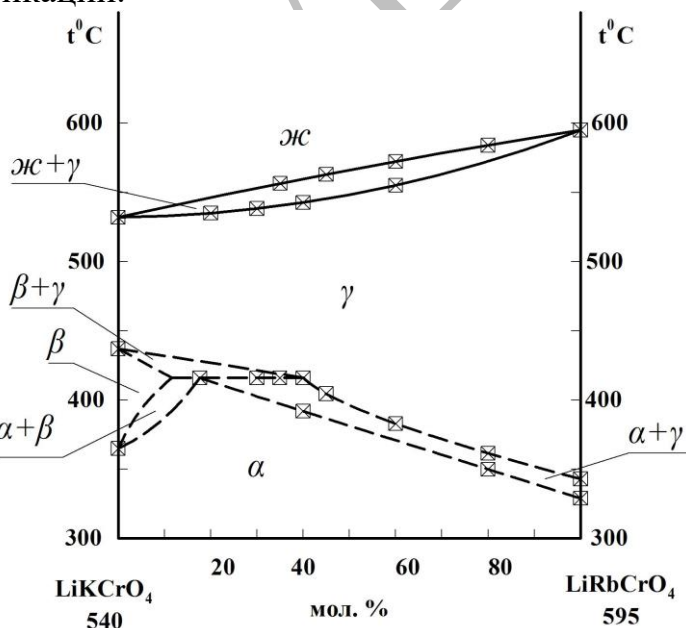


Рис. 1. T-x диаграмма квазибинарной системы $\text{LiKCrO}_4\text{-LiRbCrO}_4$.

Пояснения в тексте

Список литературы

- [1] Бурчаков А.В., Дворянова Е.М.// Тез. докл. XXXVII Самарск. обл. студ. научной конф., 2011. С. 189
 [2] Belyaev I. N., Zh. Neorg. Khim., 6 [5] 1178-1188 (1961); Russ. J. Inorg. Chem. (Engl. Transl.), 6 [5] 602-608 (1961).

**Кинетика реакции жидкофазной гидрогенизации
4-нитробензойной кислоты на скелетном никеле**

Милонова М.В., Шаронов Н.Ю.
ФГБОУ ВО «ИГХТУ», Иваново, Россия
E-mail: milonova_mv@mail.ru

В работе проведено исследование кинетики реакции жидкофазной гидрогенизации 4-нитробензойной кислоты (НБК) на скелетном никелевом катализаторе при атмосферном давлении водорода в растворителе 2-пропанол-вода азеотропного состава. Скелетный никель получали из никель-алюминиевого сплава обработкой гидроксидом натрия по стандартной методике [1]. Реакцию проводили в закрытой герметичной системе в нестационарных условиях, а конструкция экспериментальной установки позволяла фиксировать объем поглотившегося в ходе реакции водорода. Опыты проводили с различным количеством вводимой 4-нитробензойной кислоты в пяти сериях опытов для установления влияния количества гидрируемого соединения на сохранение катализатором его активности. Навеску вносимой НБК изменяли от 1.87 и до 5.52 ммоль НБК/г Ni, что соответствовало невысокой нагрузке на катализатор. Результаты кинетических исследований реакции гидрогенизации 4-нитробензойной кислоты представлены на рис. 1 и 2.

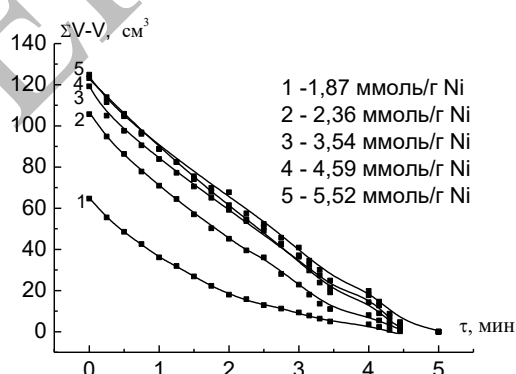
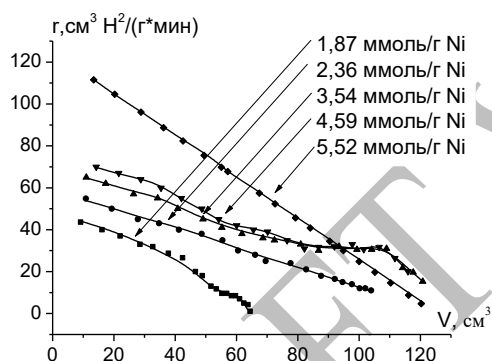


Рис. 1. Зависимость скорости реакции гидрогенизации НБК от количества поглощенного водорода на скелетном никеле в растворителе 2-пропанол-вода ($x_2=0.68$) при $T=303$ К, $m_{кат}=0.63$ г.

Рис. 2. Кинетические кривые реакции гидрогенизации НБК на скелетном никеле в линейных координатах реакции нулевого порядка.

Из данных, представленных на рис. 1 и 2, следует, что гидрогенизация НБК при введении ее в количестве 1.87 и 2.36 ммоль/г Ni протекает по первому порядку, дальнейшее увеличение начального количества гидрируемого соединения приводит к протеканию реакции в соответствии с нулевым порядком по нитросоединению. На основании этого можно сделать вывод, что начальное количество НБК определяют область протекания реакции жидкофазной гидрогенизации, незначительно изменяя величину скорости реакции.

Список литературы

[1] Л.Г. Нищенкова, В.Ф. Тимофеева, В.П. Гостикин [и др.] // Изв. Вузов. Химия и хим. технология.– 1980.– Т. 23.– №12.– С. 1497–1501.

Кинетика реакции жидкофазной гидрогенизации 4-нитрофенола на скелетном никеле в 2-пропанол-вода различного состава

Милонова М.В., Шаронов Н.Ю.
 ФГБОУ ВО «ИГХТУ», Иваново, Россия
 E-mail: milonova_mv@mail.ru

Проведено исследование кинетики реакции жидкофазной гидрогенизации 4-нитрофенола (НФ) на скелетном никелевом катализаторе в водных растворах 2-пропанола различного состава. Скелетный никель получали из никель-алюминиевого сплава обработкой раствором 4М NaOH по известной методике [1]. Процесс проводили в закрытой системе в нестационарных условиях при атмосферном давлении водорода и температуре 303 К, содержание спирта в жидкой фазе варьировали от 0.07 до 1.00 м.д., количество введенного НФ составляло ~2.0 ммоль/г Ni. В ходе реакции фиксировали объем поглощенного водорода к данному моменту времени, величины которого служили для получения кинетических зависимостей изучаемой реакции.

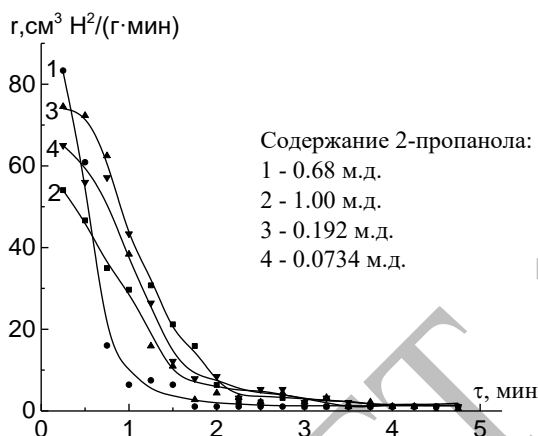


Рис. 1. Кинетическая зависимость реакции гидрогенизации НФ от времени на скелетном никеле в водных растворах 2-пропанола различного состава.

Представленные на рис.1 данные показывают, что гидрогенизация НФ на скелетном никеле соответствует течению реакции первого порядка независимо от состава водно-спиртового раствора. Полученные кинетические данные позволяют сделать вывод о том, что введение в состав жидкой фазы воды в небольшом количестве ($X_2=0.68$) приводит к существенному увеличению начальной скорости реакции, дальнейшее снижение доли органического компонента в бинарном растворителе вызывает постепенное снижение величины

начальной скорости реакции гидрогенизации. Такое влияние состава растворителя можно объяснить следующим образом. Бинарный раствор 2-пропанол-вода с $X_2=0.68$ (азеотропный состав) обладает особенным строением и свойствами при незначительном снижении сродства НФ к растворителю, повышая скорость реакции. Снижение доли спирта в бинарной смеси приводит к значительному уменьшению сродства гидрируемого соединения к растворителю, снижая тем самым наблюдаемые скорости реакции.

Список литературы

[1] Л.Г. Нищенкова, В.Ф. Тимофеева, В.П. Гостикин [и др.] // Изв. Вузов. Химия и хим. технология.– 1980.– Т. 23.– №12.– С. 1497–1501.

Поиск низкоплавких составов в тройной взаимной системе из фторидов и нитратов натрия и цезия

Михалкина О.В., Губанова Т.В.

Самарский государственный технический университет

Самара, Россия

E-mail: mikhalysya@yandex.ru

Изучение реакций взаимного обмена и фазовых равновесных состояний в трёхкомпонентных взаимных системах из нитратов и галогенидов щелочных металлов вызывает практический интерес для создания новых функциональных материалов.

Методом дифференциальной сканирующей калориметрии [1], изучена трехкомпонентная взаимная система Cs, Na || F, NO₃, образованная четырьмя двухкомпонентными системами с эвтектическим типом плавления [2,3]. В тройной взаимной системе протекает реакция обмена: CsF + NaNO₃ ⇌ NaF + CsNO₃ (ΔH°₂₉₈ = -56,95 кДж/моль; ΔG°₂₉₈ = -45,93 кДж/моль). Из расчета видно, что равновесие смещено в сторону образования пары солей CsNO₃ и NaF, которые образуют стабильную диагональ системы Cs, Na || F, NO₃.

Экспериментальным исследованием стабильной диагонали NaF–CsNO₃ подтверждено разбиение квадрата составов на два фазовых треугольника: NaF–NaNO₃–CsNO₃ и NaF–CsF–CsNO₃. Фазовая диаграмма стабильной диагонали NaF–CsNO₃ характеризуется наличием эвтектики (390 °С).

Для определения составов тройных эвтектик в системе Cs, Na || F, NO₃ исследованы два политермических разреза AB и BC. По отсутствию на кривых охлаждения составов тепловых эффектов, отвечающих совместной кристаллизации двух фаз – фторида натрия и нитрата цезия в системе NaF–NaNO₃–CsNO₃; фторидов натрия и цезия в NaF–CsF–CsNO₃, определены проекции тройных эвтектических точек на разрезы AB и BC. Последовательным изучением невариантных разрезов NaNO₃ – E₁ – E₁ и CsNO₃ – E₂ – E₂ определены составы и температуры плавления тройных эвтектик в стабильных элементах NaF–NaNO₃–CsNO₃ (110 °С) и LiNO₃–KNO₃–KBr (330 °С).

Поверхность кристаллизации трехкомпонентной взаимной системы Cs, Na || F, NO₃ представлена четырьмя полями кристаллизации исходных солей, сходящихся в двух эвтектических точках E₁ и E₂. В системе преобладает поле кристаллизации тугоплавкого фторида натрия.

Список литературы

- [1] Мощенский Ю.В. Дифференциальный сканирующий калориметр ДСК – 500. // Приборы и техника эксперимента. 2003. №6. С.143-144.
 [2] Посыпайко В.И. и др. Диаграммы плавкости солевых систем: Ч. 1 Двойные системы с общим анионом. М.: Металлургия, 1977.
 [3] Посыпайко В.И. и др. Диаграммы плавкости солевых систем: Ч. 2 Двойные системы с общим анионом. М.: Металлургия, 1977.

**Образование комплексных соединений в галогенидных расплавах
трехвалентных элементов в присутствии растворителя**

Пешкина К.Г., Ткачев Н.К.

Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН,

Екатеринбург, Россия

E-mail: kspeshkina@mail.ru

Представления о возникновении автокомплексных группировок в солевых расплавах основанные, главным образом, на анализе оптических спектров были предложены в работе [1]. Концентрация автокомплексных группировок считалась максимально возможной, а все простые анионы галогенов практически связаны в комплексы [2]. В подобной модели выпадает из рассмотрения кооперативные эффекты взаимодействия заряженных частиц, а основное внимание уделяется связям внутри комплекса. То есть, неявно предполагалось, что справедлив идеальный закон действующих масс. Такой подход, противоречит классической теории электролитов [2]. Поэтому, статистико-термодинамическая теория комплексообразования в солевых расплавах должна оперировать с активностями того или иного сорта ионов при записи закона действующих масс и содержать способ их вычисления при заданном характере сил, действующих между частицами расплава.

В докладе будет представлен анализ химического равновесия по отношению к диссоциации заряженных комплексных анионов на примере модели заряженных твердых сфер, учитывающей размеры простых и комплексных ионов в солевых расплавах. Рассчитаны возможные типы температурной зависимости концентрации комплексов на примерах галогенидных расплавов трехвалентных металлов в присутствии галогенида щелочного металла [4]. Показано, что химическое равновесие по отношению к образованию или диссоциации комплексных анионов в солевых расплавах определяется конкуренцией между энергиями диссоциации комплекса с электростатическими взаимодействиями всех ионов (простых и комплексных) в расплаве.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-33-00405)

Список литературы

- [1] Смирнов М.В., Шабанов О.М., Хайменов А.П. // Электрохимия. 1966. Т.2. №11. с.1240.
- [2] Минченко В.И., Степанов В.П. // Ионные расплавы: упругие и калорические свойства. Екатеринбург: УрО РАН, 2008, 368 с.
- [3] Дебай П. // Избранные труды. Статьи 1909–1965. Л.: Наука, 1987, 559 с.
- [4] Пешкина К.Г., Ткачев Н. К., Фишман А. Я. // Бутлеровские сообщения. 2013. Т.36. №11. С.67.

Изучение химической иммобилизации пепсина на аминированной поверхности наночастиц кремнезема

Пискунова В.С.¹, Новичков Р.В.², Зуев Б.К.³

¹Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

²Научно-исследовательский институт прикладной акустики, Дубна, Россия

³Институт РАН геохимии и аналитической химии им. В.И.Вернадского,
Москва, Россия

E-mail: wasilina5.ru@mail.ru

Поверхность остается одним из самых интересных объектов живой и неживой природы. Поверхностно-модифицированные материалы все шире используются в качестве химических катализаторов, биосенсоров, сорбентов в ВЭЖХ и др. [1]. Кремнеземные подложки наиболее распространены как носители для химического модифицирования. Главная их особенность — наличие на их поверхности силанольных групп –ОН, которые очень легко и быстро вступают в обменные реакции с модификаторами [1]. Одним из наиболее перспективных направлений в создании привитых слоев на твердой поверхности частиц является метод поверхностной самосборки. Данный метод применяют, когда соединение не может быть привито в одну стадию (из-за несовместимости функциональных поверхностных групп, когда сложно подобрать растворитель) [1]. В настоящее время в развитие медицины, пищевой и фармацевтической промышленности ощутимый вклад внесли иммобилизованные ферменты. В медицине иммобилизованные ферменты открыли путь к созданию лекарственных препаратов со сниженной токсичностью и аллергенностью, решаются проблемы направленного транспорта лекарств в организме [2]. В настоящей работе проводились модификация частиц диоксида кремния со средним размером 170 нм различными органическими соединениями. Экспериментальные методы, используемые в данной работе: измерение ζ -потенциала и размера частиц методом динамического светорассеяния и микроэлектрофореза, определение сорбционных слоев методом окситермографии ([3]), определение иммобилизованного пепсина методом УФ-спектроскопии (анализ надосадочной жидкости). На первом этапе модифицирования был выбран 3-аминопропилтриэтоксисилан (АПТЭС). На втором этапе проводили модификацию аминокремнезема ферментом — пепсином — и изучение кинетики сорбции фермента. Все три метода анализа коррелируют между собой и показали, что наибольшее количество молекул пепсина сорбируется за 8 часов.

Список литературы

- [1] Лисичкин Г.В. Химия привитых поверхностных соединений. 2003. С.592.
[2] Чуешов В.И. Промышленная технология лекарств. Т. 2. 2002. 716 с.
[3] Зуев Б.К. Способ окситермографии. Патент РФ № 2411509 приор. 15.01.2010 (Б. И. 2011. №4).

Расчет фазовых диаграмм системы $H_2O - KOH - KCl$

Працкова С.Е.

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

E-mail: se_pratskova@mail.ru

Система $H_2O - KOH - KCl$ является частью электролита при получении хрома. Бинарные диаграммы изучаемой системы являются предметом изучения как отдельно, так и в составе других тройных систем.

Проведено термодинамическое моделирование системы $H_2O - KOH - KCl$ в рамках модели Питцера [1]. Выведены уравнения для расчета среднего ионного коэффициента активности для компонентов системы KOH , KCl и осмотического коэффициента воды. Рассчитаны энергетические параметры модели с учетом опытных данных по осмотическому коэффициенту воды Φ от состава раствора при $25\text{ }^\circ\text{C}$ для систем $H_2O - KOH$, $H_2O - KCl$. Рассчитанные значения осмотического коэффициента воды и среднего ионного коэффициента хорошо согласуются с экспериментальными данными. Определены значения стандартных энергий Гиббса образования кристаллогидратов $KOH \cdot 2H_2O$, $KOH \cdot 4H_2O$, $KOH \cdot 8H_2O$. Построены двойные фазовые диаграммы $H_2O - KOH$, $H_2O - KCl$ (рис. 1,2).

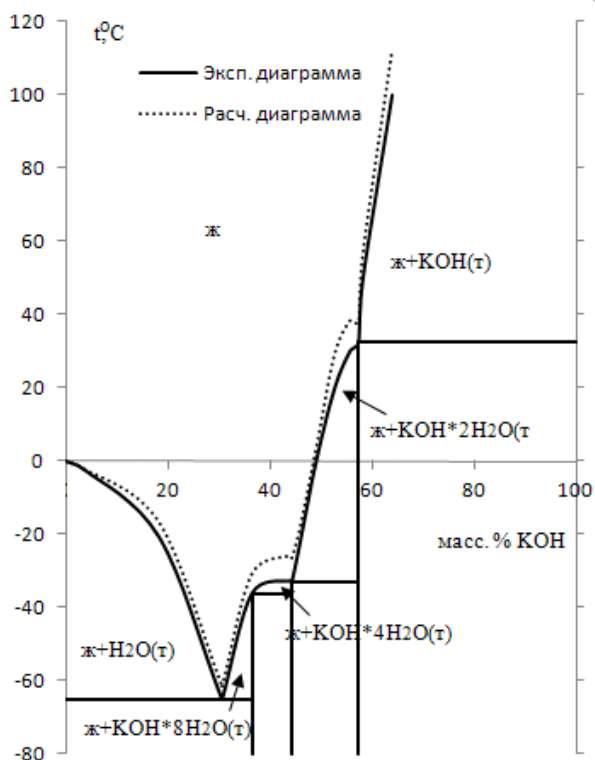


Рис. 1. Экспериментальная и расчетная фазовая диаграмма $H_2O - KOH$

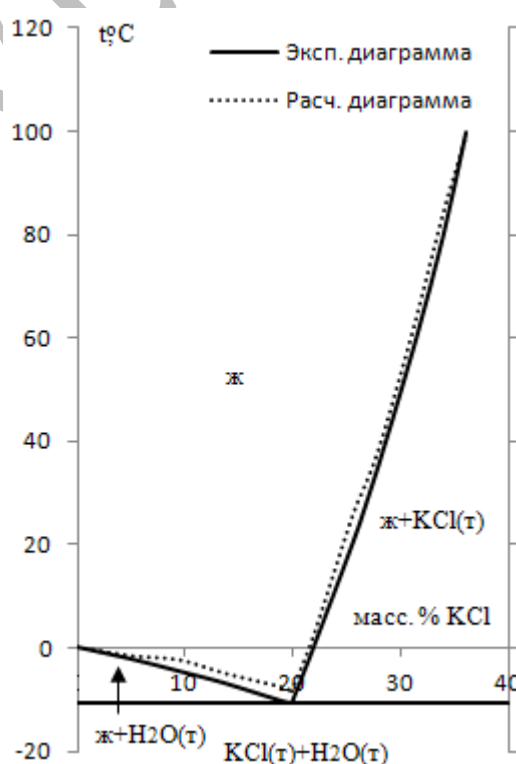


Рис. 2. Экспериментальная и расчетная фазовая диаграмма $H_2O - KCl$

Список литературы

[1] Pitzer, K.S. // Physical Chemistry. 1973. V. 77. С. 268-277.

Изучение термодинамических свойств системы $\text{H}_2\text{O} - \text{LiOH}$ методом Питцера

Працкова С.Е.

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

E-mail: se_pratskova@mail.ru

В водных растворах литиевых солей в результате гидролиза ионов Li^+ происходит образование гидроксида лития, что в целом ряде случаев может приводить к существенному изменению свойств системы, изменению параметров приборов и установок, имеющих в качестве рабочего вещества соли лития. Проведено термодинамическое моделирование системы $\text{H}_2\text{O}-\text{LiOH}$ в рамках модели Питцера [1]. Выведены уравнения для расчета среднего ионного коэффициента активности для компонента системы LiOH и осмотического коэффициента воды. Рассчитаны энергетические параметры модели с учетом опытных данных по осмотическому коэффициенту воды Φ от состава раствора при 25°C . Рассчитанные значения осмотического коэффициента воды и среднего ионного коэффициента хорошо согласуются с экспериментальными данными. Определено значение стандартной энергии Гиббса образования кристаллогидрата $\text{LiOH}\cdot\text{H}_2\text{O}$. Построена фазовая диаграмма $\text{H}_2\text{O}-\text{LiOH}$ (рис.1).

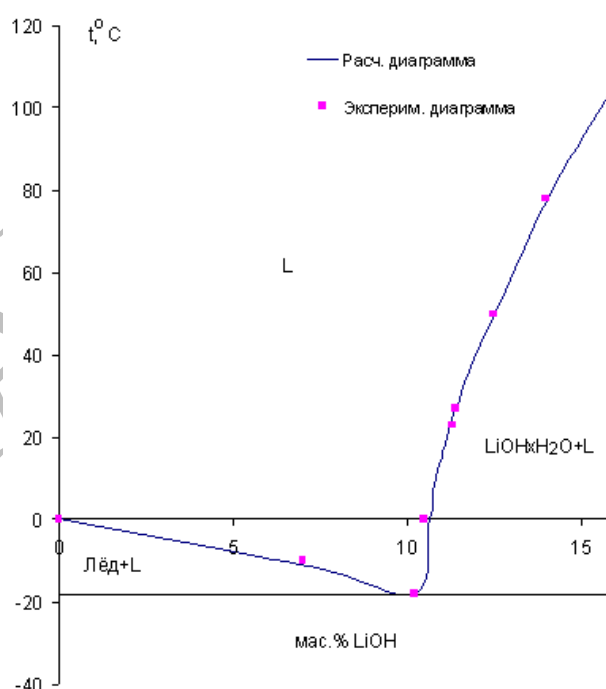


Рис. 1. Экспериментальная и рассчитанная диаграммы состояния системы $\text{H}_2\text{O}-\text{LiOH}$

Список литературы

[1] Pitzer, K.S. // Physical Chemistry. 1973. V. 77. С. 268-277.

Термодинамические характеристики блок-сополимера хитозана с полилактидом

Пряжникова М.И.¹, Горюнова П.Е.²

¹ Школа юного исследователя Института прикладной физики РАН,
Нижний Новгород, Россия

² Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: masha.p21@mail.ru

Получение гибридных материалов на основе полисахаридов и синтетических полимеров в последние два десятилетия стало предметом интенсивных исследований и нашло свое применение при разработке ранозаживляющих средств, препаратов для направленной доставки лекарств, биосенсоров. Среди природных полимеров особое место занимает хитозан ввиду его уникальных физиологических и экологических свойств. Он является биосовместимым, гипоаллергенным, обладает противомикробными свойствами в отношении некоторых бактерий и грибов, хорошо разлагается под действием природных факторов. Недостатком хитозана является низкий уровень физико-механических свойств, поэтому для целевого использования требуется его модификация.

Наличие реакционноспособных групп в макромолекуле хитозана и высокая комплексообразующая способность дает возможность его комбинирования с различными биологически активными веществами и синтетическими полимерами, например, полилактидом. Сочетание свойств этих двух соединений перспективно для создания ряда многофункциональных материалов, изделий и препаратов биомедицинского назначения.

Целью нашего исследования является получение фундаментальной информации о термодинамических свойствах блок-сополимера хитозана с полилактидом, необходимой для создания новых материалов на их основе с заданными характеристиками.

Для получения сведений о стандартных термодинамических свойствах блок-сополимера хитозана с полилактидом в данной работе использован метод прецизионной адиабатической вакуумной калориметрии. Обработка экспериментальных данных, их физико-химическая интерпретация, обобщения и выводы сделаны на основе базовых положений классической химической термодинамики, а также с учетом данных о составе выбранной системы.

Большинство термодинамических характеристик изученного блок-сополимера и процессов с его участием представляют собой справочные величины, которые будут определены впервые. Полученные значения позволят прогнозировать свойства блок-сополимеров тех составов, которые не изучены до сих пор.

Исследование свойств модифицированных CdSe-фотоанодов

Пузикова Д.С., Хусурова Г.М., Дергачева М.Б.

Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В.Сокольского, Казахстан

E-mail: d.puzikova@ifce.kz

Электрохимические фотоэлементы (ПЕС) используются для преобразования солнечного излучения в электрическую энергию. В настоящей работе полиэтиленгликоль (ПЭГ) и лигносульфонат натрия (ЛСН) использованы как поверхностно-активные вещества с целью модифицирования поверхности CdSe фотоанодов, полученных методом электроосаждения. Исследована работа фотоэлектрохимической ячейки после устранения поверхностных дефектов и нарушений целостности пленки на поверхности пленочных фотоанодов. Электроосаждение в присутствии ЛСН выполнено по методике, описанной в [1]. Добавки полиэтиленгликоля (ПЭГ-4000) в электролит вводили в количестве 10^{-6} М. Осаждение велось при температуре 50°C . Изучено фотоэлектрохимическое поведение электроосажденных пленок CdSe в растворах с редокс парой $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-/3-}$ при освещении синим диодом с длиной волны 465 нм и галогенными лампами различной мощности (50Вт и 75Вт) с использованием в качестве противоэлектрода платиновой спирали (рис. 1). Установлено, что для CdSe пленочных фотоанодов, полученных из электролита, содержащего ЛСН, ток растет с увеличением концентрации ферроцианида железа в фотоэлектрохимической ячейке и достигает значений $20 \text{ mA}/\text{cm}^2$ при освещении галогенной лампой мощностью 75Вт. Для фотоанодов CdSe, осажденных из электролита в присутствии ПЭГ ток значительно ниже, с увеличением концентрации ферроцианида железа падает. Установлено, что такие фотоаноды быстро деградируют в растворе и не пригодны для длительного использования.

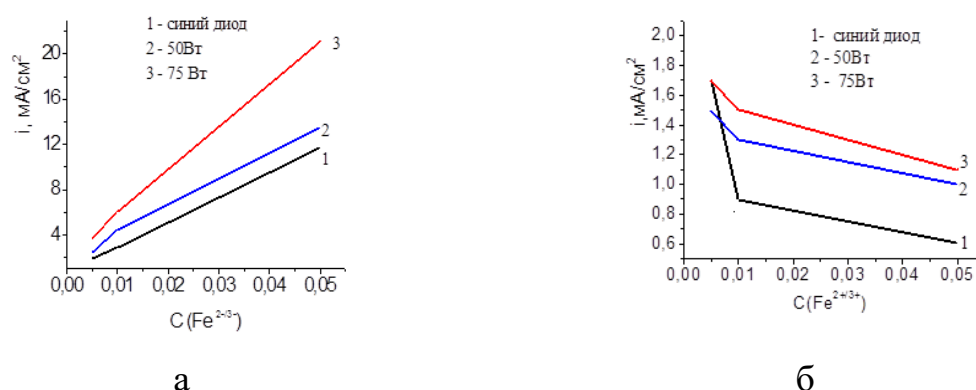


Рис. 1 – Зависимость плотности фототока CdSe-фотоанодов, модифицированных ЛСН (а) и ПЭГ(б) от концентрации $\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ и типа освещения

Список литературы

[1] Dergacheva M.B., Puzikova D.S., Khussurova G.M., Nemkaeva R.R., Mit' K.A. Sodium lignosulphonate as an additive for electrodeposition of CdSe Nanofilms on FTO/glass // Materials Today: Proceedings 4 (2017) pp. 4572-4581.

Химическое осаждение железа на поверхность графита из водного раствора нитрата железа

Рахматуллина Г.И., Низамеев И.Р.

*Казанский национальный исследовательский технический университет,
Казань, Россия*

E-mail: irek.rash@gmail.com

Токопроводящие металлические наноструктуры в силу своих особых, вызванных большой долей поверхностных атомов, химических и физических свойств представляют значительный научный и практический интерес. Такие структуры применимы в альтернативной энергетике (например, катализатор в топливных элементах), наноэлектронике, создание наносенсоров (например, датчик Холла) и многих других [1-3].

Методом химического осаждения из жидкой фазы были получены наноразмерные агрегаты железа на подложках из слюды и высокоориентированного графита (рис. 1). Исследования морфологии получаемых структур осуществлялись на атомно-силовом микроскопе (АСМ) в полуконтактном режиме в атмосферных условиях.

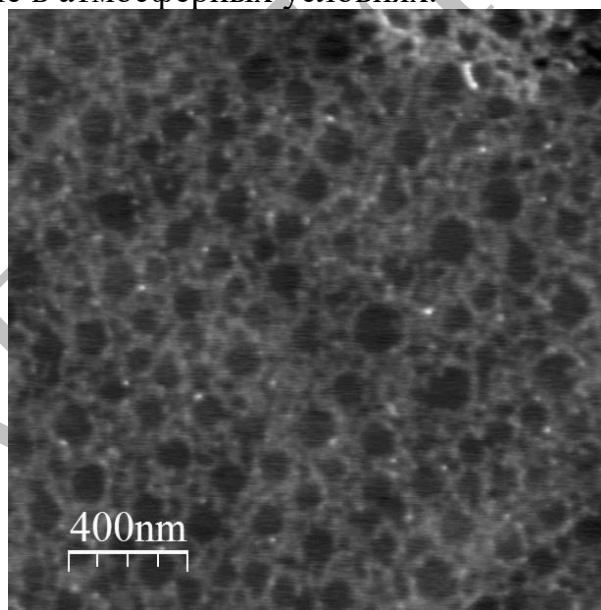


Рис.1. АСМ изображение агрегатов железа на поверхности графита

Изображения, полученные АСМ, демонстрируют образование наночастиц железа с размерами 30-50 нм, объединенных в двумерные сетчатые кластеры на поверхности подложки.

Список литературы

- [1] Pachón L.D. // Appl. Organometal. Chem. 2008. V.22. P.288-299.
- [2] Sawoo S. Srimani D., Dutta P., Lahiri R., Sarkar A. // Tetrahedron. 2009. V.65. P.4367-4374.
- [3] Wada K., Yano K., Kondo T., Mitsudo T. // Catal. Lett. 2006. V.112. P.63-67.

Солюбилизация L-лизина в обратных микроэмульсиях H₂O/бис-(2-этилгексил) сульфосукцинат натрия/изопропилмириристат

Рыбакова А.И., Саутина Н.В., Головешкина Д.Ю., Галяметдинов Ю.Г.
 Казанский национальный исследовательский технологический университет,
 Казань, Россия
 E-mail: alenarybakova1994@mail.ru

Микроэмульсии (МЭ) обладают рядом ценных качеств для их использования в системах контролируемой доставки веществ. Безопасность воздействия компонентов на организм человека, стабильность физико-химических характеристик, большая солюбилизационная емкость и оптимальная биодоступность активного компонента, позволяют создавать на их основе системы с контролируемым высвобождением биологически-активных и лекарственных препаратов.

Целью данной работы являлось исследование солюбилизации аминокислоты L-лизина в обратных микроэмульсиях вода / бис(2этилгексил) сульфосукцинат натрия (АОТ) / изопропилмириристат. Получена фазовая диаграмма этой системы при 25⁰С, выявлены границы раздела существующих фаз, исследован характер управления равновесием между жидкокристаллической областью, фазами эмульсии и микроэмульсии. Найдена максимальная солюбилизационная емкость МЭ при различном содержании ПАВ. Определено, что с увеличением содержания АОТ увеличивается размер капель МЭ и количество солюбилизированного L-лизина.

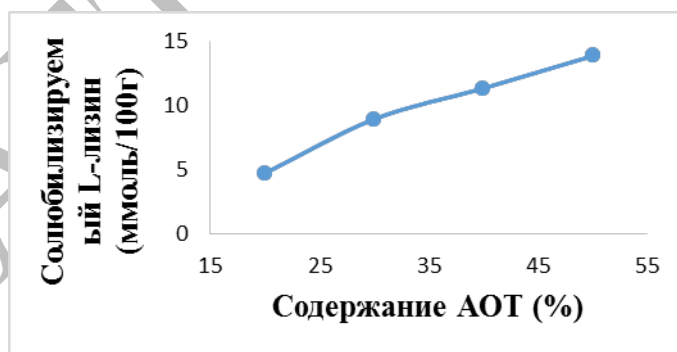


Рис. 1. Солюбилизация L-лизина в обратных микроэмульсиях

Полученные результаты указывают на перспективность использования исследованных систем в качестве транспортной основы для доставки биологически-активных веществ.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-33-00247 мол_а.

Влияние специфической и неспецифической сольватации на окисление производных ферроцена в смешанных растворителях

Рыбенкова М.Д., Галкина М.С., Ключевский К.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: niih325@bk.ru

Известно [1], что добавки воды к реакционной смеси (растворители – диоксан, ацетонитрил) приводят к существенному снижению скорости окисления ферроцена и его производных пероксидом водорода, что обусловлено специфической сольватацией последнего, за счет образования водородных связей, затрудняющей взаимодействие с металлокомплексом.

В настоящей работе рассмотрены результаты исследования влияния специфической и неспецифической сольватации на окисление производных ферроцена - ферроценилметанола (ФМ), 1,1-диэтилферроцена (ДЭФ), ацетилферроцена (АФ) и ферроценилборной кислоты (ФБК) такими окислителями как пероксид водорода, п-хинон и ионы серебра при широком варьировании концентраций воды в смешанном растворителе ацетонитрил-вода и диоксан-вода. Установлено, что зависимость скорости реакции окисления указанных соединений от концентрации воды имеет экстремальный характер независимо от природы окислителя и металлокомплекса, что иллюстрирует рисунок 1.

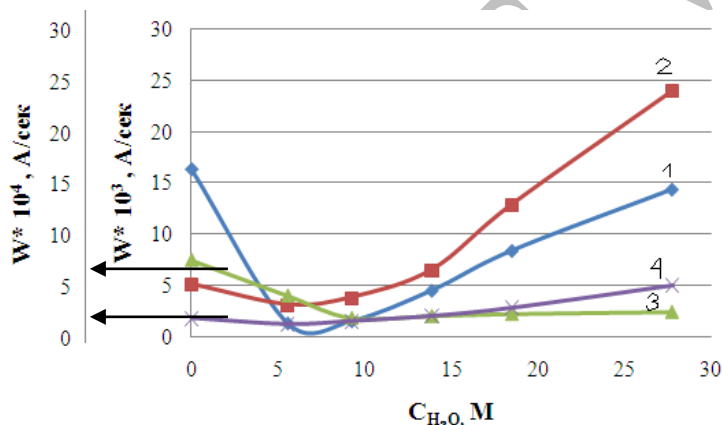


Рис. 1. Влияние добавок воды на окисление АФ и ФМ п-хиноном в ацетонитриле (1, 2), ДЭФ пероксидом водорода в диоксане (3), ФБК ионами Ag^+ в ацетонитриле (4). $C_{АФ}=0,002M$, $C_{ФМ}=0,001M$, $C_{ДЭФ}=0,005M$, $C_{ФБК}=0,002M$. $C_{ПХ}=0,003M$, $C_{H_2O_2}=0,15M$, $C_{Ag^+}=0,005M$.

Наличие точки минимума на зависимостях $w=f(C_{H_2O})$ позволяет разделить области преимущественного влияния специфической сольватации реагентов, ведущей к снижению скорости реакции, и неспецифической сольватации, приводящей к увеличению скорости реакции. Увеличение концентрации воды после точки минимума соответствует увеличению диэлектрической проницаемости растворителя, а это, как известно, способствует протеканию реакций с переносом электрона.

[1] Кочеткова К.С. Дис. канд. наук. ННГУ, 2016, 189 с.

Калориметрическое изучение дендримера первой генерации с концевыми триметилсилильными группами

Сармини Ю.А.¹, Смирнова Н.Н.¹, Маркин А.В.¹, Музафаров А.М.²

¹Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

²Российская академия наук, Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова, Москва, Россия
E-mail: uliarybakova93@gmail.com

Дендримеры – это монодисперсные, глобулярные макромолекулы, обладающие регулярной сверхразветвленной архитектурой. Они характеризуются хорошей растворимостью в широком спектре органических растворителей и низкой вязкостью растворов по сравнению с линейными полимерами. Благодаря уникальности структуры их молекулы способны к самоорганизации. Особенность синтеза дендримеров определяет наличие огромного количества концевых групп, формирующих внешнюю сферу молекулы и в значительной степени определяющих ее поведение, что делает возможным регулирование их свойств. Вышесказанное обуславливает многочисленные перспективы для создания новых материалов.

Исследование термодинамических свойств дендримеров с помощью прецизионной калориметрии позволяет выявить практически важные зависимости «термодинамическое свойство – состав».

В настоящей работе впервые измерена температурная зависимость теплоемкости дендримера первой генерации с концевыми триметилсилильными группами $G_1(\text{SiMe}_3)_6$ в интервале температур от 6 до 350 К методом адиабатической калориметрии. Для него были выявлены физические превращения – низкотемпературная аномалия (в интервале 52-71 К) и расстеклование (в интервале 130-161 К). Указанные превращения воспроизводились каждый раз при охлаждении и последующем нагревании при повторном измерении теплоемкости, при этом характеристики процессов не изменялись. Определены и проанализированы термодинамические характеристики выявленных превращений. По экспериментальным данным были рассчитаны термодинамические функции: теплоемкость, энтальпия, энтропия и функция Гиббса для области от 0 до 350 К для различных физических состояний. Также была оценена стандартная энтропия образования изученного соединения при $T = 298.15$ К в расстеклованном состоянии.

Полученные термодинамические характеристики исследуемого дендримера сопоставлены с данными для соответствующего наногеля, а также с ранее исследованными дендримерами первой генерации и различными концевыми функциональными группами. Установлены и обсуждены зависимости для термодинамических свойств дендримеров от природы терминальных групп.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГЗ Министерства образования и науки РФ («Ведущие научные исследователи», 4.6138.2017/6.7).

Исследование поверхности упорядоченных структур из полимерных микросфер в качестве подложек для гетерогенного катализа

Козлов А.А., Семина Ю.А., Флид В.Р.

Московский технологический университет (ИТХТ)

Москва, Россия

E-mail: julia.semina@inbox.ru

Целью работы является создание и исследование поверхности материала, полученного методом самоорганизации на основе сополимера полистирола и дивинилбензола (ПС-ДВБ) в качестве катализатора для получения жидких синтетических углеводородов по методу Фишера–Тропша. Использование ПС-ДВБ дает возможность резко повысить активность и, как следствие, производительность катализатора [1].

Еще одной задачей является разработка способа получения алифатических углеводородов, преимущественно C₅₊, из СО и Н₂ в присутствии вышеописанного катализатора.

Результат, который достигается при использовании предлагаемого изобретения, заключается:

- в упрощении процесса получения углеводородов за счет того, что используется катализатор, содержащий в своем составе наноразмерные частицы металлического железа, не требующий восстановления водородом или оксидом углерода и не проявляющий пирофорных свойств;

- в снижении капитальных затрат производства, так как при использовании предлагаемого состава и метода приготовления Fe – содержащего контакта наблюдается резкое возрастание его активности, вследствие чего, высокие показатели процесса могут быть достигнуты в реакторах меньшего размера;

- относительно низкие операционные затраты производства достигаются тем, что предлагаемый железосодержащий катализатор имеет сравнительно низкую себестоимость за счет дешевых солей железа.

Предложен способ получения алифатических углеводородов из оксида углерода и водорода при повышенной температуре и давлении в присутствии композиционного материала с саморегулирующейся структурой, содержащего наноразмерные частицы металлического железа и не требующего предварительного восстановления.

Катализатор может в дополнение включать промоторы, такие как оксиды калия, алюминия, циркония, титана, марганца и др.

Список литературы

- [1] Патент на изобретение № 2013141823/04(063989) от 12.09.2013 / Катализатор и способ получения синтетических углеводородов алифатического ряда из оксида углерода и водорода в его присутствии / Козлов А.А., Крылова А.Ю., Куликова М.В., Школьников А.В., Гусев С.А.

Синтез и определение индексов удерживания сложных эфиров лимонной кислоты

Красных Е.Л., Дружинина Ю.А., Сушкова С.В., Смирнова Я.А.

Самарский государственный технический университет,

г. Самара, Россия,

E-mail: yano4ka.cmir@gmail.com

Лимонная кислота (ЛК) – трехосновная карбоновая кислота, относящаяся к типу гидроксикислот. В настоящее время основной областью применения ЛК является пищевая промышленность, широко используется в качестве регулятора кислотности и консерванта, а также в нефтедобывающей промышленности для нейтрализации высокого уровня рН нефтяного раствора. Сложные эфиры лимонной кислоты могут использоваться в качестве пластификаторов для ПВХ композиций, которые являются безопасными по сравнению с пластификаторами, используемыми в промышленности в настоящий момент. Так же сложные эфиры гидроксикислоты могут применяться в качестве мономеров для производства биоразлагаемых полимеров, например, производные яблочной, молочной и винной кислот.

Целью работы является синтез ряда сложных эфиров лимонной кислоты с органическими спиртами C₁-C₅, а также определение индексов удерживания этих эфиров.

Синтез сложных эфиров проводили несколькими методами: экстрактивной этерификацией, с низшими спиртами C₁-C₂. В качестве экстрактивного агента использовали ЧХУ; азеотропной этерификацией, со спиртами C₃-C₅, азеотропобразующим агентом является бензол. Для избежания окисления и осмоления продуктов реакции этерификацию проводили в среде азота; в качестве катализатора использовали ортофосфорную кислоту; мольное соотношение компонентов спирт : кислота = 6 : 1.

Анализ сложных эфиров проводили на хроматографе «Кристалл 2000М» с пламенно-ионизационным детектором на капиллярной колонке DB-1, газ носитель – гелий, температура колонки – 493К, температура испарителя 543К, температура детектора 523К. Чистота полученных сложных эфиров составила не менее 94% масс.

Метилловый эфир лимонной кислоты представляет собой белое кристаллическое вещество; этиловый, пропиловый, бутиловый и пентилловый эфиры являются прозрачными жидкостями без механических примесей

Определение индексов удерживания проводили по стандартной методике, с использованием ряда алканов от C₁₄ до C₂₅ в диапазоне температур: 200 – 240°C.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-08-00383 а.

Электрохимические свойства пленок Ленгмюра-Блоджетт, содержащих наночастицы гексацианоферрата кобальта

Степашкин Н.А., Иванов Н.С., Суходолов Н.Г.
*Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: stepashkin.nick17@gmail.com*

В результате проведенных исследований была показана возможность внедрения наночастиц гексацианоферрата (III) кобальта, стабилизированных гексаметафосфатом натрия, в монослой октадециламина с целью их дальнейшего переноса на твердую подложку методом Ленгмюра-Блоджетт и исследования электрохимических свойств. Наночастицы гексацианоферрата (III) кобальта получены путем постепенного смешения эквимольной смеси реагентов с добавлением гексаметафосфата натрия в качестве стабилизатора. Размеры наночастиц были определены методом лазерной дифракции и составили порядка 12 нм. Фотометрически исследована стабильность гидрозоля наночастиц в интервале рН 2 – 4. Изучены изотермы сжатия монослоев октадециламина на субфазе, содержащей наночастицы гексацианоферрата (III) кобальта, при тех же значениях рН. По полученным данным выбраны оптимальные условия переноса монослоев на твердую подложку и осуществлен перенос на кремниевую подложку и подложку ИТО. Была изучена морфология полученных плёнок на поверхности подложек с помощью оптического микроскопа и сканирующего электронного микроскопа. Для исследования свойств электрода на основе монослоя ОДА, модифицированного наночастицами гексацианоферрата (III) кобальта, была составлена электродная система, в качестве электрода сравнения использован хлорсеребряный электрод. Наблюдаются прямолинейные зависимости потенциала пленки от активности ионов Cs^+ , NH_4^+ , K^+ , и Mg^{2+} со значениями углового коэффициента Нернста, близкими к теоретическим. Методом циклической вольтамперометрии были идентифицированы анодные пики, соответствующие переходу $\text{Fe}^{\text{II}} - \text{Fe}^{\text{III}}$, что свидетельствует о протекании реакции с участием одного электрона.

Твердотельные материалы для детектирования ДМФА в воздухе на основе этилцеллюлозы, допированной бис(дипиррометенатом) цинка(II)

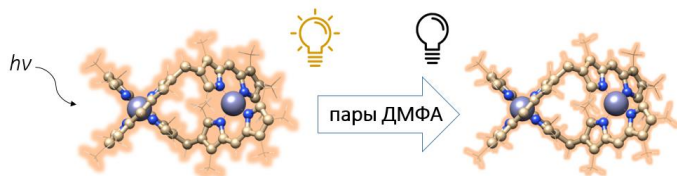
Ступикова С.А.^{1,2}, Ксенофонтов А.А.¹, Гусева Г.Б.¹, Антипа Е.В.¹

¹*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук,
Иваново, Россия*

²*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
E-mail: armstrong97@list.ru*

В настоящее время, одной из наиболее важных проблем современной химии является селективное обнаружение микроколичеств паров аминов, в том числе, ДМФА. Попадание микроколичеств таких токсикантов в организм, в том числе через кожные покровы, может приводить к повреждению печени, почек,

сердца, нервной системы. Поэтому разработка сенсоров для детектирования следовых количеств паров аминов является актуальной задачей. Для этих целей наиболее удобны и эффективны в использовании флуоресцентные сенсоры, в качестве которых могут служить высокочувствительные к свойствам среды бис(дипиррометенаты) цинка ($[Zn_2L_2]$). Нами разработаны твердотельные материалы на основе этилцеллюлозы (ЭЦ), допированной $[Zn_2L_2]$, с эффективным флуоресцентным откликом на присутствие паров ДМФА в



воздушной атмосфере. Твердотельные матрицы из ЭЦ готовили в виде таблеток при помощи гидравлического пресса и окрашивали красителем адсорбцией из раствора ($c \sim 2 \cdot 10^{-4}$ моль/л) в циклогексане, после чего сушили до постоянной массы в воздушной атмосфере. Флуоресцентный отклик композитов, помещенных в контейнер с парами ДМФА, регистрировали с помощью оптоволоконного флуоресцентного зонда.

Спектральные исследования показали, что в присутствии токсиканта флуоресценция $[Zn_2L_2]$ в составе ЭЦ-композита практически мгновенно (~ 5 с) тушится до 1.3 раза с небольшим (1 нм) сдвигом λ_{max}^{fl} в синюю область по сравнению со спектром флуоресценции образца в воздушной атмосфере (рис.1) вследствие дополнительной координации ионами цинка(II) лигандов аналита с образованием молекулярных комплексов $[Zn_2L_2DMFA_2]$.

На основе полученных твердотельных материалов могут быть разработаны новые перспективные флуоресцентные сенсоры для детектирования паров O- и N-содержащих электронодонорных токсикантов.

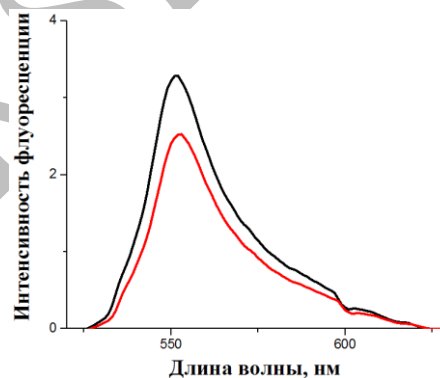


Рисунок 1. Спектры флуоресценции $[Zn_2L_2]$, допированного в ЭЦ, в воздушной атмосфере (черный) и в присутствии насыщенных паров ДМФА (красный).

Исследование стабильного симплекса $2KBr \cdot BaBr_2 - BaMoO_4 - BaBr_2$ трехкомпонентной взаимной системы $K, Ba \parallel Br, MoO_4$

Тарасова Н.С., Рыжкова Д.С., Данилушкина Е.Г.
Самарский государственный технический университет
Самара, Россия
E-mail: nadya_tarasova2016@mail.ru

Системы на основе галогенидов и молибдатов щелочных и щелочноземельных металлов находят применение в качестве электролитов,

обладают многими ценными свойствами, в том числе и высокой энергетической проводимостью, значительно уменьшают коррозионную активность по отношению к металлическим материалам. [1].

Элементы ограничения трехкомпонентной взаимной системы $K, Ba \parallel Br, MoO_4$ относятся к эвтектическим системам и изучены ранее [2-3]. Наличие двух соединений $K_2MoO_4 \cdot BaMoO_4$ и $2KBr \cdot BaBr_2$ осложняет разбиение системы. Система $K, Ba \parallel Br, MoO_4$ разбивается на четыре симплекса: $BaBr_2 - BaMoO_4 - 2KBr \cdot BaBr_2$; $2KBr \cdot BaBr_2 - BaMoO_4 - KBr$; $KBr - K_2MoO_4 \cdot BaMoO_4 - BaMoO_4$; $KBr - K_2MoO_4 \cdot BaMoO_4 - K_2MoO_4$.

Для подтверждения разбиения системы экспериментально изучена стабильная диагональ $BaMoO_4 - D$ ($D = 2KBr \cdot BaBr_2$), определены характеристики двойной перевальной эвтектической точки (e $608^\circ C$, $KBr - 45$ экв%, $BaBr_2 - 45$ экв%, $BaMoO_4 - 10$ экв%).

Экспериментально изучен стабильный симплекс $2KBr \cdot BaBr_2 - BaMoO_4 - BaBr_2$. Изучением политермических разрезов определены характеристики тройной эвтектической точки (E $597^\circ C$, $KBr - 34,2$ экв%, $BaBr_2 - 62$ экв%, $BaMoO_4 - 3$ экв%).

Список литературы

- [1]. Делимарский Ю.К. Химия ионных расплавов-Киев, Наукова думка, 1980. - 328 с
- [2]. Диаграммы плавкости солевых систем. Тройные взаимные системы // Под ред. В.И. Посыпайко, Е.А. Алексеевой. М.: «Химия», 1977. 287 с.
- [3]. Диаграмма плавкости солевых систем. Ч. III. Двойные системы с общим катионом. Посыпайко В.И., Алексеев Е.А., Васина Н.А. М., «Металлургия», 1979, 204 с.

Фазовые равновесия в трехкомпонентной системе $NaBr - Na_2CrO_4 - Na_2WO_4$

Тюрникова А.С., Егорова Е.М.

Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

E-mail: anastasiya.tyurnikova@mail.ru

Проекция ликвидуса на треугольник составов трехкомпонентной системы $NaBr - Na_2CrO_4 - Na_2WO_4$ представлена на рис.1. Двухкомпонентные системы эвтектического типа изучены ранее [1]. Данные по двухкомпонентной системе $Na_2CrO_4 - Na_2WO_4$ уточнены авторами данной работы. В системе установлены характеристики точки минимума непрерывного ряда твердых растворов (НРТР).

В трехкомпонентной системе $NaBr - Na_2CrO_4 - Na_2WO_4$ методом ДТА изучен политермический разрез АВ, расположение которого приведено на рис.1. Поверхность ликвидуса трехкомпонентной системы представлена двумя полями: поле НРТР на основе хромата и вольфрамата натрия и поле бромида

натрия. На моновариантной кривой установлено наличие минимума при $T_{пл} = 479^\circ\text{C}$.

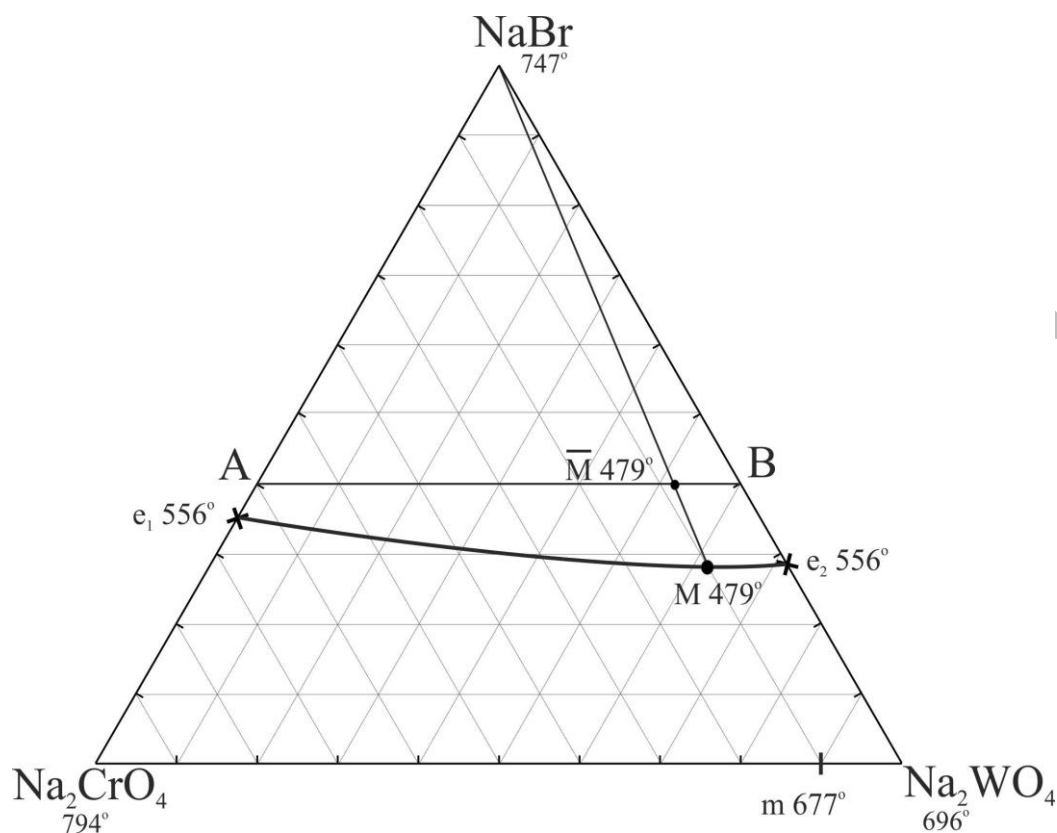


Рис. 1. Проекция ликвидуса на треугольник составов NaBr-Na₂CrO₄-Na₂WO₄

Список литературы

- [1]. В.И. Посыпайко, Е.А. Алексеева. Диаграммы плавкости солевых систем. Ч. III. Двойные системы с общим катионом // М.: «Металлургия», 1979. 204 с.

Мезоморфные свойства системы 4-н-пропилноксикоричной кислоты и 1,2-бис(4-пиридил)этана состава 2:1

Филиппов И.А., Федоров М.С., Сырбу С.А.

Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

E-mail: filippovivanim@yandex.ru

В данной работе была исследована система 4-н-пропилноксикоричной кислоты и 1,2-бис(4-пиридил)этана с целью определить наличие у системы мезоморфных свойств. В процессе исследований был использован ряд экспериментальных методов: ДСК, ИК-спектроскопия, поляризационная термомикроскопия. Ранее методом ИК-спектроскопии нами было определено, что в исследуемой системе между молекулами образуются Н-связи, что

подтвердил сдвиг частоты валентного колебания связи ОН в ИК-спектрах системы 2:1 в коротковолновую область. В результате образуется Н-комплекс, состоящий из одной молекулы 1,2-бис(4-пиридил)этана и двух молекул 4-н-пропилоксикоричной кислоты (рис. 1).

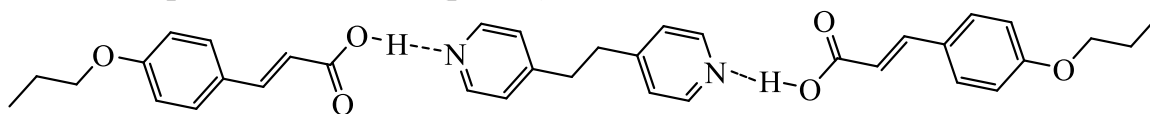


Рис. 1. Н-комплекс 4-н-пропилоксикоричной кислоты и 1,2-бис(4-пиридил)этана

Методом ДСК было показано наличие фазовых переходов в системе 2:1, часть из которых можно отнести к переходу в мезофазу. Основываясь на ДСК кривой (рис. 2), мы предположили наличие мезофазы в температурном интервале 154.7-159.9 °С.

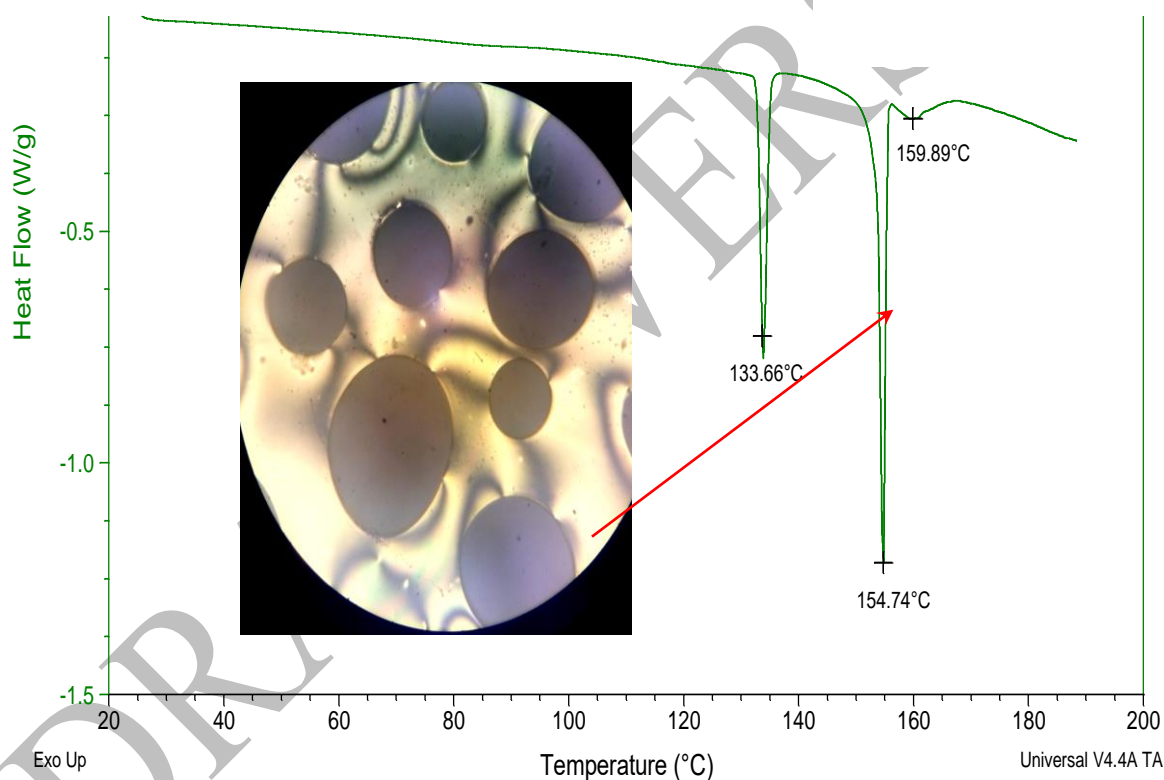


Рис. 2. ДСК кривая для системы 4-н-пропилоксикоричной кислоты и 1,2-бис(4-пиридил)этана 2:1 в режиме нагрева и шликер текстура ЖК фазы

Для подтверждения наших предположений были исследованы текстуры в поляризационном микроскопе. Как видно из рисунка в указанном температурном интервале наблюдалась шликер текстура характерная для нематических жидких кристаллов.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (4.7121.2017/8.9)

Оценка эффективности водотделения от шламовых отходов от шламовых отходов горных пород высокомолекулярными флокулянтами

Хамидуллин Н.Н., Салихов Д.Ф., Ялышев У.Р., Бадртдинова А.И.

Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия

E-mail: xamidyll@gmail.com

Перед горнообогатительными комбинатами (ГОК) в числе актуальных тем энерго – и ресурсосбережения стоит задача повышения продуктивности технологии пастового сгущения шламовых остатков. Пастой служит неосаждаемая суспензия с высоким содержанием твердой компоненты. Формируемая структура пасты обладает за счет высокой вязкости такими свойствами как неосаждаемость, неразделимость и устойчивость к расползанию под внешним воздействием.

В связи с изложенным представляло важным оценить влияние флокулянтов фирмы «Siba» на их флокулирующие свойства при пастовом сгущении шламовых остатков «хвостов» Еленинского месторождения Новокаолинового горно-обогатительного комбината. В целях выяснения основных молекулярных характеристик высокомолекулярных флокулянтов ансамбля макромолекул компании «Siba» были выполнены физико-химические исследования для оценки средней молекулярной массы M и содержания ионогенных звеньев β , варьирование которых позволяет изменять седиментационную устойчивость дисперсных систем на основе предоставленной пасты. Сухой шлам перемешивался с водой, и получившаяся суспензия обезвоживалась при добавлении каждого из соответствующих флокулянтов. За начало отсчета времени принимался момент вливания смеси в сито и регистрировалось количество выделяющийся воды за определенное время. По полученным данным составлялась графическая зависимость по которому выявлялся самый эффективный флокулянт для данного шлама.

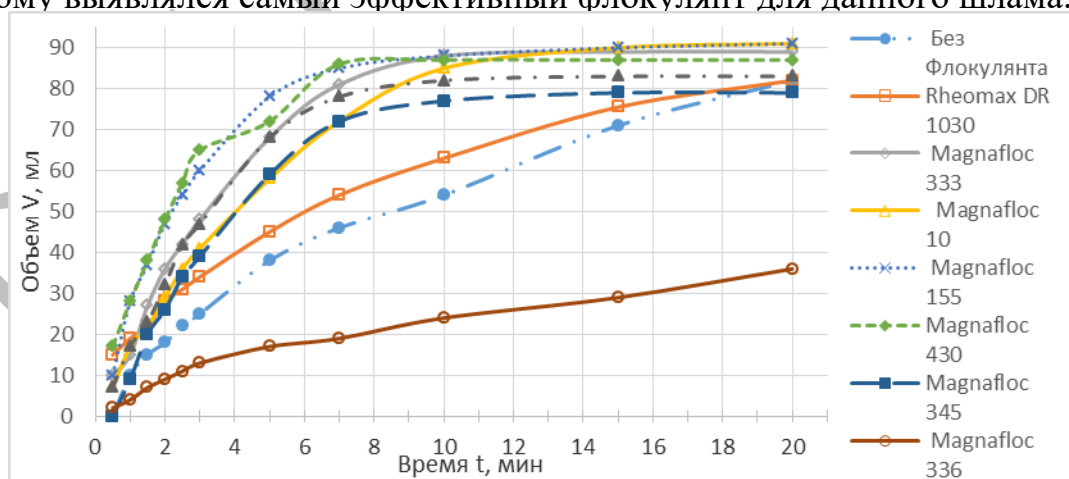


Рис. 1 Объем вытекшей вытекший воды в зависимости от времени

В ходе эксперимента полученный без действия груза в 2,5 кг был выявлен самый эффективный флокулянт (Magnafloc 155) в течении 20 мин которого вытекло 91 мл воды. Кроме того, под действием груза данный флокулянт также показал высокие результаты (95 мл воды).

Механизм термической деструкции соли Мора в изотермическом режиме

Цыганова И.В.

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

E-mail: arina.cyganova@mail.ru

В работе изучены процессы термической деструкции соли Мора – аммоний – железо (II) сульфат в изотермическом режиме при шести температурах. Выбранные для анализа температуры отвечают средним температурам последовательных стадий деструкции динамического режима данной соли [1]. Показана применимость топахимических моделей для описания механизма термической деструкции и рассчитаны константы процесса для каждой стадии.

Термическая деструкция соли изучалась термогравиметрическим методом на автоматических термовесах АТВ-14, изготовленных в ЛЭИТ «Института химической физики» РАН в г. Черноголовке.

Согласно полученным данным, при рассматриваемых температурах (100°C, 155°C, 235°C, 300°C, 450°C и 710°C) большинство реакций протекает в две стадии: до точки перегиба на интегральной кривой наблюдается ускорение процесса, а затем его замедление.

Для описания каждой кинетической стадии показана применимость топахимических моделей Колмогорова-Ерофеева-Белькевича, Гарнера-Проута-Томпкинса и Рогинского-Шульц. Исходя из сравнения коэффициентов линейной корреляции каждой модели, установлено, что для низких температур (100°C, 155°C, 235°C, 300°C) наиболее адекватно описывает процесс деструкции модель Гарнера-Проута-Томпкинса. Механизм протекания реакции деструкции – прораствание в виде нити. При более высоких же температурах (450°C и 710°C) процесс термической деструкции соответствует модели Колмогорова-Ерофеева-Белькевича и механизм образования активных центров одностадийный, рост ядер происходит мгновенно[2].

Рассчитанные константы процесса деструкции для всех моделей каждой стадии близки к единице.

Список литературы

- [1] Yilmaz, V. T. Thermal behavior and kinetic analysis of the thermogravimetric data of double ammonium sulphate hexahydrate salts of Mn (II), Fe (II), Co and Cu (II) // *Thermochimica Acta*. 1994. 3 October. С. 85-92.
- [2] Еремин, Е. Н. Основы химической кинетики. 1976. 375 с.

Тепловые эффекты взаимодействия меди(II) с никотинат-ионом в водных растворах этанола

Чеснокова Н.А., Граждан К.В., Куранова Н.Н., Гущина А.С.
 Ивановский государственный химико-технологический университет,
 Иваново, Россия
 E-mail: kax504@isuct.ru

В настоящей работе изучено влияние растворителя вода-этанол на энтальпию реакции комплексообразования никотинат-иона с Cu^{2+} . Никотиновая кислота (витамин РР), противопеллагрический препарат, обладает липопротеидермической активностью, выраженным сосудорасширяющим действием. Медь участвует в биохимических процессах как составная часть электронпереносящих белков, в процессах биосинтеза гема.

Тепловые эффекты реакции измерены с помощью ампульного калориметра. В реакционную ячейку помещали водно-этанольный раствор никотината натрия ($C=5.003\text{-}5.232$ ммоль·л⁻¹). В ампулу – раствор перхлората меди(II) ($C=0.3164$ моль·л⁻¹). Расчет $\Delta_r H^0$ проводили с использованием констант комплексообразования, констант и энтальпий кислотно-основного равновесия, полученных нами ранее [1].

Таблица 1. Термодинамические характеристики реакции образования никотинатного комплекса меди(II) в водно-этанольных растворах при $T=298$ К, кДж·моль⁻¹.

X_{EtOH} , м.д.	0.0	0.1	0.3	0.5	0.7
$\Delta_r G^0 \pm 0.30$	-21.58	-21.69	-27.00	-30.42	-33.56
$\Delta_r H^0 \pm 1.30$	-9.61	-11.59	-7.20	-4.28	-6.12
$T\Delta_r S^0 \pm 0.40$	11.97	10.10	19.80	26.14	27.44

Изменение энтальпии реакции комплексообразования немонотонно с минимумом при 0.1 м.д. этанола. Подобная зависимость для данной реакции установлена нами также в водно-диметилсульфоксидных растворах. Увеличение содержания неводного компонента в системе способствует уменьшению энергии Гиббса исследуемой реакции. Наблюдается преобладание энтропийного вклада в энергию Гиббса реакции над энтальпийным.

Полученные данные рассмотрены с позиции сольватационно-термодинамического подхода, основанного на анализе вкладов сольватационных характеристик всех участников процесса в результирующее значение его термодинамических параметров при переходе от воды к смешанному растворителю. Основное влияние в изменение энтальпии переноса реакции из воды в растворы с содержанием этанола 0-0.5 м.д. вносит изменение энтальпии переноса комплексной частицы.

Работа выполнена в НИИ термодинамики и кинетики химических процессов ИГХТУ в рамках Государственного задания (проект № 4.7104.2017/8.9).

Список литературы

[1] Куранова Н.Н., Гущина А.С., Граждан К.В., Душина С.В., Шарнин В.А. // Журнал неорганической химии. 2016. Т. 61. № 12. С. 1679-1682.

Изучение влияния циклодекстринов и полимеров на мембранную проницаемость метотрексата

Курбанова Б.Н.¹, Чибунова Е.С.¹, Кумеев Р.С.², Волкова Т.В.², Терехова И.В.²

¹Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

²Институт химии раствора им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия

E-mail: katerina.chibunova@yandex.ru

Метотрексат (4-амино-10-метилфолиевая кислота) является противоопухолевым препаратом, который применяется при терапии многих видов онкологических и аутоиммунных заболеваний. Однако трудность применения этого лекарственного препарата заключается в его относительно невысокой биодоступности. Поэтому, для достижения терапевтического эффекта необходимы частое введение и высокие дозировки препарата, что приводит к серьезным побочным эффектам. Для повышения биодоступности перорально вводимых лекарств в фармацевтике применяют различные вспомогательные вещества такие, как циклодекстрины и полимеры, способные значительно улучшить фармакологически значимые характеристики лекарственных соединений, такие как растворимость, проницаемость и устойчивость. Цель данной работы заключалась в изучении влияния циклодекстринов и полимеров на коэффициенты проницаемости метотрексата.

Коэффициенты проницаемости метотрексата через искусственную целлофановую мембрану (MWC0 12-14 кДа) были определены на ячейке Франца в фосфатном буферном растворе (рН 7.4) и в присутствии различных концентраций β -циклодекстрина и водорастворимых полимеров (поливинилпирролидон, полиэтиленгликоль, гидроксипропилметилцеллюлоза). Установлено, что добавление в раствор рассматриваемых вспомогательных веществ приводит к снижению коэффициентов проницаемости метотрексата, причем в присутствии β -циклодекстрина наблюдалось наиболее существенное понижение. Это связано с тем, что в системе метотрексат/ β -циклодекстрин происходит образование устойчивых комплексов включения, что затрудняет диффузию метотрексата через мембрану. Образование комплексов метотрексат/ β -циклодекстрин подтверждено методами ¹H ЯМР и УФ-спектроскопии.

СЕКЦИЯ 6 Прикладные исследования и материалы

The definition of energy of natural gas

Karpov A.B.

*Gubkin Russian State University of Oil and Gas (National Research University),
Moscow, Russia
karpov.a@gubkin.ru*

Since the beginning of the XIX century, the sale and purchase of luminous and then natural gas in practice were carried out by volume measurements. Therefore, it took a lot of time and effort to develop methods for measuring volumetric costs [1].

In Russia, gas supplies are measured in cubic meters, so it is very often necessary for gas companies to use the conversion factor of the volume in the heating value. Thus, the method of measuring the gas flow in the form of energy can be considered more promising and universal. The methods used to determine the flow and heat of combustion must comply with standards, contract conditions and national legislation.

When indirectly determining the energy at a gas measuring station, quantities such as gas volume or mass, heat of combustion and additional physical quantities such as carbon dioxide content, density, etc. are separately measured. The volume flow and the amount of energy are usually recorded at the measurement point.

In the case of commercial analyzes of the volume of natural gas, the shortcomings of the settlement method are paid for by its advantages - speed and the absence of the need for additional expensive equipment, however, when switching to payment for transferred energy, the disadvantages of the indirect method become significant [2].

Accounting for changes in gas quality at the point of acceptance-transfer is a key factor in the justification of the method of determining energy and its accuracy, i.e. traceability of the determination of the heat of combustion for a particular acceptance-transfer point.

Thus, the increase in the cost of energy and the appearance of gases of different quality led to the fact that payment worldwide began to be made by measuring the thermal energy, in turn, the need to determine the heat of combustion through measurements or calculations led to the appearance of a number of appropriate methods of determination.

References

- [1] Kozlov A.M., Karpov A.B., Fedorova E.B., Zhagfarov F.G. The determination of energy is an important factor in the sale of natural gas // *Neftegazohimiya* №4, 2015. P. 31-34
- [2] Krivosheeva A.S., Ahmedova A. Zh., Kozlov A.M. Improving the accuracy of determining the calorific value of natural gas using a bomb calorimeter // *Abstracts of the 71st International Youth Scientific Conference "Oil and Gas - 2017" vol.2, 2017.* - P. 376.

Synthesis of polycondensation sorbent

Kasimov Sh.A.¹, Djalilov A.T.², Turaev Kh.Kh.¹, Pardayev O.T.¹,
Eshqurbonov F.B.¹, Geldiyev Yu.A.¹

¹*Termez State University, Termez, Uzbekistan*

²*Tashkent Scientific Research Institute of Chemical Technology, Tashkent,
Uzbekistan*

E-mail: sh_kasimov@rambler.ru

Polycondensation ion exchangers in most cases are obtained from complex mixtures of polyfunctional compounds of uncontrolled composition. In addition to unreacted starting monomers, their composition includes oligomers with unequal number of units, different content and mutual arrangement of functional reactive groups. Often the composition of the initial monomers is unknown and, moreover, it is not always constant, it is believed that it is impossible to predict the structural parameters of polycondensation ion exchangers. In addition, it is believed that the complexics obtained by polymer-analogous transformations of various copolymers have a number of disadvantages, which include low mechanical strength and osmotic stability of the grain, uneven distribution of ionogenic groups in the polymer grain, the appearance of side groups and crosslinks as a result of chemical conversions [1].

Thus, the aim of the study is to synthesize and study sorbents obtained by polycondensation based on urea, formaldehyde and hydrazine hydrate and to study their sorption properties. 6 g of urea (0.1 mol) previously dissolved in 15.8 ml (0.2 mol) of formalin at a temperature of 40 °C were placed in a three-necked flask equipped with a reflux condenser and a mechanical stirrer. After that, 5 g (0.1 mole) of hydrazine hydrate were added dropwise. Then the temperature was raised to 100-110 °C and at this temperature a resinous mass was formed after 1.5-2 hours, which was transferred to a porcelain dish and dried in an oven at 80-90 °C for 24 hours. The dried polymer was ground, washed from low molecular weight substances with a 5% solution of NaOH, then with distilled water until a neutral reaction. The product obtained is a fine, porous, pale yellow granule. The yield is 85%.

Studies have been carried out to study the effect of temperature on the process of polycondensation of urea, formaldehyde and hydrazine hydrate. The process of polycondensation was studied at temperatures of 70, 80, 90 and 100 °C. The reaction time, the specific volume of anion exchanger in water, and the static exchange capacity (SEC) of 0.1 N HCl solution were determined.

The optimum polycondensation temperature was assumed to be 90 °C, the reaction time being 3.5-4 hours, the reaction time being more uniform, and the exchange capacitance of 0.1 N HCl solution reached 5.2 mg-equiv/g.

References

[1] Sukhishvili S., Kharlampieva E., Izumrudov V. Where polyelectrolyte multilayers and polyelectrolyte complexes meet // *Macromolecules* №26, -2006, - T.39. - S.8873-8881.

Properties of methanesulfonate based Deep Eutectic Solvents for gases capturing purposes

Mechergui A., Akhmetshina A., Vorotyntsev I.

¹ *Nizhny Novgorod State Technical University n.a. R.E. Alekseev, Russia*

E-mail: amalfatroucha@gmail.com

Since the early 2000's, a new class of ionic liquids (ILs) known as deep eutectic solvents (DESs) has emerged as promising green alternatives for conventional solvents. Basically, a DES is a combination of an organic salt (usually referred to as hydrogen bond acceptor HBA) and a complexing agent (hydrogen bond donor HBD) exhibiting the unique properties of ILs while being cheaper, easier to prepare and less harmful to the environment^[1].

In this work, we have developed DESs systems composed of 1-butyl-3-methylimidazolium methanesulfonate [bmim][MeSO₃] and four different HBDs: urea, maleic acid, fumaric acid and oxalic acid and we have studied their gases absorption capacities. After defining the molar ratio at which every mixture forms the eutectic point, DESs were characterized by FTIR and NMR spectroscopy and physical properties such as density, viscosity and melting point were determined. Additionally, the influence of HBD variation on the DESs was discussed. First, σ -profile and charge distribution of each DES were generated by COSMO-RS model; from these profiles the strength of interactions between [bmim][MeSO₃] and different HBDs and their effects on DESs properties can be deduced. In a second step, the solubility of CO₂, H₂S and NH₃ in the DESs was also predicted by COSMO-RS. It was found that the DESs exhibited higher affinity for NH₃ owing to the strong ability of the eutectic solvents to form new hydrogen bonds with NH₃. These predictions were confirmed by the experimental solubility results evaluated using the volumetric method.

References

[1] W. F. Smith and J. Hashemi, *Foundations of materials science and engineering*, McGraw-Hill, 2004

Flue gas desulphurisation

Plashyhin S.V., Antropov A.S.

*National Technical University of Ukraine «Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute»,
Kiev, Ukraine*

E-mail: plashihin@rambler.ru

Flue gases desulphurisation plays a key role in environmental protection. In most countries with a high level of industrial development, the flue gases desulphurisation has become a branch of industry with significant investments, management, scientific, technical and production facilities, legally established design

and operation norms at gas purification plants from sulphur oxides. Dozens of powerful machine-building and instrument-making companies have been working out and developing the equipment and devices for these purposes.

Classification of flue gases desulphurisation methods, which containing SO₂ can be carried out by various grounds: by type and process nature, type of used sorbent, type of the obtained product, etc. Accepted by the UN Economic Commission for Europe (UNECE), the classification subdivides all desulphurisation methods by one of the characteristic features of processes – non-regenerative (non-cyclic) and regenerative (cyclic) purification processes [1].

In our opinion, the most rational classification of methods is one that allows characterizing the physical and chemical nature of the process and emphasizing its technological features.

At the initial setting the problem of gases desulphurisation solution including flue gases of CHP, came primarily from the task of SO₂ emissions reducing in industrial areas.

This one-sided approach to bellow. To achieve the goal in Central Europe, the USA and Japan, the desulphurisation technologies, based on the rare-phase methods gases absorption at al purification, are the most supported and widely used. Such tendencies are typical for the late 60 th of the first half of the 70 th of the last century, which, in turn, brought the new environmental problems. The methods of alkaline, double alkaline, limestone or limestone purification application (first-generation installations) leads to the formation the plenty of solid and liquid wastes, which is necessary to separate the special areas, and in some cases, to bury them at landfills, which can lead to groundwater poisoning.

In case of flue gases desulphurisation of electric stations with the help of rare-phase methods are possible to the different products depends on the type of technology. For example, a 500 MW coal-fired plant with a sulphur content 3.5% and with a 95% sulphur discharge level can produces ether 90 ton of sulphite-sulphate pulp or 45 ton of gypsum, or 31 ton of ammonium sulphate, or 23 ton of sulphuric acid, or 15 ton of sulphur dioxide, or 7.5 ton of sulphur per hour [2].

According to the new approach to the gas desulphurisation problem, the possibility of using these products is determined by which of the traditional flue gas purification technologies can be applied in a particular situation.

Currently, despite the numbers of worldwide research in gases purifying from sulphur dioxide, the liquid phase (wet) technologies are the most commonly used for the cleaning of flue gases purification. Primarily, those one non- regenerative stamping and regenerative sulphite bisulfite sodium method [3].

References

[1] Corinair (1996). "CORINAIR Atmospheric Emission Inventory Guidebook", ЕМЕР Expert panels/ UNECE/.

[2] Гладкий А.В. Современное состояние и перспективы мирового развития методов десульфуризации отходящих промышленных газов // Промышленная и санитарная очистка газов. - М.: ЦИНТИХИМНЕФТЕМАШ, 1990. - 28 с.

[3] Saleem A., Janssen K.E., Ireland P.A. Аммиачная абсорбция SO₂ приобретает значение // Мир серы, N, P, K. - 1994. - N 4. - С. 23 - 29.

Изучение синергии бинарных смесей ПАВ для оптимизации рецептуры синтетических моющих средств

Чеботарева К.В., Абдрахманова М.Ж., Александрина А.Ю.
 ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет»,
 Волжский политехнический институт (филиал)
 Волжский, Россия
 E-mail: chebotareva_ksenya@mail.ru

Перспективной областью исследований является изучение бинарных смесей поверхностно-активных веществ (ПАВ) в составе средств для мытья посуды, поскольку бинарные смеси реализуют эффект синергизма. Композиции основного ПАВ и со-ПАВ широко используются в рецептуростроении моющих средств, однако состав таких композиций не имеет научного обоснования. Таким образом, изучение синергии бинарных смесей ПАВ актуально исходя из задачи оптимизации рецептуры синтетических моющих средств.

Важнейшей характеристикой ПАВ, имеющей значение для пеномоющих композиций, является высота столба пены и устойчивость пены. Пенообразующую способность определяли методом Росс-Майлса.

В таблице приведены результаты исследования основных характеристик для ряда индивидуальных ПАВ (неионогенные – алкилполиглюкозиды, диэтаноламид кокосового масла, алкилдиметиламинооксид; анионные - альфа-олефинсульфонат натрия, лауретсульфат натрия; амфотерный ПАВ - кокамидопропил бетаин)

Таблица 1. Технологические характеристики ПАВ

Вещества	Содержание основного вещества	pH	Высота столба пены, мм	Вязкость, сР	Плотность, г/см ³
Алкилполиглюкозид C ₈ -C ₁₀	55,5	11,76	765,67	2033	1,150
Диэтаноламид кокосового масла	73	11,72	375,5	1194	1,000
Алкилдиметиламинооксид	10	0,87	766,33	17,83	0,977
Альфа-олефинсульфонатнатрия	30	12,79	772	32,3	1,043
Лауретсульфат натрия	54	8,47	759	24540	-
Кокамидопропил бетаин	37,5	4,89	740	24,7	1,06

Методом полного факторного эксперимента установлена взаимосвязь между пенообразующей способностью и соотношением «содержание ПАВ-содержание со-ПАВ». Обнаружены синергические эффекты бинарных смесей ПАВ, проявляющиеся в увеличении пенообразующей способности. На основании проведенных экспериментальных исследований оптимизирована рецептура средств для мытья посуды, апробация которых проведена на производственной площадке ТД «Грасс».

Определение мольных соотношений полиэлектролитов в процессе образования интерполиэлектролитных комплексов между полидиаллилдиметиламмоний хлоридом и Акремонами

Авакова Е.О., Кузьменко В.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия*

E-mail: avakova_katya@mail.ru

Интерполиэлектролитные комплексы (ИПЭК) – особое семейство полимерных соединений, образующихся при смешивании водных растворов противоположно заряженных полиэлектролитов за счёт кооперативного электростатического связывания поликатионов с полианионами. В зависимости от зарядного отношения и степени полимеризации исходных полиэлектролитов можно получить либо нестехиометрические водорастворимые, либо стехиометричные нерастворимые, лишь слабо набухающие в воде ИПЭК [1].

Целью исследования является определения концентрационных условий образования стехиометрических ИПЭК с целью формирования сложных оболочек полиэлектролитных микрокапсул.

Проведено титрование катионного полидиаллилдиметиламмоний хлорида (ПДАДМАХ) анионными сополимерами акриловой и метакриловой кислоты - акремонами марок В-1, АК-35, D-13. Определение степени взаимодействия полиэлектролитов контролировали по изменению мутности на приборе – мутномер НИ - 9870302.

При добавлении раствора титранта к раствору исследуемого вещества изменения значений мутности на первой стадии практически не наблюдалось, что может свидетельствовать о формировании растворимых комплексов. Дальнейшее добавление акремона приводит к увеличению значений мутности реакционной смеси, что указывает на укрупнение частиц ПЭК и приводит к формированию осадка. Дополнительное введение анионного полиэлектролита не приводит к изменению мутности раствора, что характеризует достижение равновесия в системе. Таким образом, при титровании одного компонента другим нерастворимые комплексы формировались в очень узком диапазоне соотношений. Определено мольное соотношение полиэлектролитов при образовании ИПЭК стехиометрического и нестехиометрического состава. Минимальное соотношение, при котором образуется нестехиометрический комплекс Z_{\min} варьируется от 0,42 до 0,125. Насыщенный нестехиометрический комплекс образуется при Z_{\max} от 0,68 до 0,172.

Список литературы

[1] Кабанов В. А. Полиэлектролитные комплексы в растворе и в конденсированной фазе// Журнал Успехи химии. 2005. № 1(74). С. 5-23.

Концентрация кислорода в металле при выплавке низко- и среднеуглеродистой стали в ДСП-160

Авдоница Д.Н., Мьялкин И.В.

Выксунский филиал НИТУ "МИСис", Выкса, Россия

E-mail: i.v.myalkin@gamil.com

Современная технология выплавки стали в ДСП позволяет получать высококачественный металл ответственного назначения, в том числе с низким содержанием углерода. Для этого на современных ДСП используется кислородная продувка металла с применением стеновых устройств комбинированного назначения [1]. Определяющими факторами отличия технологии выплавки низкоуглеродистой и среднеуглеродистой стали являются расход кислорода, фактическое содержание его в металле и стремление к достижению равновесного состояния. Актуальным является оценка равновесия растворенного кислорода со шлаковой и металлической фазами и сравнение с фактической его концентрацией. В ходе термодинамических расчётов была оценена равновесная активность кислорода со шлаковой фазой с применением программы «Гиббс» и углеродом в расплаве. Установлено, что при выплавке среднеуглеродистой стали фактическая активность кислорода в полупродукте находится в интервале между равновесной концентрацией кислорода со шлаковой фазой и в равновесии с углеродом в металле. В случае низкоуглеродистой стали фактическая активность кислорода в полупродукте находится в промежутке между предельной растворимостью кислорода в расплаве и равновесной концентрацией кислорода со шлаковой фазой, что можно объяснить непосредственным контактом расплава с кислородной струей.

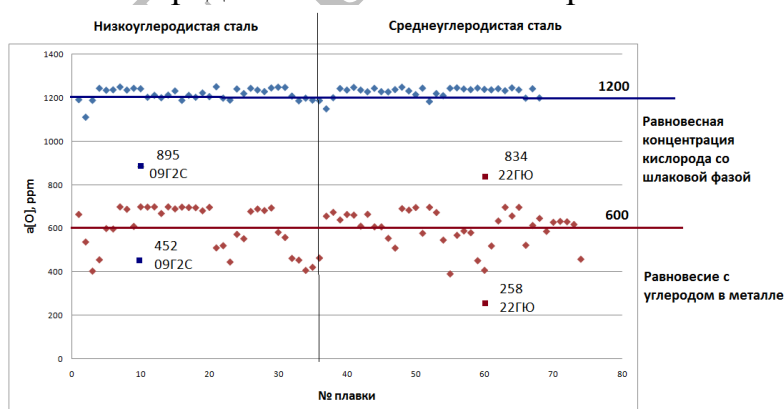


Рис.1. Активность кислорода в металле при выплавке стали в ДСП-160.

Список литературы

[1] Сафонов В.М., Мьялкин И.В., Мороз Д.В., Корзун Е.Л., Смирнова Н.Н. Применения термодинамического моделирования в технологии выплавки стали // Седьмая Международная научная конференция "Химическая термодинамика и кинетика" - 265.с

Оценка изменения количества и состава неметаллических включений в ходе непрерывной разливки стали

Агеев М.И., Мялкин И.В., Сафонов В.М.
Выксунский филиал НИТУ "МИСис", Выкса, Россия
E-mail: i.v.myalkin@gamil.com

Одним из направлений развития техники и технологии современной электрометаллургии является обеспечение возрастающих требований промышленности по чистоте стали от неметаллических включений. Наиболее опасными с точки зрения разрушения металла являются твердые и остроугольные включения зерен корунда, так как в связи с высокими твердостью и температурой плавления включения корунда при обработке давлением не деформируются. Поэтому в современной практике применяют комплексное раскисление стали алюминием и кальцием. Это позволяет не только снизить содержание кислорода, но и модифицировать включения зерен корунда в более безопасные алюминаты кальция.

Целью данной работы является исследование на компьютерной модели процесса образования неметаллических включений трубной стали и оценка степени влияния вторичного окисления на их состав и количество.

В данной работе было проведено исследование образования фаз неметаллических включений и их химического состава в ходе охлаждения от 1700⁰С до 600⁰С стали марки 09Г2С. Химический состав стали был выбран из паспортов плавок литейно-прокатного комплекса АО "ОМК - Сталь". Номер плавки – 1710580. Компьютерный расчет проводили с помощью программного обеспечения Thermo-Calc.

Проанализировав результаты расчетов, установили увеличение массы образовавшихся с неметаллических включений после вторичного окисления на 19,7% (абс.) с 0,0325%, до 0,0389 %. Вместе с тем, следует особо отметить, что наряду с увеличением их массы существенно изменился и качественный состав неметаллических включений. Так, если до вторичного окисления в металле присутствуют моно- и биалюминаты кальция, то после вторичного окисления образуются гексаалюминаты кальция и фазы корунда. Образование этих алюминатов объясняется снижением содержания Са в стали, о чем также свидетельствует снижение количества СаS. Т.е. остаточных концентраций кальция не хватает для связывания серы. Оптимальное отношение Са/Al в металле (при содержании СаО в алюминатах 50 %) составляет 0,11 - 0,14, что соответствует составу стали до вторичного окисления на МНРС (Са/Al = 0,119) и объясняет отсутствие гексаалюминатов кальция. В результате вторичного окисления данное соотношение снижается ниже минимально допустимого и составляет около 0,093. Для улучшения чистоты стали и модифицирования трудноудаляемых неметаллических включений необходимо минимизировать процесс вторичного окисления при разливке на МНРС, а также контролировать соотношение содержания алюминия и кальция в металле.

Роль температуры в коллоидизации сульфатного мыла в водных растворах

Андранович О.С., Трегелева Л.Р., Демьянцева Е.Ю., Смит Р.А.
 ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский Государственный университет
 промышленных технологий и дизайна Высшая школа технологии и
 энергетики»,
 Санкт-Петербург, Россия
 E-mail: ilonichka3377@mail.ru

При сульфатной варке в результате взаимодействия смоляных и жирных кислот, жиров, восков с гидроксидом натрия образуется сульфатное мыло. Натриевые соли полученных кислот, обладая поверхностно-активными свойствами, способствуют эмульгированию и солубилизации части неомыляемых липофильных компонентов экстрактивных веществ. В результате отбираемое после отстаивания упаренного отработанного черного щелока сульфатное мыло будет содержать приблизительно равные количества натриевых солей смоляных и жирных кислот, и сравнительно меньшего количества окисленных и неомыляемых веществ. Необходимость тщательного отбора мыла обуславливается ценностью этого продукта, а также тем, что оно оказывает негативное воздействие на выпарную установку в процессах упаривания щелока.

В работе были проанализированы зависимости поверхностного натяжения растворов хвойного и облагороженного сульфатного мыла при разных температурах, определена критическая концентрация мицеллообразования (ККМ). Как видно из таблицы 1 присутствие неомыляемых веществ в растворах хвойного сульфатного мыла резко снижает его мицеллообразующую способность. Влияние температуры на ККМ облагороженного сульфатного мыла незначительно. У хвойного сульфатного мыла коллоидизация раствора с повышением температуры ухудшается. Это связано с тем, что в хвойном сульфатном мыле преимущественно содержатся соединения с полициклическими цепями (абиетат натрия).

Таблица 1. Влияние температуры на мицеллообразование сульфатного мыла

Наименование объекта	ККМ, %, масс.			
	20°C	30°C	40°C	60°C
Раствор хвойного сульфатного мыла	0,75	0,81	0,83	0,85
Раствор облагороженного сульфатного мыла	0,12	0,1	0,11	0,14

Список литературы

- [1] Demyantseva E. Yu., Andranovich O.S., Smith R.A., Schiraya K. V. // Journal Science and Society. 2016. p.8-14
 [2] Н.П.Лысогорская, Е.Ю.Демьянцева, В.В.Клюбин. // Коллоид. журн.2002. – т.64. №3.с.427-429.

Добавки для депарафинизации масляных фракций на основе сополимеров высших алкил(мет)акрилатов и N-алкилакриламидов

Арифуллин И.Р.^{1,2}, Большакова Е.А.², Семенова Ю.И.¹

¹Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

²Нижегородский государственный технический университет
им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия
E-mail: i-arifullin@mail.ru

Полимеры на основе высших алкилакрилатов и алкилметакрилатов широко применяются в качестве добавок для повышения эффективности депарафинизации масляных фракций нефтей. Введение в их состав высших N-алкилакриламидов может повысить эффективность действия присадки и обеспечить интенсификацию процессов депарафинизации.

Целью данной работы была оценка перспективности применения сополимеров высших алкилакрилатов и N-алкилакриламидов в качестве добавок для депарафинизации масляных фракций.

Для оценки влияния звеньев N-алкилакриламидов на эффективность добавок были синтезированы гомо- и сополимеры на основе алкилакрилатов C₁₆₋₂₀. Их состав представлен в табл. 1.

Таблица 1. Состав синтезированных присадок.

№	Состав
П-1	Алкилакрилаты C ₁₆ -C ₂₀
П-2	Алкилакрилаты C ₁₆ -C ₂₀ : N-(мет-Нонил)акриламид (8:2)

В табл. 2 приведены результаты депарафинизации масляной фракции без присадки и в присутствии двух полимерных добавок.

Таблица 2. Влияние введения добавок на депарафинизацию масляной фракции.

Присадка	Время филь- трования, с	Параметры масла			Параметры гача	
		Выход, %	ИВ	Тз, °С	Тпл, °С	ОМ, %
-	41	72,4	99,6	-15	47,7	37,2
П-1	8	77,8	98,5	-16	51,4	15,4
П-2	10	79,4	98,9	-16	50,8	18,1

Показано, что обе присадки значительно сокращают время фильтрования (в 4-5 раз), повышают выход депарафинированного масла на 5-7% и уменьшают остаточное содержание масла (ОМ) в парафине. Кроме того, при проведении процесса в присутствии амидосодержащей присадки наблюдается более высокий выход депарафинированного масла по сравнению с применением гомополимера алкилакрилатов.

Синтез магнитного сорбента на основе гуминовой кислоты

Жакина А.Х., Арнт О.В., Кудайберген Г.К.

ТОО «Институт органического синтеза и углехимии РК», Караганда, Казахстан
E-mail: oxana230590@mail.ru

Институт органического синтеза и углехимии РК (ИОСУ РК) имеет богатый опыт по химической переработке и модификации бурых и окисленных углей Центрального Казахстана. Нами получена серия доступных химически модифицированных продуктов многофункционального назначения из отходов угледобычи (окисленные угли, горелые породы и т.д.). Так как в настоящее время магнитным наноматериалам уделяется повышенное внимание, связанное с наличием уникальных магнитных и сочетанию необычных физических свойств наночастиц, позволяющих эффективно использовать их в составе магнитоактивных сорбентов в технологиях очистки воды, то важным инструментом управления магнитными характеристиками в наноструктурах может стать модификация поверхности наночастиц полимерными материалами, обладающими высокой сорбционной емкостью. К числу перспективных полимеров в нанотехнологии относятся гуминовые кислоты, уже используемые в технологии очистки природных и сточных вод.

Синтез магнитного сорбента осуществлен в лабораторных условиях методом *in situ* – метод нанесения покрытия на наночастицы магнетита в процессе синтеза. Получение сорбента проводили в лабораторных условиях под действием ультразвукового облучения. Сырьем для получения исходной гуминовой кислоты служили окисленные угли Шубаркольского месторождения. На рисунке 1 представлен готовый магнитный гуминовый сорбент. Как видно, он обладает очень хорошими магнитными свойствами.



Рис. 1. Магнитные свойства сорбента на основе гуминовой кислоты

В ходе синтеза установлено, что определяющими факторами протекания процесса синтеза магнитного сорбента являются соотношение исходных реагентов, продолжительность УЗО, концентрация осадителя. Работа выполнена при поддержке гранта 4864/ГФ4 МОН РК.

Исследования морфологии поверхности магнитного сорбента на основе гуминовой кислоты

Жакина А.Х., Арнт О.В., Кудайберген Г.К.

ТОО «Институт органического синтеза и углехимии РК», Караганда,
Казахстан

E-mail: oxana230590@mail.ru

Для индивидуального изучения морфологии поверхности магнитного сорбента полученного на основе гуминовой кислоты проведен микроскопический анализ с использованием растрового электронного микроскопа MIRA 3 фирмы TESCAN. Детальное исследование морфологии поверхности магнитного сорбента (Fe_3O_4 -ГК), полученного методом *in situ* с применением УЗО, показало, что поверхность образца неоднородная (рисунок 1 а). Вкрапленные в состав гуминовой кислоты магнитные наночастицы имеют слоистую структуру, образованную параллельно расположенными слоями. Возможно, взаимодействие магнитных частиц с гуминовой кислотой, приводит к «распрямлению» макромолекул с последующим уплотнением структуры.

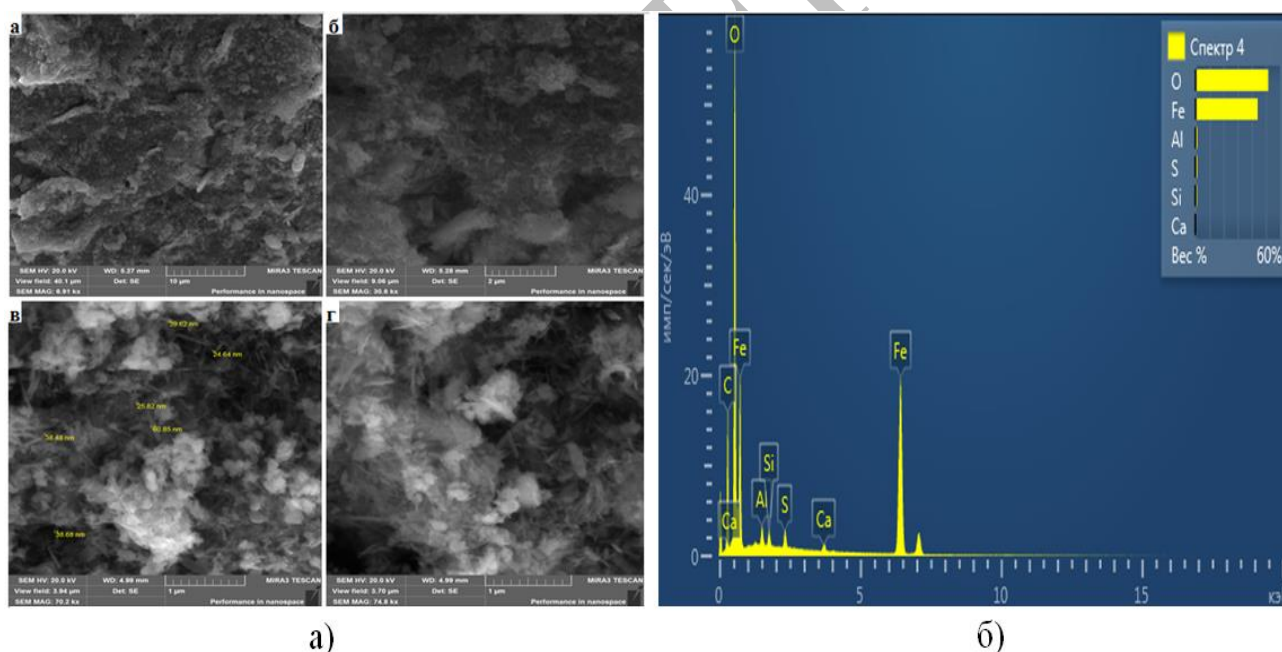


Рис. 1. Результаты электронно-микроскопических снимков Fe_3O_4 -ГК с УЗО (а) и элементного состава (б).

Предположено, что под влиянием ультразвука аморфные частицы сперва образуют зародыши новых фаз, которые видны при максимальном увеличении. Размер таких частиц составляет до 60 нм. Результаты рентгеновского энергодисперсионного микроанализа элементного состава образца Fe_3O_4 -ГК с УЗО подтверждают наличие магнетита и алюмосиликатный состав ГК (рисунок 1б). Работа выполнена при поддержке гранта 4864/ГФ4 МОН РК.

Каталитическое гидрирование антрацена

Ахметкаримова Ж.С.¹, Мулдахметов Ж.Х.¹, Аринова А.Е.¹, Ордабаева А.Т.¹, Исабекова Д.С.²

¹Институт органического синтеза и углекислотной РК, Караганда, Казахстан

²Карагандинский государственный технический университет, Караганда, Казахстан

E-mail: zhanarnf@mail.ru

Особый интерес для решения ряда технических задач переработки топлива представляют полиароматические углеводороды. Объектом исследования выбран - антрацен. Представляет собой сочетание трех шестичленных циклов. Изучение антрацена при помощи рентгеноструктурного анализа показывает, что все 14 атомов углерода молекулы антрацена лежат в одной плоскости [1].

Эксперименты гидрирования антрацена проводили в автоклаве высокого давления «СЖФ-0,05» из жаропрочной нержавеющей стали объемом 0,05 л. Предварительно перемешанные исходные компоненты помещали в реактор, герметизировали, продували водородом и закачивали водород до 4,0 МПа, нагревали до температуры 400°C при скорости нагрева 10°C в минуту. Продолжительность процесса составила 60 мин после достижения автоклавом рабочей температуры. После окончания эксперимента реактор охлаждали до комнатной температуры.

В работе использовались методы ХМС и ГЖХ анализа газообразных и жидких продуктов реакции. ХМС исследование проводилось на приборе HP 5890/ 5972 MSD фирмы Аджилент (США), на капиллярной колонке DB-5ms 30mm x 0.250mm x 0.50µm, в интервале температур 60-300°C. Идентификация веществ производилась по масс-спектральной базе данных NIST98.

В ходе исследования установлено, что в одинаковых условиях Fe₂O₃/ZSM и CoO/ZSM образуют состав продуктов реакции различный по соотношению компонентов. Так, при незначительной разнице в степени конверсии антрацена – 95,02% для Fe₂O₃/ZSM и 97,38% для CoO/ZSM, разница в содержании продуктов гидрогенолиза и гидрирования более заметна. Таким образом, в ход проведения сравнительного анализа представленных продуктов реакции полученных в процессе гидрирования линейного полиароматического соединения, антрацена, в присутствии цеолитного носителя, импрегнированных высокодисперсными железом- и кобальтсодержащими добавками, можно констатировать, что синтезированные катализатор на основе кобальта проявляет высокую активность в процессах гидрирования, гидродеструкции объекта исследования.

Список литературы

[1] Байкенов М.И., Байкенова Г.Г., Исабаев А.С., Татеева А.Б., Ахметкаримова Ж.С., Тусипхан А., Матаева А.Ж., Есенбаева К.К. // Химия твердого топлива. 2015. №3. С.22-28.

Полиэлектrolитные комплексы хитозана с пектином и их применение в инкапсулировании

Басырова С.И., Шилова С.В., Третьякова А.Я.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия*

E-mail: basyrova.sara@mail.ru

В последние десятилетия предметом интенсивных исследований является хитозан. Это обусловлено комплексом уникальных свойств данного природного полисахарида – способности к биодеструкции, гипоаллергенности, совместимости с тканями живых организмов. Указанные свойства определяют широкое применение хитозана в косметической, медицинской, пищевой, текстильной промышленности, сельском хозяйстве и водоочистке. Растворимость хитозана в воде обеспечивает возможность его комплексообразования с противоположно заряженными полиэлектролитами и поверхностно-активными веществами (ПАВ) [1].

Цель данной работы заключалась в исследовании закономерностей формирования полиэлектролитных комплексов хитозана с полианионом пектином и получении капсул на их основе.

Объектами исследования являлись образцы гидрохлорида хитозана с молекулярной массой M_n 38700 и степенью деацетилирования 80% (ЗАО «Биопрогресс», г. Щелково) и высокоэтерифицированного яблочного пектина с молекулярной массой M_n 26000 («Herbstreith & Fox KG Pektin-Fabriken», Германия). Для проведения исследования применяли методы динамического светорассеяния, кондуктометрии, турбидиметрии и ИК-спектроскопии.

Показано, что при последовательном введении разбавленного раствора пектина ($7,5 \times 10^{-4}$ осново-моль/л) к относительно концентрированному раствору хитозана ($1,5 \times 10^{-3}$ осново-моль/л) (или наоборот) в системе образуется интерполиэлектrolитный комплекс за счет электростатического взаимодействия протонированных групп хитозана и карбоксильных групп пектина. Установлено, что на характер взаимодействия полиэлектролитов оказывает влияние концентрация компонентов, их соотношение в системе и последовательность ввода. Полиэлектrolитные капсулы получали методом послойного осаждения полианиона пектина и поликатиона хитозана на микросферы карбоната кальция и последующего удаления карбонатного «ядра». Показано, что размер капсул можно направленно регулировать путем варьирования количества нанесенных слоев противоположно заряженных полиэлектролитов. Полученные наноразмерные капсулы перспективны для доставки лекарственных средств и биологически активных веществ в живые клетки.

Список литературы

[1] Паламарчук И.А., Бровко О.С., Боголицын К.Г. и др. // Журнал прикладной химии. 2015. Т. 88. № 1. С. 109-115.

Электрохимическое осаждение блестящих никелевых покрытий в присутствии гетероциклических соединений

Белова В.С., Балмасов А. В., Ларионов А.В.

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

E-mail: valeria_bel@mail.ru

В работе исследовано влияние добавки гетероциклического соединения (ГЦС) - 2-(4Н-1,2,4-триазол-3-илтио)уксусной кислоты на качество гальванических никелевых покрытий.

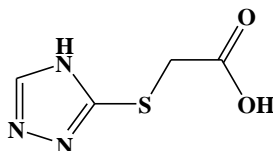


Рис. 1. Структурная формула 2-(4Н-1,2,4-триазол-3-илтио)уксусной кислоты

В присутствии данного гетероциклического соединения были получены качественные блестящие никелевые покрытия, обладающие высокой отражательной способностью. В ходе исследования регистрировались катодные поляризационные кривые с использованием потенциостата Р-30J. При помощи профилометра модели 170622 были измерены показатели шероховатости поверхности покрытий, полученных из базового сернокислого электролита и электролита, содержащего добавку ГЦС. С помощью растровой электронной и атомно-силовой микроскопии была изучена структура гальванических осадков. При введении в электролит добавки существенно изменяется структура получаемых покрытий. Уменьшаются размеры зерен, покрытие становится более однородным. Это связано с влиянием адсорбции на скорость нуклеации и роста кристаллитов никеля при электроосаждении.

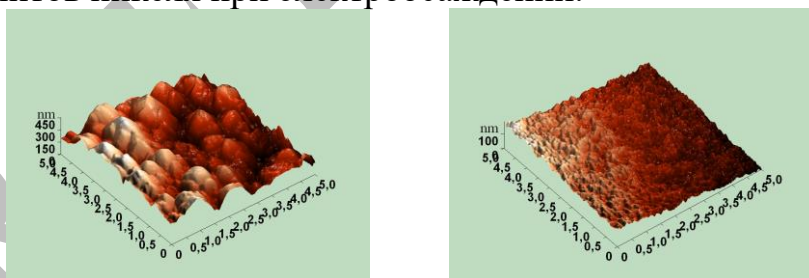


Рис. 2. Микрорельеф поверхности никелевого покрытия, полученного из стандартного электролита никелирования и электролита с добавкой ГЦС - 30 мг/л, при толщине покрытия 6 мкм.

Установлено, что при введении в состав электролита малых количеств ГЦС (не более 50 мг/л) происходит увеличение катодной поляризации, способствующее получению высококачественных гальванических покрытий. Эта добавка проявляет эффект блескообразователя и является выравнивающей добавкой. Шероховатость поверхности снижается с $R_a=0,25$ мкм до $R_a=0,08$ мкм (для толщины покрытия 6 мкм). Светоотражательная способность увеличивается с 35% до 76%.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства образования и науки РФ (№ проекта 4.7305.2017/8.)

Ате-комплексы лантаноидов с перфторированным 2-меркаптобензотиазолом. Синтез, строение и люминесцентные свойства.

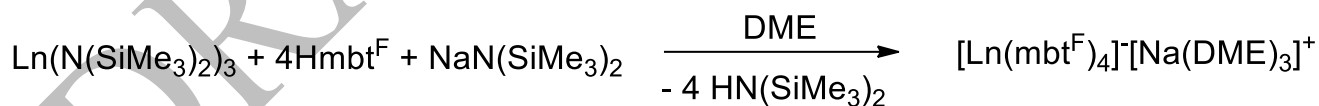
Л. И. Блинова^{1,2}, В. А. Ильичев², М. Н. Бочкарев^{1,2}

¹Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

²Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН
Нижний Новгород, Россия
E-mail: blinova.li@mail.ru

Комплексы лантаноидов с органическими лигандами, благодаря уникальным люминесцентным свойствам, востребованы во многих современных оптоэлектронных технологиях и биомедицине. Для получения высоколюминесцентных соединений необходимо сенсбилизировать ионы лантаноидов органическими лигандами, содержащими интенсивно поглощающие хромофорные группы. Использование перфторированных лигандов для этой цели позволяет увеличить квантовый выход фотолюминесценции и время жизни возбужденных состояний ионов лантаноидов, которые излучают в ИК-области. Этот эффект обусловлен отсутствием в них С-Н, О-Н и N-H групп являющихся эффективными тушителями ИК-люминесценции.

В работе синтезированы новые ате-комплексы лантаноидов с использованием 4,5,6,7-тетрафтор-1,3-бензотиазол-2(3Н)-тиона (HmbtF) [1] в качестве лиганда, в соответствии со схемой (рис. 1). Структура некоторых комплексов была определена методом РСА. Люминесцентные свойства комплексов были исследованы с помощью времязрешающих методик. Обнаружено, что времена жизни возбужденных состояний лантаноидов в этих соединениях в 3-5 раз превышают характерные значения для нефторированных органолантаноидных соединений [2]. Это обусловлено отсутствием в ближайшем окружении иона лантаноида органических фрагментов, содержащих С-Н – связи. Синтезированные нами соединения представляют интерес в качестве активных сред для мощных ИК-лазеров.



Ln = Nd, Sm, Gd, Er, Yb

Рис.1. Схема синтеза ате-комплексов

Список литературы

- [1] Ilichev V.A., Blinova L.I., Rozhkov A.V., Balashova T.V., Rummyantsev R.V., Fukin G.K., Bochkarev M.N.// Journal of Molecular Structure. 2017. V. 1148. P. 201-205.
[2] Pushkarev A.P., Bochkarev M.N.// Russ. Chem. Rev. 2016. V. 85. P. 1338-1368.

Химическая переработка растительных масел

С.А. Бобровская, А.Н. Шлеина, Ю.Е. Курис, Е.Ю. Шумилова, А.В. Протопопов
 Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
 Барнаул, Россия
 E-mail: a_protoporov@mail.ru

Растительные масла представляют собой возобновляемый ресурс, который может использоваться в качестве надежного исходного материала для получения новых продуктов с широким спектром структурных и функциональных вариаций. Широкая доступность и относительно низкая стоимость делает растительные масла привлекательным сырьем для пластмассовой промышленности. В последнее время, в качестве альтернативного ресурса для производства для различных продуктов, таких как полимеры, лакокрасочные покрытия, адгезивы и композитные материалы.

Нами проведено исследование отработанных бентонитовых адсорбентов после маслоочистки подсолнечного и рапсового масел. На первом этапе работы была проведена экстракция диэтиловым эфиром адсорбированного на бентоните масложира. При этом было установлено, что содержание масложира на бентонитовых адсорбентах составляет до 25 %. Полученный после экстракции отбеленный земельный масложир подвергали предварительной обработке в присутствии щелочи. В модифицированное масло вносили серу и проводили полимеризацию в течение 0,5 - 5 часов, при температурах 120 °С, 140 °С, 160 °С. Полученные продукты исследовали на йодное число, для определения прореагировавших непредельных связей.

Таблица 1. Значение йодного числа при полимеризации масла

Время синтеза, ч	Подсолнечное масло			Рапсовое масло		
	Температура, °С			Температура, °С		
	120	140	160	120	140	160
0,5	63	233	121	13	127	70
1	114	111	44	76	97	0
2	190	6	0	114	0	-
3	228	0	-	114	-	-
4	241	-	-	32	-	-

Приведенные данные показывают, что при 120 °С реакция окисления масла преобладает над реакцией полимеризации. При 140 °С после двух часов синтеза начинает наблюдаться значительное повышение вязкости, продукт становится смолообразным и имеет темно-коричневый цвета. При 160 °С синтез удалось провести только в течение часа, так как продукт стал «битумно-образным». Данный факт свидетельствует о достаточно полном протекании полимеризации при данных условиях.

Исследование продуктов химической модификации подсолнечного масла методом ИК-спектроскопии

А.Н. Шлеина, С.А. Бобровская, Ю.Е. Курис, Е.Ю. Шумилова, А.В. Протопопов
 Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
 Барнаул, Россия
 E-mail: a_protopopov@mail.ru

Необходимость освобождения полимерной промышленности от ее зависимости от истощающих ресурсов представляет собой серьезную проблему, и поэтому актуален поиск промышленно применимых возобновляемых альтернатив. В этом случае растительные масла обладают многими преимуществами в связи с их возобновляемостью. Их широкая доступность и относительно низкие цены делают их промышленно привлекательными, как это ежедневно демонстрирует промышленная химия. Крупнейшие источники растительных масел являются многие сельскохозяйственные культуры, такие как соя, кукуруза, льняное семя, хлопковое семя или арахис.

Проведенные нами исследования по химической модификации растительных масел, полученных из отходов маслоэкстракционного производства, показали возможность синтеза резиноподобных полимеров.

Полученные в результате химической модификации продукты анализировали методом ИК-спектроскопии и сравнивали с исходным маслом.

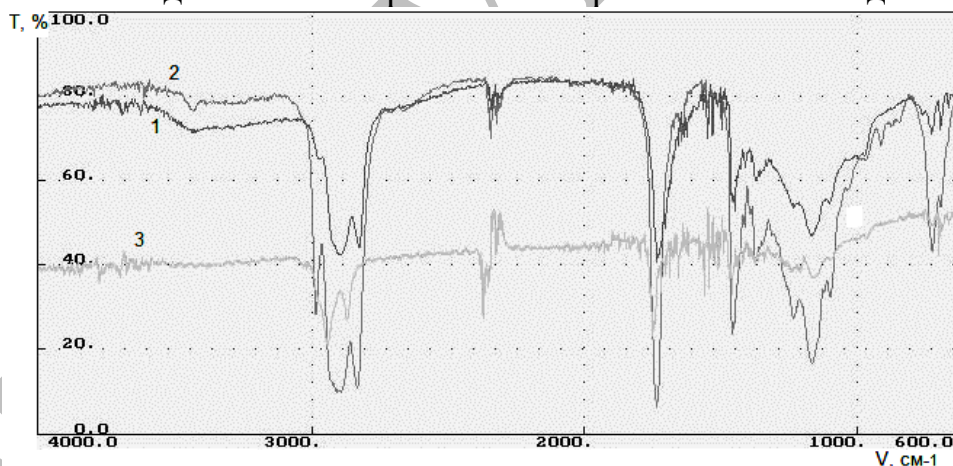


Рис.2. ИК-спектры подсолнечного масла (1) и модифицированного масла при 120⁰С (2) и при 160⁰С (3)

Анализ полученных продуктов методом ИК-спектроскопии показал исчезновение полосы поглощения в области 3600 см⁻¹ для продукта, полученного при температуре обработки 160⁰С и ее сужение при температуре 120⁰С и появление полосы поглощения в области 1560 см⁻¹, отсутствующей в исходном масле, полоса поглощения в области 3100 см⁻¹, характерная для колебаний метиленовых групп, в модифицированном масле исчезает. Таким образом, в ходе модификации растительного масла с применением серы наблюдается взаимодействие по метиленовым группам, а также, в процессе взаимодействия наблюдается уменьшение водородного взаимодействия гидроксильных групп и, в дальнейшем, их взаимодействие в процессе реакции.

Оценка влияния ультразвуковой обработки шерсти на результаты крашения

Бобылев Н.С., Андреева Е.А., Смирнова С.В.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия*

Шерстяное волокно обладает комплексом уникальных свойств и является одним из наиболее ценных видов натуральных волокон, перерабатываемых мировой текстильной промышленностью. Большое значение в процессах отделки шерсти имеет подготовка волокна к колорированию, поскольку кутикулярный слой шерстяного волокна проявляет гидрофобные свойства, что затрудняет проникновение молекул красителя в кортекс. Одним из путей совершенствования технологии крашения шерсти металлсодержащими красителями (комплекса 1:2) является предварительная обработка кератина с целью придания ему способности более эффективно окрашиваться красителями этого класса. В последние годы значительно возрос интерес исследователей к использованию ультразвука для увеличения доступной для молекул красителя поверхности шерстяного волокна.

Целью настоящей работы явилась оценка влияния ультразвуковой обработки на процесс крашения шерстяного волокна.

В работе спектрофотометрическими методами исследовано влияние условий обработки кератина шерсти ультразвуком на кинетику выбирания металлсодержащих красителей волокном. Установлено, что ультразвуковая обработка волокна перед крашением позволяет в несколько раз повысить скорость и степень выбирания исследованных красителей из красильной ванны. Проведена оценка эффективности обработки на колористические и прочностные характеристики шерстяного волокна.

Разработка полимерных азотсодержащих диспергаторов для масел

Большакова Е.А.¹, Арифиллин И.Р.^{1,2}

¹*Нижегородский государственный технический университет
им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия*

²*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: ea_rapina@mail.ru*

Нефтяные базовые масла по своим свойствам недостаточно выполняют задачи, связанные с удерживанием загрязнений в суспендированном состоянии. Для улучшения данной характеристики масел в них вводят диспергирующие присадки, которые поддерживают твердые продукты окисления в объеме масла, не позволяя им укрупняться и оседать на металлических деталях двигателя.

Известно, что сополимеры высших алкилметакрилатов, широко применяемые в качестве модификаторов вязкости и депрессоров (снижающих температуру застывания), в случае введения звеньев азотсодержащих сомономеров могут проявлять дополнительно и высокую диспергирующую способность.

В данной работе были синтезированы многофункциональные присадки для масел на основе сополимеров высших алкилметакрилатов и азотсодержащего сомономера – N-винилпирролидона (N-ВП), а также проведена оценка комплекса характеристик полученных присадок.

Радикальной полимеризацией в масле И-20А были синтезированы образцы, содержащие звенья алкилметакрилатов с длиной алкильного фрагмента 12-15 атомов углерода (АМА₁₂₋₁₅), N-ВП и метилметакрилата (ММА). Варьированием количества и способа дозирования инициатора полимеризации и регулятора роста цепи добивались заданных значений молекулярно-массовых характеристик полимеров.

Для полученных присадок были определены депрессорные свойства, загущающие свойства (с использованием значений кинематических вязкостей загущенных присадками масел при температурах 50 °С и 100 °С), оценена стойкость к механодеструкции (методом ультразвуковой обработки), определена диспергирующая способность. Результаты анализа показали, что введение в состав небольших количеств ММА улучшает свойства присадок, содержание ММА более 5 % мас. является нецелесообразным, поскольку приводит к ухудшению эксплуатационных характеристик присадки (к потере текучести). Введение до 10 % мас. звеньев N-ВП повышает стойкость полимера к механодеструкции и значительно улучшает диспергирующие свойства присадок – до уровня промышленного сукцинимидного диспергатора марки С-40.

Таким образом, предложены эффективные многофункциональные присадки на основе сополимеров АМА₁₂₋₁₅, N-ВП и ММА, которые сочетают свойства модификатора вязкости, депрессора и диспергатора нефтяных масел.

Разработка метода оценки диспергирующей способности полимерных присадок для масел

Большакова Е.А., Савинова М.В.

Нижегородский государственный технический университет

им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия

E-mail: ea_panina@mail.ru

Диспергирующие присадки, препятствующие укрупнению и осаждению образующихся микрочастиц, выполняют важнейшую роль при эксплуатации нефтяных масел различного назначения. Поэтому лабораторная оценка

диспергирующей способности таких присадок в маслах считается важной задачей.

В литературе описано несколько способов определения диспергирующих свойств присадок, к ним относятся методы хроматографии на бумаге, метод высокотемпературного окисления масла, экспресс-метод с введением жидкой добавки (например, глицерина), не смешивающейся с маслом. Однако экспериментальная проверка показала, что все эти методы обладают плохой воспроизводимостью и имеют целый ряд других недостатков. Например, метод хроматографии на бумаге занимает много времени на пробоподготовку и на выполнение анализа (до 20 часов), а результаты предлагаемого экспресс-метода даже качественно не коррелируют с известными данными по эффективности разных диспергаторов.

В ходе представляемой работы с использованием сравнительного анализа промышленного российского сукцинимидного диспергатора марки С-40, промышленной зарубежной загущающей полиалкилметакрилатной присадки марки Viscoplex 0-220 и вязкостно-диспергирующих присадок на основе сополимеров алкилметакрилатов с N-винилпирролидоном была разработана новая методика оценки диспергирующих свойств присадок для масел.

Методика основана на высокотемпературном окислении масла И-20А, в которое вводятся анализируемая диспергирующая присадка и промышленная антиокислительная присадка марки ДФ-11 (дитиофосфат цинка). Полученная композиция окисляется при высокой температуре, после чего ее охлаждают до комнатной температуры и измеряют оптическую плотность масла с помощью фотоэлектроколориметра с использованием красного (D_K) и синего (D_C) светофильтров. Предложена формула, позволяющая на основе этих данных вычислить показатель диспергирующей способности присадки. Разработанный метод показывает хорошую воспроизводимость и хорошо коррелирует с известными практическими данными по диспергирующей активности промышленных присадок.

Влияние содержание олова на пассивацию катализатора Zn-ZSM-5 (90) при получении ароматических углеводородов из ПБФ

Бургуа-Зебальос Д., Гафарова Э.Б.
*РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина,
Москва, Россия
E-mail: iliza05@mail.ru*

Процесс получения ароматических углеводородов из пропан-бутановых фракций можно рассматривать как источник дополнительного количества БТК-фракции наряду с легкой смолой пиролиза и риформатом. Однако, малое время работы катализатора из-за значительного

закоксовывания снижает перспективность процесса. Одним из возможных методов снижения коксообразования является внесение в катализатор малых количеств олова, что и сделано в данной работе. Исследование пассивации катализатора 5% Zn ZSM-5(90) оловом проводили при введении металла пропиткой в количестве 0,1; 0,25; 0,5 % мас.

При введении олова конверсия пропан-бутановой смеси уменьшается, но повышается селективность, происходит снижение как метанообразования, так и выхода полиядерных ароматических углеводородов. Показатели процесса приведены на рис. 1. Согласно экспериментальным данным введение олова более 0,25% масс. не актуально. Следует отметить, что состав продуктов реакции зависит от содержания олова.

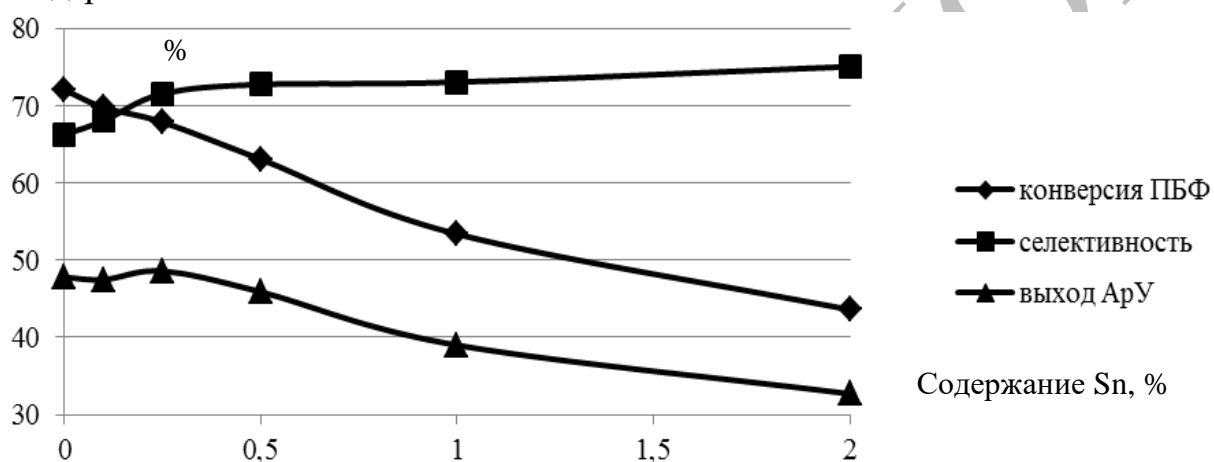


Рис. 1. Зависимость показателей ароматизации ПБФ от содержания олова в Zn-ZSM-5 (90) при 600°C и 550 ч⁻¹

Список литературы

- [1] Лapidус А.Л., Козлов А.М., Худяков Д.С., Дергачев А.А. Ароматизация пропан-бутановой фракции на модифицированном пентасиле// Газохимия. 2010. № 6. С. 16-18
- [2] Козлов А.М., Худяков Д.С., Лapidус А.Л., Дергачёв А.А. Ароматизация пропан-бутановой фракции на пентасиле, модифицированном солями цинка// Технологии нефти и газа. 2011. № 1 (72). С. 7-10.
- [3] Лapidус А.Л., Козлов А.М., Худяков Д.С., Дергачев А.А. Ароматизация смеси алканов С3-С4 на Zn-пентасиле, модифицированном оловом и свинцом// Известия Академии наук. Серия химическая. 2011. № 3. С. 572.

Пассивация катализатора Zn- ЦВМ (30) оловом при получении ароматических углеводородов из пропан-бутановых фракций

Бургуа-Зебальос Д., Гафарова Э.Б.

РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, Москва, Россия

E-mail: iliza05@mail.ru

Процесс получения ароматических углеводородов из пропан-бутановых фракций долгое время рассматривался как один из способов утилизации ШФЛУ. Однако, одним из существенных недостатков процесса является небольшая работа каталитических систем до регенерации. В работе исследуется влияние добавок олова на катализатор 5% Zn- ЦВМ (30) при введении металла пропиткой.

При изучении зависимости конверсии, выхода и селективности процесса от содержания олова в катализаторе, содержащем от 0,1 до 1,0 % мас. металла, были выявлены следующие особенности процесса: при повышении содержания олова наблюдается уменьшение конверсии ПБФ и уменьшение метанообразования, выход целевого продукта – ароматических углеводородов – проходит через максимум при содержании 0,25 % масс. олова (рисунок 1).

Таким образом, применение добавок олова перспективно для катализатора 5% масс Zn-ЦВМ при ароматизации ПБФ, при этом оптимальная концентрация добавки олова составляет 0,25% мас.

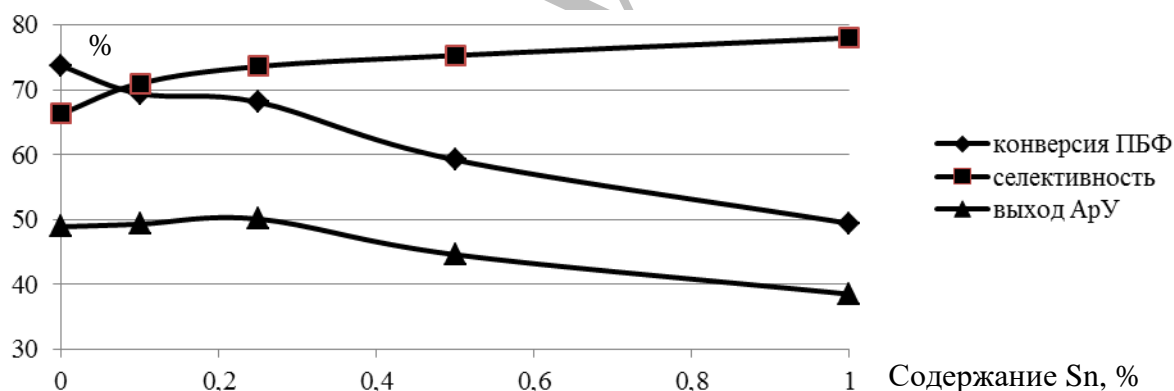


Рис. 1. Зависимость показателей ароматизации ПБФ от содержания олова в Zn- ЦВМ (30) при 600°C и 550 ч⁻¹

Список литературы

- [1] Лapidус А.Л., Козлов А.М., Худяков Д.С., Дергачев А.А. Ароматизация пропан-бутановой фракции на модифицированном пентасиле// Газохимия. 2010. № 6. С. 16-18
- [2] Козлов А.М., Худяков Д.С., Лapidус А.Л., Дергачёв А.А. Ароматизация пропан-бутановой фракции на пентасиле, модифицированном солями цинка// Технологии нефти и газа. 2011. № 1 (72). С. 7-10.
- [3] Лapidус А.Л., Козлов А.М., Худяков Д.С., Дергачев А.А. Ароматизация смеси алканов С3-С4 на Zn-пентасиле, модифицированном оловом и свинцом// Известия Академии наук. Серия химическая. 2011. № 3. С. 572.

Электрокаталитическая активность цинксодержащих композитов полианилина с анилиноформальдегидным полимером

Висурханова Я.А., Лазарева Е.С., Иванова Н.М.

*Институт органического синтеза и углехимии Республики Казахстан
Караганда, Казахстан*

E-mail: yakahashovda@mail.ru

В данной работе представлены результаты исследований электрокаталитической активности цинксодержащих композитов на основе смешанного полимера из полианилина и анилиноформальдегидного полимера (ПАни+АФП) в электрогидрировании *o*-нитроанилина (*o*-НА).

Для синтеза смешанного полимера ПАни+АФП была выбрана стандартная методика синтеза ПАни путем окислительной полимеризации анилина в солянокислой среде (окислитель – персульфат аммония) в присутствии АФ-полимера. Установлено, что синтезированный сополимер является термически более стабильным, чем составляющие его отдельные полимеры ПАни·НСl и АФП, и к 500°C теряет в массе только ~51-54%. Цинксодержащие ПАни+АФП-композиты получены введением хлорида цинка (II) или его оксида ZnO в процессе окислительной полимеризации анилина в присутствии АФ-полимера (анилин/АФП = 2:1). Соотношение анилин/ZnCl₂ (ZnO) составляло 1:1 и 1:2. Содержание цинка в фильтрате было определено методом комплексонометрического титрования, затем по разнице с исходным вычислено содержание цинка в полученных композитах. Установлено, что содержание цинка в этих композитах зависит от условий их синтеза.

Эксперименты по электрокаталитическому гидрированию *o*-НА с участием синтезированных композитов ПАни+АФП+ZnCl₂(ZnO) были проведены в спиртово-водно-щелочной среде на медном катоде, активированном композитом (анод – Pt-сетка), при силе тока 2А и 30°C. Было установлено, что электрокаталитической активностью в электрогидрировании *o*-НА обладают все синтезированные Zn-содержащие ПАни+АФП-композиты – в их присутствии электрогидрирование *o*-НА осуществляется с более высокими скоростями и более полной конверсией *o*-НА в *o*-фенилендиамин, чем в электрохимическом восстановлении на Cu-катоде. Это обусловлено тем, что в ходе катодной поляризации осуществляется электрохимическое восстановление катионов цинка (II) из Zn-содержащих предшественников и формирование частиц цинка в нуль-валентном состоянии, выступающих в качестве электрокатализатора в электрогидрировании *o*-НА, что подтверждается результатами рентгено-фазового анализа. Среди композитов с введённым ZnCl₂ наиболее каталитически активными являются композиты, приготовленные с проведением выпаривания растворителя, хотя содержание цинка в 1 г этих композитов является наименьшим.

Таким образом, синтезированные Zn-содержащие ПАни+АФП-композиты проявляют электрокаталитическую активность в электрогидрировании *o*-НА и могут быть использованы в качестве катализаторов или электрокатализаторов в процессах восстановления других нитросоединений.

Строение композитов полианилина с CuCl_2 и FeO и их электрокаталитические свойства

Соболева Е.А., Висурханова Я.А., Иванова Н.М.

Институт органического синтеза и углехимии Республики Казахстан,
Караганда, Казахстан

E-mail: yakahashovda@mail.ru

В проявлении каталитических или электрокаталитических свойств биметаллополимерные композиты могут быть более эффективные, чем монометаллические аналоги, благодаря формированию биметаллических микро- и наночастиц различного строения. В данной работе представлены результаты исследований фазового состава и электрокаталитической активности биметаллических композитов полианилина (ПАни) с оксидом железа (II) и хлоридом меди (II), введёнными методом *in situ* процесса окислительной полимеризации анилина в солянокислой среде без выпаривания растворителя (1 группа) и с его проведением (2 группа). Соотношение анилина и суммы $\text{FeO}+\text{CuCl}_2$ составляло 1:1 и 1:2 (по массе). Внутренние соотношения FeO/CuCl_2 были выбраны равными 1:1, 2:1 и 3:1.

Рентгенофазовыми анализами синтезированных ПАни+ CuCl_2 + FeO -композитов 1-ой группы установлено присутствие кристаллических фаз оксидов железа (FeO , Fe_3O_4) и гидроксохлорида меди ($\text{Cu}(\text{OH})\text{Cl}$) в их составах. После применения этих композитов в электрогидрировании *n*-нитроанилина (*n*-НА) в их составах дополнительно к кристаллическим фазам оксидов железа появляются кристаллические фазы металлического железа и металлической меди, а также оксида меди CuO . Таким образом, в ходе катодной поляризации током композитов ПАни+ $\text{FeO}+\text{CuCl}_2$ происходит электрохимическое восстановление и катионов железа (II), и катионов меди (II).

Согласно РФ-анализам в композитах ПАни+ $\text{FeO}+\text{CuCl}_2$, синтезированных с проведением выпаривания, присутствуют кристаллические фазы оксидов железа (FeO , Fe_3O_4), сульфата аммония (с самыми высокими пиками на рентгенограмме), хлорида аммония и оксида меди (II). После применения этих композитов в электрогидрировании *n*-НА в их составах также появляются кристаллические фазы Fe^0 и Cu^0 . Синтезированные биметаллические Fe-Cu-композиты ПАни были исследованы на проявление ими электрокаталитической активности в электрогидрировании *n*-НА. Эксперименты выполнены в диафрагменной электрохимической ячейке в спиртово-водно-щелочной среде католита при силе тока 1,5 А и 30°C. Концентрация *n*-НА составляла 0,066 моль/л, масса композита, наносимого на катод – 1 г. Анодом служила платиновая сетка, катодом – медная пластина, плотно прилегающая ко дну электролизёра. Выполненными исследованиями показано, что биметаллические композиты на основе ПАни, полученные с проведением процедуры выпаривания (2 группа), проявляют более высокую электрокаталитическую активность в электрогидрировании *n*-НА, чем композиты, синтезированные с отделением жидкого фильтрата (I группа), с которым уходит большая часть растворённой в нём соли металла.

**Исследование физико-химических свойств соединений
соинтеркалирования нитрата графита**

*Вишневецкий В.Ю., Майданик А.А., Макух Т.А., Медведь А.О., Сухов П.В.,
Берестнева Ю.В., Ракша Е.В., Савоськин М.В.*

*Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М.Литвиненко, Донецк
E-mail: vishnevskiy.vladislav@yandex.ru*

Получен ряд бинарных и тройных соединений соинтеркалирования нитрата графита (ССНГ) с органическими соединениями и водой. Бинарные соединения получали обработкой нитрата графита одним из следующих соинтеркалантов – этилацетатом, диоксаном, ацетоном, ацетонитрилом, диметилацетамидом, диэтиловым эфиром диэтиленгликоля, муравьиной кислотой, уксусной кислотой, бутилацетатом или водой. Тройные ССНГ были синтезированы последовательной обработкой нитрата графита этилформиатом и, далее, одним из перечисленных соинтеркалантов. Выбор соинтеркалантов базировался на результатах работы [1], где установлено, что стабильность ССНГ обусловлена потенциалом ионизации внедренного аниона и регулируется сродством органического соинтеркаланта к протону.

Соединения соинтеркалирования обладают уникальной способностью к многократному увеличению объема при термической обработке, с получением терморасширенного графита. Коэффициенты вспучивания (K_v) тройных соединений соинтеркалирования, как правило, находятся на уровне или превышают значения K_v соответствующих бинарных ССНГ. Коэффициент вспучивания для бинарных ССНГ составляет 125–355 см³/г и 240–380 см³/г – для тройных.

По данным рентгенофазового анализа, полученные продукты представляют собой смесь тройных соединений соинтеркалирования II стадии α -формы и IV стадии β -формы. Высота заполненного слоя ССНГ варьирует от 7,1 до 7,8 Å. Показано, что при хранении в течение 20 суток образцы претерпевают значительные структурные изменения, связанные, в основном, с переходом α -формы ССНГ в более стабильную β -форму.

Графеноподобные частицы получали расслоением ССНГ и полученных из них терморасширенных графитов в жидких средах под действием ультразвука. Структуру и размеры полученных наночастиц исследовали с помощью просвечивающей электронной микроскопии. Показано, что предварительное терморасширение ССНГ приводит к увеличению плоскостных размеров наночастиц до нескольких десятков микрон. По данным электронной дифракции толщина таких графеноподобных частиц составляет 1 – 10 атомарных слоев.

Список литературы

[1] M.V.Savoskin M.V., Yaroshenko A.P., Whyman G.E., Mestechkin M.M., Mysyk R.D., Mochalin V.N. // Carbon. 2003.Vol. 41. P. 2757-2760.

Определение оптимальных технологических параметров получения водорастворимых полисахаридов березы повислой (*Bétula péndula*)

Власов С.С.^{1,2}, Ровкина К.И.^{1,2}

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Томск, Россия

²Сибирский государственный медицинский университет, Томск, Россия
E-mail: unreal800@gmail.com

L-рамнопиранозил-6-O-метил-D-галактуронан – фармацевтический препарат, применяемый в качестве субстанции для создания гипополидемического средства и представляет собой водорастворимый полисахарид, получаемый экстракцией из листьев березы повислой (*Bétula péndula*), семейство березовые (Betulaceae).

Наиболее распространенным способом выделения полисахаридов из растительного сырья является экстракция водным растворителем (в большинстве случаев, подкисленным хлористоводородной кислотой до рН=2-6) при нагревании, с последующим сгущением экстракта и спиртовым осаждением. Перед проведением спиртового осаждения целесообразно провести очистку экстракта от остаточных твердых частиц сырья. В процессе осаждения вместе с полисахаридом могут осаждаться низкомолекулярные примеси (НМП), поэтому необходима стадия очистки продукта от НМП. Сушка также является значимой стадией при получении полисахаридов т.к. параметры высушивания могут существенно влиять на морфологию конечного продукта.

Нами было установлено влияние на выход и качество конечного продукта следующих технологических параметров: время, кратность и температура экстракции, рН экстрагента, степень упаривания экстракта, соотношение экстракт:спирт, концентрация спирта, количество ступеней очистки.

Таким образом, нами были подобраны оптимальные технологические параметры получения водорастворимых полисахаридов березы повислой, результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1. Оптимальные параметры экстракции

Исследуемый параметр	Стандартное значение	Оптимальное значение
Время экстракции	1 час	2 часа
Температура экстракции	90°C	50°C
рН экстрагента	2,0	7,0
Степень упаривания экстракта	1:3	1:4
Концентрация спирта	96%	80%
Количество ступеней очистки	1	3

Оптимизация получения полимер-коллоидных дисперсий на основе N-поливинилпирролидона и гидроксида цинка

Газизов Э.Р., Гуськова М.В.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

E-mail: Emil2596@mail.ru

Разработка новых способов получения наночастиц с заданными свойствами остаётся важной задачей современной нанотехнологии. Интерес к таким функциональным наноматериалам обусловлен возможностью их применения при создании материалов биомедицинского назначения, например, матриц для тканевой инженерии и заместительной хирургии [1]. В данном случае исследуется применение частиц золя гидроксида цинка. В качестве полимерного стабилизатора частиц золя выбран N-поливинилпирролидон (ПВП), который обладает дезинтоксикационными, адсорбционными свойствами, является инертным по отношению к организму. Оптимизация метода получения полимер-коллоидных дисперсий (ПКД) ПВП-золь гидроксида цинка производилась путем гидролиза солей цинка, с последующим увеличением агрегативной устойчивости в водно-спиртовом растворе. Размер частиц полученных ПКД исследовали методом спектра мутности.

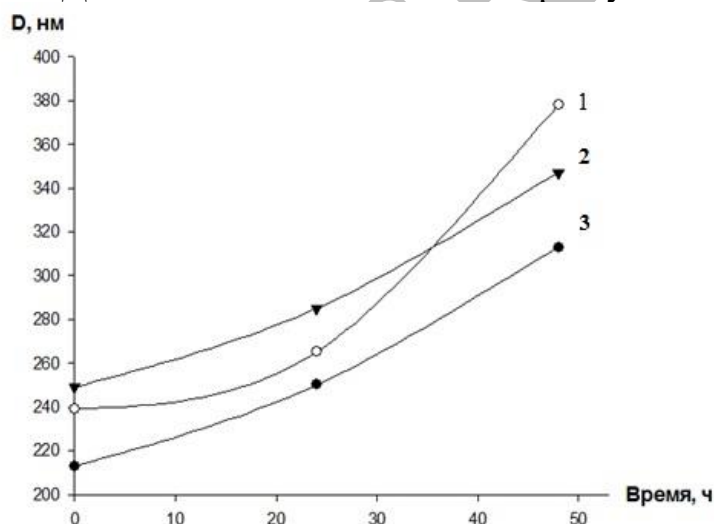


Рис. 1. Зависимость размера частиц золя в водных растворах этанола от времени выдержки. Кривая 1 – 96% этанол, Кривая 2 – 48% этанол, Кривая 3 – 38,4% этанол. Содержание ПВП 0,1 %.

Оптимальный состав среды для ультрадисперсных систем на базе ПВП и гидроксида цинка – 50%-водный раствор этанола. Увеличение стабильности протекает за счет ограничения удельной растворимости солей цинка в этаноле с последующим образованием ультрадисперсного золя, требуемого для создания ПКД.

Список литературы

[1] Лукутцова Н.П., Постникова О.А., Пыкин А.А. и др. //Вестник Белгородского государственного технологического университета им. В.Г. Шухова. 2015, № 3, с. 54-57

Диэлектрические свойства композиционных материалов на основе дисперсно-наполненной эпоксидной смолы

Ибатуллин И.М., Камалов А.Н., Гафиятуллина С.И.
Казанский национальный исследовательский технический университет
им. А.Н. Туполева-КАИ, Казань, Россия
E-mail: ms.syumbelya@mail.ru

Для каждого материала свойственно наличие уникального набора электрических характеристик, которые, главным образом, зависят от его диэлектрических свойств. Измерение этих свойств может дать информацию, например, полезную для улучшения свойств материалов-поглотителей СВЧ-излучения на полимерной основе [1]. Интерес к использованию углеродсодержащих частиц для наполнения при разработке таких материалов объясняется присущими им достоинствами: отсутствие магнитных свойств, не подверженность коррозии, и меньшее значение плотности материалов, наполненных углеродсодержащими частицами.

Целью данной работы являлось изучение диэлектрических свойств дисперсно-наполненных полимерных композиций в зависимости от вида наполнителя и его концентрации.

В работе было использовано связующее на основе: эпоксидиановой смолы марки ЭД-22, аминного отвердителя полиэтиленполиамина (ПЭПА). В качестве наполнителей были выбраны шунгитовый порошок, технический углерод марок П234, П514, К354, Т900, калий-натрий виннокислый, металлические порошки железо карбонильное радиотехническое марки Р-10 и никель карбонильный марки ПНК УТ-1.

Исследования диэлектрических параметров были проведены на векторном анализаторе цепей E5071C с дополнительно установленным коаксиальным пробником. Для эксперимента были изготовлены образцы с геометрическими размерами не менее 20x20x30 мм с гладкой поверхностью, полученной с помощью шлифовально-полировального станка Struers LaboPol-35. Концентрация наполнения варьировалась от 10 до 30% масс. содержания наполнителя. В ходе эксперимента были получены данные по диэлектрической проницаемости ϵ' и тангенсу угла диэлектрических потерь $\text{tg}\delta$ при частоте 10 ГГц для каждого образца.

По результатам измерений выяснилось, что при повышении концентрации наполнителя у всех образцов наблюдается повышение показателей ϵ' и $\text{tg}\delta$. Наибольшие показатели диэлектрической проницаемости ϵ' были у образцов, наполненных техническим углеродом, а наименьший показатель был у образца с наполнителем калий-натрий виннокислый. Высокие показатели тангенса угла диэлектрических потерь $\text{tg}\delta$ были характерны для образцов с П514 и П234.

Список литературы

[1] Банный В.А. Применение полимерных радиопоглощающих материалов в решении проблемы электромагнитной безопасности / В.А. Банный, В.А. Игнатенко // Проблемы здоровья и экологии. – 2016. - № 3(49). - С. 9-13.

Коррозионный мониторинг лёгких сплавов в средах, имитирующих морскую воду

Голованова В.А., Тупикова Е.Н.

*Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С. П. Королева, Самара, Россия*

E-mail: GolovanovaVA@yandex.ru

Исследование коррозии лёгких сплавов, используемых в авиационной промышленности, является актуальной задачей. При разработке новых сплавов немаловажную роль играет прогнозирование скорости их коррозии в условиях эксплуатации. Для этой цели проводят коррозионные испытания по известным методикам [1], в основе которых лежит гравиметрический метод, характеризующийся высокой точностью, но требующий длительных экспериментов. Современные коррозиметры, работа которых основана на измерении некоторой физической величины, изменяющейся в процессе коррозии, обеспечивают автоматическое определение показателей коррозии.

Целью работы является сопоставление данных коррозионного мониторинга алюминиевого сплава в средах имитирующих морскую воду гравиметрическим и электрохимическим методами.

В исследованиях использовали следующие приборы: универсальный коррозиметр «Эксперт 004» и индикатор скорости коррозии «Монитор 2М». Оба прибора работают на принципе поляризационного сопротивления и предназначены для контроля коррозии низколегированных сталей. Для исследования коррозии алюминиевых сплавов была проведена дополнительная калибровка.

В качестве образцов использовали металлические пластинки сплава АД16 площадью около 0.005 м². Гравиметрические испытания проводили в течение 4 суток. Время эксперимента на коррозиметрах составило 2 часа с периодичностью опроса датчика 5 минут. Результаты экспериментов представлены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты измерений.

Агрессивная среда	Глубинный показатель коррозии, определёнными методами коррозионного мониторинга, мм/год		
	Гравиметрия	Эксперт 004	Монитор 2М
NaCl	0.031	0.045	0.026
NaCl+Na ₂ SO ₄	0.043	0.053	

Значения скорости коррозии, полученные двумя методами, сопоставимы, что позволяет использовать данные коррозиметра для экспрессных испытаний при коррозионном мониторинге алюминиевых сплавов.

Список литературы

[1] ГОСТ 9.308-85. Единая система защиты от коррозии и старения. Покрытия металлические и неметаллические неорганические. Методы ускоренных коррозионных испытаний. М.: Издательство стандартов, 1985. – 21 с.

Получение искусственных дисперсий на основе изопренового каучука и казеината калия для создания адгезированных систем

Гуляева Ю.А., Фролов В.В., Войтович О.Г., Коротнева И.С.
Ярославский государственный технический университет, Ярославль, Россия
E-mail: gulyaeva04-08@yandex.ru

В последние годы все больший интерес приобретает использование биополимеров в составе адгезированных систем, поскольку они характеризуются низкой токсичностью, высокой биodeградируемостью, возобновляемостью сырья. Наряду с преимуществами имеются и недостатки, связанные с хрупкостью пленок и их низкими прочностными характеристиками. Казеин – один из самых известных биологических полимеров, который применяется в клеевых составах. Возможными способами устранения недостатков казеина являются радикальная прививочная (со)полимеризация его с синтетическими мономерами в эмульсии [1] и (или) получение искусственных дисперсий на основе неэмульсионных каучуков и казеината калия [2].

В настоящей работе для модификации свойств казеина осуществляли эмульгирование циклогексанового раствора каучука СКИ-3 в водном растворе казеината калия в присутствии этанола. Для наилучшего диспергирования при смешении фаз использовался циркуляционный шестеренный насос (6000 об/мин). Полученная эмульсия дегазировалась с целью удаления циклогексана из системы и образования дисперсии полимера в воде. Применение этанола обеспечивает снижение температуры отгонки до 62°C за счет образования азеотропной смеси вода-спирт-циклогексан, а также повышение устойчивости полимерной дисперсии из-за появления смешанных адсорбционных слоев эмульгатора и спирта, обладающих большей гидрофильностью [3].

Полученные искусственные дисперсии показали высокие адгезионные свойства при склеивании изделий из различных материалов (картона, дерева, искусственной и натуральной кож) в отличие от образца сравнения – казеинового клея в испытаниях на прочность клеевого шва при сдвиге и на расслаивание.

Список литературы

- [1] Фролов В.В., Микулина А.И., Коротнева И.С. Синтез водных дисперсий привитых сополимеров на основе бутилакрилата и белковых макромолекул // Современные проблемы науки и образования. –2014. –№6; URL: www.science-education.ru/120-16808
- [2] Гуляева Ю.А., Фролов В.В., Коротнева И.С., Парфенов А.А. Получение искусственных водных дисперсий на основе бутадиенового каучука для адгезированных систем.//Математика и естественные науки. Теория и практика: Межвуз. сб. науч. тр. Вып. 10. – Ярославль: Издат. дом ЯГТУ, 2015. – 264–268 с.
- [3] Аверко-Антонович, Л.А. Химия и технология синтетического каучука/ Л.А. Аверко-Антонович, Ю.О. Аверко-Антонович, И.М. Давлетбаева, П.А. Кирпичников.– М: Химия, изд-во«КолосС», 2008. – 357 с.

Покрyтия на основе хитозана с бактерицидными свойствами для титановых имплантатов

Гусейнова М.А., Смирнова Л.А., Саломатина Е.В.
Нижегородский государственный университет им. Н.И.
Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: MashaGuseinova@mail.ru

Травматизм был и остается одной из самых распространенных проблем нарушения костной ткани. В настоящее время ведутся интенсивные исследования по разработке имплантатов на основе биodeградируемых полимерных материалов, как синтетических, так и природных. Однако в практике особенно при объемных нарушениях костной ткани широко используются имплантаты на основе титана и его сплавов благодаря их чрезвычайной легкости. При этом имеет место риск инфицирования и образования на поверхности имплантата биопленки. Это предполагает повторное хирургическое вмешательство по извлечению имплантата.

В этой связи актуальной является задача создания защитной оболочки с антибактериальными свойствами на поверхности имплантата. Для ее предохранения наиболее широко используются защитные клеи на основе полиметилметакрилата с включением в его матрицу источника гентамицина.

Целью работы является разработка композиций на основе хитозана, обладающих бактерицидными свойствами, для использования их в качестве защиты титановых имплантатов от биообрастания. Хитозан — это катионный полисахарид, один из наиболее перспективных натуральных биополимеров для тканевой инженерии, биосовместимых покрытий и доставки лекарственных препаратов.

Для определения оптимального состава композиции, наносимой на титановые имплантаты, выполнено исследование влияния природы и концентрации кислоты и рН среды на электрофоретическую подвижность хитозана в водных средах.

Проведена модификация хитозана ионами и наночастицами серебра, а также антибиотиками.

Исследован процесс формирования защитной оболочки модифицированного хитозана на поверхности титановых пластин и ее свойства в зависимости от конформации макромолекул полисахарида, природы и концентрации кислоты. Оказалось, что конформационное состояние макромолекул хитозана влияет на однородность образующегося защитного слоя.

Исследованы антибактериальные свойства покрытия по отношению к 3-м видам бактерий: *E. coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Staphylococcus*.

Получение и использование новых полимерных материалов на основе гидрогелей

Матрунчик Ю.В., Воробьёва Е.В., Давлюд Д.Н., Шестак И.В.
Институт общей и неорганической химии НАН Беларуси,

Минск, Республика Беларусь

E-mail: yuliya.M@tut.by, davlud.d@tut.by

Полимерные гидрогели (ПГГ) представляют собой материалы, способные поглощать и удерживать в течение длительного времени большое количество воды и водных растворов. Нами разработан новый способ получения ПГГ и синтезирован гидрогель на основе полиакриловой кислоты и поливинилового спирта. Преимуществами полученных новым способом ПГГ по сравнению с известными являются доступность и нетоксичность исходных полимеров, высокая стабильность при изменении внешних условий и при совмещении с другими компонентами в композициях.

Результаты исследования реологических свойств композиций ПГГ с поверхностно-активными веществами (ПАВ) показали, что вязкость композиции гидрогеля с анионным ПАВ додецилсульфатом натрия увеличивается в среднем в 2,5 раза; в случае неионогенного ПАВ *N*-третоктилфенилового эфира полиоксиэтиленгликоля повышается в 3,8 раза по сравнению с ПГГ. В присутствии катионного ПАВ цетилпиридиний хлорида стабильность гидрогеля снижается, происходит выделение жидкой фазы. Вязкость композиции ПГГ с олеатом натрия возрастает почти в сто раз по сравнению с раствором ПАВ и в 10 раз – с ПГГ в индивидуальном состоянии. Полученные результаты научных исследований необходимы для оценки возможного использования композиций на основе полимерных гидрогелей и ПАВ в качестве моющих и чистящих материалов, более эффективных по сравнению с ПАВ в индивидуальном состоянии.

Выявлена селективная сольватация ПГГ компонентами смешанного растворителя вода-этанол. Показано, что при увеличении содержания этанола в бинарной смеси до 60 % степень набухания возрастает, дальнейшее увеличение содержания этанола в поглощаемой жидкости снижает степень набухания ПГГ. На основании полученных результатов разработан композиционный материал ПГГ с этиловым спиртом, который характеризуется гелеобразной формой и высокой антимикробной активностью и может быть использован в качестве дезинфицирующего средства для профилактики контактной инфекции.

В результате исследования влияния низкомолекулярных электролитов (сульфатов калия, меди, цинка и железа (II и III)) на степень набухания ПГГ в зависимости от заряда катиона и концентрации соли определены условия, определяющие максимальную степень набухания и влагоудерживающие свойства в растворах низкомолекулярных солей. Разработанные композиции после испытаний рекомендованы для использования в бытовой химии, в области охраны труда (средства для обработки рук), медицине (антисептические препараты), агрохимии (предпосевная обработка семян растений).

Разработка инновационного метода получения макромономеров для производства поликарбоксилатных суперпластификаторов

Демидов П.А., Демидова Ю.В.

*Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), Санкт-Петербург, Россия*

E-mail: demidova@technolog.edu.ru

Самые последние технологические прорывы в бетонной технологии связаны с изобретением новых добавок. Особое внимание уделяется созданию высококачественных поликарбоксилатных суперпластификаторов, поскольку введение данных добавок в бетоны позволяет значительно увеличить долговечность возводимых объектов, а также существенно снизить расходы на их эксплуатацию.

Одним из наиболее распространенных в промышленности методов получения поликарбоксилатов является сополимеризация ненасыщенных кислот с макромономером, содержащим в своей структуре полиэтоксильную часть. В качестве макромономера могут выступать этоксилированные непредельные спирты (виниловый, (мет)аллиловый, изопренол и другие), и в большей степени – акриловые или метакриловые эфиры метоксиполиэтиленгликолей.

Основные способы получения метоксиполиэтиленгликоль (мет)акрилатов основаны на различных способах (мет)акрирования метоксиполиэтиленгликоля, т. е. предполагают получение макромономера в две стадии: получение метоксиполиэтиленгликоля и (мет)акрирование последнего. Одним из наиболее перспективных способов получения метоксиполиэтиленгликоль (мет)акрилатов может быть прямое этоксилирование метил(мет)акрилата.

Предлагаемый метод инновационным, поскольку этот подход отличает технологию от существующих, поскольку позволяет получать макромономер с разной молекулярной массой за одну стадию без образования промежуточных и побочных продуктов.

В рамках проблемы предполагается разработать научный задел для создания технологии получения амфифильных макромономеров путем прямого оксиэтилирования метил(мет)акрилата. В проекте решаются важные научно-технические и технологические задачи, способствующие созданию конкурентоспособной продукции и рациональному использованию химического сырья и энергетики в том числе: использование современных научных тенденций аппаратурного оформления и условий проведения указанного процесса. Этот подход отличает технологию от существующих, поскольку позволяет получать макромономер с разной молекулярной массой без образования промежуточных и побочных продуктов.

Разработка и исследование свойств эластомерных теплозащитных материалов, содержащих каолиновое микроволокно

Каблов В.Ф., Новопольцева О.М., Кейбал Н.А., Кочетков В.Г., Крюкова Д.А.,
Гордеева Е.В., Егорова С.А.

Волжский политехнический институт (филиал)

ФГБОУ «Волгоградский государственный технический университет»

Волжский, Россия

E-mail: dasha.antarius@yandex.ru

Создание материалов, способных работать в условиях высокотемпературного потока, является важной задачей в защите конструкций специального назначения в ракетной, авиационной и морской технике [1]. Одно из перспективных направлений ее решения – использование микроволокнистых наполнителей, обладающих малой теплопроводностью и низким аккумулярованием тепла [2]. Однако введение их в состав эластомерных композиций приводит к некоторому ухудшению ее физико-механических показателей. Данный недостаток может быть устранен модификацией таких наполнителей, позволяющей улучшить их распределение и повысить сродство к эластомеру.

Целью работы является исследование влияния каолинового микроволокна на физико-механические и огнетеплозащитные свойства резин на основе этиленпропилендиенового каучука СКЭПТ-40 [3]. Огнетеплозащитные свойства оценивали по времени прогрева необогреваемой поверхности образца открытым пламенем плазматрона до 100 °С и по скорости линейного горения.

Предварительная обработка каолинового микроволокна фосфорборсодержащим олигомером и совместное его введение в резиновую смесь с агентом сочетания гексахлор-п-ксилолом способствует образованию более развитой поверхности волокна и приводит к снижению эффекта Пейна.

При этом образцы характеризуются улучшенными физико-механическими свойствами (условная прочность при растяжении повышается на 10 – 12 %), меньшей скоростью деструкции, образованием при высокотемпературном воздействии более регулярной плотной мелкопористой коксовой структуры, что в свою очередь способствует увеличению времени прогрева необогреваемой поверхности образца до 100 °С и уменьшению потери массы и скорости линейного горения.

Таким образом, установлено, что введение каолинового волокна в состав эластомерных огнетеплозащитных материалов увеличивает их эффективность при высокотемпературном воздействии.

Список литературы:

- [1] Каблов В.Ф., Новопольцева О.М., Кочетков В.Г. Влияние наполнителя перлит на теплостойкость резин на основе этиленпропилендиенового каучука // Современные проблемы науки и образования. – 2013. – № 3; URL: www.scienceeducation.ru/109-9370.
- [2] Кащеев И.Д. Химическая технология огнеупоров / Учебное пособие. — М.: Интернет Инжиниринг, 2007. — 752 с.
- [3] Большой справочник резинщика. Ч.1. Каучуки и ингредиенты / под ред. Резниченко С.В., Морозова Ю.Л. – М.: Техинформ, 2012. – 744 с.

Исследование влияния гидрофильного наполнителя на огнезащитные свойства эпоксидных композитов

Каблов В.Ф., Еременко Д.В., Усихина М.С., Кейбал Н.А.,
Крекалева Т.В.

*Волжский политехнический институт (филиал)
ФГБОУ «Волгоградский государственный технический университет»
Волжский, Россия
E-mail: deremenko1996@gmail.com*

Полимерные композиты на основе эпоксидных смол находят широкое применение в качестве конструкционных материалов и адгезивов. Однако в ряде случаев использование эпоксидных композитов ограничивается их невысокой термо- и огнестойкостью. В последние годы интенсивное развитие получило введение антипиренных добавок в полимерные композиции в виде микрокапсул. При воздействии пламени происходят своеобразные микровзрывы капсул и выброс огнегасящих жидкостей в зону пламени. В качестве замедлителей горения для коксующихся полимеров, к которым относятся эпоксидные связующие, можно эффективно использовать фосфорсодержащие замедлители горения.

Целью научно-исследовательской работы является исследование влияния модифицированного диметилфосфитом гидрофильного наполнителя на огнезащитные свойства композитов на основе эпоксидной смолы ЭД-20.

Эпоксидные композиты, содержащие гидрофильный наполнитель, получали на основе эпоксидной смолы путем последовательного смешения компонентов: смолы ЭД-20, модифицированных раствором диметилфосфита гранул шитого полиакриламида, отвердителя – полиэтиленполиамин. Полученные реакционные смеси заливали в формы и проводили отверждение без подвода тепла в течение 24 ч.

Эпоксидные композиты исследовались на горючесть в соответствии с ГОСТ 28157-89 методом оценки скорости горизонтального распространения пламени по поверхности. Образцы, содержащие модифицированный гидрофильный наполнитель являются самозатухающими и не поддерживают горение.

При воздействии пламени на эпоксидные композиты происходят своеобразные микровзрывы и выделение в зону горения огнегасящей жидкости – раствора диметилфосфита. Галогенсодержащие соединения подавляют горение за счет реакции обрыва цепи. Диметилфосфит в процессе горения способствуют протеканию реакций циклизации, конденсации и карбонизации продуктов деструкции и образованию в результате этих процессов слоя кокса, который имеет пористую структуру и низкую теплопроводность, что препятствует проникновению теплового потока к внутренним слоям, и тем самым замедляет выделение в зону горения продуктов деструкции с одновременным резким снижением их концентрации в газовой фазе.

Термический анализ технических лигнинов и продуктов их ацилирования

Ефрюшин Д.Д., Шуткина Д.А., Попов К.А.

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
Барнаул, Россия
E-mail: dsibh@mail.ru

С целью исследования термической стабильности полученных ранее ацилированных продуктов технических лигнинов [1] в диапазоне температур от 50 до 400 °С был проведен термический анализ исходных лигнинов и продуктов взаимодействия их с системой «карбоновая кислота – тионилхлорид – толуол – серная кислота».

Анализ полученных экспериментальных зависимостей позволяет выявить следующие температурные области: до 100 °С – соответствует процессу удаления несвязанной воды и легколетучих компонентов; в интервале 100-175 °С происходит удаление связанной воды в материале [2]; при температуре 140-200 °С - процесс расстекловывания лигнина; в диапазоне температур 200-350 °С - деструкция лигнина, сопровождающаяся образованием летучих соединений за счёт деструкции связей, содержащих кислород. Согласно литературным данным в этой области температур при пиролизе лигнина могут разрушаться следующие связи в структурном звене лигнина: при 250 °С $C_\beta - C_\gamma$ с γ -спиртовой группой, при 300 °С – $C_{ар} - C_\alpha$ с α -бензильной группой, а также между структурными звеньями: при 170-220 °С алкиларильная эфирная $C_\beta - OC_{ар}$, при 250 °С, алкиларильная эфирная $C_\alpha - OC_{ар}$. Кроме того, в этих условиях может протекать процесс декарбоксилирования [3].

При анализе термограмм исходных технических лигнинов можно сделать вывод о большей термостабильности гидролизного лигнина по сравнению с сульфатным вследствие большей сконденсированности и большего количества водородных связей.

Ацилированные лигнины с высокими степенями превращения ОН-групп в ацильные отличаются более «рыхлой» надмолекулярной структурой. Исходя из анализа термограмм, ацильный остаток карбоновой кислоты достаточно глубоко внедряется (и, возможно, разрушает) в структуру материала, вызывая сдвиг температуры разложения ацилированного лигнина в сторону меньших температур на 15-20 °С.

Список литературы

- [1] Modification of technical lignins by carboxylic acids / D. D. Efyushin, V. V. Konshin, A. V. Protopopov, A. A. Beushev // Chemistry of Natural Compounds. – 2015. – Vol. 51, №. 5. – P. 1007-1008.
- [2] Фенгел, Д. Древесина (химия, ультраструктура, реакции): Пер. с англ. / Д. Фенгел, Г. Вегнер. - М.: Лесн. пром-сть, 1988. – 512 с.
- [3] Szczurek, A. Bimodal activated carbons derived from resorcinol-formaldehyde cryogels / A. Szczurek, G. Amaral-Labat, V. Fierro, A. Pizzi, A. Celzard // Science And Technology Of Advanced materials. – 2011. – V. 12. – No 3. – P. 1-12.

Расчет эффективной энергии активации термоокислительной деструкции технических лигнинов и продуктов их ацилирования

Ефрюшин Д.Д., Шуткина Д.А., Попов К.А.

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,

Барнаул, Россия

E-mail: dsibh@mail.ru

Величина энергии активации E_a термоокислительной деструкции термопластичных полимеров при прочих равных условиях является мерой устойчивости полимера к термоокислительной деструкции. Расчет энергии активации технических лигнинов и продуктов их ацилирования проводился на основе термогравиметрических данных с использованием кинетической модели Бройдо. Результаты расчета представлены в таблице 1.

Таблица 1. Температурный интервал и энергия активации термической деструкции лигнинов

Образец	Температурный интервал, °С	Энергия активации E_a , кДж/моль
Сульфатный лигнин (СЛ)	170 – 210	85,0 ± 0,5
СЛ, ацилированный уксусной кислотой ($\alpha = 0,30$)	160 – 250	82,3 ± 0,5
СЛ, ацилированный миристиновой кислотой ($\alpha = 0,76$)	180 – 220	69,8 ± 0,5
Гидролизный лигнин (ГЛ)	160 – 250	100,6 ± 0,5
ГЛ, ацилированный уксусной кислотой ($\alpha = 0,40$)	150 – 225	92,3 ± 0,5
ГЛ, ацилированный миристиновой кислотой ($\alpha = 0,27$)	180 – 240	64,8 ± 0,5

Значение E_a гидролизного лигнина выше, чем у сульфатного, что обусловлено большей сконденсированностью и, как следствие, большей устойчивостью. Ацилированные лигнины с высокими степенями превращения ОН-групп в ацильные отличаются более «рыхлой» надмолекулярной структурой, о чем свидетельствует снижение значения E_a с 85,0 до 69,8 кДж/моль для сульфатного лигнина, со 100,6 до 64,8 кДж/моль для гидролизного лигнина в зависимости от степени превращения. Высокую термическую стабильность исходных лигнинов обуславливает процесс конденсационного формирования трехмерной сетки в ходе реакции сшивки с участием бензильного спиртового гидроксила и ароматического ряда, что невозможно для ацилированных лигнинов, т.к. бензильный спиртовый гидроксил активно участвует в реакции ацилирования. [1].

Список литературы

[1] С.С. Утгоф, Л.В. Игнатович // Промышленность региона: проблемы и перспективы инновационного развития. 2013. С. 143–147.

Получение тонких пленок селенида галлия

А.К. Жанабаева, М.Б. Дергачева, Д.С. Пузикова

*Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В.Сокольского
Алматы, Казахстан**E-mail: a.k.zhanabaeva@mail.ru*

Селениды галлия привлекают большое внимание исследователей благодаря подходящим структурным и оптическим свойствам [1]. К этой группе относятся диселенид галлия Ga_2Se_3 , который имеет кубическую структуру с шириной запрещенной зоны 1,8-2,6 эВ [2] и кристаллизуется в α -и β -структурных модификациях.

Существует множество методов получения селенида галлия. Однако метод электроосаждения для получения тонких пленок на проводящих подложках относится к недорогим методам, а также позволяет контролировать толщину, морфологию и состав пленки в процессе осаждения [3].

В работе исследовалась зависимость элементного состава и поверхности пленок селенида галлия от концентрации ионов галлия в исходном растворе. Электроосаждение проводили в течение 30 минут, при потенциале -0,8В и температуре 70°C из растворов с постоянной концентрацией ионов селена ($2 \cdot 10^{-3}\text{М}$) и различным содержанием ионов галлия ($6 \cdot 10^{-3}\text{М}$, $8 \cdot 10^{-2}\text{М}$, $1 \cdot 10^{-1}\text{М}$, $1,2 \cdot 10^{-1}$, $1 \cdot 10^{-1}\text{М}$). Результаты исследований элементного состава свежеполученных образцов показали, что при концентрации $1,0 \cdot 10^{-1}\text{М}$ GaCl_3 и $2 \cdot 10^{-3}\text{М}$ NaHSeO_3 на стеклоуглеродном электроде получена пленка с максимальным содержанием галлия (26,7ат%). На микрофотографии поверхности пленок селенида галлия (рис.1) видно, что равномерное распределение глобул нарушается скоплениями крупных кристаллов, состоящих из более мелких частиц, а также отмечено появление дендритов в виде цветков, что характерно для осажденных пленок селенида галлия.

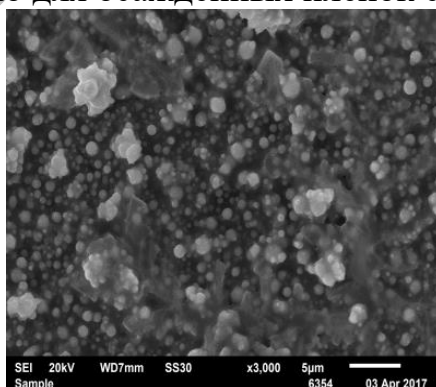


Рис. 1 – Микрофотография поверхности пленки селенида галлия

Список литературы

- [1] Hahn H and Klinger W. // Z. Anorg. Chem. 1949. V. 259 P. 135.
- [2] Peressi M., Baldereschi A. // J. Appl. Phys. 1998. V. 83. P. 3092.
- [3] Lincot D. //Thin Solid Films. 2005. V. 487. P. 40.

Природные противостарители для резин

Звада А.А., Каблов В.Ф., Новопольцева О.М., Грачева Н.В.

Волжский политехнический институт (филиал)

ФГБОУ «Волгоградский государственный технический университет»

Волжский, Россия

E-mail: zvada.stasia@yandex.ru

В последние годы возрастает интерес к природному, в частности, к растительному сырью, изучению его химического состава, способов переработки и применения. Сырье растительного происхождения содержит разнообразный комплекс биологически активных веществ, который придает ему не только ценные физиологические, но и технологические свойства.

Присутствие антиоксидантов в природном сырье позволяет повысить их биологическую стойкость, препятствующую окислительной деструкции нестабильных активных компонентов. Этот факт стал причиной, чтобы задуматься, возможно ли использование природных полимеров в качестве стабилизаторов в эластомерных композициях.

На кафедре ВТПЭ ВПИ ведутся исследования применения растворенных меланинов, полученных из природного сырья, в качестве антиоксидантов в составе резиновых смесей на основе каучуков общего назначения, применяемых для изготовления медицинских изделий, изделий для пищевой промышленности и др. Уникальным свойством меланинов является устойчивое свободно-радикальное состояние [1, 2].

В результате проведенных исследований было выявлено, что предварительно растворенные меланины являются более эффективными антиоксидантами для каучуков общего назначения, в частности изопренового каучука СКИ-3, чем широко применяемый в резиновой промышленности противостаритель фенольного типа агидол-2. Установлено, что с введением растворенных меланинов в состав резиновых смесей физико-механические показатели практически не изменились, а показатели после термического старения, проводимого в течение 72 часов при температуре 100 °С, значительно повысились (практически на 30 %) при замене агидола-2 на меланины.

Список литературы

- [1] Кантан, А.Д. Извлечение биологически активных веществ из листьев красной смородины / А.Д. Кантан, С.Н. Пертова // Тезисы докладов XXVI Менделеевской конференции молодых ученых – Самара: СамГТУ, 2016 – С. 82.
- [2] Звада, А.А. Природные полимеры меланинов – перспективные противостарители эластомеров и эластомерных композиций/ А.А. Звада, В.Ф. Каблов, О.М. Новопольцева, Н.В. Грачева // Тезисы докладов XXVII Менделеевской конференции молодых ученых. Секция «Технология полимеров и материалов на их основе» (23 – 28 апреля 2017 г. Уфа) – Уфа: Издательство «Диалог», 2017 – С. 109.

Изучение процессов переводной печати по целлюлозным материалам в присутствии отечественных полимеров

Зеленкова Т.Н., Пученькина А.В., Темирсултанова Л.В., Козлова О.В.
 Ивановский государственный химико-технологический университет,
 Иваново, Россия
 E-mail: ovk-56@mail.ru

Как известно, одним из методов химической модификации текстильных материалов, которая позволила бы повысить восприимчивость хлопчатобумажных тканей к дисперсным красителям, является обработка её полимерами – модификаторами. Как показано ранее последнее можно реализовать при использовании полимеров акриловой природы.

Целью работы явилось изучение возможности и эффективности использования полимеров-модификаторов акриловой и уретановой природы отечественного производства в качестве модификатора под переводную термопечать. Для сравнения использовали полимеры зарубежных производителей, широко используемых в качестве праймеров под сублимационную печать и на российских текстильных производствах для отделки текстильных материалов.

Важными свойствами, определяющими пригодность полимера для модификации текстильного материала, являются эластичность, прозрачность, прочность образующейся на поверхности ткани пленки, которые в немалой степени зависят от строения, свойств и мономерного состава сополимеров. Выбор полимеров основан как на оценке вышеперечисленных факторов с отлитых пленок, так и оптическим экспресс-методом (рис.1), который позволяет косвенно изучить водопоглощение пленок.

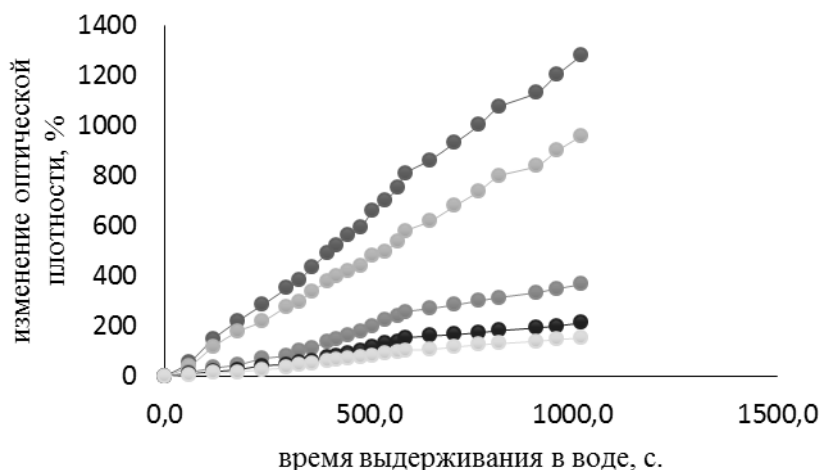


Рис.1 Оптические свойства для пленок, отлитых из препаратов (снизу вверх): аквапол-21; рузин-14и; их смесь; аквапол-12; его смесь с рузином-14и.

Полученные результаты позволяют спрогнозировать конечные свойства различных сочетаний и добиться желаемых результатов модификации.

Разработка микрокапсулированного препарата, предназначенного для функциональной отделки текстильного материала

Исполатова Г.С., Зайцева А.О.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия*

E-mail: gispolatowa2011@yandex.ru

В последнее время увеличился спрос на функциональный текстиль, особенно медицинского ассортимента. Для придания дополнительных свойств текстильному материалу на него наносят различные лекарственные препараты. На сегодняшний момент иммобилизация микрокапсул с активным веществом на текстильный материал – перспективный метод нанесения лекарственного препарата. Микрокапсулирование – это процесс заключения твердых или жидких веществ в оболочку пленкообразующего материала (микрокапсулу) [1]. Методы, используемые для получения микрочастиц, должны обеспечивать высокую степень включения лекарственного средства, а также обеспечивать получение частиц контролируемых размеров [2].

Цель исследования состояла в получении полиэлектролитных микрокапсул, содержащих лекарственный препарат, для придания функциональных свойств текстильному материалу. В качестве ядра капсулы были использованы синтезированные неорганические коллоидные частицы CaCO_3 . Для синтеза оболочки микрокапсул использовали разноименно заряженные полиэлектролиты. Лекарственный препарат может быть включен в состав ядра капсулы методом совместного осаждения на стадии синтеза коллоидных частиц. Разработаны протоколы получения полиэлектролитных оболочек на частицах карбоната кальция. Определены оптимальная последовательность и состав реакционной смеси, позволяющие получать агрегативно устойчивые системы, содержащие капсулы.

С помощью электронной микроскопии получены фотографии микрокапсул. Синтезированные микрокапсулы имели шарообразную форму. Методом динамического рассеивания света определены размеры капсул, которые составляют 500-7000 нм. Микрокапсулы были иммобилизованы на целлюлозном текстильном материале посредством послойного нанесения полиэлектролитов.

Список литературы

[1] Patent 20110223314 United States, International Class B05D 7/00 20060101 B05D007 / 00. Efficient Microencapsulation. ZHANG; Xiaoxiao; (Honolulu, HI); Garmire; David; (Honolulu, HI); Ohta; Aaron; (Honolulu, HI). Serial No. : 045244. Filed: March 10, 2011.

[2] Е.А. Петрова, С.А. Кедик, К.В. Алексеев, Е.В. Блынская, А.В. Панов, В.В. Суслов, Н.В.Тихонова. Оценка эффективности метода двойного эмульгирования при получении микросфер налтрексона на основе сополимера молочной и гликолевой кислот // Вестник МИТХТ. 2013. Т. 8. № 2. С. 58–63.

Разработка пропиточных составов на основе фосфорсодержащих соединений для синтетических кордных нитей

Каткова Д.А., Кейбал Н.А., Каблов В.Ф.

¹Волжский политехнический институт (филиал)

ФГБОУ «Волгоградский государственный технический университет»,

Волжский, Россия

E-mail: k.daria.95@mail.ru.

Основным направлением расширения и улучшения ассортимента химических волокнистых материалов является не столько разработка новых видов, сколько модификация уже существующих волокон с целью придания им новых свойств. Весьма актуальной на сегодня является проблема создания новых пропиточных составов для синтетических волокон, которые придавали бы необходимые свойства нитям [1].

Целью настоящей работы является разработка пропиточных составов на основе диметилфосфита и исследование свойств полиэфирных и полиамидных нитей после модификации.

Были разработаны пропиточные составы на основе водных растворов диметилфосфита с концентрацией 15% - 25% и водного раствора диметилфосфита нейтрализованного триэтаноломином. Пропитку нитей проводили в течение 5 минут при комнатной температуре с последующим отжимом избытка пропиточного состава и термофиксацией в течение 30 минут при 150 °С.

В ходе проведения исследований выявлены наиболее оптимальные рецептуры полученных пропиточных составов.

С целью определения эффективности разработанных составов и определения оптимальных условий обработки проведены исследования по изменению основных физико-механических показателей, водопоглощению и огнестойкости модифицированных полиэфирных (ПЭ) и полиамидных (ПА) нитей.



Рис. 1. Поперечный срез обработанного полиэфирного волокна, х400

Список литературы

[1] Волков, В. А. // Поверхностная модификация волокон для получения устойчивого к эксплуатации долговременного эффекта. 2016. С.48.

Композиция на основе кремнийорганических смол и алкоксисиланов

Киреева Ю.Г.

Владимирский государственный университет имени А. Г. и Н. Г.

Столетовых, Владимир, Россия

E-mail: yulia.kireeva.96@mail.ru

Бетонные и железобетонные конструкции, применяемые в строительстве, подвергаются воздействию различных агрессивных факторов как природного, так и техногенного характера.

Для повышения стойкости бетона и железобетона при эксплуатации используют различные защитные мероприятия. Одним из возможных вариантов является их гидрофобизация и гидроизоляция [1]. В настоящее время широко используются различные гидрофобизирующие кремнийорганические жидкости [ГКЖ]. В качестве объекта исследований был выбран тетраэтоксисилан [ТЭОС]. Для того, чтобы добиться заданной устойчивости гидрофобизатора авторами проводились исследования по совмещению ТЭОС с различными органическими связующими. Выбор органических связующих был остановлен на сополимерах стирола. В качестве одного из примеров реализации предложенного направления наиболее устойчивой композиции на основе тетраэтоксисилана, совмещенного с олигопипериленстиролом [ОППС].

Как показали исследования ТЭОС и ОППС полностью совместимы друг с другом во всех соотношениях. При значительном содержании ТЭОС в композиции возможен его полный гидролиз до диоксида кремния [2]. Образующиеся наночастицы SiO_2 должны изменять физико-механические характеристики защитного материала. Исследования ударной прочности пленок на приборе У18 показали, что введение ТЭОС приводит к повышению ударной прочности полимерной пленки, достигая максимального значения при концентрации ТЭОС – 20-22 %. Повышение содержания ТЭОС приводит к резкому снижению ударной прочности. Аналогичная тенденция просматривается и при определении твердости по маятниковому прибору М-3.

Из этого можно сделать вывод, что между компонентами существуют не только сильные межмолекулярные связи, но и вероятно протекают химические взаимодействия. Адгезионные характеристики (предел прочности при отрыве) определяли на адгезиметре «Константа А». Максимальные значения предела прочности при отрыве независимо от природы подложки достигаются при концентрации ТЭОС 22-27%.

Список литературы

[1] Чухланов В.Ю., Колышева Н.А. Новые полимерные связующие на основе олигапиперилинстирола и алкоксилосанов. Пластические массы. 2007. №6. С.15.

[2] Chukhlanov V.Y., Kriushenko S.S., Chukhlanova N.V. Elastic polyurethane foams modified by tetraethoxysilane – Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2015. Т. 49. № 4. С. 518-522.

Кинетика вакуумной сушки хлопковой целлюлозы

Ковалёв П.Е., Липин А.А.

Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия

E-mail: joda429@mail.ru, lipin.a@mail.ru

Хлопковая целлюлоза является сырьём для производства нитроцеллюлозы. По требованию технологии перед нитрованием хлопковая целлюлоза должна быть высушена до остаточной влажности не более 5 мас. %. В работе изучалась кинетика сушки брикетов хлопковой целлюлозы в вакуумной сушильной камере с целью определения оптимальных режимных параметров процесса.

Экспериментальная установка состояла из вакуумной сушильной камеры с конденсатором паров влаги, компрессорной холодильной установки и вакуумного насоса. Стенки сушильной камеры имеют электрообогрев. Величина вакуума в камере контролировалась вакуумметром, регулирование величины вакуума осуществлялось с помощью игольчатого клапана. Для измерения температуры высушиваемого материала и температуры газовой фазы внутри камеры использовались термоэлектрические преобразователи ДТПЛ011-0,5/1,5. Высушивались образцы спрессованной хлопковой целлюлозы размером 200×230×260 мм и начальной относительной влажностью 20 мас. %.

На рис. 1а представлены кривые сушки при значениях вакуума 600 и 700 мм рт.ст. Можно сделать вывод, что увеличение величины вакуума позволяет интенсифицировать процесс сушки. Из рис. 1б следует, что увеличение температуры сушки со 100 до 120 °С увеличивает скорость сушки, что позволяет сократить продолжительность процесса. Однако дальнейшее повышение температуры выше 120 °С нежелательно, т.к. это приводит к деструкции материала.

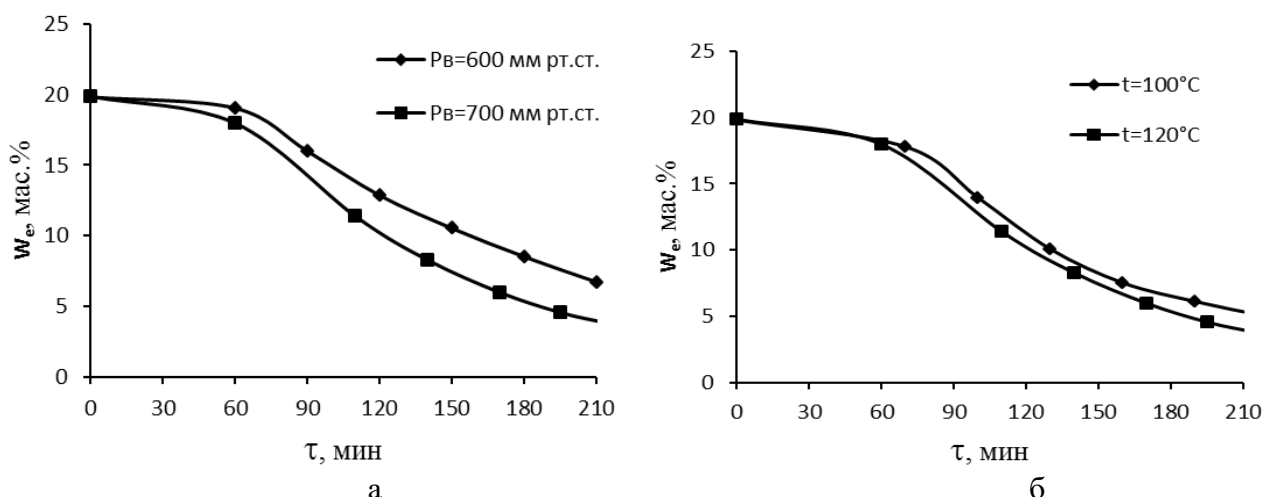


Рис. 1. Кривые сушки при разных значениях вакуума (а) и температуры (б) в сушильной камере

Проведенные исследования позволили выбрать оптимальные технологические параметры процесса сушки брикетированной хлопковой целлюлозы.

Использование минералов как протекторов УФ - излучения

Кравченко М.А.

Ивановский государственный химико-технологический университет,

Иваново, Россия

E-mail: a_a_a_4@mail.ru

На кафедре ХТВМ ИГХТУ предложен способ обработки шерстяного волокна водной дисперсией нерастворимых алюмосиликатов, к которым в первую очередь относятся природные глинистые минералы. Их предварительно измельчают, погружают шерсть в дисперсию и с помощью шейкер-установки при комнатной температуре добиваются равномерного распределения и фиксации микрочастиц на поверхности волокна. Технология является чистой и безотходной.

Установлено, что обработка шерсти алюмосиликатами дает возможность в несколько раз снизить ее повреждаемость микроорганизмами; присутствие алюмосиликатов на поверхности волокна увеличивает прочностные и упруго-эластические свойства шерстяных материалов; протекторные свойства алюмосиликатов позволяют улучшить светостойкость шерсти. В последнем случае наиболее эффективным является применение минералов, содержащих в качестве примесей оксид титана (TiO_2).

Чтобы прояснить вопрос о значимости защитного действия TiO_2 в составе глины была проведена серия модельных экспериментов, в ходе которых образцы шерсти обрабатывали оксидом титана и пилларными материалами с его включением в сравнении с природными глинами Часов-Ярская и Веселовская. Последние были выбраны потому, что максимально проявляют защитные свойства по отношению к УФ-инсоляции.

В ходе проведенных экспериментов установили, что протекторные свойства у модифицированных оксидом титана слоистых алюмосиликатов проявляются в большей степени, чем у чистого оксида титана. Вероятно, это связано с тем, что пилларирование при этих условиях обогащенного оксидом титана монтмориллонитового минерала приводит к повышению степени кристалличности частиц TiO_2 , иммобилизованных на глине, а, следовательно, и высокой дисперсности. Благодаря чему порошок лучше фиксируется на волокне и при этом увеличивается отражательная способность его микрочастиц.

Максимальная степень защиты волокна от УФ-излучения наблюдается после обработки глиной, модифицированной оксидом титана при $700\text{ }^\circ\text{C}$ с последующей гидротермальной обработкой.

Повышение экологической безопасности ПУ-клеев

Криушенко С.С.^{1,2}, Стюнина А.О.², Акулиничева А.А.^{1,2}, Антипова Е.А.¹,
Короткова Н.П.¹

¹ООО «НПП «Макромер» им. В.С. Лебедева», г. Владимир, Россия

²ФГБОУ ВПО «Владимирский государственный университет им. А.Г. и Н.Г. Столетовых» (ВлГУ), г. Владимир, Россия
e-mail: sergey.kriushenko@yandex.ru

На сегодняшний день благодаря своим уникальным свойствам широкое распространение получили полиуретановые клеи как по специфике применения, так и по объему выпуска изделий с их использованием. В связи с этим задача повышения экологической безопасности таких продуктов является актуальной. Для получения технологичного времени отверждения практически все ПУ-клеи содержат токсичные аминные катализаторы. В целях снижения концентрации (или полного исключения последних) ПУ-клеи разработали на основе аминополиолов, где встроенный в структуру азот оказывает каталитическое воздействие, обеспечивая увеличение экологичности ПУ-составов, сохраняя при этом все физико-механические свойства клея (рис 1).

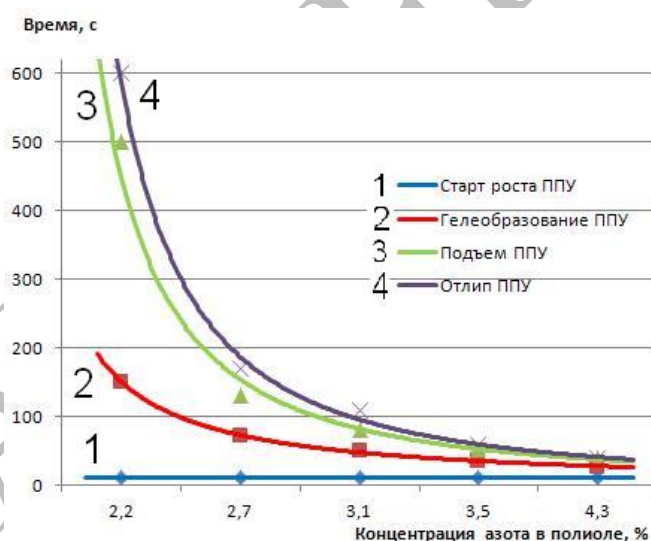


Рис.1. Зависимость технологических параметров получения ПУ-клея (для сэндвич-панелей из металла и минеральной ваты) концентрации азота в аминополиоле (без дополнительного использования катализаторов).

В работе использовались аминополиолы собственной разработки - ряд трёхфункциональных аминополиолов с ММ в диапазоне 350-700 и массовой долей азота 2-4 %, характеристики которых приведены в таблице 1.

Таблица 1. Характеристики аминополиолов

Показатели	1	2	3	4	5
ММ	350	400	450	500	700
Nобщий, %	4,3	3,5	2,8	2,7	2,2
ГЧ, мгКОН/г	510	420	385	320	270
$\eta^{25^{\circ}\text{C}}$, мПа·с	420	375	340	295	255

Полиуретановые инъекционные составы для ремонта и гидроизоляции строительных конструкций

Криушенко С.С.^{1,2}, Стюнина А.О.², Акулиничева А.А.^{1,2}, Антипова Е.А.¹,
Короткова Н.П.¹

¹ООО «НПП «Макромер» им. В.С. Лебедева», г. Владимир, Россия

²ФГБОУ ВПО «Владимирский государственный университет им. А.Г. и Н.Г. Столетовых» (ВлГУ), г. Владимир, Россия
e-mail: sergey.kriushenko@yandex.ru

Нарушение гидроизоляции строительных конструкций приводит к их ускоренному износу: сезонные циклы замораживания и размораживания влаги, проникшей в бетон, подтопление грунтовыми водами, заражение поверхности грибок вызывают физическое разрушение конструкций. В результате долговечность сооружений снижается. Гидроизоляция, в том числе, с помощью полимерных инъекционных систем решает задачи как профилактики, так и устранения уже начавшихся процессов разрушения строительного материала под действием воды.

Разработана линейка двухкомпонентных полиуретановых инъекционных составов марки «Лапрол ИРБ» (промышленно выпускается компанией ООО «НПП «Макромер» им. В.С. Лебедева»). Основные свойства составов представлены в таблице 1. В продуктах «Лапрол ИРБ-1» и «Лапрол ИРБ-Р-1» высокая скорость отверждения обеспечивается применением аминополиола, что повышает экологичность продукта за счет удаления из рецептуры токсичных аминных катализаторов.

Таблица 1. Свойства 2К ПУ инъекционных систем марки «Лапрол ИРБ»

Показатель	ИРБ-1	ИРБ-Н-1	ИРБ-Р-1	ИРБ-НР-1
Вязкость компонента А при 25°C, мПа*с	275±50	265±50	305±50	300±50
Вязкость компонента Б при 25°C, мПа*с	250±50	250±50	250±50	250±50
Соотношение А/Б, масс.ч.	1 / 1	1 / 1	1 / 1	1 / 1
Жизнеспособность смеси при 20°C (без взаимод. с водой)	61-65 сек.	80 мин.	40 сек	90 сек.
Время затвердевания при взаимодействии с водой	60-62 сек.	18 мин.	4 мин.	6 мин.
Увеличение объема смолы при контакте с водой (10% от массы компонента А), раз	75	200	250	300
Прочность при сжатии (на образцах без воды)	при 10% деформац.	Используются преимущественно для гидроизоляции. *		
	при 75% деформац.			
Модуль упругости при сжатии (75% деформац.)	185 МПа			
Относительное удлинение при растяжении	950 МПа			
	4-6 %			

Данные продукты используются для укрепления и гидроизоляции (постоянной и превентивной) строительных конструкций, в т.ч. подземных частей зданий и сооружений, а также горизонтальной отсечки капиллярного подъема влаги.

**Моющие композиции для текстиля на основе новых марок
отечественных ПАВ**

Кружилина И.М., Белокурова О.А., Одинцова О.И.

Ивановский государственный химико-технологический университет

Иваново, Россия

E-mail: belochka95-09@mail.ru

Промывка – одна из важнейших составляющих процесса колорирования текстильных материалов, в ходе которой очень важно полностью удалить с ткани незафиксированный и гидролизированный краситель для обеспечения яркости, насыщенности и устойчивости окраски. В связи с этим совершенствование технологии промывки тканей, окрашенных активными красителями, является важной задачей.

Наиболее перспективным решением проблемы повышения эффективности процесса промывки колорированных текстильных материалов является интенсификация процесса путем применения новых современных моющих ТВВ.

В качестве основных объектов исследования были выбраны новые продукты ООО «Завод синтанолов», г. Дзержинск Нижегородской обл. и ОАО «Аминохим», г. Москва, в частности, Сульфэтоксилаты жирных спиртов марок Б1 и Б3, Синтанолы марок БВ, АЛМ-5, АЛМ-7, АЛМ-10, Синтанор 5-09-11, Стенор 80 и Сунатал. Исследования проводились с использованием хлопчатобумажных тканей, окрашенных активными красителями по одностадийному термофиксационному способу.

Исследованы различные комбинации препаратов разной природы с целью интенсификации процесса отмытки красителя с текстильного материала. Исследована эффективность введения добавок различных текстильно-вспомогательных веществ (трилон А, трилон Б, мочевины и др.) для интенсификации процесса промывки текстильных материалов, окрашенных активными красителями [1]. Подобраны эффективные композиции на основе анионного - Сульфэтоксилата жирных спиртов марки Б3 и неионогенного - Синтанола АЛМ-10 с добавкой мочевины, а также на основе неионогенного - Синтанола АЛМ-7 с добавками мочевины и трилона Б, обеспечивающие необходимый уровень отмытки активного красителя и высокие показатели устойчивости окрасок к различным физико-химическим воздействиям.

Список литературы

[1] Бухштаб, З.И. Технология синтетических моющих средств: Уч. пособ. для вузов / З.И. Бухштаб, А.П. Мельник, В.М. Ковалев. – М.: Легпромбытиздат, 1988. – 320 с.

Получение покрытий из алюминидов железа на поверхности стали с использованием высокоэнергетического воздействия

Кулевич В.П., Слаутин О.В., Фатыхова А.Г.

Волгоградский государственный технический университет, Волгоград, Россия

E-mail: kulevich.vp@gmail.com

В настоящей работе предложена технологическая схема получения покрытий из алюминидов железа, включающая сварку взрывом алюминия АД1 со сталью Ст3 и двойную термическую обработку, и изучена трансформация фазового состава полученных покрытий при высокотемпературных нагревах.

Образцы для исследования получали сваркой взрывом алюминия АД1 со сталью Ст3 для обеспечения прочного соединения разнородных металлов.

По результатам исследования установлено, что термообработка биметалла Ст3-АД1 при температуре жидкофазного взаимодействия ($660\text{ }^{\circ}\text{C}$) приводит к формированию на границе соединения композита диффузионной зоны, состоящей из прослойки интерметаллида Fe_2Al_5 со стороны стали и двухфазной (FeAl_3+Al) прослойки со стороны алюминия. Повторная термообработка при температуре твердофазного взаимодействия ($640\text{ }^{\circ}\text{C}$) приводит к образованию на границе прослойки Fe_2Al_5 с двухфазной прослойкой магистральной трещины (рис. 1, а), которая обеспечивает отделение непрореагировавшего алюминиевого слоя и получение интерметаллидного Fe_2Al_5 покрытия на поверхности стали (рис. 1, б). Твердость полученного покрытия составляет примерно 12 ГПа, а его толщина регулируется продолжительностью первого этапа термообработки.

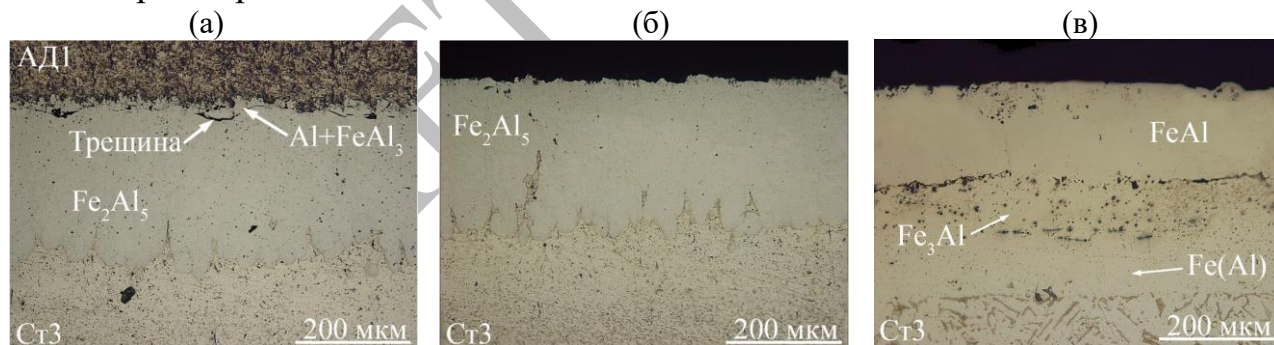


Рис. 1. Микроструктура диффузионной зоны после двойной термообработки (а) и покрытия после отделения алюминия (б) и после высокотемпературной термообработки (в)

Высокотемпературные нагревы образцов с покрытием приводят к трансформации фазового состава последнего в следующей последовательности: $\text{Fe}_2\text{Al}_5 \rightarrow \text{FeAl}_2 \rightarrow \text{FeAl} \rightarrow \text{Fe}_3\text{Al} \rightarrow \text{Fe(Al)}$. При этом толщина покрытия увеличивается за счет диффузии атомов алюминия в стальную подложку, а твердость уменьшается до ~ 6 ГПа. Сформированное слоистое $\text{FeAl} / \text{Fe}_3\text{Al} / \text{Fe(Al)}$ покрытие не содержит хрупких фаз (Fe_2Al_5 , FeAl_2), но содержит пустоты на межфазной границе $\text{FeAl} / \text{Fe}_3\text{Al}$ и включения сульфидов марганца в алюминиде Fe_3Al (рис. 1, в).

Работа выполнена при финансовой поддержке за счет гранта РФФИ № 17-08-00283.

Электродиализное концентрирование раствора нитрата аммония

Куликова А.А., Липин А.Г.

Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия

E-mail: alyonalt@mail.ru

Работа посвящена исследованию процесса электродиализа сточных вод производства аммиачной селитры. Электродиализ - перспективное направление реализации безотходных технологий, так как позволяет получать концентрат, используемый как вторичный сырьевой поток и дилуат, подходящий к применению в качестве технической воды в том же технологическом цикле.

Исследования проводили на лабораторном трехкамерном электромембранном аппарате. Использовались гетерогенные ионообменные мембраны МА-40 и МК-40. Процесс организован по циркуляционной схеме. Перерабатываемый раствор подавался в среднюю камеру на обессоливание, через анодную и катодную камеры так же циркулировал раствор нитрата аммония. Эксперименты проводились с одинаковыми концентрациями раствора NH_4NO_3 , но с различными объемами V перерабатываемого раствора нитрата аммония в потенциостатическом режиме при разности потенциалов 9 В. Объем обрабатываемого раствора от опыта к опыту увеличивался. Начальный объем раствора в емкости концентрата не изменялся, поэтому степень концентрирования от опыта к опыту возрастала. В таблице 1 приведены основные параметры процесса электродиализа: τ – продолжительность процесса, η – выход по току, $i_{\text{ср}}$ – средняя за время опыта плотность тока, $j_{\text{ср}}$ – среднее значение потока ионов через мембрану, C – содержание нитрата аммония в концентрате в конце опыта.

Таблица 1. Результаты экспериментов

№	$V_{\text{перераб.р-ра}}$, мл	τ , мин	η , %	$i_{\text{ср}}$, А/м ²	$j_{\text{ср}}$, 10 ⁶ моль/с	C , г/л
1	100	22	50	198,5	12,3	26
2	200	38	50	228,8	14,3	39
3	350	58	55,3	239,65	16,34	58,5
4	500	72	62,5	250,7	18,8	105,8

С увеличением объема перерабатываемого раствора усредненное значение концентраций растворов в камерах электродиализатора повышаются, что приводит к увеличению как максимального, так и среднего значения силы тока. Выполненная серия экспериментов показала, что возможно получение концентрированного раствора с содержанием аммиачной селитры 105 г/л. Раствор такой концентрации может подвергаться дальнейшему концентрированию методом упаривания. Таким образом, показана возможность возврата нитрата аммония, содержащегося в сточных водах, в технологический цикл.

**Исследование коксовых отложений катализаторов получения
низкозастывающих дизельных топлив**

Куриленко И.А., Гафарова Э.Б.

РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, Москва, Россия

Гидрогенизационные процессы производства низкозастывающего дизельного топлива происходят на бифункциональных катализаторах. Кислотным компонентом данных катализаторов являются цеолиты и цеолитоподобные структуры, размер каналов которых обеспечивает прохождение только n-алканов, за счет чего конверсия разветвленных алканов, нафтенов и ароматических структур остается незначительной. Компонентом, обеспечивающим функцию гидрирования-дегидрирования, как правило, являются металлы Ni, Co, Mo, W, Pt и Pd. Также в состав катализаторов входят промоторы, модификаторы и связующий компонент.

Образование кокса на катализаторах вызывает существенное изменение их активности по двум причинам. Во-первых, активные центры катализатора участвуют в процессе образования кокса, что может приводить иногда к весьма сильному физическому и даже химическому разрушению каталитической системы. Во-вторых, закоксовывание катализатора вызывает необходимость его регенерации, что связано с многократной циклической сменой восстановительной и окислительной сред и значительными колебаниями температуры. Проведенное исследование позволяет изучить особенности закоксовывания и регенерации катализаторов различного состава, предложить методику исследования свойств катализатора и оптимизации условий его работы.

При анализе катализаторы высушивались в СТА-анализаторе в токе азота при 105°C, затем охлаждались до 25°C, а затем проводился анализ в атмосфере 90% об азота и 10% кислорода.

В результате работы установлено, что цеолитные катализаторы, содержащие Pt и Pd, характеризуются меньшей закоксованностью, их регенерация происходит при более низких температурах: кокс образуется преимущественно на поверхности катализатора и имеет меньшую степень уплотнения.

Список литературы

- [1] Трифонова И.Н., Козлов А.М. Определение ёмкости цеолитов для глубокой очистки газа перед ожижением// Новые технологии в газовой промышленности Тезисы докладов юбилейной десятой всероссийской конференции молодых ученых, специалистов и студентов. 2013. С. 151.
- [2] Карпов А.Б., Козлов А.М. Разработка адсорбционно-селективных технологий выделения гелия// Нефть и газ - 2015 Сборник тезисов 69-ой Международной молодежной научной конференции. 2015. С. 161.
- [3] Стенина Н.Д., Козлов А.М. Определение емкости цеолитов для подготовки природного газа к сжижению// Нефть и газ -2017 Сборник тезисов. 2017. С. 453.

Влияние пассивации оловом галлий алюмосиликата при получении ароматических углеводородов из пропан-бутановых фракций

Куриленко И.А., Гафарова Э.Б.

РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, Москва, Россия

Процесс получения ароматических углеводородов из пропан-бутановых фракций долгое время рассматривали как альтернатива каталитическому риформингу прямогонных бензиновых фракций, но из-за быстрого закоксовывания каталитических систем и невысокой селективности процесс не нашел промышленного применения. Одним из способов снижения коксообразования является регулируемое отравление катализатора, что и было сделано в данной работе.

Для частичного подавления активности катализаторов получения ароматических углеводородов можно их обработать заранее рассчитанными небольшими количествами сернистых соединений. Однако, при малых межрегенерационных пробегах применение таких соединений для частичного отравления катализаторов затруднительно. Поэтому необходим поиск других отравляющих веществ, которые вносились бы на стадии синтеза катализатора и не удалялись в течении большого количества циклов реакция-регенерация.

Для решения этой задачи первоначально производилась пассивация галлий алюмосиликата (ГАС) добавлением хлорида олова при концентрациях 0,1; 0,25; 0,5 % масс олова.

Введение олова в ГАС приводит к уменьшению конверсии пропан-бутановой смеси, увеличению селективности, уменьшению метанообразования и выхода нафталина и его гомологов. При росте концентрации олова с 0,1 до 0,5 % масс. увеличивается содержание бутанов и бутиленов в отходящих газах с 0,9 до 1,8% об. и уменьшается содержание нафталина и его гомологов в жидкости с 9,2 до 6,4 % масс.

Таким образом, применение добавок олова перспективно для катализатора на основе галлий алюмосиликата для повышения безрегенерационного пробега (времени работы катализатора без регенерации), а также для повышения содержания моноядерных ароматических углеводородов в жидком катализате.

Список литературы

- [1] Лapidус А.Л., Козлов А.М., Худяков Д.С., Дергачев А.А. Ароматизация пропан-бутановой фракции на модифицированном пентасиле// Газохимия. 2010. № 6. С. 16-18
- [2] Козлов А.М., Худяков Д.С., Лapidус А.Л., Дергачёв А.А. Ароматизация пропан-бутановой фракции на пентасиле, модифицированном солями цинка// Технологии нефти и газа. 2011. № 1 (72). С. 7-10.
- [3] Лapidус А.Л., Козлов А.М., Худяков Д.С., Дергачев А.А. Ароматизация смеси алканов C3-C4 на Zn-пентасиле, модифицированном оловом и свинцом// Известия Академии наук. Серия химическая. 2011. № 3. С. 572.

Синтез, структурные и электрохимические особенности перспективных катодных материалов на основе ферроцианидных комплексов 3d-металлов

Лаптенкова А.В., Селютин А.А.

Санкт-Петербургский государственный университет,

Санкт-Петербург, Россия

E-mail: laptenkova15@gmail.com

Ферроцианидные комплексы 3d-металлов изучаются на протяжении долгого времени, но за последнее десятилетие внимание учёных к ним особенно возросло из-за широких возможностей их применения в электрохимии [1]. Высокая устойчивость ферроцианидного аниона и положительный восстановительный потенциал делают привлекательным использование комплексов в роли катодных материалов для водных аккумуляторов [2].

Химические источники тока, созданные с использованием ферроцианидов обладают высокой эффективностью аккумулирования энергии, длительным жизненным циклом, стабильностью работы, не являются токсичными. Кубическая кристаллическая структура данных соединений обеспечивает обратимую интеркаляцию щелочных и щелочноземельных металлов.

В данной работе были получены новые катодные материалы для магний-ионных батарей на основе ферроцианидов переходных металлов, содержащих в своём составе ионы магния или калия. Преимуществом использования магния является двухвалентная природа иона, которая обеспечивает высокую ёмкость аккумуляторов. Кроме того, распространённость магния в земной коре и стабильность в атмосфере делает аккумуляторы недорогими и безопасными в использовании.

Основным способом синтеза ферроцианидных комплексов является метод соосаждения в растворе. Достоинства данного способа заключаются в возможности регулировать с помощью условий синтеза такие параметры, как размеры частиц, степень кристалличности и заселённость кристаллографических позиций различными атомами.

Полученные образцы были охарактеризованы методами РФА с уточнением параметров структуры методом Ритвельда. Проведён комплексный анализ методами АЭС-ИСП, СЭМ, ТГА. Впервые для комплексов подобного состава были изучены магнитные свойства и проведён анализ методом ЯГР.

Основные электрохимические характеристики полученных катодных материалов определены с помощью циклической вольтамперометрии и снятия циклов заряда-разряда в гальваностатическом режиме.

Список литературы

[1] T. Gupta, A. Kim, S. Phadke, S. Biswas, T. Luong, B. Hertzberg, M. Chamoun, K. Lutterodt, D. Steingart // *J. Power Sources*. 2016. 305. P. 22-29.

[2] M. Pasta, C. Wessells, R. Huggins, Y. Cui // *Nat. Com.* 2012. 3. P. 1149-1155.

Оценка влияния параметров плавки на выход годного в ДСП

Левина Е.В., Мялкин И.В., Сафонов В.М.
 Выксунский филиал НИТУ "МИСис", Выкса, Россия
 E-mail: i.v.myalkin@gamil.com

Задачей работы было оценить влияние основных показателей плавки на выход годного на ДСП российского завода, отвечающего современному уровню развития техники и технологии электроплавки. Особенностью работы современной ДСП является как зависимость процессов в печи от состава завалки, так и сочетание подвода электрической энергии с химической за счёт использования газо-кислородных устройств.

Анализ массива данных провели с помощью программы "STATISTICA". Исходными данными послужили 500 паспортов плавок за 2017 год, сталь марок: 20, 22ГЮ, 09Г2С, 2пс, 3сп, 13ХФА, 17Г1С, 09ГСФ, К56.

Интересно отметить, что на выход годного не влияет время плавки от выпуска до выпуска и время работы под током, а также удельный расход углерода. При этом парные коэффициенты корреляции между выходом годного и временем работы под током и временем от выпуска до выпуска самые высокие. На таком видимом парадоксе сказываются вариации иных параметров плавки.

Был проведён сравнительный анализ выхода годного на данной ДСП (на рисунке завод 1) и на ДСП другого современного российского электросталеплавильного завода (на рисунке завод 2). Для статистического анализа данных 500 паспортов плавок в ДСП завода 2 были взяты марки стали: 3Сп, 35ГС и 25Г2С. Результат проведённого t-теста представлен на рисунке 2.

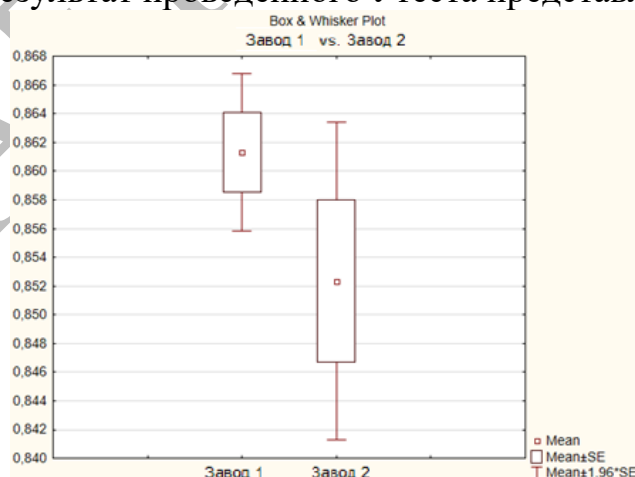


Рис.1. Сравнение выхода годного между заводом 1, ЛПК, и заводом 2.

Выход годного при выплавке в ДСП этих заводов статистически не различается, но средний выход годного на ДСП завода 1 немного выше, а стандартная ошибка ниже, что свидетельствует о лучшей стандартизации процесса выплавки в данной ДСП.

Исследование стойкости защитной гетерофазной керамики к высокотемпературному окислению

Лемешева М.В.¹, Погожев Ю.С.¹, Яцюк И.В.¹, Потанин А.Ю.¹, Вершинников В.И.², Левашов Е.А.¹

¹*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия*

²*Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мерджанова РАН, г. Черноголовка, Россия*

E-mail: lemescheva.margarita@yandex.ru

Развитие авиационной и ракетно-космической отраслей связано в первую очередь со снижением веса конечного изделия. Перспективным материалом для изготовления различных теплонагруженных элементов конструкций, подверженных одновременному воздействию высокотемпературных нестационарных тепловых потоков в окислительной среде с одновременным воздействием силовых нагрузок, например, носовых обтекателей, передних кромок крыльев, турбокомпрессоров, сопловых блоков, камер сгорания и др. являются углерод-углеродные композиционные материалы (УУКМ). Основным недостатком УУКМ, который препятствует его внедрению в реальные теплонагруженные конструкции, является высокая скорость окисления при температурах выше 400-500 °С и коррозия в азоте при высоких температурах.

В качестве материала для защиты изделий из УУКМ используется керамика на основе ZrB_2 . Диборид циркония, имеет высокую температуру плавления (3245 °С) [1], теплопроводность (57,9 Вт/(м·К)) [1], жаростойкость [2] твердость 18-23 ГПа [3] и низкий коэффициент теплового расширения ($5,9 \cdot 10^{-6} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$) [3]. Для стабилизации B_2O_3 , который испаряется выше 1000 °С в процессе окисления ZrB_2 , в керамику вводятся добавки $MoSi_2$, SiC, $ZrSi_2$ [4, 5].

В данной работе гетерофазный порошок $ZrB_2/ZrSi_2/MoSi_2$ получали методом СВС. Изучены его химический и фазовый составы, как в свободной насыпке, так и в виде горячепрессованных образцов. Для изучения стойкости к окислению проводились высокотемпературные испытания компактных образцов в интервале температур 1200-1600 °С.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014—2020 годы», Соглашение о предоставлении субсидии № 14.578.21.0227 (Уникальный идентификатор проекта RFMEFI57817X0227).

[1] Sonber J. K. et al. // J. Refract. Met. Hard Mater. V. 29. 2011. P.21

[2] [Theo Saunders](#) et al. // J. Alloys Compd. V. 653. 2015. P. 629–635

[3] Wang Tie-Gang et al. // J. Mater. Sci. Technol. V. 28 №11. 2012. P. 981

[4] Zhang Y. Et al. // Surf. Coat. Technol. V. 300. 2016. P. 1–9

[5] Zhang W. et al. // Trans. Nonferrous Met. Soc. Chine V. 21. 2011. P.1538-1544

Создание экотехнологий печати пигментами с использованием связующих нового поколения

Маноли О.А., Ширманова В.В., Козлова О.В.

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

E-mail: ovk-56@mail.ru

В связи с крайне неблагоприятной экологической ситуацией все большее значение приобретают технологии, предусматривающие использование малотоксичных, пожаробезопасных веществ, а также энерго-, тепло- и водосберегающих процессов. Пигментная печать представляет собой один из наиболее простых, экономически выгодных и перспективных способов колорирования текстильных материалов. В этой связи разработка эффективных, конкурентоспособных технологий пигментной печати при использовании новых отечественных сополимеров на основе (мет) акриловых мономеров является актуальной.

Цель работы заключается в обосновании эффективности применения отечественных полимерных связующих нового поколения, в том числе новых, освобожденных от алкилфенолэтоксилатов (APEO-free), в пигментной печати; в выявлении закономерностей фиксации пигментов на текстильных материалах в присутствии новых полимеров отечественного производства; оценке влияния различных добавок (сшивающих препаратов, силиконовых мягчителей, полиуретановых отвердителей, минеральных добавок, эмульгаторов и др.) на качественные показатели печати по тканям различного волокнистого состава.

Особенностью исследований, выполняемых в рамках этой работы, является ориентация на применение отечественных конкурентоспособных связующих и сшивающих препаратов, анализ рынка и эффективности действия совершенно новых препаратов таких перспективных компаний, как ООО «Сван», ООО «Оргхимпром», ЗАО «Макромер», ОАО «Пигмент» и др.

Показаны преимущества и недостатки ряда полимеров - связующих, которые уже нашли довольно широкое применение на отделочных предприятиях Ивановского и др. регионов России. Это такие препараты, как Рузин-14, ЭМ-37э, ларус-21, Эмультекс 5БН, Дистекс, Лакротен и др.

При ужесточении экологических требований к домашнему текстилю из вышеназванных препаратов только препарат ЭМ-37э может конкурировать с известным зарубежным аналогом биндером 83 (компания Клариант), в рецептуре которого отсутствуют алкилфенолэтоксилаты и другие вещества, классифицируемые как опасные для окружающей среды и используемые в производстве в качестве смачивателей и диспергаторов с высокой способностью к биологическому разложению.

Кроме того, применение этого препарата в пигментной композиции позволяет получить в сопоставляемых условиях применения высокие колористические показатели и хорошие технические результаты печати.

Применение фторированного алюмосиликата при колорировании текстильных материалов пигментами

Миронова А.А., Владимирцева Е.Л.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия*

E-mail: elvladimirtseva@mail.ru

В работе экспериментально обоснована возможность использования фторированного алюмосиликата (ФТАС) в крашении и печати пигментами текстильных материалов различного волокнистого состава. ФТАС является побочным продуктом в производстве фторида алюминия, выпускаемого Череповецким химическим комбинатом. Кроме окислов алюминия и кремния, он содержит в своем составе от 2 до 6 % фторида алюминия, имея брутто формулу $xAl_2O_3 \cdot ySiO_2 \cdot zAlF_3$. Уникальность этого препарата заключается в сочетании нерастворимой (оксиды кремния и алюминия) и растворимой (фторид алюминия) фракции [1].

Предпосылкой к исследованию явился тот факт, что благодаря наличию водорастворимого фторида алюминия, ФТАС имеет кислую реакцию, следовательно, может быть использован как катализатор полимеризации связующих агентов в пигментной композиции. Кроме того, размер частиц порошка ФТАС сопоставим с размерами частиц пигментных красителей, а белизна порошка (85%) близка к этому показателю для оксида титана (84 %) и гидроксида алюминия (90%), применяемых для производства белых пигментов.

В ходе работы установили, что при введении ФТАС в печатный состав в качестве купажа заметно улучшается гриф напечатанного материала. Жесткость образцов снижается в среднем на 15-20 %. При этом расцветки становятся более насыщенными, а их устойчивость к физико-механическим воздействиям имеет тенденцию к улучшению. Отметим, что изменяется не только насыщенность расцветки, но и оттенок цветного пигмента. При этом возникал оригинальный колористический эффект «мелкозернистой» печати, особенно заметный на темном фоне. Появление этого своеобразного эффекта связано с соотношением размеров частиц цветного пигмента и ФТАС.

Использование синтетического алюмосиликата в качестве катализатора при совмещении пигментного крашения и заключительной отделки тканей композициями на основе низкоформальдегидных предконденсатов термореактивных смол также дает положительные результаты по всем контрольным показателям: несминаемость материалов увеличивается на 10-15 % при сохранении мягкого грифа материала и хороших колористических показателей окраски.

Список литературы

[1] ГОСТ 19181-78 Алюминий фтористый технический. - М.: Государственный комитет СССР по стандартам, 1989.

Автоклавное получение дисперсных фаз, содержащих платину или палладий в оксидной матрице $\text{MoO}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$

Морозов Р.А., Тупикова Е.Н.

*Самарский национальный исследовательский университет
им. академика С.П. Королева, Самара, Россия*

E-mail: klobar1@gmail.com

Процессы, осуществляемые в закрытых системах (автоклавах) в водных растворах при температурах выше 100°C , широко применяют в настоящее время для получения нанопорошков металлов, нанодисперсных оксидов и цеолитов с определенной кристаллической и пористой структурой. Автоклавный синтез металлических дисперсий в гелеобразной среде аморфных гидроксидов, кристаллизующихся в гидротермальных условиях, расширяет возможности приготовления новых многокомпонентных дисперсных материалов.

Цель работы заключалась в получении дисперсных фаз путем автоклавного термолиза тетраамминов Pt (II) или Pd (II) с молибдат-ионами в среде суспендированного гидроксида алюминия.

Комплексы $[\text{M}(\text{NH}_3)_4]\text{MoO}_4$, где $\text{M} = \text{Pt}, \text{Pd}$, синтезировали реакцией ионного обмена хлорида тетраамминплатины (II) или палладия (II) с молибдатом аммония. Суспензия гидроксида алюминия была получена осаждением из раствора соли алюминия концентрированным раствором аммиака с последующей промывкой осадка до нейтральной среды.

Растворы с концентрацией комплексов $0,002 \text{ M}$ помещали во фторопластовые стаканы, добавляли суспензию $\text{Al}(\text{OH})_3$, растворы деаэрировали, герметизировали и нагревали при 190°C в течение 180 минут. Полученные в автоклаве порошки серого цвета отфильтровывали, сушили и затем прокачивали при 550°C .

Химический состав продуктов был определен методом оптико-эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой на приборе PlasmaQuant PQ9000. Размер, форма и распределение элементов в частицах полученных дисперсных фаз были установлены с помощью растрового электронного микроскопа Tescan Vega с энерго-дисперсионным микроанализатором рентгеновского спектра Inga Energy, а также атомно-силового микроскопа Nanoskan 4D.

Показано, что в автоклавных условиях комплексы $[\text{M}(\text{NH}_3)_4]\text{MoO}_4$, где $\text{M} = \text{Pt}, \text{Pd}$, разлагаются с образованием металлических платины или палладия и коллоидного оксида молибдена, так называемой «молибденовой сини», который адсорбируется на поверхности гидроксида алюминия. При дальнейшем прокачивании образуется порошок, представляющий собой алюмооксидную матрицу с включениями частиц MoO_3 и равномерно распределенными наноразмерными частицами благородных металлов.

Увеличение предела огнетеплостойкости полимерных композиций за счет введения в них аппретированных микроуглеродных волокнистых наполнителей

Мотченко А.О., Антонов Ю. Каблов В.Ф., Кейбал Н.А.

Волжский политехнический институт (филиал)

ФГБОУ «Волгоградский государственный технический университет»

Волгоград, Россия

E-mail: kuorri@gmail.com

В настоящее время трудно переоценить значение эластомерных материалов с повышенными огнетеплозащитными характеристиками во всех областях промышленности. В ряде случаев уровень развития промышленного производства определяется достижениями в области их создания и применения.

Волокнонаполненные композиции обладают усиливающими огнетеплозащитными свойствами и придают изделиям на их основе ряд дополнительных свойств [1].

Для получения высокой огнетеплостойкости без ухудшения остальных показателей, используют предварительно аппретированные волокнистые наполнители.

Установлено, что введение углеродных микроволокон позволяет существенно улучшить огнетеплозащитные свойства эластомерных материалов. Например, скорость деструкции уменьшается на 8-20%, эрозионная стойкость увеличивается на 20-70%, реометрические характеристики улучшались до 30%. Необходимо так же отметить, что одной из причин улучшения эрозионной стойкости и теплозащитных свойств является укрепление кокса за счет его армирования микроволоконками.

На основании вышесказанного логично предположить, что высокие огнетеплозащитные свойства материалов, содержащих МУВ, заключаются в том, что углеродные волокна являются стимуляторами формирования в материале углеродных фаз, которые способствуют увеличению «зародышей» закоксованной поверхности с повышением температуры.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что эластомерные материалы, в составе которых присутствуют углеродные волокна, обладают более высокими показателями огнетеплозащиты. Вместе с этим, предварительное аппретирование микроуглеродных волокон, позволяет получать не только повышенные огнетеплозащитные свойства, но также сохранять физико-механические свойства эластомерных композиций.

Список литературы

[1] Исследование влияния наполнения резин микроуглеродными волокнами с целью улучшения теплозащитных свойств / В.Ф. Каблов, Н.А. Кейбал, О.М. Новопольцева, К.Ю. Руденко, А.О. Мотченко, А.П. Малахо // Известия ВолгГТУ. Сер. Химия и технология элементоорганических мономеров и полимерных материалов. - Волгоград, 2016. - № 12 (191). - С. 88-91.

Полевые транзисторы на основе тонких пленок органических веществ

Муллагалиев И. Н., Салихов Р. Б.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

E-mail: ilnur9409@mail.ru

Органическая электроника связана с созданием новых электронных устройств: тонкопленочных полевых транзисторов, светодиодов, сенсоров и солнечных элементов на основе органических соединений. Тонкие пленки полианилинов (PANI), C60 и фуллеренпроизводных активно используются в качестве транспортного слоя в органических полевых транзисторах. Изучение механизмов транспорта заряда в тонких органических пленках и отработка технологии получения полимерных слоев с повышенной проводимостью [1-3] – необходимые условия для развития органической электроники.

Для изготовления транзисторов были использованы стеклянные пластины с омическим контактом в виде ИТО. На слой ИТО методом центрифугирования наносился слой полиимидной пленки, который использовался в качестве подзатворного диэлектрика. Далее были нанесены алюминиевые электроды методом термического распыления в вакуумной камере на установке ВУП-5 (вакуумный универсальный пост). В область зазора между электродами в 50 мкм наносилась пленка PANI, C60 или фуллеренпроизводных.

Были получены и проанализированы выходные и передаточные вольтамперные характеристики транзисторов. Зависимости имеют нелинейный характер во всем диапазоне приложенных к затвору напряжений. Следует отметить, что отсутствует типичный для большинства полевых транзисторов участок насыщения тока. Полученные зависимости характерны для нормально открытого полевого транзистора, т.е. канал проводимости, формируется изначально в процессе изготовления образца. В транзисторах на основе тонких пленок PANI и фуллеренов выходной ток увеличивался, соответственно, при отрицательном и положительном потенциалах на затворе, что подтверждает дырочный и электронный тип проводимости в указанных соединениях.

Список литературы

- [1] Bunakov A., Salikhov R., Lachinov A. Current-voltage characteristics of thin poly(biphenyl-4-ylphthalide) films // *Macromolecular Symposia*. 2004. Т. 212. С. 387-392.
- [2] Salikhov R. B., Lachinov A. N., Rakhmeyev R. G. Mechanisms of conductivity in metal-polymer-Si thin film structures // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2007. Т. 467. №. 1. С. 85-92.
- [3] Gadiev R.M., Lachinov A.N., Rakhmееv R.G., Kornilov V.M., Salikhov R.B., Yusupov A.R. The conducting polymer/polymer interface // *Applied Physics Letters*. 2011. Т. 98. № 17. С. 173305.

Исследование свойств огнетеплозащитных материалов, содержащих циркониевые микросферы

Нарыжный Д.А.¹, Каблов В.Ф.¹, Новопольцева О.М.¹, Кочетков В.Г.¹

¹*Волжский политехнический институт (филиал) ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет», Волжский, Россия*

E-mail: vg.kochetkov@mail.ru

Ранее нами была показана возможность применения микродисперсного диоксида циркония в составе эластомерных огнетеплозащитных материалов [1]. Однако, при этом происходит некоторое снижение прочности материала. Для устранения этого недостатка возможно использование более перспективных микросфер из диоксида циркония.

В работе исследовалось влияние введения циркониевых микросфер (диаметр 5-50 мкм) на комплекс физико-механических, теплофизических и огнезащитных свойств эластомерных огнетеплозащитных материалов (ОТЗМ) на основе этиленпропилендиенового каучука, содержащих 30 масс. ч. наполнителя (БС-120) и серную вулканизирующую группу.

Количество микросфер варьировалось в пределах 1-10 масс. ч.

Исследование реометрических характеристик (MDR 3000 Professional, ASTM D2084-79) показало, что введение ЦСФ практически не влияет на минимальный и максимальный крутящие моменты по сравнению с контрольной композицией. Циркониевые микросферы по сравнению с микродисперсным диоксидом циркония имеют меньший размер, что обеспечивает лучшее их распределение по объему композиции и, следовательно, большую гомогенность системы, что сказывается на прочности материала: композиции, содержащие ЦСФ на 10-25 % прочнее композиций с микродисперсным диоксидом циркония и не уступают контрольной смеси. Также благодаря полному строению микросфер происходит снижение плотности материала.

Для оценки огне- и теплостойкости образцов в соответствии с разработанной методикой определялись следующие параметры: зависимость температуры на необогреваемой поверхности образца от времени воздействия открытого пламени плазмотрона, потеря массы образца и скорость линейного горения. При высокотемпературном прогреве на поверхности образца создавалась температура порядка 2000 °С.

Введение циркониевых микросфер способствует увеличению времени прогрева образца на 16-20 % и уменьшению потери массы при высокотемпературном воздействии на 30-35 % за счет образования равномерного мелкопористого коксового слоя.

Список литературы

[1] Каблов В.Ф., Новопольцева О.М., Кочетков В.Г. и др. // Огнеупоры и техническая керамика. 2015. № 1-2. С. 16-19

Капсулирование гранул с использованием дисперсий полимеров

Небукин В. О., Липин А. Г.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия**E-mail: vlaneb93@gmail.com*

В данной работе проведены эксперименты по капсулированию минеральных удобрений в полимерные оболочки в аппарате с псевдооживленным слоем гранул. Нанесение защитной оболочки осуществляется путём распыливания на частицы кипящего слоя водной дисперсии стиролакрилового полимера в количестве 10÷30% от веса гранул. Капли дисперсии, столкнувшись с частицами слоя, растекаются по их поверхности, образуя жидкостную плёнку. Удаление дисперсионной среды путем сушки приводит к отверждению плёнки. Процесс проводился в режиме фонтанирующего слоя, обеспечивающего интенсивную циркуляцию частиц. Таким образом, создаются условия для многократного прохождения каждой частицы через зону орошения форсунки, что способствует равномерному распределению пленкообразующего вещества по поверхности обрабатываемых гранул. Получены образцы капсулированных удобрений трех видов: аммиачная селитра, аммофоска, аммофос. Выполнены эксперименты по растворению капсулированного продукта. Концентрация раствора определялась рефрактометрическим методом. Получены зависимости кинетики выделения питательных веществ из капсулированных удобрений (рис.1).

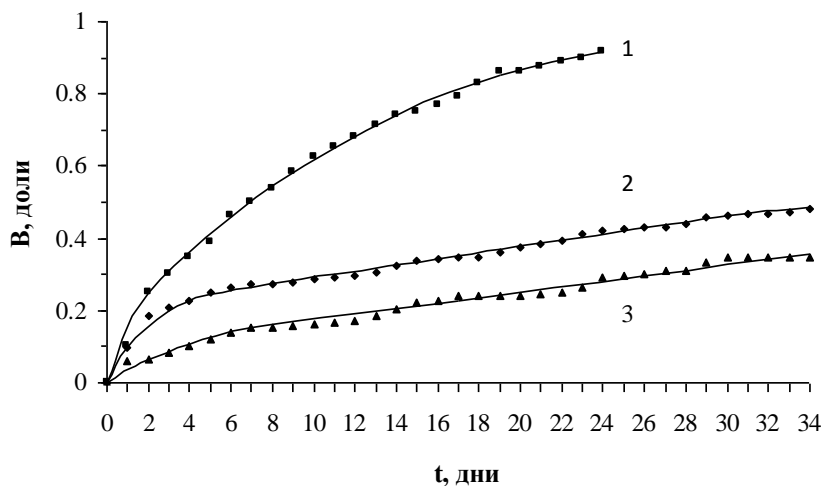


Рис.1. Кинетика выделения питательного вещества из различных удобрений: 1 – аммиачная селитра, 2 – аммофоска, 3 – аммофос. Относительная масса оболочки 20 %

Сравнительный анализ кривых рис.1 показывает, что нанесение защитного покрытия в количестве 20% от массы гранул для разных видов удобрений дает разный эффект. Скорость высвобождения питательных веществ уменьшается в ряду: аммиачная селитра, аммофоска, аммофос. Такое различие объясняется двумя факторами. Удобрения имеют разный гранулометрический состав, а значит и удельную поверхность, что является причиной формирования оболочки различной толщины. Кроме того разные удобрения оказывают неодинаковое влияние на процесс формирования пленки из эмульсии полимера.

Использование экстракта жмыха граната в косметических средствах

Новгородская Е.И.

*Киевский политехнический институт имени Игоря Сикорского, Киев, Украина
E-mail: katya.novg@gmail.com*

Современное направление производства косметической продукции направлено на разработку рецептур с использованием органических веществ природного происхождения с целью частичной замены синтетических компонентов. Целью данного исследования является использование экстракта жмыха граната как источника вяжущих веществ в косметических средствах.

Для улучшения показателей вязкости в косметических средствах используется танин, который непосредственно может быть получен путем экстрагирования жмыха граната после производства сока в пищевой промышленности. Экстрагирование проводят как методом мацерации сухого сырья органическим растворителем, так и с использованием классического метода – извлечение с помощью экстрактора Сокслета. Перед проведением экстрагирования сырье подвергается измельчению до частиц размером $5 \cdot 10^{-1}$ мм в целях повышения эффективности массопереноса активных компонентов из растительного материала в растворитель. Для более полной экстракции проведен ряд экспериментов гравиметрического анализа по определению сухого остатка, с которых можно утверждать, что гидромодуль растительного сырья к экстрагенту – 2:1 является преобладающим для данного вида сырья [1].

Дубильные вещества способны удерживать в организме аскорбиновую кислоту, а также улучшать её усвоение на клеточном уровне. С добавкой танина изготавливают косметические кремы, снимающие раздражение и отёчность кожи. Также экстракты, содержащие танины, перспективно использовать как добавки для лечебных ванн и приготовления холодных компрессов.

Сегодня уже известен способ получения синтетического танина, который не содержит примесей. Однако танин природного происхождения имеет более благоприятное воздействие на кожу, предотвращает вероятность возникновения побочных эффектов и несет вред только при индивидуальной непереносимости вещества.

Следовательно, можно утверждать, что использование экстракта жмыха граната является целесообразным для улучшения реологических и биохимических свойств косметической продукции.

Список литературы

[1] Гафизов Г.К. Изучение вопросов комплексной переработки плодов граната. Proceedings of the International Scientific and Practical Conference «Methodology of modern research, Vol. 1(March 21-22, 2015, Dubai, UAE)». — Dubai.: Rost Publishing, 2015. — P. 15—27.

Оптическая керамика на основе твёрдых растворов оксидов редкоземельных элементов (Y, Sc, Lu), легированных ионами иттербия

Новикова А.В.¹, Пермин Д.А.²

¹*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

²*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девярых РАН, Нижний Новгород, Россия*

E-mail: anastasia93novikova@yandex.ru

Актуальной проблемой современного материаловедения является разработка методик изготовления лазеров ультракоротких импульсов. Для получения коротких импульсов необходимым условием является использование активных сред с достаточно широкой полосой усиления. Известно, что смеси $\text{Sc}_2\text{O}_3\text{-Y}_2\text{O}_3\text{-Lu}_2\text{O}_3$ формируют твёрдые растворы с кубической решёткой, а нарушение кристаллического поля вокруг активных ионов должно приводить к уширению спектральных линий люминесценции по сравнению с индивидуальными соединениями.

Целью настоящего исследования была разработка методики получения прозрачной керамики на основе смешанных оксидов иттрия, лютетия и скандия с добавкой оксида иттербия методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза с последующим вакуумным спеканием.

Синтез порошков был осуществлён глицин-нитратным способом при термическом иницировании при 500°C . В результате были получены высокодисперсные порошки, состоящие из рыхлых агломератов с пористой структурой.

По результатам рентгенофазового анализа синтезированные порошки кристаллизуются в кубическую структуру биксбиита. Положение рефлексов на рентгенограммах и параметр элементарной ячейки кристаллической решётки смешанных оксидов линейно зависит от состава матрицы и соответствует правилу Вегарда. Положение максимумов полос люминесценции в смешанных оксидах находится в линейной зависимости от состава. Наблюдается увеличение ширины на полувысоте полос люминесценции в твёрдых растворах по сравнению с индивидуальными оксидами с 16 нм для $\text{Yb:Sc}_2\text{O}_3$ до 25 нм для $\text{Yb:}(\text{Y}_{0.75}\text{Sc}_{0.25})_2\text{O}_3$.

В результате свободного вакуумного спекания порошков смешанных оксидов иттрия и лютетия со спекающей добавкой оксида лантана получена серия образцов оптических керамик общей формулой $(\text{Lu}_x\text{Y}_{1-x}\text{La}_{0.05})_2\text{O}_3$, где $x=0.25, 0.45$ и 0.65 . Для спекания прозрачной керамики на основе оксида скандия была разработана методика горячего прессования со спекающей добавкой 1 масс.% LiF. Исследованы основные люминесцентные свойства полученных керамических образцов.

Морфологические особенности агрегации дифосфинового комплекса кобальта на твердой поверхности

Нургалиева Г.Р.¹, Низамеев И.Р.^{1,2}, Стрельник И.Д.², Карасик А.А.², Кадиров М.К.^{1,2}

¹Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия

²Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр
Российской академии наук», Казань, Россия

E-mail: nurguliya92@mail.ru

В современном мире вопрос энергетики стоит довольно остро. Создание альтернативных источников энергии – очень актуальная задача. Перспективной и активно развивающейся областью является развитие водородно-кислородных топливных элементов (ТЭ). Одной из интересных задач в этом направлении является разработка эффективного и, главное, недорогого катализатора окисления водорода и восстановления кислорода.

Современная наука перестраивается в направлении использования органических материалов, экологически чистых и недорогих. Из литературы известно о применении дифосфиновых комплексов никеля с различными заместителями в роли катализатора окисления водорода и восстановления кислорода в ТЭ [1]. Встречаются немногочисленные труды, предполагающие возможность использования для данной цели комплексов на основе других переходных металлов, например, кобальта и железа.

В рамках данной работы методами атомно-силовой микроскопии изучается морфология дифосфинового комплекса кобальта на поверхности графита. Ранее [2] было установлено влияние морфологии дифосфинового комплекса никеля на его эффективность в роли катализатора в рассматриваемой реакции.

Синтез заявляемого дифосфинового комплекса кобальта осуществлялся по методике, описанной в работе [2].

Установлено, что исследуемый комплекс на поверхности высокорентрированного графита образует матрицу агрегатов с сильно развитой поверхностью. Размеры агрегатов колеблются в широком диапазоне: 40-220 нм. Хорошо развитая поверхность катализатора позволяет ожидать от него высокой эффективности.

Список литературы

[1] Yang J.Y., Bullock R.M., Dougherty W.G., Kassel W.S., Twamley B., DuBois D.L., DuBois M.R. // Dalton Transactions. 2010. V. 39. P. 3001-3010.

[2] Kadirov M., Karasik A., Nizameev I., Strelnik I., Kholin K., Kadirov D., Ismaev T., Budnikova Yu., Sinyashin O. // Energy Technol. 10.1002/ente.201700711.

Использование смеси пенообразователей для повышения эффективности обогащения калийных руд

Осипова Е.О., Позняк Н.И.

Институт общей и неорганической химии НАН Беларуси

Минск, Беларусь

E-mail: osipovaelena81@gmail.com

Одной из основных задач при флотационном обогащении сильвинитовой руды является повышение эффективности действия реагентов-собирателей. Применение вспенивателей, сочетающих пенообразующие свойства и способность активировать действие собирателя, как правило, обеспечивает повышение эффективности флотации минеральных частиц: увеличивается извлечение минерала в пенный продукт, повышается скорость флотации, а также снижается расход основного дорогостоящего токсичного собирателя, что в свою очередь решает экономические и технологические проблемы обогатительных фабрик.

В качестве основного объекта исследования использована солянокислая соль технического амина марки «Flotigam S» (Германия, Clariant), используемая на обогатительных фабриках ОАО «Беларуськалий» в зимний период. В качестве вспенивателей использованы сосновое масло (ТУ 13-0281074-263-95) и полиэтиленгликоль ПЭГ- 400 (ТУ 2481-007-71150986-2006).

Таблица 1. Технологические показатели флотации калийной руды смесями солянокислого амина «Flotigam S» (расход 60 г/т) с сочетанием соснового масла и ПЭГ-400 при их различных удельных расходах.

Расход реагентов, г/т		Концентрат, %					Содержание КСІ в хвостах, %
Сосновое масло	ПЭГ	Выход	Содержание КСІ	Извлечение КСІ	Содержание н.о.	Извлечение н.о.	
0	10	25,6	88,6	84,6	1,3	9,0	5,5
5	10	27,3	87,7	89,3	1,3	9,6	3,9
10	10	27,8	88,4	91,7	1,2	9,0	3,1
15	10	28,0	88,2	92,1	1,4	10,1	2,9
20	10	28,5	86,7	92,2	1,4	10,1	2,9
10	0	26,8	89,0	89,0	1,2	8,7	4,0
10	5	27,5	87,0	89,3	1,2	8,9	3,9
10	10	27,8	88,4	91,7	1,2	9,0	3,1
10	15	28,0	88,0	91,9	1,2	9,1	3,0
10	20	28,3	87,1	92,0	1,2	9,2	3,0

Как видно из таблицы, использование в собирательной смеси на основе солянокислого амина комбинации пенообразователей - соснового масла и ПЭГ-400, интенсифицирует флотацию калийной руды. Оптимальный расход, при котором достигаются высокие технологические показатели для соснового масла - 15 г/т руды, для ПЭГ – 10 г/т руды.

Получение пенопластов на основе ПВХ

Паламарчук А.А., Христофорова И.А.

Владимирский государственный университет имени А.Г. и

Н.Г. Столетовых, Владимир, Россия

E-mail: flashlight_on@mail.ru,

Пенопластами считаются материалы с системой изолированных, не сообщающихся между собой ячеек, содержащих газ или смесь газов и разделенных тонкими стенками. В зависимости от исходного полимера, его структуры и объемного веса они обладают разнообразными свойствами: низким объемным весом (от 20 кг/м³), достаточной прочностью, высокими теплоизоляционными, звукоизоляционными и диэлектрическими свойствами, стойкостью к действию влаги и агрессивных сред. [1]

Поливинилхлорид — один из распространенных полимеров, применяемых в технологии строительных пластмасс. Получают его полимеризацией винилхлорида $\text{CH}_2 = \text{CHCl}$. Пенополивинилхлорид представляет собой пластмассу в виде твердой пены с равномерно замкнуто-пористой структурой, заполненной газом; получают ее на основе поливинилхлорида. Выпускается трех марок: жесткий ПВХ-1 и ПВХ-2 и эластичный ПВХ-Э.

Пенопласты на основе поливинилхлорида и его сополимеров можно получать как прессовым, так и беспрессовым методами. В СССР на основе поливинилхлорида в промышленном масштабе прессовым методом изготавливают жесткие пенопласты марок ПВХ-1, ПВХ-2 и ПХА; эластичные — ПВХ-Э. Беспрессовым методом изготавливают жесткие пенопласты марок ПВ-1 и «винипор жесткий» и эластичный — «эластичный винипор».

Прессовый метод был освоен более 30 лет назад и, несмотря на ряд недостатков — высокую трудоемкость, большие энергетические затраты, отсутствие непрерывного производства, наличие громоздких прессов и сложных пресс-форм — до сих пор не утратил своего значения.

Основные достоинства метода — простая, легко регулируемая, не требующая дорогого оборудования технология и возможность получения пеноизделий с высокими физико-механическими показателями и малым водопоглощением. Беспрессовый метод получения пенополивинилхлорида можно осуществить, вспенивая композиции за счёт газов, выделяющихся при разложении газообразователей (пенопласты марок ПВ-1), или насыщая поливинилхлоридную пасту газом под давлением с последующей желатинизацией (винипор жесткий и эластичный). [2]

Список литературы

[1] Комар А.Г. Строительные материалы и изделия: Учеб. для инж.-экон. спец. строит. вузов. — 5-е изд., перераб. и доп. — М.: Высш. шк., 1988. С. 468

[2] Воробьев В.А., Андрианов Р.А. Полимерные теплоизоляционные материалы - М.: Стройиздат, 1972 С. 143-155

Антимикробная отделка целлюлозных материалов

Петрова Л.С., Малышева К.А., Носкова Ю.

Ивановский государственный химико-технологический университет,

Иваново, Россия

E-mail: milafck@gmail.com

Особую актуальность в настоящее время приобретает антимикробная отделка текстильных материалов с использованием серебросодержащих препаратов. Терапевтические свойства серебра доказаны против широкого диапазона микроорганизмов, даже при использовании его в низких концентрациях [1-2]. Применение наночастиц серебра приводит к увеличению количества частиц на единицу поверхности текстильного материала, что позволяет максимизировать антибактериальные эффекты [3].

Целью настоящего исследования является синтез наночастиц серебра, стабилизированных синтетическими полиэлектролитами и разработка на их основе отечественного препарата для биоцидной отделки целлюлозных текстильных материалов.

В качестве восстановителя нитрата серебра был выбран глиоксаль. Для стабилизации гетерогенной системы использовали анионные синтетические полиэлектролиты – производные поликарбоксилатов, катионные-полидиаллилдиметиламмоний хлорид и полигуанидин, концентрацию которых варьировали в интервале от $0,4 \cdot 10^{-5}$ моль/дм³ до $0,4 \cdot 10^{-6}$ моль/дм³.

Проведен анализ спектров фотонной корреляционной спектроскопии, характеризующих размеры образующихся частиц в гидрозолях серебра. Определены эффективные концентрационные параметры системы восстановитель-стабилизатор. Показано, что размер частиц серебра варьируется от 2 нм до 10 нм в зависимости от концентрации восстановителя.

Методом «дисков» определена антибактериальная активность гидрозолей наносеребра по отношению к культурам: *Escherichia coli* и *Staphylococcus aureus*. Установлено, что они оказывают стабильный биоцидный эффект. Высокая антимикробная активность разработанного препарата и сохранение биоцидных свойств на протяжении длительного срока наблюдения позволяют его рекомендовать для антимикробной отделки текстильных материалов.

Список литературы

- [1] Q. Cheng, C. Li, V. Pavlinek, P. Saha, H. Wang// *Applied Surface Science* .2006. №252. – P.4154–4160.
- [2] S.H. Jeong, S.Y. Yeo, S.C. Yi // *Journal of Materials Science*.2005. №40. – P.5407–5411.
- [3] S.Y. Yeo, S.H. Jeong // *Polymer-International*. 2003. №7. – P.1053–1057.

Физико-химические свойства полимерного пленочного связующего

Петрунина Е.С., Камалетдинова С.И., Заббарова Э.И.

Казанский национальный исследовательский технический университет им.

А.Н. Туполева - КАИ, Казань, Россия

E-mail: e-petrunina96@mail.ru

Разработка составов пленочных связующих в настоящее время весьма актуальна [1,2]. Однако ряд жестких требований, предъявляемых к свойствам пленочных связующих, например, по реологии, замедляют развитие научных изысканий в данной области.

Целью исследований предполагалась разработка составов полимерного пленочного связующего с оптимальными физико-механическими свойствами.

Для регулирования свойств связующего были приготовлены составы из разных марок эпоксидных смол в различных соотношениях. Как показал литературный обзор, для получения пленочных связующих необходимы высоковязкие смолы, которые при $T=20\div 25^{\circ}\text{C}$ могли бы находиться в виде эластичной пленки, а при температуре пропитки тканых наполнителей пленочным связующим его вязкость должна находиться в диапазоне $0,4\div 2$ Па·с.

Выбор отвердителя для составов пленочных связующих основан на двух критериях: во-первых, для того, чтобы исключить возможное снижение вязкости составов, необходим порошковый отвердитель, а не жидкий; во-вторых, температура отверждения состава, должна быть выше температуры пропитки. Проведенные испытания реологических свойств полученных композиций, показали, что только часть составов удовлетворяют предъявляемым требованиям по реологии. Вязкость измерялась на ротационном динамическом реометре «Reostress 6000» фирмы «Haake».

Результаты по изучению липкости показали, что композиции способны хорошо удерживаться на поверхности оснастки и отделяться от нее без потери композиции, а также имеют хорошие адгезионные свойства, что обеспечивает межфазное взаимодействие контактирующих слоев ткани.

Далее были проведены исследования на жизнеспособность связующего при тепловом воздействии на динамическом механическом анализаторе «DMA 242 Artemis» («Netzsch»). Из полученных данных было выявлено время (более 4-х часов), в течении которого можно производить пропитку, до того как наступит процесс гелеобразования при $T=90-120^{\circ}\text{C}$.

Список литературы

[1] Истягин С.Е. Роль технологических факторов в формировании стабильности свойств пленочного связующего // С.Е.Истягин, Е.А.Вешкин, В.И.Постнов, Д.И.Коган // Труды ВИАМ. 2016. №5 (41). С.53-60.

[2] Патент 2565177 РФ, МПК С08L3/10 Эпоксидное связующее пленочного типа/ Каблов Е. Н., Чурсова Л. В., Бабин А.Н., Коган Д. И., Панина Н. Н., Гуревич Я. М.- N 2014138715/05, Заяв. 25.09.2014, Оpubл. 20.10.2015.

Придание текстильным материалам функциональных свойств с применением метода дублирования

Полушин Е.Г., Ширманова В.В., Козлова О.В.

Ивановский государственный химико-технологический университет,

Иваново, Россия

E-mail: ovk-56@mail.ru

К инновационным методам придания тканям функциональных свойств относится дублирование различных по природе и свойствам материалов. При этом немаловажное значение имеют как выбранные объекты дублирования, так и полимеры, формирующие межтканевую матрицу. Работа посвящена оценке эффективности применения водных дисперсий отечественных акриловых полимеров для склеивания тканей и придания дублированным материалам дополнительных улучшенных свойств. Нанесение тончайшей плёнки методом ламинирования по верху ткани либо путем специальной пропитки позволяют в процессе отверждения склеить одновременно две ткани и придать композиту свойства дышащих мембран. В работе изучена возможность получения безпористой плёнки - мембраны, с помощью гидрофильных акриловых полимеров, представляющих собой сополимеры метакриловых мономеров, бутилакрилата, бутадиена, винилацетата, акрилонитрила, а в ряде случаев и стирола. Технология дублирования (склеивания) 100% полиэфирной ткани с флисовой или трикотажной тканями предполагала использование термопресса с температурой 150°C и времени воздействия 15 сек. После чего оценивались прочностные характеристики склейки и устойчивость к мокрым обработкам. Из серии исследованных полимеров (рузины, лакротены, ларусы и др.) были получены дублированные материалы. По результатам исследования выбраны наиболее эффективные препараты, одним из которых является новый специально синтезированный отечественный продукт Ларус 21 (ООО «Сван»). Полимерная композиция включала акриловое связующее, акриловый загуститель, функциональные добавки (минеральные наполнители, органические соли и др.). В ряде случаев необходима добавка сшивающих отвердителей, в качестве которых можно использовать безформальдегидные предконденсаты терморезактивных смол, продукты на основе изоцианата, глицидиловых эфиров и др. У этого типа мембраны есть недостатки: в результате того, что эти ткани подвергаются атмосферным воздействиям, водоотталкивающие свойства верхнего материала периодически надо восстанавливать. Аналоги гидрофильных мембран представлены фирмами Sympatex, Ultimex, Sofitex, Cyclone, TransActive и с комбинированными гидрофильно-микропористыми свойствами: типа TriplePoint и Gore-Tex/Sympatex [1].

Список литературы

[1] Dilaver M., Носаоğlu S. M., Soydemir G. // [Journal of Cleaner Production](#), V. 171.2017. P. 220-233.

Вольтамперометрический «электронный язык» для распознавания энантиомеров триптофана с использованием стеклоуглеродных электродов, модифицированных α -, β - и γ -циклодекстринами

Проворова Ю.Р., Зильберг Р.А.

Башкирский государственный университет,

Республика Башкортостан, Уфа, Россия

E-mail: provorova-96@mail.ru

Многие биологически активные вещества (аминокислоты, сахара и др.), существуют в виде оптически активных изомеров (энантиомеров). Аминокислоты, входящие в состав белков, как правило, имеют L-конфигурацию, тогда как D-аминокислоты не участвуют в синтезе белков или даже оказывают неблагоприятное воздействие на живые организмы. Среди аминокислот особый интерес представляет триптофан (Trp) – 2-амино-3-(1H-индол-3-ил)-пропионовая кислота, L-энантиомер которой является предшественником нейротрансмиттера серотонина. Дисбаланс или дефицит L-триптофана могут вызывать хронические заболевания. Для человека триптофан является незаменимой аминокислотой, которая поступает в организм с белками пищи или пищевыми добавками. Поэтому очень важно распознавание и определение энантиомеров триптофана в пищевых продуктах, фармацевтических препаратах, БАДах и живых организмах. Для аналитического определения энантиомеров триптофана в последнее время все чаще применяют электрохимические методы из-за их высокой чувствительности, избирательности и простоты методик.

В настоящей работе изучена вольтамперометрическая сенсорная система для распознавания энантиомеров триптофана на основе трех стеклоуглеродных электродов, модифицированных электропроводящими пленками полиариленфталида, содержащими α -, β - или γ -ЦД. Исходя из литературных данных [1], можно предположить, что такие электроды будут иметь перекрестную селективность по отношению к энантиомерам триптофана. Это позволяет использовать их в качестве хиральных сенсоров в составе сенсорной системы. С использованием методов вольтамперометрии, импедансной спектроскопии и атомно-силовой микроскопии оптимизированы условия модифицирования СУЭ полимерными пленками полиариленфталида, содержащими α -, β - или γ -ЦД. Установлены аналитические характеристики сенсоров, условия регистрации вольтамперограмм и возможности сенсорной системы при распознавании энантиомеров триптофана в лекарственных средствах и пищевых добавках.

Список литературы

[1]. Maistrenko VN, Sidel'nikov AV, Zil'berg RA (2018) Enantioselective voltammetric sensors: new solutions. J Anal Chem 73 P.1–9

Работа выполнена при поддержке РФФ: грант № 16–13–10257.

Разработка новых лекарственных композиций, предназначенных для терапии ревматоидного артрита

Промзелева М.А., Терехова И.В.

*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук,
Иваново, Россия*

E-mail: marija.brusnikina@yandex.ru

Лефлуномид относится к группе базисных препаратов, которые оказывают иммуномодулирующее и противовоспалительное действие и применяются в лечении ревматоидного артрита. Важной характеристикой любого лекарственного вещества является растворимость. Лефлуномид относится ко II классу препаратов в соответствии с биофармацевтической классификационной системой, поскольку плохо растворим в воде. В связи с этим, цель работы заключалась в получении лекарственных форм противоревматоидного препарата с улучшенными биофармацевтическими свойствами (растворимость, скорость растворения, мембранная проницаемость) за счет комплексообразования с инкапсулирующими материалами природного происхождения – циклодекстринами.

Установлено, что циклодекстрины проявляют солюбилизирующий эффект по отношению к лефлуномиду, который обусловлен процессом образования комплексов включения и проникновением гидрофобной части молекулы гостя в полость хозяина. Существенное повышение растворимости в средах, имитирующих биологические жидкости человеческого организма (рН=1.2 и 7.4), наблюдается в присутствии β -циклодекстринов, так как они образуют наиболее устойчивые комплексы включения. Твердые комплексы лефлуномида с β - и гидроксипропил- β -циклодекстринами, предназначенные для перорального введения, были получены методами лиофилизации и механоактивации. Исследование кинетики их растворения в фосфатном и солянокислом буферных растворах показало, что комплексообразование с циклодекстринами в десятки раз увеличивает скорость растворения лекарственного препарата. Таким образом, комплексы лефлуномида с β - и гидроксипропил- β -циклодекстринами могут быть предложены как более эффективные лекарственные препараты.

Исследование свойств огнетеплозащитных материалов, содержащих алюмосиликатные микросферы

Пудовкин В.В., Каблов В.Ф., Новопольцева О.М., Кочетков В.Г.

Волжский политехнический институт (филиал) ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет», Волжский, Россия

E-mail: vg.kochetkov@mail.ru

Создание эластомерных огнетеплозащитных материалов (ОТЗМ) является сложной и многофакторной задачей, решение которой связано с

использованием различные системы целевых добавок, основным недостатком которых является повышение какого-либо свойства при значительном ухудшении остальных показателей [1]. Работа ОТЗМ осуществляется в экстремальных условиях – при повышенных температурах и давлениях и, часто, под действием скоростных потоков, вызывающих эрозионное разрушение материала.

Одним из перспективных направлений решения данной проблемы является использование минеральных наполнителей (перлит, карбид кремния, нитрид бора) [2] и микроволокнистых минеральных наполнителей (углеродных, базальтовых, каолиновых микроволокон), образующих «сетку» повышающую эрозионную стойкость материала. Однако введение таких добавок связано как с ухудшением физико-механических характеристик, так и теплофизических параметров.

Объектом исследования являлись вулканизаты на основе этиленпропилендиенового каучука с серной вулканизирующей группой. Для снижения плотности и теплопроводности исследуемых композиций, а, следовательно, повышения их эффективности, предлагается использовать полые алюмосиликатные микросферы (МСФ) со средним диаметром 20-100 мкм.

Прочность вулканизатов, содержащих МСФ выше, чем у образца, не содержащего микросферы, на 16-25 %, что может быть связано с возникновением дополнительных поверхностно-адсорбционных связей с каучуковой матрицей [3].

Для оценки огне- и теплостойкости образцов в соответствии с разработанной методикой на поверхности образца создавалась температура порядка 2000 С. При введении в эластомерную композицию микросфер, время прогрева увеличивается практически на 15-35 %. Потеря массы образцов снижается на 18-36 %.

Список литературы

- [1] Каблов В.Ф. // Каучук и резина. 1997. № 1. С.8-10
- [2] Каблов В.Ф., Новопольцева О.М., Кочетков В.Г. и др. // Известия ВолгГТУ. Сер. Химия и технология элементоорганических мономеров и полимерных материалов. 2016. № 4 (183). С. 46-60.
- [3] Каблов В.Ф., Новопольцева О.М., Кочетков В.Г. и др. // Журнал прикладной химии. 2017. Т. 90, вып. 2. С. 236-240.

Влияние местоположения освещения на величину квантового выхода

Пузикова Д.С., Хусурова Г.М., Дергачева М.Б.

Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В.Сокольского, Казахстан

E-mail: d.puzikova@ifce.kz

Степень преобразования падающего излучения является одной из главных характеристик фотоанода. Данная величина зависит от физико-химических характеристик каждого электрода, выбора редокс системы, а также от конструкции (и геометрии) фотоэлектрохимического элемента. Было изучено влияние местоположения освещения на величину квантового выхода. В качестве фотоанода использовали тонкие пленки CdSe, электроосажденные на FTO по методике [1]. Исследования были проведены в трехэлектродной ячейке в электролите 0,3М Na₂SO₃. В ходе проведения исследований было отмечено, что величина фототока при прямом освещении электроосажденной пленки резко возрастает, и, как следствие, увеличивается значение квантового выхода. Известно, что в случае массивных полупроводников электрическое поле области пространственного заряда разделяет фотогенерированные заряды, препятствуя их рекомбинации и определяя направление их транспорта либо в электролит, либо в проводящую подложку. Именно этот процесс объясняет разницу между значениями квантового выхода при освещении со стороны CdSe (около 0,60) и стекло/FTO (около 0,052) (рис. 1). Таким образом, изменяя местоположение освещения (с тыльной стороны стекло/ FTO на фронтальную сторону CdSe) была увеличена степень преобразования до 60%.

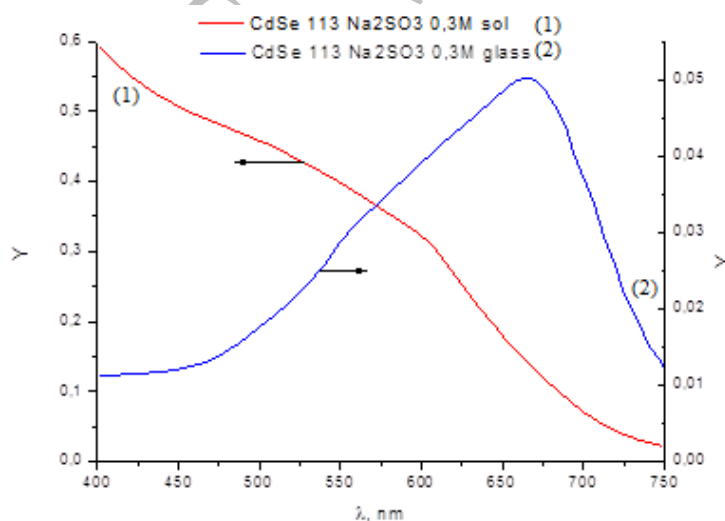


Рис. 1 – Квантовый выход для CdSe-фотоанода при освещении со стороны CdSe (1) и стекло/FTO (2)

Список литературы

[1] Dergacheva M.B., Puzikova D.S., Khussurova G.M., Nemkaeva R.R., Mit' K.A. Sodium lignosulphonate as an additive for electrodeposition of CdSe Nanofilms on FTO/glass // *Materials Today: Proceedings* 4 (2017) pp. 4572-4581.

Исследование гидродинамических процессов в кристаллизаторе тонкослябовой МНРС

Пышкин Д.А., Мялкин И.В., Сафонов В.М.
Выксунский филиал НИТУ "МИСиС", Выкса, Россия
E-mail: i.v.myalkin@gamil.com

Развитие электросталеплавильного производства в настоящее время основано на применении инновационных техники и технологии, позволяющих получать деляль широкий круг применений, ранее закрывавшихся конвертерным производством. Большим шагом в развитии электросталеплавильных заводов стало применение тонкослябовых машин непрерывной разливки стали (МНРС), что позволило повысить общую эффективность производства. Разливку стали на тонкослябовой МНРС электросталеплавильного цеха ЛПК ВМЗ проводят через погружной стакан, который обеспечивает подвод двух плоских струй металла под уровень расплава. Актуальным является вопрос выбора оптимальной глубины его погружения. При снижении глубины погружения развивается процесс волнообразования и вихреобразования на границе шлак-металл, что способствует вовлечению в жидкую фазу частичек шлаковой смеси. При увеличении глубины погружения возрастает доля неметаллических включений и газовых пузырей, захваченных в заготовку, и растёт вероятность переохлаждения зеркала металла. Исследование процесса проводили на холодной модели, которая обеспечивала расход жидкости с определённой скоростью, и с помощью компьютерной модели. Модель кристаллизатора изготовили в масштабе 1:2 к натурному образцу. Конструкция и технология изготовления модели позволяет изменять ширину сляба от 1400 до 900 мм (натура). В качестве рабочей жидкости, моделирующей расплав стали, выбрана вода при температуре 18–25°C. В компьютерной среде ANSYS CFX 15.0.7 были разработаны компьютерные модели, которые обеспечивают расчет скорости и направления потоков жидкости в кристаллизаторе. Моделирование позволило определить направление и скорость характерных потоков в кристаллизаторе тонкослябовой МНРС. Сравнение результатов компьютерного и физического моделирования позволило верифицировать расчётные модели и использовать их для совершенствования тонкослябовой разливки (рис.1).

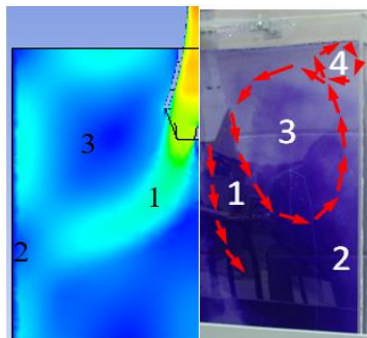


Рис.1. Сравнение компьютерной (слева) и физической (справа) моделей.

Тиражирование технологии получения рафинированного углеводородного растворителя с заданным интервалом кипения на основе отечественного сырья

Разинов А.Л., Чигорина Е.А., Убаськина Ю.А., Рябенко В.С., Ковтун И.Д.
НИЦ «Курчатовский институт» - ИРЕА,
Москва, Россия
E-mail: razinov.anatoly@yandex.ru

Нефтяные органические углеводородные растворители (нефрасы) получают при перегонке нефтепродуктов. Являясь производными материала природного происхождения (нефти), нефрасы могут содержать в себе большое количество ароматических соединений и соединений серы. Безопасность применения нефрасов напрямую зависит от содержания в них ароматических соединений и соединений серы. Основные требования, предъявляемые к нефтяным органическим растворителям – необходимость узкого интервала кипения, слабый запах, низкое содержание ароматических соединений (или их отсутствие), а также низкая токсичность [1]. Наиболее известными зарубежными аналогами растворителя, удовлетворяющими вышеуказанным требованиям, являются дорогостоящие нефтяные растворители фирмы «Arrow» [2], известная линейка растворителей Lotoxane. На российском рынке отечественные нефрасы с такими характеристиками не представлены.

В лаборатории заказного органического синтеза НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА была разработана технология получения рафинированного углеводородного растворителя с заданным интервалом кипения на основе отечественного сырья. Особенностью данной технологии является возможность ее тиражирования на производственные площади нефтеперерабатывающих заводов, предприятий по добыче нефти и предприятий других отраслей (автомобильной, лакокрасочной, машиностроительной), нуждающихся в недорогом рафинированном углеводородном растворителе с заданным интервалом кипения на основе отечественного сырья.

Полученный углеводородный растворитель сравним по свойствам с зарубежным растворителем Lotoxane Fast (по внешнему виду, слабому запаху, точке кипения, температуре вспышки) и имеет преимущество по стоимости в 1,5 – 2 раза дешевле за литр по сравнению с зарубежным аналогом. В сочетании с более низкой стоимостью полученного растворителя, по сравнению с зарубежным аналогом, малой токсичностью и допустимой температурой вспышки, данный нефтяной углеводородный растворитель является оптимальным при применении в бытовых и промышленных целях, а применяемая технология – тиражируемой для нужд любого предприятия.

Список литературы

- [1] Директива 1999/13/ЕС Европейского Парламента и Совета от 11.03.99.
[2] Arrow Solutions. Manufacturers of commercial cleaning and maintenance products. URL: <http://www.arrowchem.com>. Дата обращения: 01.12.17

Влияние полимерных добавок на устойчивость пен растворов индивидуальных и бинарных смесей анионных и неионогенных ПАВ

Райко Е.С., Гусак Э. Н., Александрина А. Ю.

*ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет»,
Волжский политехнический институт (филиал)*

Волжский, Россия

E-mail:001elmira@mail.ru

Пенообразующая способность является важной характеристикой различных продуктов на основе ПАВ - наличие у средств для мытья посуды быстро генерируемого большого объема пены и ее устойчивость во время моющего цикла обеспечивает стабильный интерес потребителей к продукции. В настоящей работе исследовано влияние полимерных добавок на стабильность пен растворов смесей анионных и неионогенных ПАВ с целью выявления потенциала снижения себестоимости готовой продукции без ухудшения профиля пенообразования.

Объектами исследования являлись следующие поверхностно-активные вещества: алкилполигликозид C₈-C₁₀, алкилполигликозид C₁₂-C₁₄, диэтаноламид, алкилдиметиламиноксид, альфа-олефин сульфонат натрия, *лаурет сульфат натрия*, кокамидопропилбетаин. В индивидуальные и бинарные смеси указанных ПАВ вводили водорастворимые полимеры.

Изучены следующие характеристики: концентрация (ручной рефрактометр), pH (стационарный pH-метр), высота столба пены (прибор Росс-Майлса), вязкость (вискозиметр Brookfield DV2T), плотность (ареометр), стабильность высоты столба пены.

Пенообразующую способность определяли методом Росс-Майлса. Согласно этому методу пенообразующую способность характеризуют начальной высотой столба пены (H₀), образующейся в цилиндре диаметром 50 мм при падении струи раствора с высоты 900 мм на 50 мл предварительно помещенного в цилиндр раствора ПАВ. Устойчивость пены оценивали как отношение высоты пены через пять минут (H₅) к начальной высоте H₀.

Выявлено, что добавление 0,1-2% по массе водорастворимого полимера к базовым ПАВ обеспечивает синергетический эффект в отношении пенообразования и способствует стабильности пены моющего состава. На основании проведенных экспериментальных исследований разработана рецептура композиций ПАВ, апробация которых проведена на производственной площадке ТД «Грасс».

Список литературы

- [1] Абрамзон А. А. Поверхностно-активные вещества: Свойства и применение. - 2-е изд., перераб. и доп. - Л.: Химия, 1981.-243 с.
- [2] ГОСТ 22567.1-77 СМС. Метод определения пенообразующей способности.

Исследование активизирующего влияния многостенных углеродных нанотрубок на процессы получения гуминовых кислот в условиях микроволнового воздействия

Рапиков А.Р., Жакина А.Х., Василец Е.П., Бейсенбаев А.Р.
ТОО «Институт органического синтеза и углехимии РК», Караганда,
Казахстан
E-mail: r.alisher.r@mail.ru

К числу малоизученных и перспективных методов интенсификации технологических процессов получения гуминоминеральных композитов с активированными формами углеродных нанотрубок относятся физические методы использования микроволнового излучения. Взаимодействие микроволн с углеродными нанотрубками (УНТ) является перспективной темой и обладает высоким потенциалом для практического применения результатов исследования. Для осуществления разрабатываемых процессов иммобилизации использована бытовая микроволновая печь с рабочей мощностью 350 Вт.

Для изучения влияния микроволнового излучения на процесс получения композитов с активированными формами углеродных нанотрубок использованы их смеси гуминовыми, подвергавшихся различной модификации. В работе использованы окисленные угли Шубаркольского месторождения и выделенные из них гуминовые кислоты. Воздействие микроволнового излучения (МВИ) основывается на процессе нагрева смесей гуминовой кислоты и активированных углеродных нанотрубок в результате поглощения ими энергии МВИ. Температура в микроволновой печи в зависимости от времени облучения достигала 60-100°C. В процессе реакции происходило обезвоживание смеси с образованием гуминового композита. Ход реакции контролировали кондуктометрическим методом, определяя изменение содержания кислых групп в каждом образце.

Для изучения влияния микроволнового излучения на процесс получения гуминовых кислот, модифицированных МУНТом, рассмотрено влияние изменения времени МВИ (5, 10, 15 минут) при соотношении исходных компонентов ГК:МУНТ = 10:1 на процесс получения композитов. Варьируя время МВИ, получали образцы с содержанием кислых групп 3,43-3,46 ммоль-экв/г. Установлено, что наилучший результат (3,95 ммоль-экв/г) показывает образец со временем облучения микроволнами 5 минут. Выход продуктов составил 60-68%.

Работа выполнена при поддержке программы 0004ПЦФ-14 МОН РК.

Подбор антиоксиданта для получения очищенного фосфотидилхолина

Ровкина К.И.^{1,2}, Власов С.С.^{1,2}

¹*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Томск, Россия*

²*Сибирский государственный медицинский университет, Томск, Россия
E-mail: rki91@bk.ru*

В фармацевтической промышленности фосфолипиды находят применение в качестве гепатопротекторов. Так же они являются компонентами комплексных препаратов для парентерального питания[1]. Высокоочищенный фосфатидилхолин обладает низкой коммерческой доступностью, одной из причин которого является низкий выход готового продукта. Помимо этого, фосфатидилхолин сильно подвержен процессам окисления, в результате чего требуются особые условия при получении и хранении. В связи с этим актуальным является разработка отечественной технологии получения фосфатидилхолина из порошка яичного желтка для фармацевтического применения.

Разрабатываемая нами технология включает в себя 4 основные стадии: обезжиривание исходного сырья (сухого желтка), экстракция обезжиренного желтка раствором антиоксиданта в органическом растворителе, очистка извлечения от сопутствующих веществ путем двукратного осаждения фосфолипидов, выделение фосфатидилхолина из фосфолипидного комплекса методом колоночной хроматографии.

Одним из наиболее важных шагов для решения поставленной проблемы является использование антиоксиданта в процессе выделения фосфатидилхолина для увеличения выхода готового продукта, так как в процессе выделения чистого продукта, значительная его часть подвергается окислению. Поэтому нами проведен подбор наиболее эффективного антиоксиданта. В качестве исследуемых антиоксидантов были выбраны рибофлавин, никотиновая кислота и никотинамид. В результате проведенных исследований получены данные по выходу фосфотидилхолина. При использовании рибофлавина - $2,34 \pm 0,2\%$, никотиновой кислоты - $4,12 \pm 0,2\%$ и никотинамида - $6,33 \pm 0,3\%$.

Таким образом, нами был определен наиболее эффективный антиоксидант - никотинамид, максимально повышающий выход очищенного фосфотидилхолина для фармацевтического применения.

Список литературы

[1] Zeisei S.H. // The Journal of the American College of Nutrition. 1992. Vol. 11. P. 473–481.

Разработка нового антигипертензивного лекарственного средства на основе 1-о-гесадецил-2-о-металкарбамоилглицерина и исследование его антигипертензивной активности

Ровкина К.И.^{1,2}, Власов С.С.^{1,2}

¹*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия*

²*Сибирский государственный медицинский университет, Томск, Россия*
E-mail: rki91@bk.ru

По данным всемирной организации здравоохранения в США, Канаде и странах Европейского содружества гипертоническая болезнь регистрируется более чем у 10% населения в возрасте старше 40 лет. В мире, гипертонией страдают 1,2 миллиарда людей, это самая распространенная причина смертности. Основной целью данного исследования является разработка технологии получения лекарственного средства (ЛС) на основе 1-О-гексадецил-2-О-метилкарбамоилглицерина и исследование его антигипертензивной активности.

Лекарственное средство представляет собой твердые желатиновые капсулы, заполненные гранулами, которые получали методом структурной грануляции на приборе псевдооживленного слоя. Гранулы состоят из действующего вещества и определенного набора вспомогательных веществ, которые обеспечивают оптимальные технологические и фармацевтические свойства. Метод структурной грануляции был использован для повышения сыпучести смеси. В связи с этим, для получения гранулята, удовлетворяющего всем требованиям проводился подбор оптимальных параметров гранулирования и изучение их влияния на свойства гранул. Основными из них являются температура, скорость подачи увлажнителя, расход подаваемого воздуха в форсунку, и так далее. Далее производили наполнение полученными гранулами желатиновых капсул. Исследование специфической активности ЛС проводилось на лабораторных животных, крысах и кроликах. Исследование включало определение зависимости доза-эффект, определение видовой чувствительности крыс и кроликов к действию ЛС, сравнение антигипертензивного эффекта ЛС и референтного препарата по силе и длительности гипотензивного действия.

В результате была разработана оптимальная технология получения лекарственного средства, а так же проведены исследования по изучению специфической активности.

Проведенные исследования показали, что полученное по разработанной технологии лекарственное средство обладает выраженным и продолжительным гипотензивным эффектом.

УФ - чувствительные полититаноксид-содержащие терполимеры, как основа материалов с переключаемым режимом смачивания

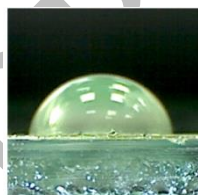
Рябкова О.А., Саломатина Е.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

E-mail: riabkova_oa@mail.ru

Известно, что для порошкообразного TiO_2 , диспергированного в различных матрицах, характерен УФ-индуцированный одноэлектронный переход $Ti^{4+} + e^- \rightleftharpoons Ti^{3+}$ с квантовым выходом $\sim 17\%$. Это явление обуславливает изменение оптических и поверхностных характеристик таких композитов. Материалами с более высоким квантовым выходом ($>50\%$) перехода $Ti^{4+} + e^- \rightleftharpoons Ti^{3+}$ являются оптически прозрачные полимерные композиты, содержащие наноструктурированный полититаноксид (ПТО) в органической матрице полигидроксиэтилметакрилата (поли(ГЭМА)) [1].

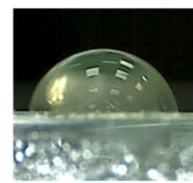
Целью работы явилось исследование поверхностных свойств органо-неорганических ПТО-содержащих терполимеров путём измерения краевого угла смачивания их поверхности полярным и неполярным растворителями в процессе УФ-воздействия. Впервые синтезированы оптически прозрачные материалы ПТО в органических матрицах на основе сополимеров ГЭМА с винилбутиловым эфиром, бутилметакрилатом (БМА), акрилонитрилом (АН), виниловым эфиром версатиковой кислоты, N-изобутоксиметакриламидом, октафторпентилакрилатом и 3-метакрилоксипропилтриметоксисиланом при различных мольных соотношениях. Выявлено, что терполимеры ПТО-ГЭМА-БМА и ПТО-ГЭМА-АН демонстрируют ярко выраженный контролируемый во времени переход $Ti^{4+} + e^- \rightleftharpoons Ti^{3+}$, и, соответственно, «переключаемый» режим смачивания, который проявляется как снижение угла смачивания при УФ-облучении и восстановление его исходного значения после прекращения облучения. В полимерной матрице ПТО-ГЭМА-АН угол изменяется в пределах $86 \rightleftharpoons 11^\circ$, что говорит о наличии эффекта фотоиндуцированной супергидрофильности. Разработанная композиция перспективна для создания на её основе самоочищающихся поверхностей.



0 минут УФ



120 минут УФ



Материал после окончания УФ-облучения с изначальной прозрачностью

Рис 1. Фото капель воды, нанесённых на терполимер [ПТО]:[ГЭМА]:[АН].

Список литературы

[1] E.V. Salomatina, N.M. Bityurin, M.V. Gulenova, T.A. Gracheva, M.N. Drozdov, A.V. Knyazev, K.V. Kir'yanov, A.V. Markin, L.A. Smirnova, *Journal of Materials Chemistry C*, **2013**, 1, 63-75.

Разработка моноинструментального экспресс-метода для диагностики полимерных мембран на основе атомно-силовой микроскопии

Сазанова Т.С., Воротынцев И.В.

Нижегородский государственный технический университет

им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия

E-mail: yarymova.tatyana@yandex.ru

Современные проблемы производства высокочистых веществ (жидкостей и газов) могут быть решены с применением мембранной технологии, которая включена в перечень критических технологий, отнесенных к приоритетным направлениям развития науки и техники XXI века. И это закономерно, поскольку мембранные процессы характеризуются низкой стоимостью, простым аппаратным оформлением, малой энергоемкостью и высокой эффективностью разделения.

Мембранные методы разделения жидких и газообразных сред базируются на разных принципах разделения и механизмах переноса вещества, но все они имеют общий фрагмент системы – мембрану. Область применения мембраны определяет ее химическая природа, структура и функциональные свойства.

При создании высокоэффективных мембран важным аспектом является выбор материалов с оптимальным набором свойств, обеспечивающих высокую эффективность и экономичность того или иного процесса. В качестве материала для изготовления мембран чаще всего используют полимеры. Важным этапом разработки и производства полимерных мембран является контроль свойств создаваемых материалов в разных пространственных масштабах.

В традиционном исполнении этап контроля качества включает в себя ни один, а несколько методов и подходов, которые в комплексе затрачивают очень много времени и тем самым «тормозят» процесс разработки и производства этих материалов. Кроме того следует учитывать, что методы диагностики должны быть неразрушающими, но при этом информативными и высокоточными. При применении комплекса разных методов контроля чаще всего приводит к нарушению этих условий. Поэтому представляется актуальной задача разработки нового метода диагностики полимерных мембран, в котором будет задействован только один вид аналитического оборудования, который в свою очередь будет отвечать всем необходимым требованиям.

В основе предлагаемого экспресс-метода контроля полимерных мембран на стадиях разработки и производства лежит метод атомно-силовой микроскопии (АСМ).

Метод АСМ является очень перспективным методом диагностики полимерных мембран, поскольку позволяет характеризовать определяющие свойства мембран, и тем самым оценивать и прогнозировать остальные свойства без применения дополнительных методов контроля с высоким разрешением, точностью и воспроизводимостью без разрушения образца.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 15-19-10057.

Ингибирование при пиролизе синтетических углеводородов

Самсоненко И.А.

НИЦ «Газопереработка», Москва, Россия

E-mail: sam.il2017@yandex.ru

Одной из основных проблем нефтегазохимической отрасли в России является дефицит мощностей для производства мономеров. Именно поэтому процесс пиролиза является в настоящее время одним из наиболее актуальных и динамично развивающихся процессов нефтегазопереработки.

В работе [1] показано что при пиролизе синтетической бензиновой фракции наблюдаются повышенные выходы низших олефинов, для чего подобран комбинированный ингибитор и его концентрация на основе серо- и оловосодержащих соединений для пиролиза GTL-бензина, который значительно уменьшает образование кокса на стенках реактора.

Стоит отметить, что сочетание технологии Фишера–Тропша с традиционным процессом термического пиролиза при реализации имеет определенные преимущества: во-первых, использование природного газа для получения нефтехимической продукции как альтернативы нефти. Во-вторых, повышенные выходы низших олефинов и уменьшение коксообразования при пиролизе синтетических бензиновых фракций снижают удельный расход синтетической нефти на тонну олефинов [2].

Исследование процесса термического пиролиза углеводородов проводили в лабораторной установке проточного типа, в качестве сырья использовалась модельная смесь эквивалентная синтетической бензиновой фракции.

В результате проведенных экспериментов, выявлено, что добавки растворов солей олова и бора при пиролизе алкановых углеводородов, существенно снижают отложения кокса. Для подавления коксообразования при высокотемпературном пиролизе наиболее эффективными являются спиртовые растворы, которые снижают коксообразование на 75%.

Уменьшение коксообразования снизит количество и длительность остановок печей для регенерации, что напрямую влияет на операционные затраты производства.

Список литературы

- [1] Кондратенко А.Д., Карпов А.Б., Жагфаров Ф.Г., Козлов А.М. Использование синтетической бензиновой фракции в качестве сырья для пиролиза // в сб. Переработка углеводородного сырья. Комплексные решения 2016. С. 132-133.
- [2] Карпов А.Б., Мещерин И.В., Лapidус А.Л., Жагфаров Ф.Г., Кондратенко А.Д. Оценка эффективности процесса пиролиза с использованием GTL-бензиновой фракции // Нефтегазохимия. 2016. № 1. С. 14-18.

Перспективные сорбенты для выделения гелия адсорбционными методами

Самсоненко И.А.

НИЦ «Газопереработка», Москва, Россия

E-mail: sam.il2017@yandex.ru

По разным оценкам, от четверти до трети мировых разведанных запасов гелия сосредоточено в Российских нефтегазовых месторождениях. Гелий в уникальных концентрациях (0,15-1 %) содержится в природном газе месторождений Восточной Сибири и Республики Саха (Якутия).

В настоящее время во всем мире для промышленного выделения гелия из природного газа используют криогенную технологию, основанную на методе низкотемпературной конденсации и последующей ректификации компонентов. Основной недостаток криогенного способа получения гелия – большие энергетические затраты на охлаждение и сжижение компонентов природного газа.

Отличительной особенностью гелия является исключительно высокая проникающая способность, обеспечивающая возможность применения на практике мембранных технологий для процессов разделения гелийсодержащих газовых смесей. Гелий хорошо проникает через кварцевое стекло. Но кварц – минерал очень тугоплавкий, поэтому изготовление тонких кварцевых трубок или пластин – весьма трудоемкая операция, а их хрупкость ставит под сомнение надежность сепарационных агрегатов на такой основе.

В качестве мембранных материалов предложено использовать полые стеклокристаллические алюмосиликатные микросферы - ценосферы, являющиеся микросферическим компонентом летучих зол и образующиеся в процессе сжигания угля. Такой некриогенный способ обогащения гелием смеси аналогичен методу короткоциклового безнагревной адсорбции — PSA- процессу [1]. Современное производство позволяет получать большие объемы микросфер различного состава.

Популярность микросфер объясняется их уникальными свойствами, в частности, оптимальным соотношением площади поверхности к занимаемому объему. Шарообразная форма наполнителя означает, что для увлажнения его поверхности потребуется меньшее количество жидких компонентов производимой продукции (смола, отвердителя, модификатора, растворителя и т.д.), чем для формового наполнителя иной, отличной от сферы формы. Применение полых сфер позволяет существенно облегчать производимые композиционные материалы, улучшать их теплоизолирующие и звукопоглощающие свойства. В ряде случаев химический состав микросфер придает им уникальные свойства огнезащитных, стойких и прочных материалов.

Список литературы

[1] Карпов А.Б., Козлов А.М. Разработка адсорбционно-селективных технологий выделения гелия. - В сб.: «Нефть и газ – 2015». - М.: РГУ нефти и газа имени И.М. Губкина, 2015. 161 с.

Датчики аммиака на основе тонких пленок полианилинов

Сафаргалин И. Н., Муллагалиев И. Н., Салихов Р. Б.
Башкирский государственный университет, Уфа, Россия
E-mail: idrissafargalin@gmail.com

Наибольшее распространение получили датчики с органическими полимерными сорбентами [1] и с неорганическими сорбентами на основе оксидов металлов. Приборы для измерения концентрации аммиака востребованы в производствах, где рабочая среда имеет нестабильную концентрацию аммиака. Основное направление исследований направлено на поиск новых чувствительных к аммиаку веществ. Окислительно-восстановительные и кислотно-основные переходы между формами ПАНИ, а также быстрое и обратимое установление равновесия позволяют конструировать на базе полимера различные типы сенсоров [2-3].

На стеклянную подложку методом термического распыления в вакуумной камере были нанесены алюминиевые контакты с зазором 200 мкм. В области зазора методом центрифугирования была сформирована тонкая пленка производного полианилина, толщина которой составляла величину порядка 1 мкм. Так же были исследованы нерастворимые производные полианилина, тонкие пленки которых были нанесены в область зазора вакуумным напылением из ячейки Кнудсена.

Были измерены зависимости электропроводности полученных образцов от концентрации паров аммиака в воздухе. С ростом концентрации NH_3 проводимость пленок возрастала, что приводило к увеличению выходного токового сигнала датчика. К достоинствам полученных абсорбционных датчиков NH_3 на основе пленок полианилина следует отнести малый гистерезис. Судя по полученным результатам, чувствительность изготовленных образцов датчиков недостаточно высокая, поэтому требуются дополнительные исследования по улучшению их характеристик.

Список литературы

- [1] Gadiev R.M., Lachinov A.N., Salikhov R.B., Zhdanov E.R. Smart polymers as basic for bio-, chemical and physical sensors // NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security / Edited by J. Vonca , S. Kruchinin. 2014. P. 243-256.
- [2] Салихов Р.Б., Лачинов А.Н., Рахмеев Р.Г., Гадиев Р.М., Юсупов А.Р., Салазкин С.Н. Химические сенсоры на основе нанополимерных пленок // Измерительная техника. 2009. № 4. С. 62-64.
- [3] Салихов Р.Б. Полимерная электроника // В сборнике: Актуальные вопросы университетской науки. Сборник научных трудов. Уфа. 2016. С. 198-203.

Концентрирование ксенона из природного газа методом газогидратной кристаллизации

Сергеева М.С., Малышев В.М., Петухов А.Н., Воротынцев В.М.
*Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е.
Алексеева, Нижний Новгород, Россия
E-mail: Sergeeva.m.s@rambler.ru*

Содержание ксенона в воздухе составляет 0,000009 об. % [1]. В природном углеводородном газе содержание ксенона составляет 0,15 об. %, что на 4 порядка больше, чем в воздухе [2]. В настоящее время ксенон извлекают из жидкого кислорода в процессе ректификации воздуха, путем промывки газообразной смеси промывочной жидкостью, при использовании методов сжижения газов, с помощью фракционированной конденсации, мембранной технологии. Существенными недостатками перечисленных методов являются сложность аппаратного оформления и низкая эффективность разделения газов. Предложен способ концентрирования ксенона из природного газа методом газогидратной кристаллизации.

В ходе газогидратной кристаллизации происходит перераспределение компонентов газовой смеси между газовым гидратом и газовой смесью. Газогидратная кристаллизация проводится в несколько стадий с целью увеличения коэффициента разделения. Преимуществами метода газогидратной кристаллизации являются низкие энергозатраты, возможность осуществления процесса при температурах около 0 °С, высокая эффективность разделения газовых смесей за счет большого коэффициента разделения, относительно простое аппаратное оформление. Благодаря клатратной структуре, данная технология позволяет концентрировать большие объемы газа в небольшом объеме газового гидрата, например, 1 м³ газового гидрата ксенона при 273 К содержит 167 м³ газа Xe.

Целью работы является определение коэффициентов разделения для трех- и четырехкомпонентных газовых смесей, состав которых приближен к составу природного газа.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-79-20286).

Список литературы

- [1] Godish, T. Air quality / T. Godish, W.T. Davis, J.S. Fu // CRC Press. – 2014. – 542 p.
- [2] Способ получения ксенонового концентрата из природного горючего газа, продуктов его переработки, включая техногенные отходящие газы и устройство для его реализации (варианты): пат. 2466086 Рос. Федерация: МПК C01B23/00B01D53/00 / В. П. Сметанников, А. Н. Орлов, Н. Н. Малинин, О. П. Семенова; заявитель и патентообладатель. – № 2010105321/05; заявл. 16.02.2010; опубл. 10.11.2012.

Коррозионная стойкость алюминидов-железа на стальной подложке

Проничев Д.В., Серов А.Г., Артемьев Н.А., Кривченко Н.В.
 Волгоградский государственный технический университет,
 Волгоград, Россия
 E-mail: pronichev@vstu.ru

Алюминиевые покрытия на стальных подложках обеспечивают уникальные свойства благодаря образованию интерметаллидных соединений системы Fe–Al, обладающих коррозионной и окислительной стойкостью, низкой плотностью [1].

Для коррозионных испытаний было подготовлено три образца. На образце №1 коррозионному воздействию подвергалось только интерметаллидное покрытие, а остальные поверхности были защищены слоем эпоксидного компаунда. У образца №2 подвергались коррозии торцевые поверхности интерметаллидного покрытия и стали, а боковые защищались слоем эпоксидного компаунда. У образца №3 защита эпоксидным компаундом не использовалась.

Испытания на коррозионную стойкость проводили в соответствии с ГОСТом 9.908-85 в среде, имитирующей воздействие влажной приморской атмосферы в течение 90 суток.

На всех образцах были обнаружены язвенные коррозионные поражения в местах контакта среды с подложкой. На интерметаллидном покрытие следов коррозии не обнаружено.

Для определения стойкости материала к воздействию окружающей среды проводили измерение массы образца во время эксперимента.

В процессе исследования масса образцов изменялась крайне незначительно в пределах погрешности измерений (рис. 1), что свидетельствует о близости скоростей процессов переноса вещества, связанных с коррозионным разрушением металла и осаждением продуктов коррозии.

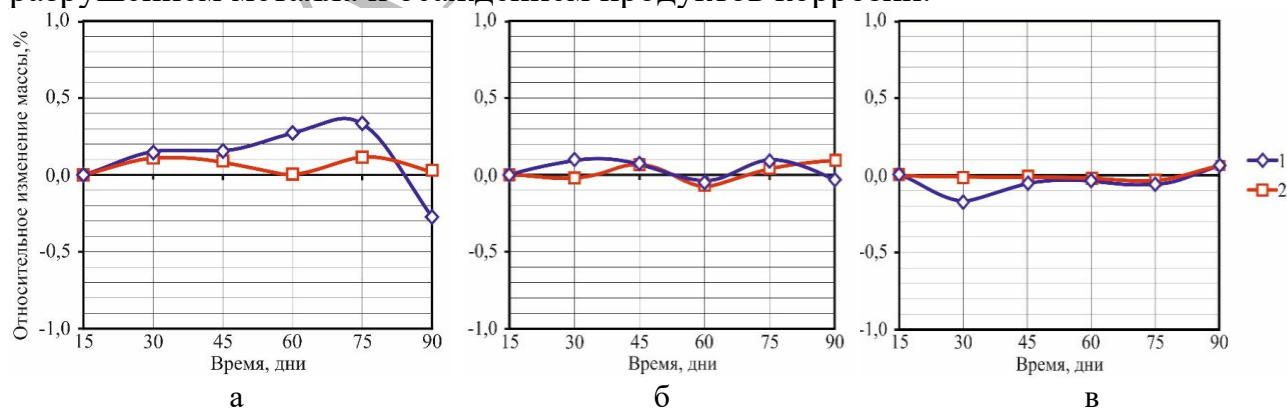


Рис. 1. Относительное изменение массы образцов №1 (а), №2 (б) и №3 до (1) и после отчистки (2).

Список литературы

[1] Проничев, Д. В. Investigation on the Corrosion Resistance of Al-Steel Laminated Composite / Д. В. Проничев, Л. М. Гуревич, М. Д. Трунов, В. М. Ястребов // Contemporary Engineering Sciences. - 2015. - Vol. 8, No. 23. - С. 1083-1090.

Абразивное изнашивание слоистых металло-интерметаллидных композитов системы Ti-Fe

Слаутин О.В., Серов А.Г., Коваль Н.Р., Кривченко Н.В.
 Волгоградский государственный технический университет,
 Волгоград, Россия
 E-mail: slautin@vstu.ru

Испытание образцов на абразивное изнашивание проводили при температурах 20 и 500°C, использовали разработанную в ВолГТУ [1] лабораторную установку. Исследования проводили на 9-слойных образцах состава титан ВТ1-0 + сталь 08кп (титановые слои - снаружи), сталях У9А и 40ХСМФ.

Таблица 1. Результаты испытаний образцов на абразивное изнашивание.

Образец	Потеря объема ΔV , мм ³		Прирост/убыль износостойкости	Твердость	
	20 °С	500 °С		HRC	H, ГПа
СМИК	1,503	1,267	+16 %	-	Интерметаллид: 6-7,8 (7,5-7,8)* Железо: 2,4-2,8 (2,4-2,8)*
СМИК после закалки	1,427	1,295	+9 %	-	Интерметаллид: 7,1-8,2 (7,6-7,9)* Железо: 2,5-2,9 (2,5-2,8)*
Сталь У9А	1,071	1,199	-12 %	55 (45)*	5,6 (4,3)*
Сталь 40ХСМФ	0,884	1,256	-42 %	45 (42)*	4,3 (3,9)*
Примечание: * - после испытаний на абразивное изнашивание при 500 °С					

Износостойкость СММК системы Ti-Fe с объемным наполнением интерметаллидами 70 % при комнатной температуре ниже, чем у инструментальных сталей У9А и 40ХСМФ, а при 500 °С находится на уровне штамповой стали 40ХСМФ. При этом прирост износостойкости СММК составляет 16 %, а ее снижение у сталей У9А и 40ХСМФ – до 42 %. Очевидно, что дальнейшее повышение температуры испытаний обеспечит более полное раскрытие потенциала СММК, упрочненного твердой и термостабильной интерметаллидной фазой.

Список литературы

[1] Методика испытаний наплавленных сплавов на стойкость к высокотемпературному абразивному изнашиванию / А.А. Артемьев, А.А. Антонов, Г.Н. Соколов, В.И. Лысак // Трение и износ. - 2017. - Т. 38, № 3. - С. 247-254.

Разработка рецептур набухающих резин

Каблов В.Ф., Куцов А.Н., Кейбал Н.А.,
Крекалева Т.В. Ситников Е.Е., Шапоров Е.В.

Волжский политехнический институт (филиал)

ФГБОУ «Волгоградский государственный технический университет»

Волжский, Россия

E-mail: evgen.sitnikov2016@yandex.ru

Успех разработки нефтяных и газовых скважин в основном зависит от состава и свойств буровых растворов, которые должны обеспечить безопасность, безаварийность бурения и качественное вскрытие продуктивного пласта. Большим осложнением в освоении месторождений Восточной Сибири, является проводка скважин в солевых отложениях. Для улучшения буровых работ требуется промывочная жидкость, способная предотвращать растворение солей, а также обладать высокими смазывающими свойствами. В последние годы при прохождении осложненных участков и вскрытии продуктивных пластов все большее распространение получают системы растворов на углеводородной основе, из которых наиболее эффективны инвертные эмульсионные растворы.

Целью научно-исследовательской работы является разработка рецептур набухающих резин в буровом инвертном эмульсионном растворе необходимых для изготовления уплотнительных элементов с оценкой основных физико-механических и эксплуатационных свойств.

Была разработана рецептура резиновой смеси на основе дивинилнитрильного каучука, содержащая сополимер акриламида, серу в качестве вулканизирующего агента и активные добавки. Резиновая смесь готовилась смешиванием в микросмесителе типа 211.822 ПС и на лабораторных вальцах ВЛ 320/160 с регулируемым обогревом при 50 °С. Образцы для определения свойств резин вулканизовались при температуре 150 °С в течение 30 мин.

Для оценки качества разработанных резин использовались стандартные методы определения упруго-прочностных свойств при растяжении и набухании в жидкостях. При увеличении содержания гидрофильной добавки в резине наблюдается уменьшение условной прочности при растяжении и относительного удлинения при разрыве по сравнению с вулканизатом базового варианта.

При исследовании образцов вулканизатов при контакте с буровым инвертным эмульсионным раствором в течении 5 суток наблюдается набухание 12 %, через 10 суток – 17 %. В ходе выполнения научно-исследовательской работы разработана рецептура нефнабухающих резин для изготовления уплотнительных элементов бурового оборудования. Проведена оценка влияния сополимера акриламида на физико-механические свойства и степень набухания в инвертном эмульсионном растворе.

Привитые и блок-сополимеры хитозана с виниловыми мономерами – высокоэффективные флокулянты, коагулянты, сорбенты

Скотникова Д.С., Мочалова А.Е., Смирнова Л.А.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

E-mail: d.skotnikova@mail.ru

Проблема очистки оборотных и сточных вод промышленных предприятий различных отраслей, а также подготовки питьевой воды остается чрезвычайно актуальной. В настоящее время круг катионных флокулянтов, выпускаемых промышленностью, ограничивается синтетическими сополимерами на основе амидов акриловой и метакриловой кислот, винилпиридинов, полиэтиленаминов. Учитывая, что большинство промышленных и бытовых сточных вод содержат частицы с отрицательными зарядами, расширение ассортимента и повышение эффективности флокулянтов, коагулянтов и сорбентов катионного типа остается важной задачей. Комплекс полезных свойств, присущих хитозану, открывает возможность использования полисахарида в качестве базовой основы для создания широкого спектра высокоэффективных реагентов для очистки сточных вод и в процессах водоподготовки.

В работе были получены привитые и блок-сополимеры хитозана с водорастворимыми мономерами винилового ряда – акриламидом, винилпиридином с различной молекулярной массой синтетического фрагмента в них. Исследована флокулирующая и коагулирующая активности полученных сополимеров хитозана как на модельных, так и на реальных дисперсных системах в сопоставлении с широко применяемыми в настоящее время коагулянтами и флокулянтами марки «Праестол».

Показано, что привитые и блок-сополимеры хитозана являются высокоэффективными флокулянтами (при очистке сточных вод от взвешенных частиц) и сорбентами ионов металлов (при очистке сточных вод гальванических производств). Низкомолекулярные аналоги сополимеров могут быть использованы в качестве коагулянтов.

Влияние метода синтеза на ФМР характеристики наноразмерного никель-цинкового феррита

Скуднев В.Ю.¹, Бузько В.Ю.¹, Вызулин С.А.²

¹*Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия*

²*Краснодарское высшее военное училище имени генерала армии С.М.*

Штеменко, Краснодар, Россия

E-mail: skudnev_vs@mail.ru

В настоящее время ферриты находят свое применение в различных областях науки и техники. Однако существует ряд сложностей, связанных с

предсказанием некоторых свойств, важных для той или иной области. Эти свойства, в свою очередь, сильно зависят от многих факторов. В данной работе было изучено влияние метода синтеза на ФМР характеристики наноразмерного порошка никель-цинкового феррита состава $Ni_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4$.

Образцы наноразмерных ферритов были получены с использованием различных методов синтеза: глицинатный пирохимический метод синтеза (№1), глицинатный пирохимический метод синтеза из пенообразного геля (№2), пирохимический нитрат-мочевинный метод синтеза (№3), нитрат-глицинатный метод синтеза (№4). Как было обнаружено, разные способы синтеза приводят к получению наноразмерных образцов $Ni_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4$ с различным размером зерен от 20 до 70 нм. При этом средний размер наночастиц феррита систематически возрастает в ряду образцов №4<№2<№1<№3

Анализ спектров ФМР, снятых в X-диапазоне на спектрометре ФМР/ЭПР JEOL JES-FA300, позволил определить ФМР характеристики (табл. 1), которые описывают магнитные и радиопоглощающие свойства исследуемых образцов.

Таблица 1. ФМР характеристики образцов наноразмерных ферритов.

Образец феррита	H_R , мТл	H_{sat} , мТл	ΔH , мТл	$I_{уд}$, отн. ед.
№1	237.82	630	308.44	1
№2	216.82	670	169.48	0.92
№3	219.75	470	297.18	1.31
№4	220.24	600	321.58	3.35

Из данных, приведенных в таблице 1, видна значимая вариация в резонансных частотах ФМР (H_R), полях насыщения (H_{sat}), их ширин линий (ΔH) и величин удельного радиопоглощения ($I_{уд}$) для изученных образцов наноразмерного $Ni_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4$.

Согласно полученным данным, метод синтеза оказывает большое влияние на ФМР характеристики изученных образцов никель-цинкового феррита.

Отражение эффекта замещения металлов на ФМР характеристиках наноразмерного никель-цинкового феррита

Скуднев В.Ю.¹, Бузько В.Ю.¹, Вызулин С.А.²

¹Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия

²Краснодарское высшее военное училище имени генерала армии С.М.

Штеменко, Краснодар, Россия

E-mail: skudnev_vs@mail.ru

Никель-цинковый феррит достаточно часто применяется для производства радиопоглощающих покрытий. Интерес в этой области связан также и с возможностью замещения металлов в никель-цинковом феррите с целью управления их магнитными и радиопоглощающими. В данной работе этот

вопрос был рассмотрен посредством отражения эффекта замещения металлов на ФМР характеристиках наноразмерного порошка никель-цинкового феррита.

Исследуемые образцы имели следующие составы: $Ni_{0.45}Mn_{0.10}Zn_{0.45}Fe_2O_4$ (№1), $Ni_{0.45}Cu_{0.10}Zn_{0.45}Fe_2O_4$ (№2), $Ni_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4$ (№3). Все данные образцы наноразмерного феррита были получены с использованием нитрат-мочевинного метода синтеза. Как выяснилось, замещение приводит к изменению размера зерен синтезируемого наноразмерного феррита. Иначе говоря, в образце №3 размер зерен лежал в пределах от 45 до 65 нм, в образце №2 – от 40 до 55 нм, в образце №1 – от 25 до 45 нм.

Анализ спектров ФМР наноразмерных ферритов, снятых в X-диапазоне на спектрометре ФМР/ЭПР JEOL JES-FA300, позволил определить ФМР характеристики (табл. 1), которые описывают магнитные и радиопоглощающие свойства исследуемых образцов.

Таблица 1. ФМР характеристики образцов наноразмерных ферритов.

Образец феррита	H_R , мТл	H_{sat} , мТл	ΔH , мТл	$I_{\gamma\delta}$, отн. ед.
№1	229.03	560	262.7	1
№2	258.34	560	282.7	0.92
№3	184.58	430	196.79	3.44

Из данных, приведенных в таблице 1, видна вариация величин резонансных частот ФМР (H_R), полей насыщения (H_{sat}), ширин линий (ΔH) и величин удельного радиопоглощения ($I_{\gamma\delta}$) для изученных образцов. Важно также отметить, что каждая величина варьируется достаточно в широких пределах.

Наблюдаемый эффект замещения металлов в наноразмерном феррите указывает на возможность подбора оптимальных магнитных и радиопоглощающих свойств для его дальнейшего использования в конкретных приложениях.

Разработка клеевых композиций для защиты металлоконструкций гуммированием холодным способом

Сметанников С.М., Кейбал Н.А., Каблов В.Ф.

Волжский политехнический институт (филиал) ФГБОУ «Волгоградский
государственный технический университет», Волжский, Россия

E-mail: www.kintaro.ru@mail.ru

В рамках выполнения данной работы осуществлен синтез и изучены основные свойства фосфоразотсодержащих модифицирующих добавок для эластомерных клеевых композиций и использование данных модификаторов в

качестве промоторов адгезии клеевых составов на основе полихлоропрена при склеивании резин друг с другом и с металлом.

Применение предлагаемого технологического приема – модификации эластичных клеевых составов модифицирующими добавками с функционально-активными группами позволяет достичь высоких адгезионных показателей при склеивании резин в дублированных эластомерных материалах, например, при гуммировании аппаратуры несколькими слоями резин, обрезаивание валов, роликов, колес. Установлено, что полученный продукт улучшает адгезионные свойства эластомерных композиций на основе хлорсодержащих каучуков. Благодаря полученным испытаниям, было установлено, что данная модифицированная клеевая композиция, обладает более высокой адгезией к эластомерным материалам, обладая при этом и высокой адгезией металлам.

Современные условия конкурентной, рыночной борьбы на рынке сбыта требуют от производителей продукции новых, более дешевых, но имеющих те же свойства продуктов. Модифицированная клеевая композиция, способна стать аналогом существующих клеев, а значит найдет широкое применение в гуммировании наружной и внутренней поверхности абсорберов, хранилищ, каналов, труб и технологических резервуаров в установках обессеривания дымовых газов и сжигания мусора, а также в солянокислых травильных установках и емкостях с соляной кислотой, обрезаивании валов, роликов и колес.

Список литературы

[1] Каблов В.Ф., Бондаренко С.Н., Кейбал Н.А. Модификация эластичных клеевых составов и покрытий элементсодержащими промоторами адгезии: монография. – Волгоград: «Политехник», 2010. – 237 с.

Исследование процесса образования полимерной пленки карбамидных смол в процессе низкочастотного ультразвукового воздействия

Смирнова А.С., Шибашов А.В.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия*

E-mail: ShibashovAV@gmail.com

Жидкие гомогенные и гетерогенные системы, обладающие значительной вязкостью, в настоящее время получили широкое распространение в промышленности. При использовании таких сред, в качестве сырья, можно придать конечному продукту разнообразные свойства, однако для достижения ряда свойств зачастую необходимо модифицировать физико-химическую структуру жидкостей. Исследования последних лет доказали, что перспективным способом модификации физико-химической структуры исходных жидких гомогенных или гетерогенных систем с целью улучшения

свойств и характеристик конечного продукта является ультразвуковое кавитационное воздействие [1]. Для получения полимерных сеток и решетчатых структур широко используются предконденсаты термореактивных смол, которые наиболее часто получают на основе мочевины или меламин. Наличие свободных гидроксиметильных групп и подвижного водорода у атома азота делает данные препараты очень активными к реакциям смолообразования. Поэтому их используют в качестве связующего между макромолекулами природных полимеров, а так же как основной компонент

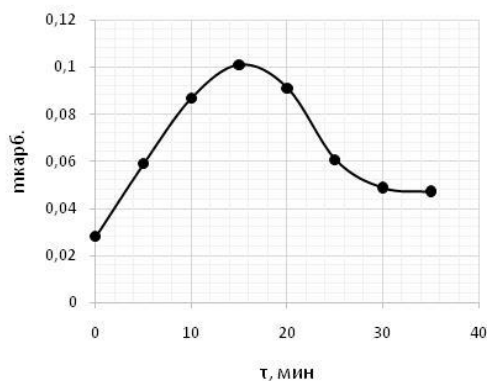


Рис. 1. Масса полимерной пленки

капсулирующих составов для гранул минеральных удобрений.

В данной работе исследовано влияние низкочастотного ультразвукового воздействия на процесс его полимеризации в растворе и на поверхности природного волокна. На рисунке 1 представлена зависимость массы образующегося полимера от времени предварительного воздействия низкочастотного ультразвука на раствор с массовой концентрацией карбамола 15%. Из графика видно, что при увеличении продолжительности ультразвукового воздействия до 20 минут масса образовавшегося полимера монотонно растет, дальнейшее увеличение времени воздействия ультразвука наоборот приводит к уменьшению массы полимеризованного карбамола, а после 35 минут воздействия масса образованного полимера практически перестает меняться.

Список литературы

[1] Хмелев, В.Н. Ультразвуковое распыление жидкостей: монография / В.Н. Хмелев, А.В. Шалунов, А.В. Шалунова; Алт. гос. техн. унт, БТИ. – Бийск: Изд-во Алт. гос. техн. ун-та, 2010. – 250 с.

Исследование адамантилсодержащих соединений в качестве ингредиентов резиновых смесей

Солопов В.А., Каблов В.Ф., Новопольцева О.М., Кочетков В.Г., Бурмистров В.В.
 Волжский политехнический институт (филиал) ФГБОУ ВО «Волгоградский
 государственный технический университет», Волжский, Россия
 E-mail: vg.kochetkov@mail.ru

В настоящее время научно-технический прогресс требует разработки и создания принципиально новых веществ и материалов и совершенствования существующих способов переработки эластомерных композиций,

предназначенных для изготовления резинотехнических изделий с заданными эксплуатационными свойствами.

Объектом исследования являлись ненаполненные композиции на основе изопренового каучука СКИ-3 с серной вулканизирующей группой, содержащие в качестве противостарителей диафен ФП (1) и агидол (2). Нами было исследовано влияние введения в состав композиций адамантилсодержащих соединений с гидроксильными (1-1 и 2-1) и аминогруппами (1-2 и 2-2) на физико-механические и реометрические свойства.

Исследование реометрических характеристик (MDR 3000 Professional, ASTM D2084-79) показало, что при введении адамантилсодержащих соединений с аминогруппами увеличивается показатель скорости вулканизации, в то время как адамантилсодержащие соединения с гидроксильными группами практически не влияют на кинетику вулканизации.

При введении адамантилсодержащих соединений с аминогруппами улучшаются показатели после термоокислительного старения, что свидетельствует об их эффективности в качестве противостарителей (табл. 1).

Таблица 1. Реометрические и физико-механические показатели исследуемых композиций.

Показатель	1	1-1	1-2	2	2-1	2-2
Показатель скорости вулканизации (R_v), мин ⁻¹	0,27	0,28	1,83	0,22	0,22	1,33
Условная прочность при растяжении (f_p), МПа	18,8	15,8	13,1	18,0	11,5	11,1
Относительное удлинение при разрыве (ϵ), %	600	620	760	600	560	720
Относительное остаточное удлинение после разрыва, %	5	8	4	5	4	3
Изменение показателей после старения (100 °С x 72 час.), %:						
Δf_p	-2	-21	-3	-4	-20	-2
$\Delta \epsilon$	-7	-10	21	-8	7	33

Получение и возможность применения экструдированных органо-неорганических сорбентов для повышения сортности растительных масел

Строганова Ю.И., Шишкина Ю.О., Разговоров П.Б., Нагорнов Р.С.
 Ивановский государственный химико-технологический университет,
 Иваново, Россия
 E-mail: razgovorov@isuct.ru

Целью работы является получение и применение экструдированных органо-неорганических сорбентов для очистки маслосодержащих сред от свободных жирных кислот. В качестве исходных неорганических материалов,

обеспечивающих повышение сортности растительных масел, применяли отмученные природные алюмосиликаты. Улучшение их сорбционных свойств достигалось путем активации 6%-м раствором яблочного уксуса, введением в систему технической соды и воды в определенных пропорциях, пропуском полученной массы через экструдер с последующей резкой на гранулы и сушкой. Использование таких сорбентов позволяет исключить стадию разделения твердой и жидкой фаз после сорбции (фильтрации), что обеспечивает удешевление технологического процесса очистки масел [1].

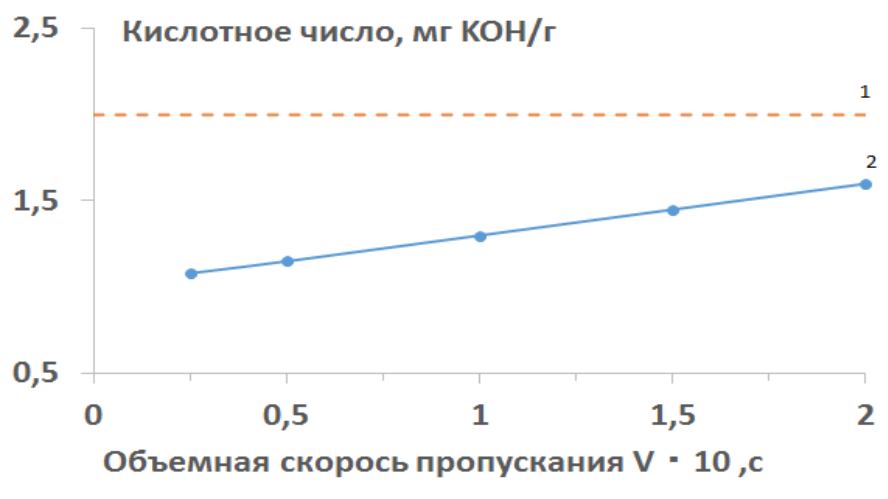


Рис. 1. Изменение кислотного числа горчичного масла при различной скорости пропускания через стеклянную колонку, наполненную экструдированным сорбентом.

Опыты проводили на экструдате активированной голубой глины при испытании образцов нерафинированного горчичного масла с кислотным числом 2,0 мг КОН/г (пунктирная линия 1 на рис. 1). Экструдированный материал засыпали в стеклянную колонку диаметром 25 мм и объемом 55 см³ (1:10 по высоте), через которую при комнатной температуре пропускали растительные масла, варьируя объемную скорость их выхода из колонки в диапазоне $(0-2) \cdot 10^{-2} c^{-1}$. Выявлен характер зависимости количества выделяемых жирных кислот от объемной скорости пропускания растительных масел через слой экструдата: увеличение продолжительности контакта фаз способствует повышению сортности масла (рис. 1, кривая 2). Для получения масла I сорта объемная скорость пропускания не должна превышать отметки 0,010–0,015 c⁻¹.

Список литературы

[1] Прокофьев В.Ю., Разговоров П.Б., Ильин А.П. Основы физико-химической механики экструдированных катализаторов и сорбентов. М.: КРАСАНД, 2013. 320 с.

Регенерация сульфида натрия в кислотном-щелочном способе производства сульфатной целлюлозы

Субботина К.О.

Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна. Высшая школа технологии и энергетики, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: KatrinSubbotina@yandex.ru

В кислотном-щелочном способе стоит проблема [1] регенерации сульфида натрия из черного щелока. В эксперименте установлена возможность получения сульфида натрия путем абсорбции сероводорода, образующегося при подкислении черного щелока, регенерируемого в процессе каустической щелочью [2].

Целью настоящей работы является определение оптимальных параметров получения сульфида натрия [3] абсорбцией сероводорода регенерированным гидроксидом натрия в кислотном-щелочном способе производства сульфатной целлюлозы.

Исследования проведены на симплексе. В эксперименте установлено, что наилучшие результаты достигнуты в опыте 1 при 2 ступенях абсорбции, температуре щелока 30 °С и концентрации NaOH 45% и в опыте 2 на 1 ступени при температуре черного щелока 10 °С концентрацией NaOH 45%.

Список литературы

- [1] Казаков В. Г., Луканин П. В., Федорова О. В., Самойленко Д. Е. Модернизация технологического процесса переработки черных щелоков сульфатной целлюлозы//ЖПХ.-2016.-Т.89, вып.5 – с.654-659;
- [2] Демин В.А. Химия и технология сульфатных щелоков, Сыктывкар: СЛИ, 2013, 96 с.;
- [3] Федорова О.В., Луканин П.В., Казаков В.Г., Субботина К.О., Самойленко Д. Е. Влияние технологических параметров на извлечение соединений из растворов черного щелока производства сульфатной целлюлозы//Вестник Санкт-Петербургского государственного университета технологии и дизайна. Серия 1– 2016 - №4 – с. 49-52.

Регенерация катализаторов гидроизомеризации с помощью синхронного термического анализа

Танкиева З.И., Гафарова Э.Б.

РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, Москва, Россия

Синхронный термический анализ занимает особое место в списке аналитических приёмов исследования катализаторов. Только с помощью этого комбинированного метода при программируемом нагреве образца можно

определить состав коксовых отложений, а также температуры и теплоты их выгораний.

В работе исследовалась возможность синхронного термического анализа в окислительной атмосфере изучения коксовых отложений катализаторов гидроизомеризации дизельного топлива.

Первоначально в работе закоксованный образец катализатора истирался в агатовой ступке и навеска известной массы помещалась в керамический тигель. Для полного извлечения воды тигель помещался в сушильный шкаф и при температуре 110°C выдерживался 5 часов. Затем тигель вынимали и охлаждали в эксикаторе в течение 3 часов. После охлаждения навеску катализатора массой 7-10 мкг отбирали в платиновый тигель и помещали в СТА-анализатор.

После продувки печи СТА азотом начинался программируемый нагрев в атмосфере 79% азота 21% кислорода (об.). После получения данных СТА-анализа при скоростях нагрева 5, 10, 15 и 20 °/мин были определены доли кокса, сгорающего при различных температурах и теплоты соответствующих реакций. В результате обработки данных был предложен оптимальный режим с программируемым нагревом для оптимального разделения различных ДСК-пиков сгорания коксовых отложений при минимизации времени анализа. Данный режим был проверен опытным путём на СТА-анализаторе.

В результате проведённых опытов было показано, что используя метод синхронного термического анализа можно изучить количество кокса в закоксованном катализаторе и распределение различных коксовых отложений по температурам сгорания.

Список литературы

- [1] Карпов А.Б., Козлов А.М. Разработка адсорбционно-селективных технологий выделения гелия// Нефть и газ - 2015 Сборник тезисов 69-ой Международной молодежной научной конференции. 2015. С. 161.
- [2] Трифонова И.Н., Козлов А.М. Определение ёмкости цеолитов для глубокой очистки газа перед ожижением// Новые технологии в газовой промышленности Тезисы докладов юбилейной десятой всероссийской конференции молодых ученых, специалистов и студентов. 2013. С. 151.
- [3] Стенина Н.Д., Козлов А.М. Определение емкости цеолитов для подготовки природного газа к сжижению// Нефть и газ -2017 Сборник тезисов. 2017. С. 453.

Определение общей кислотности катализаторов получения ароматических углеводородов из пропан-бутановых фракций

Танкиева З.И., Гафарова Э.Б.
*РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина,
Москва, Россия*

Определение кислотности катализаторов каталитических процессов позволяют уточнить общие закономерности повышения конверсии сырья, увеличения или снижения селективности, а, следовательно, возможности прогнозирования выхода целевых продуктов реакции при изменении состава катализаторов или методов их приготовления.

Наличие в этих катализаторах кислотных центров различного типа определяет их свойства в ряде каталитических процессов – крекинг и гидрокрекинг, изомеризация углеводородов и др. Для определения общей кислотности катализаторов, а также долей кислотных центров различной силы и их изменения был использован метод термопрограммированной десорбции аммиака. В работе исследовалась изменение кислотности катализаторов на основе пентасила ZSM-5 при внесении различных количеств цинка как металла-промотера.

Первоначально носитель в порошке пропитывался водным раствором нитрата цинка и высушивался сначала на водяной бане, а затем в муфельной печи при температуре не менее 350°C. После извлечения из печи катализатор прессовался в «таблетки». Для определения кислотности катализатора был применен метод термопрограммируемой десорбции аммиака с предварительным насыщением навески катализатора в течении 30 минут. В дальнейшем навеска нагревалась в токе гелия с анализом сигнала катарометра с пересчетом сигнала на количество выделяемого аммиака.

При рассмотрении результатов ТПД аммиака замечено, что при введении цинка изменяется количество активных центров (увеличение общей кислотности) и незначительном изменении долей низкотемпературных, среднетемпературных и высокотемпературных центров.

Список литературы

- [1] Лapidус А.Л., Козлов А.М., Худяков Д.С., Дергачев А.А. Ароматизация пропан-бутановой фракции на модифицированном пентасиле// Газохимия. 2010. № 6. С. 16-18
- [2] Козлов А.М., Худяков Д.С., Лapidус А.Л., Дергачёв А.А. Ароматизация пропан-бутановой фракции на пентасиле, модифицированном солями цинка// Технологии нефти и газа. 2011. № 1 (72). С. 7-10.
- [3] Лapidус А.Л., Козлов А.М., Худяков Д.С., Дергачев А.А. Ароматизация смеси алканов C3-C4 на Zn-пентасиле, модифицированном оловом и свинцом// Известия Академии наук. Серия химическая. 2011. № 3. С.

Способы получения композиционных керамических материалов на основе гексагонального нитрида бора методом реакционного и жидкофазного спекания

Тарабанов Р.В., Гафурова А.В.

Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия

E-mail: tarabanovrv@gmail.com

В настоящее время, основной эффективной технологией создания материалов на основе гексагонального нитрида бора (BN_Γ) является горячее прессование (ГП). Применение данного способа обусловлено высокой температурой плавления BN_Γ (2973 °С) и слоистой (графитоподобной) структурой частиц, препятствующей процессам спекания. Отрицательные факторы метода ГП: высокие энергетические затраты при малом объёме производства и невозможность получения изделий сложной геометрической формы. Таким образом, одним из вариантов устранения недостатков данного метода является применение альтернативных высокотемпературных методов консолидации частиц BN_Γ , таких как жидкофазное и реакционное спекание.

В работе представлены способы получения материалов системы $\text{BN-Si}_3\text{N}_4$: метод реакционного спекания путём высокотемпературного азотирования первично консолидированных порошков BN_Γ , аморфного бора (В) и кремния (Si), а также метод жидкофазного спекания с применением активатора спекания эвтектического состава – алюмоиттриевого граната (YAG) и различных порошков нитрида бора гексагонального и турбостратного (BN_Γ).

Некоторые физические свойства приведены в (табл. 1) и (табл. 2).

Таблица 1. Физические свойства реакционно-спеченных материалов.

Концентрация исходных компонентов, % мас.			Плотность, г/см ³	Пористость, %	Усадка, %	Потеря массы, %
BN_Γ	Si	В				
70	30	–	1,4	20	-10,5	-8
50	50	–	1,7	18	-3,2	-17,6
70	–	30	1,46	33	-15,5	-17,6
50	–	50	1,39	36	-25,4	-22,8

Таблица 2. Физические свойства жидкофазно-спеченных материалов.

Концентрация компонентов, об. %				Выдержка, ч	Усадка, %	Плотность, г/см ³	Пористость, об. %	Модуль упругости, ГПа	Прочность, МПа
BN_Γ	BN_Γ	Si_3N_4	YAG						
20	-	60	20	2	9,5	2,43	25,2	37,4	52,6
30	-	50	20		3,4	1,91	39,3	25,4	29,3
-	20	60	20	3	9,7	2,78	14,5	39,5	84,2
-	30	50	20		7,4	2,66	15,5	94,0	161,4

Влияние содержания цинка на конверсию пропан-бутановой смеси при получении ароматических углеводородов на катализаторе Zn-ZSM-5 (90)

Трухин Г.О., Гафарова Э.Б.
 РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина,
 Москва, Россия
 E-mail: glebtrukhin1402@gmail.com

Применение пропан-бутановых фракций для производства ароматических углеводородов является актуальным ввиду уменьшения ресурсов прямогонных бензиновых фракций, но оптимизация состава катализатора для данной реакции до сих пор является актуальной. В работе исследовалось влияние содержания различных содержаний цинка в катализаторе Zn-ZSM-5 (90).

При 550 °С на исходном цеолите реакция протекает с низкой конверсией и выходом. Введение 2% масс. цинка в цеолит приводит к существенному увеличению конверсии 51,5%, селективности 65,9% и выхода АрУ 33,9%. При увеличении содержания цинка до 5% масс. показатели процесса улучшаются. Дальнейшее увеличение содержание цинка до 7,0% масс. уменьшает выход АрУ.

Приведённые данные характеризуют каталитическую активность систем с различным содержанием цинка. С минимальным метанообразованием реакция ароматизации ПБФ протекает на образце, содержащем 2 % масс. Zn-ZSM-5 (90), но выход ароматических углеводородов ниже, чем на катализаторе с 5 % масс. Zn (рис. 1). С максимальным выходом ароматических углеводородов реакция проходит на катализаторе с 5 % масс. Zn при 600° С.

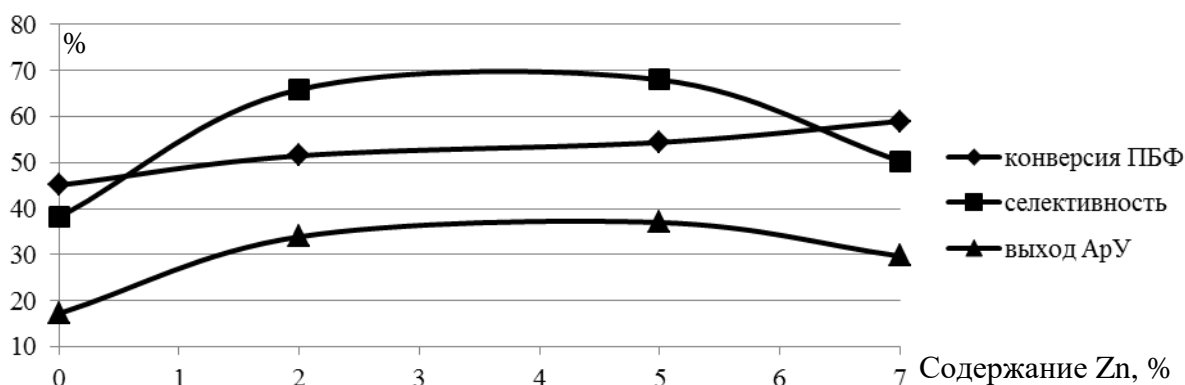


Рис 1 – Влияние содержание цинка на показатели работы катализатора

Список литературы

- [1] Козлов А.М., Худяков Д.С., Лapidус А.Л., Дергачёв А.А. Ароматизация пропан-бутановой фракции на пентасиле, модифицированном солями цинка// Технологии нефти и газа. 2011. № 1 (72). С. 7-10.
- [2] Катализатор процесса окислительной ароматизации низших алканов// Козлов А.М., Федорова Е.Б., Карпов А.Б., Козлов К.М. патент на изобретение RUS 2603774 14.10.2015.
- [3] Катализатор процесса окислительной ароматизации низших алканов// Козлов А.М., Федорова Е.Б., Карпов А.Б., Козлов К.М. патент на изобретение RUS 2603775 14.10.2015.

Влияние содержания цинка на конверсию пропан-бутановой смеси при получении ароматических углеводородов на катализаторе Zn-ЦВМ (30)

Трухин Г.О., Гафарова Э.Б.
 РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина,
 Москва, Россия
 E-mail: glebtrukhin1402@gmail.com

Использование альтернативного сырья для производства ароматических углеводородов является актуальным ввиду уменьшения для каталитического риформинга. Однако оптимизация состава катализатора для процесса получения ароматических углеводородов из ПБФ является актуальной проблемой. В работе исследовалось влияние содержания цинка в катализаторе Zn-ZSM-5 (90).

При использовании цеолита H-ЦВМ со структурой пентасила с модулем 30 опыты проводили при пропитке нитратом цинка и содержании цинка 2, 5 и 7 % масс. при объёмной скорости по газообразному сырью 550 ч^{-1} и температурах $575\text{-}625^\circ\text{C}$.

При 600°C на декатионированном цеолите реакция протекает с невысокими конверсией и выходом. Введение 2% масс. цинка (из нитрата) приводит к улучшению показателей процесса: конверсия 66,6%, селективность 64,3%, выход 42,8%. При введении 5% масс. цинка конверсия достигает 73,7%, а селективность и выход АрУВ 66,3 и 48,9% соответственно. Дальнейшее увеличение содержание цинка до 7,0% масс. уменьшает выход АрУ (рис. 1).

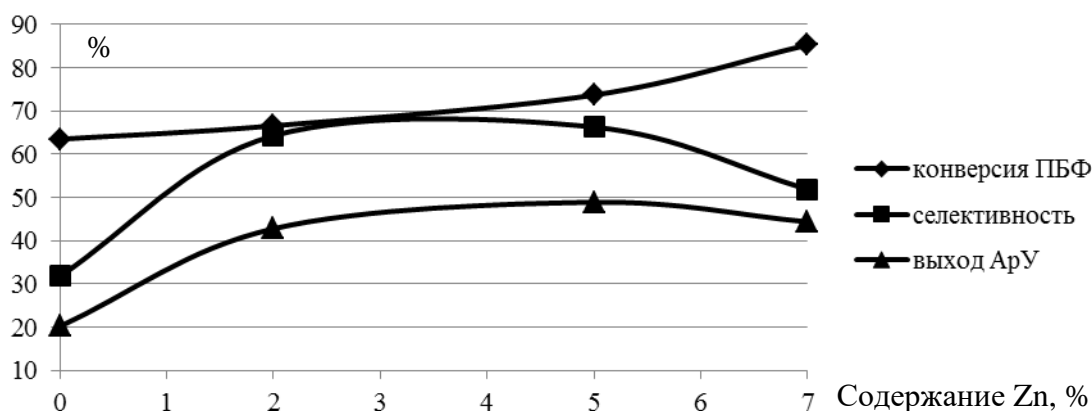


Рис. 1 – Влияние содержание цинка на показатели работы катализатора

Список литературы

- [1] Козлов А.М., Худяков Д.С., Лapidус А.Л., Дергачёв А.А. Ароматизация пропан-бутановой фракции на пентасиле, модифицированном солями цинка// Технологии нефти и газа. 2011. № 1 (72). С. 7-10.
- [2] Катализатор процесса окислительной ароматизации низших алканов// Козлов А.М., Федорова Е.Б., Карпов А.Б., Козлов К.М. патент на изобретение RUS 2603774 14.10.2015
- [3] Катализатор процесса окислительной ароматизации низших алканов// Козлов А.М., Федорова Е.Б., Карпов А.Б., Козлов К.М. патент на изобретение RUS 2603775 14.10.2015

Исследование влияния компонентов кремнистого сырья на его адсорбционные свойства

Убаськина Ю.А.

НИЦ «Курчатовский институт» - ИРЕА, Москва, Россия

E-mail: baseou@yandex.ru

Кремнистое сырье (диатомит, опока, трепел) является одним из самых перспективных материалов для получения высокоэффективных фильтрующих и адсорбционных материалов для очистки различных жидких сред. Его преимущество состоит в сочетании доступности, дешевизне, высокой удельной поверхности, высокой пористости и высокой химической инертности материала, состоящего на 62,8 – 96,8 % [1] из кремнезема, большей частью рентгеноаморфного.

В данной работе нами было исследовано влияние компонентов кремнистого сырья на его адсорбционные свойства. В качестве объекта испытания был выбран диатомит Инзенского месторождения Ульяновской области. Для определения усредненного химического состава Инзенского диатомита были проанализированы данные о химическом составе диатомита 1938, 1972, 1977, 2000-2017 гг. Было найдено, что Инзенский диатомит чрезвычайно однороден по химическому составу. Такая однородность Инзенского диатомита по химическому составу позволяет использовать его в качестве сырья для получения адсорбента, предназначенного для очистки различных жидких сред. Было установлено, что основными компонентами Инзенского диатомита являются кремнезем (76,66 – 90,19%), глинозем (3,66 – 6,64%), оксид железа (III) (1,98 – 3,36%), оксид титана (0,22 – 0,50%), оксид калия (0,93 – 1,56%), оксид натрия (0,02 – 0,28%), оксид магния (0,53 – 1,05%), оксид кальция (0,22 – 0,79%).

Для определения адсорбционной способности диатомита была использована методика, приведенная в ГОСТ 30036.2 – 93. Методика заключается в изучении адсорбции органического основного тиазинового красителя – метиленового синего, из его кислого водного раствора на образцах породы. Для исследования влияния химического состава диатомита на его адсорбционные свойства были отобраны образцы диатомита с поверхности, с глубины залегания 5, 10, 15 метров и из скважины с глубины 33 метра. Химический состав отобранных образцов был исследован на рентгенофлуоресцентном спектрометре ARL OPTIM'X. Было обнаружено, что глинозем и оксиды щелочных и щелочноземельных металлов определяют адсорбционную способность диатомита в кислой среде по отношению к положительно заряженному органическому катиону метиленового синего. Был сделан вывод, что химический состав диатомита значительно влияет на адсорбционные свойства диатомита

Список литературы

[1] Кремнистые породы СССР / Под ред. Дистанова У.Г. Казань: Татарское книжное издательство, 1976. 412 с.

Способ выделение элементарного йода из концентратов

Умбаров И.А., Тураев Х.Х., Алимназаров Б.Х., Умбарова М.И.
 Термезский государственный университет, Термез, Узбекистан
 E-mail: i_umbarov@mail.ru

Выделение элементарного йода из концентратов проводилось по схеме, приведенной в рис.

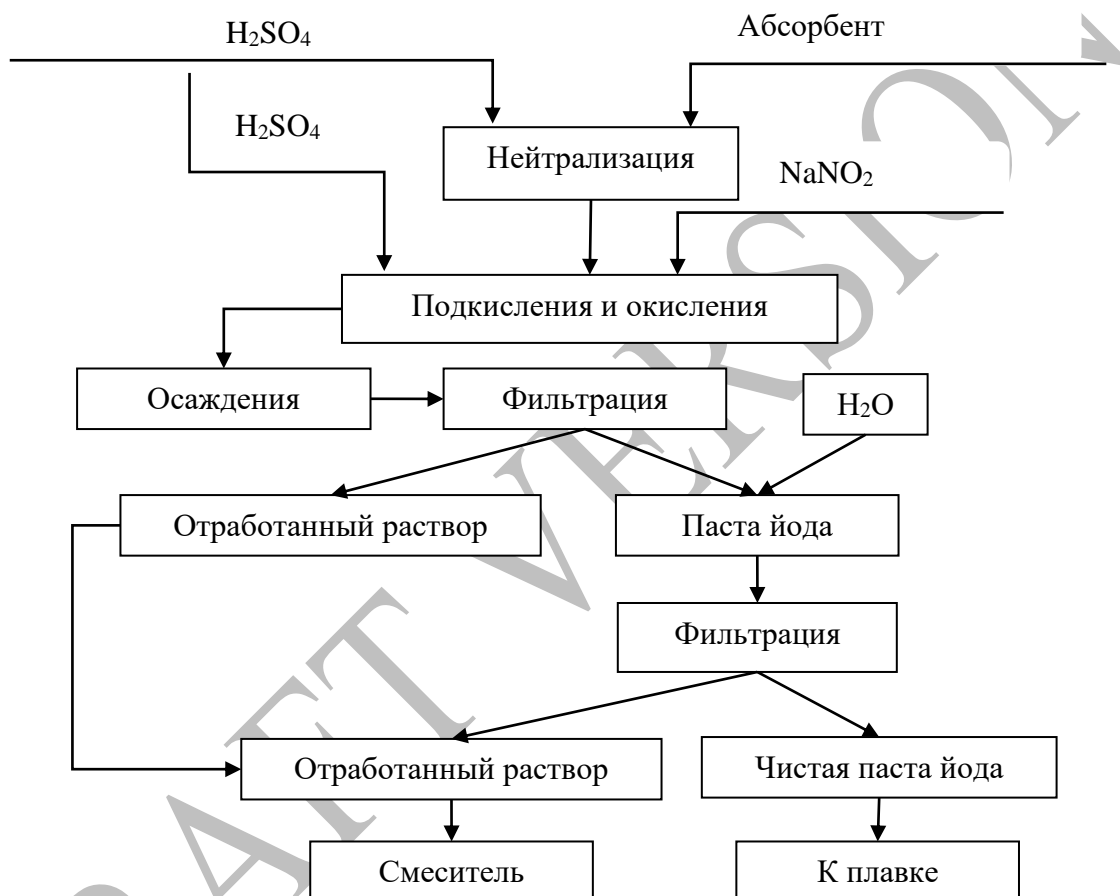


Рис. Принципиальная схема осаждения элементарного йода из абсорбента

Для выделения элементарного йода из концентратов пригодны почти все известные окислители, но практическое применение нашли только два: перекись водорода и нитрит натрия, причем единственным недостатком окислителя нитрита натрия является его сравнительная дороговизна.

После выделения элементарного йода из концентратов по схеме приведенной в рис. дальнейшую технологическую очистку йодной пасты проводили следующим образом: кристаллы фильтруются через нутч-фильтр и промываются водой. Количество воды равно массе промываемых кристаллов. Фильтрат и промывная вода подается на линии насоса буровой воды.

Вольтамперометрическая сенсорная система для распознавания энантиомеров пропранолола в лекарственных формах

Файзуллина Ю.Г., Проворова Ю. Р., Яркаева Ю. А., Зильберг Р. А.
*Башкирский государственный университет, Республика Башкортостан,
Уфа, Россия*
E-mail: not12modest@mail.ru

С развитием представлений о роли стереоизомеров в биохимических процессах и широким использованием лекарственных средств на их основе стало понятно, что наряду с простотой пробоподготовки, доступностью и дешевизной приборов, временем анализа применимость аналитических методов во многом будет определяться их возможностью распознавать оптические изомеры действующих веществ. Нами изучены возможности вольтамперометрической сенсорной системы на основе модифицированных композитами полиарилефталата с меламинам, циануровой кислотой и α -, β -циклодекстринами [1] стеклоуглеродных электродов для экспрессного распознавания R- и S- энантиомеров пропранолола в лекарственных формах. Рассмотрено влияние содержания основного компонента и вспомогательных веществ, условий регистрации вольтамперограмм на их характеристики, оценена вероятность распознавания энантиомеров пропранолола в лекарственных формах. Разрабатываемые сенсоры лишены в большинстве случаев острой избирательности отклика и обладают высокой перекрестной чувствительностью. Такие свойства являются предпочтительными для последующего использования этих модификаторов в составе массивов мультисенсорных систем. Применение мультисенсорного подхода позволяет изящно обходить трудности связанные с близостью аналитических сигналов энантиомеров и создавать массивы сенсоров с высокой перекрестной чувствительностью, которые в сочетании с многомерной обработкой данных дают возможность надежного распознавания энантиомеров пропранолола в многокомпонентных растворах, содержащих вспомогательные вещества готовых лекарственных форм. Экспериментально доказано, что использование массива перекрестно-чувствительных химических сенсоров в сочетании с хемометрической обработкой данных позволяет распознавать энантиомеры пропранолола в лекарственных формах с вероятностью не ниже 90 %. Это позволяет использовать их для экспресс анализа лекарственных форм без разделения составляющих их ингредиентов, что является более предпочтительным, так как при этом сокращаются потери анализируемых веществ, уменьшается число операций, время анализа и расход реагентов.

Список литературы

[1]. Zilberg R. A., Sidelnikov A. V., Maistrenko V. N., Yarkaeva Yu. A., Khamitov E. M., Kornilov V. M., and Maksutova E. I. AVoltammetric Sensory System for Recognition of Propranolol Enantiomers Based on Glassy Carbon Electrodes Modified by Polyarylenephthalide Composites of Melamine and Cyanuric Acid // *Electroanalysis*. 2017. Vol. 29 (DOI: 10.1002/elan.201700404) (в печати)

Работа выполнена при поддержке РФФИ: грант № 16–13–10257.

Инновационный способ флокуляционной очистки отработанных трансформаторных масел

*Фалалеева Т.С., Лопатина Е.В., Проскурина В.Е., Галяметдинов Ю.Г.
Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия*

E-mail: v_proskurina@mail.ru

Важным вопросом в технологии регенерации отработанных трансформаторных масел является поиск инновационного способа интенсификации процессов разделения твердых и жидких фаз в маслonaполненной системе, адсорбции асфальто-смолистых веществ, органических кислот и других окисленных форм. Использование процесса флокуляции совместно с существующими контактными технологиями очистки значительно ускоряет процесс осаждения шлама и снижает ресурсозатраты [1]. В настоящей работе в лабораторных условиях был изучен процесс флокуляции суспензии бентонитовой глины в отработанном трансформаторном масле с участием природных полисахаридов – амилопектина и хитозана, синтетического катионного сополимера акриламида (АА) с гидрохлоридом диметиламиноэтилметакрилатом и органо-органических гибридов на основе амилопектина, хитозана и катионного сополимера АА.

Методом вискозиметрии определены молекулярные массы гибридных образцов и концентрации ионогенных звеньев в их макромолекулах. Проанализировано влияние концентрации индивидуальных природных и синтетических полимеров и гибридных систем на их флокулирующие показатели в маслосодержащих системах. Размер образующихся флокул был определен методом динамического светорассеяния на приборе анализатор размера частиц и дзета-потенциала серии Zetasizer Nano-ZS. Визуальный контроль проб отработанных масел показал осветление верхней части системы. Наиболее высокие флокулирующие свойства отмечены для маслосодержащей системы с участием органо-органического гибрида на основе амилопектина и катионного сополимера АА, взятых в соотношении 1÷1.

Таким образом, синтезированные органо-органические гибридные нанокomпозиты обладают большим флокулирующим действием относительно индивидуальных природных полисахаридов и синтетического катионного образца. Поэтому данный гибридный образец можно рекомендовать в качестве эффективного флокулянта при очистке отработанных трансформаторных масел в промышленном масштабе.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (№15-03-01399).

Список литературы:

[1] Проскурина В.Е., Галяметдинов Ю.Г., Лопатина Е.В., Фалалеева Т.С. Флокуляционный способ очистки маслосодержащих систем полимер-неорганическими гибридами // Вестник технологического университета. 2016. Т.19. №14. С.5-9.

Гидротермальный синтез платина-хромового катализатора

Хабарова Д.С., Тупикова Е.Н.

*Самарский национальный исследовательский
университет им. акад. С.П. Королева, Самара, Россия*

E-mail: daria.s.khabarova@gmail.com

Биметаллические катализаторы, состоящие из платины и цветного металла, перспективны в качестве электродов для топливных элементов и катализаторов глубокого окисления углеводородов. Ранее были изучены реакции разложения двойных комплексов $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_6][\text{PtCl}_4]$ и $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}][\text{PtCl}_4]$ в гидротермальных условиях. Продукты реакций представляют собой черные порошки, состоящие из оксидов цветных металлов, на которых происходит восстановление металлических частиц платины. В реакциях разложения пероксида водорода и горения пропана катализаторы, полученные из двойных комплексов, проявляют высокую каталитическую активность. Также ранее автоклавным термолизом $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4]\text{CrO}_4$ были получены Pt-Cr_xO_y нанесенные на стружку из нержавеющей стали катализаторы, свойства которых превосходят монометаллические платиновые катализаторы в реакции горения пропана. В процессе разложения хромат-иона образуются оксиды со степенью окисления хрома от +5 до +3. Мы предположили, что разложение двойного комплекса $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}][\text{PtCl}_4]$, также как и двойных комплексов Pt-Ni, Pt-Co, приведет к образованию оксида со степенью окисления +3.

Цель работы заключалась в изучение реакций гидротермального разложения двойного комплекса тетрахлолоплатинат (II) хлоропентаамминхрома (III) $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}][\text{PtCl}_4]$, получение из него порошкообразных и нанесенных катализаторов и исследовании их свойств.

Двойной комплекс синтезировали реакцией ионного обмена из соответствующих простых комплексов. Разложение соединения-предшественника осуществляли в водном растворе с pH 8-9 при температуре 190°C. Продукты реакции, и полученные катализаторы исследовали методами сканирующей электронной микроскопии и энергодисперсионного рентгеновского микроанализа, а также методом атомно-силовой микроскопии.

Каталитические свойства полученных порошкообразных образцов исследовали в реакции разложения пероксида водорода. Скорость реакция определяли по количеству выделившегося кислорода.

Также в автоклавных условиях были получены нанесенные Pt-Cr катализаторы. В качестве носителя использовали оксидированную стружку из нержавеющей стали. Каталитические свойства полученного нанесенного катализатора исследовали в реакции горения пропана на проточной установке с анализом реакционной смеси газохроматографическим методом. Сопоставлены активности катализаторов, полученных из комплекса $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4]\text{CrO}_4$ и двойного комплекса $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}][\text{PtCl}_4]$.

Влияние неионогенных веществ на адсорбционные свойства катионного ПАВ

*Харламова А.Н., Щирая К.В., Демьянцева Е.Ю.
СПбГУПТД Высшая школа технологии и энергетики,
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: x.anastasia@inbox.ru*

Амфифильные соединения весьма активны на различных поверхностях раздела и способны к образованию агрегатов в растворе. Эти характерные для ПАВ свойства широко используются во многих процессах, в том числе при производстве и переработки древесных волокнистых материалов. Кроме того, мицеллы в растворах и агрегаты, присутствующие на поверхностях, составляют уникальную микросреду, которая может быть использована для контроля над многими процессами на недостижимом в макроскопических условиях уровне. Область существования мицеллярных растворов, структуру агрегатов, поведение системы можно варьировать путем смещения амфифильных веществ разных молекулярных структур, и получать желательные характеристики, не прибегая к синтезу новых веществ. Хорошо подобранная система ПАВ действует гораздо лучше отдельных компонентов, так как возможно проявление синергетического или антагонистического эффектов.

В настоящей работе исследовано влияние на основные межфазные и объемные свойства катионного вещества катамина АБ неионогенных поверхностно-активных веществ (НПАВ) синтанола ДС-10 и синтамида-5, представляющих моноалкиловые эфиры полиэтиленгликоля на основе первичных жирных спиртов и смесь полиоксиэтилированных эфиров моноэтаноламидов синтетических жирных кислот соответственно. Данный КПАВ может быть использован как для модификации поверхности волокнистых полуфабрикатов, так и в качестве деэмульгирующего агента, способствующего повышению агрегативной неустойчивости частиц из производственных растворов.

В работе были проанализированы зависимости поверхностного натяжения от концентрации водных растворов выбранных ПАВ и их смесей, определены ККМ и рассчитана поверхностная активность веществ G. При всех соотношениях компонентов наблюдается отклонение от аддитивных значений, что говорит о различных формах образованных мицелл, приводящее как к взаимной активации, так и к ухудшению физико-химических свойств смешанных мицелл. Добавка неионогенных веществ в количестве 10-20% резко повышает адсорбционную способность катамина АБ. В то же время процесс мицеллообразования в данных смесях отличается, несмотря на принадлежность к одному классу поверхностно-активных веществ. По-видимому, это связано с различным химическим строением ПАВ и геометрией молекул.

Многокомпонентные образцы состава воды как средство оценивания качества результатов, получаемых в аналитических лабораториях

Хижнякова К.Н., Лоханина С.Ю., Трубачева Л.В.

Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия

E-mail: swetlei@mail.ru

Одним из важных аспектов деятельности испытательной лаборатории в ходе подтверждения компетентности является внутрилабораторный контроль качества результатов измерений (ВЛКК). Процедуры ВЛКК предусматривают применение реперов, в качестве которых могут выступать стандартные образцы различного уровня, а также специально созданные образцы, имитирующие по своему составу контролируемые объекты.

В экоаналитических лабораториях широкое распространение получили однокомпонентные образцы для контроля, а многокомпонентные – выпускаются в РФ небольшим количеством производителей и чаще всего представляют собой растворы ионов металлов, а не образцы на нативной основе. Целесообразность их применения обусловлена тем, что учитывается влияние матрицы на результаты контрольной процедуры; проводится контроль точности результатов измерений по нескольким компонентам; происходит отслеживание всей процедуры анализа по контролю объектов окружающей среды. При создании образцов, представляющих собой дисперсные материалы, очень важно обеспечить их однородность и прослеживаемость. Особые трудности возникают при создании образцов состава воды с аттестованными значениями содержания тяжелых металлов.

В ходе проведения эксперимента созданы матрицы ОК, содержащие основные макрокомпоненты природной воды, с дополнительно введенными микрокомпонентами-загрязнителями: ионами металлов (медь, свинец, кадмий) и рядом анионов. Микрокомпоненты выбраны в качестве реперов для оценки метрологических характеристик образца по указанной выше причине. Проведен обширный статистический эксперимент с применением различных методов анализа – инверсионной вольтамперометрии (для установления концентрации тяжелых металлов), молекулярно-абсорбционной спектроскопии (для определения содержания нитрат-ионов) и др. Определены метрологические характеристики образцов, такие как аттестованное значение, неопределенности от способа аттестации, от неоднородности и нестабильности материала. Установленные значения показали, что для контроля качества результатов, получаемых по аттестованным методикам измерений возможно применение созданных образцов. Для целей внутрилабораторного контроля результатов анализа воды на содержание некоторых тяжелых металлов необходимы дополнительные процедуры по доработке материала образца с целью обеспечения их однородного распределения в матрице.

Огнезащитные покрытия для резин на основе хлорсульфированного полиэтилена модифицированные ПВС волокнами

Цыбулько Н.О., Кейбал Н.А., Каблов В.Ф.

Волжский политехнический институт (филиал)

ФГБОУ «Волгоградский государственный технический университет»

Волжский, Россия

E-mail: tsybulko.nadya@yandex.ru

Материалы на основе галогенсодержащих полимеров прочно занимают свое место в многообразии полимерных покрытий и находят широкое применение в различных отраслях промышленности благодаря своим исключительным защитным свойствам и адгезии к различным субстратам. Одним из таких полимеров является хлорсульфированный полиэтилен (ХСПЭ).

Для создания огнезащитного материала на основе ХСПЭ в качестве модифицирующей добавки использовалось пиролизованное ПВС волокно, предварительно обработанное фосфорборсодержащим аппретом. На их основе был получен «вспучивающийся» материал, который под воздействием пламени резко увеличивался в объеме с образованием слоя кокса, представляющего собой закоксовавшийся расплав негорючих веществ. Адгезионное соединение покрытия с резиновой подложкой сохранялось как в процессе горения, так и после его прекращения. Полученная композиция может использоваться в качестве самозатухающего огнезащитного покрытия для полимерных материалов.

Целью работы является создание защитных покрытий для резин на основе ХСПЭ с повышенной адгезией, огнетеплостойкостью к резинам путем их модификации пиролизованным ПВС волокном. Установлено, что продукт - пиролизованное ПВС волокно является эффективным ингибитором горения, введение которого в небольшом количестве в состав композиции обеспечивает хорошую огнезащиту и высокую адгезию покрытия.

Установлено, что наиболее эффективное содержание модификатора, способствующее максимальному увеличению адгезии покрытий на основе ХСПЭ к резинам составляет 1-2%, что позволяет повысить прочность связи вулканизированных резин на основе различных каучуков с покрытием в среднем в 1,5 раза и существенно увеличить огнезащитные свойства. При большей концентрации ухудшается распределение пиролизованного ПВС волокна в полимере, что вызывает снижение прочности пленок.

Список литературы

[1] Калинина, Н.К. Разработка материалов на основе хлорсульфированного полиэтилена с улучшенными прочностными и эксплуатационными свойствами: автореф. дис. канд. техн. наук / Н.К. Калинина. – М., 2011. – 18 с.

Влияние кремнийорганических полимеров на пенообразование черного щелока в производстве сульфатной целлюлозы

Чебанова О.Т., Субботина К.О.

*Санкт-Петербургский Государственный Университет Промышленных Технологий и Дизайна. Высшая школа технологии и энергетики, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: angel021197@rambler.ru*

Вспенивание щелоков причиняет большие затруднения при выпаривании черного щелока. Причиной пенообразования является присутствие в черном щелоке поверхностно активных веществ (сульфатное мыло). Пена черного щелока трудно разрушается, продолжительность ее саморазрушения около суток [1]. Нами были проведены исследования по уменьшению пенообразования при выпаривании черного щелока производства сульфатной целлюлозы с применением гидрофобных кремнийобразующих полимеров (ингибиторов), которые способны образовывать на различных материалах невидимые адгезионные пленки [2]. Разрушение пены происходит из-за того, что ингибиторы увеличивают свободную энергию вызывая самопроизвольные процессы, уменьшающие дисперсность и приводящие к разрушению дисперсной системы.

Целевой функцией эксперимента являлся столб пены, мм. Исходное значение столба пены, при температуре 63,3 °С и времени реакции 0,3 мин- 38 мм. Для постановки эксперимента выбран ротатабельный центральный композиционный план [3]. В результате обработки экспериментальных данных полученной регрессионное уравнение:

$$Y=9,98487+0,169747*X_1-1,88051*X_2+1,32467*X_3+0,887108*X_1^2-0,75*X_1*X_2+0,75*X_1*X_3+1,59422*X_2^2-1,25*X_2*X_3-0,350329*X_3^2.$$

Влияние отдельных параметров представлены на рис.1-6.

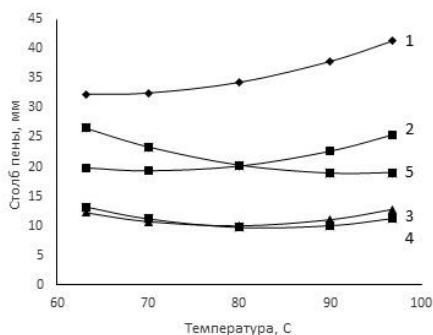


Рис.1. Зависимость столба пены, мм, от температуры, °С, при времени реакции 0,3 мин и различных концентрациях ингибитора, %: 1-13; 2-20; 3-30; 4-35; 5-46.

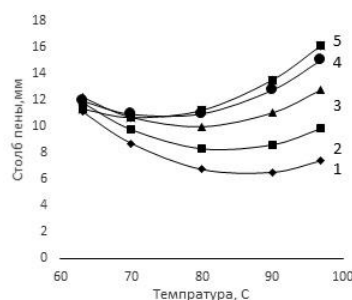


Рис.2. Зависимость столба пены, мм, от температуры, °С, при концентрации ингибитора 13%, и различном значении времени реакции, мин.: 1-0,3; 2-1; 3-2; 4-3; 5-3,6.

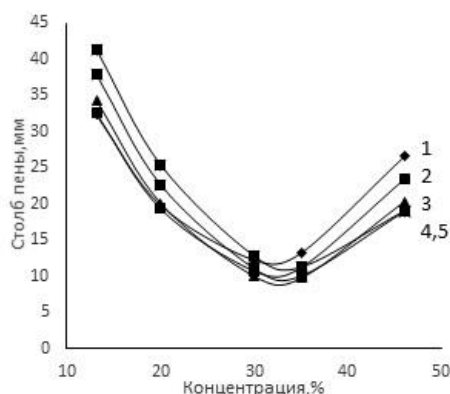


Рис.3. Зависимость столба пены, мм, от концентрации ингибитора, %, при времени реакции 0,3 мин, и различной температуре, °С.: 1-63,3; 2-70; 3-80; 4-90; 5-96,8.

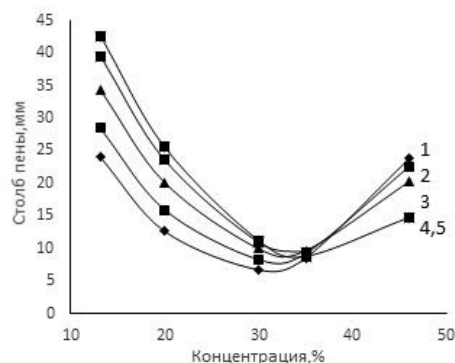


Рис.4. Зависимость столба пены, мм, от концентрации ингибитора, %, при температуре 63,3 °С, и при различном времени реакции, мин.: 1-0,3; 2-1; 3-2; 4-3; 5-3,6.

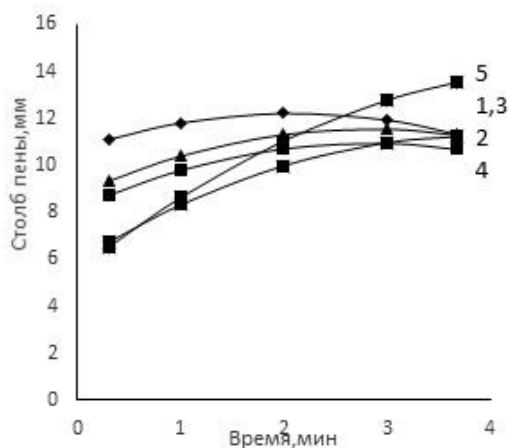


Рис.5. Зависимость столба пены, мм, от времени реакции, мин, при концентрации ингибитора 13 %, и при различной температуре, °С.: 1-63,3; 2-70; 3-80; 4-90; 5-96,8

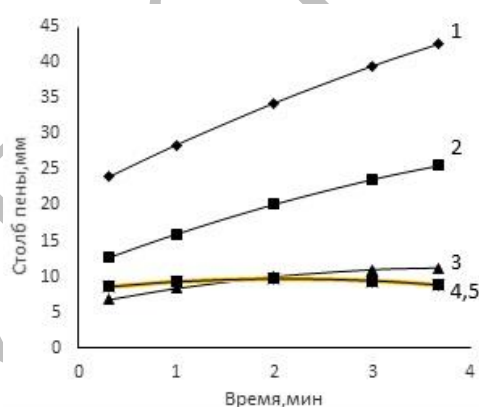


Рис. 6. Зависимость столба пены, мм, от времени реакции, мин, при температуре 63,3 °С, и при различной концентрации ингибитора, %: 1-13; 2-20; 3-30; 4-35; 5-46.

Анализ экспериментальных данных показал, что оптимальными параметрами для уменьшения пенообразования черного щелока, являются:

- температура – 80°С
- концентрация ГКЖ – 300 мг\дм³с.в.
- время реакции – 30с

Список литературы

- [1] Ю.С. Иванов, А.Г. Кузнецов, Л.Ю. Бабкина, Производство сульфатной целлюлозы ч.2, Учебное пособие СПб 2016, Изд-во ВШТЭ СПбГУПТД, 73с;
- [2] В.Бажант, В.Хваловски, И.Ратоуски, Силиконы, Изд-во Госхимиздат, Москва 1960г, 710с;
- [3] Сидняев Н. И., Вилисова Н. Т. Введение в теорию планирования эксперимента. М.: МГТУ им.Баумана, 2001. 32 с.

Влияние размеров частиц минералов на эффективность модификации свойств шерстяного волокна алюмосиликатами

Чернова Е.Н., Владимирцева Е.Л.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия*

E-mail: elvladimirtseva@mail.ru

Работа продолжает исследования, проводимые на кафедре ХТВМ ИГХТУ и направленные на изучение возможности модификации свойств природных волокон для придания им качественно новых характеристик. Предложен способ обработки шерстяного волокна в водной дисперсии нерастворимых алюмосиликатов. Для экспериментов были выбраны природные глинистые минералы, отличающиеся составом и наличием примесей. Шерстяное волокно обрабатывалось дисперсией алюмосиликатов на шейк-установке при постоянном встряхивании.

Специфика строения шерсти, наличие чешуйчатого слоя и пор различного диаметра (~12 мкм) обуславливают ее способность сорбировать и прочно закреплять на поверхности мельчайшие частицы порошков. Доказано, что наличие мелкодисперсной фракции алюмосиликатов, придает шерстяному волокну улучшенные потребительские и технологические свойства: заметно снижается свойлачиваемость шерсти, повышается устойчивость к действию УФ-излучения, шерсть приобретает способность окрашиваться хромовыми красителями без дополнительной стадии хромирования. В ходе экспериментов было установлено, что при постоянном перемешивании в водной дисперсии происходят конкурирующие процессы: сорбция нанофракции алюмосиликатов и абразивное истирание волокна более крупными частицами. При этом, для прогнозирования результата процесса, важное значение приобретает определение степени дисперсности распущенных в воде глин.

Размер частиц минералов оценивался методом динамического рассеяния света (ДРС) на приборе Photocor Compact-Z. Параллельно контролировалось изменение массы шерстяного волокна. Установили, что в течение 20 мин обработки шерсти дисперсией алюмосиликатов, размеры частиц ряда глин заметно изменялись – соотношение крупной и мелкой фракций в дисперсии повышалось от 1:1 до 1:2 и/или 1:3. В первую очередь это характерно для монтмориллонитовых глин: Бентонита, Часов-Ярской и др. При обработке шерсти такими глинами, результирующий привес волокна практически не зависит от того, какие фракции твердых минералов используются первоначально. В свою очередь глины, содержащие высокий процент кремнезема, практически не диспергируются в воде. Именно они максимально повреждают шерстяное волокно и, следовательно, непригодны для предложенного способа модификации шерсти.

Таким образом доказали, что характер и направленность эффектов модификации определяется не только химическим, но и гранулометрическим составом минералов.

Косметическое мыло с антибактериальными свойствами на основе природных компонентов

Черныш И.В.

Киевский политехнический институт им. Игоря Сикорского, Киев, Украина

E-mail: irachernysh55@gmail.com

Микрофлора кожи рук человека представлена полезными резидентными бактериями, которые участвуют в формировании иммунитета. С другой стороны, патогенные и условно патогенные микроорганизмы, попадая на кожу, могут быть причиной инфекционного заражения. Поэтому актуальным остается поиск перспективных антисептических добавок к моющим и косметическим средствам с точки зрения их экологической и санитарной безопасности. В косметические мыла часто вводят синтетические бактерицидные ингредиенты триклозан или триклокарбан. Изучение литературы показало, что такие вещества не всегда безопасны для организма человека и окружающей среды. Поэтому перспективным является использование антимикробных компонентов растительного происхождения [1].

Нами разработана рецептура антибактериального косметического мыла с учетом стандартных требований к органолептическим, физико-химическим и антисептическим свойствам продукта в соответствии с ДСТУ 4537:2006. В качестве мыльной основы были использованы очищенные для пищевого применения кокосовое и пальмовое масла (соответственно 40% и 60% по массе), а оливковое и касторовое масла 1:1 вводили в качестве пережиря (5% от общей массы основы). Как бактерицидный компонент использовали экстракт тимьяна, который получали из сухой биомассы 70%-ным этанолом с помощью экстрактора Сокелета. Карвакрол и тимол – основные бактерицидные вещества экстракта являются циклическими монотерпеноидами и препятствуют адгезии патогенных микроорганизмов.

Полученное мыло имело $pH = 8$, хорошую моющую и пенообразующую способность. В дальнейшем запланировано определить антибактериальную активность продукта в отношении микроорганизмов *Staphylococcus epidermidis* и *Candida albicans*.

Список литературы

[1] Andre' O. Barel, Marc Paye, Howard I. Maibach. // Handbook of cosmetic science and technology. 2009. Т. 3. С. 225-228.

Влияние состава полимерно-композиционных загустителей на качество набивных хлопчатобумажных тканей с активными красителями

Шарипов М.С.

Бухарский государственный университет, Бухара, Республика Узбекистан

E-mail: mssharpov@bk.ru

Успешное решение задач, возникающих при крашении и печатании тканей (заданная интенсивность, равномерность и прочность окраски) достигается за счет применения текстильных вспомогательных веществ. Наибольшую важность для процессов печатания тканей имеют загустители и некоторые другие компоненты печатных красок [1]. При печатании тканей активными и холодными красителями хорошо зарекомендовали себя загустители альгинатной природы, эфиры крахмала и целлюлозы, а также некоторые типы синтетических загустителей [2].

Важной задачей является нахождение оптимальной структуры полимеров, обладающих высокой загущающей способностью и не вызывающих повышение жесткости тканей. В этом плане хорошие результаты получены при использовании разработанных нами композиций при набивке тканей (таблица 1).

Таблица 1. Влияние содержания окисленного крахмала на колористические показатели хлопчатобумажных тканей напечатанных с активными красителями

Содержание ОК, г/кг в загустке	Состав водорастворимых полимеров	Колористические свойства		
		Неровнота окраски, ΔR, %	Разноотте- нчность, ΔE, %	Жесткость напечатанных тканей, мкН·см
5,8	ОК – Унифлок	0,17	1,3	27310
6,0	ОК – ГИПАН	0,11	1,1	21640
6,2	ОК-Унифлок- ГИПАН	0,07	1,0	8595

Жесткость напечатанной ткани резко снижается при содержании композиции 6,2 г/кг окисленного крахмала, однако дальнейшее повышение концентрации окисленного крахмала не приводит к достаточно резким изменениям жесткости. На основании полученных данных для печати хлопчатобумажных тканей с активными красителями целесообразно использовать предложенного состава загустки на основе окисленного крахмала с добавлением синтетических полиакрилатов.

Список литературы

- [1] Айзенштейн Э., Ефремов В. Мировое производство волокнистых материалов в начале 21 века.// «ЛегПромБизнесДиректор». 2001. №10(36). С.32.
 [2] Уклеба М., Буадзе Е., Шарабидзе М. Исследование возможности применения природных полимеров в роли загустителей // Известия вузов. Химия и химическая технология. 2007. т.3. вып.3. С.65-69.

Разработка сенсорного элемента для определения в воздухе NO_2 на основе тонких пленок $\text{Cd}_x\text{Pb}_{1-x}\text{S}$ с использованием различных солей кадмия

Шашмурин Ю. Г.¹, Бездетнова А. Е.¹, Кочнев А. В.¹,
Марков В. Ф.^{1,2}, Маскаева Л. Н.^{1,2}

¹ Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

² Уральский институт ГПС МЧС России, Екатеринбург, Россия

Одной из основных экологических проблем крупных городов в настоящее время является контроль за содержанием в воздухе NO_2 . Одними из наиболее эффективных средств для мониторинга состава атмосферного воздуха являются газоанализаторы с полупроводниковыми адсорбционно-чувствительными элементами (АЧЭ) [1, 2].

Нами исследованы сенсорные свойства гидрохимически осажденных на ситалл пленок твердого раствора $\text{Cd}_x\text{Pb}_{1-x}\text{S}$ к NO_2 . Содержание NO_2 в воздухе варьировалось в пределах 0–200 мг/м^3 . Результаты сравнительных исследований по отклику и релаксации сенсорных элементов на основе пленок $\text{Cd}_x\text{Pb}_{1-x}\text{S}$, синтезированных с использованием различных солей кадмия: CdAc_2 (1); CdBr_2 (2); $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2$ (3); CdCl_2 (4); CdI_2 (5) для концентрации NO_2 в воздушной среде 8 мг/м^3 , представлены на рис. 1 и 2 соответственно.

По результатам проведенных измерений следует вывод, что материал дает относительно хороший отклик, однако результаты могут значительно различаться в зависимости от аниона исходной соли кадмия.

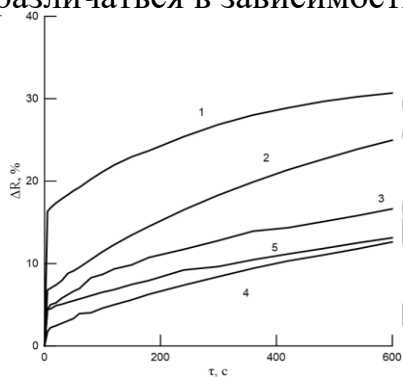


Рис. 1. Относительное изменение омического сопротивления пленок $\text{Cd}_x\text{Pb}_{1-x}\text{S}$, к диоксиду азота.

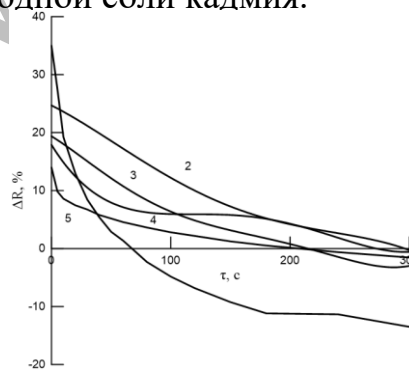


Рис. 2. Графическая зависимость процесса релаксации пленок $\text{Cd}_x\text{Pb}_{1-x}\text{S}$, после их контакта с NO_2

Установлено, что существует саморелаксация сенсорных элементов при нахождении сенсора в среде свежего воздуха. Полученные результаты свидетельствуют о перспективности исследованных пленок для создания на их основе сенсорных элементов для определения NO_2 .

Список литературы

- [1] Каттрал Р. В. Химические сенсоры/ Р. В. Каттрал. – М.: Научный мир. 2000. 145 с.
[2] Вышпанов Ю. А. Адсорбционная чувствительность полупроводников / Ю. А. Вышпанов, В.А. Смынтына – Одеса: Астропринт. 2005. 216 с.

Разработка и получение одноупаковочной силикатной краски с использованием аппаратов вихревого слоя

Шварев Р. Р., Войтович В. А., Захарычев Е. А., Карт М. А.

*Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

E-mail: rus.shwarev@yandex.ru

В настоящее время силикатные краски (СК) являются одними из наиболее прогрессивных, экологически чистых, пожаробезопасных лакокрасочных материалов (ЛКМ), все более широко используемых за рубежом для отделки фасадов, интерьеров как при строительстве новых, так и ремонте старых зданий и сооружений.

В России согласно ГОСТ 18958-73 силикатные краски изготавливаются на калийном жидком стекле в виде двух упаковок: в одной – жидкое стекло с наполнителями и пигментами, в другой – так называемый силикатизатор. При смешивании содержимого упаковки начинается химическая реакция, приводящая к отверждению краски. В качестве силикатизатора ГОСТ предусматривает использование оксида цинка в виде цинковых белил или бората кальция.

Из вышеизложенного следует, что двухупаковочность вносит определенные технологические неудобства при использовании данных красок, при этом они характеризуются невысоким качеством, создают проблемы как при окрашивании, так и в поведении покрытий, образующихся из них.

В связи с этим, лабораторией полимерных материалов НИИ химии ННГУ им. Н. И. Лобачевского совместно с ООО «Аппарат-НН» была разработана рецептура одноупаковочной силикатной краски, получаемой на современном высокотехнологичном оборудовании с применением аппаратов вихревого слоя. Данная одноупаковочная силикатная краска не имеет российских аналогов и характеризуется удобством применения, качеством, а также устойчивостью и долговечностью получаемого покрытия к внешним атмосферным воздействиям. Наряду с этим, при ее изготовлении удастся использовать натриевое жидкое стекло, которое в несколько раз дешевле калиевого.

Для диспергирования (измельчения) пигментов и наполнителей, входящих в состав данной одноупаковочной силикатной краски, применяли аппарат вихревого слоя (АВС). Степень перетира краски (показатель, характеризующий размер частиц пигментов и наполнителей) составила менее 10 мкм, при этом результат получен за достаточно короткий промежуток времени. Таким образом, использование АВС для получения данной краски позволило уменьшить не только время, затрачиваемое на диспергирование, но и существенно снизить энергозатраты процесса, по сравнению с традиционно используемыми в лакокрасочной промышленности бисерными мельницами.

Оптимизация режима экстрагирования инулина из сырья, его фракционирование по степени полимеризации

Шипилова А.С., Князев А.В., Гусарова Е.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: 28_stasy@bk.ru

Инулин – натуральный пищевой функциональный ингредиент, по своим свойствам относящийся к группе пребиотиков и имеющий обширную сферу применения. Обладая способностью воздействовать на организм комплексно, инулин активно используется в пищевой и фармацевтической промышленности [1]. В связи этим, целью работы является разработка промышленного способа получения инулина из топинамбура. Основная стадия данного процесса - экстракция инулина из топинамбура. Кроме того, актуальной проблемой является фракционирование инулина по длине цепи и отделение его от других соединений, содержащихся в сырье. Поэтому наша работа была направлена на решение следующих задач:

1. Экспериментальная оценка путей интенсификации экстрагирования.

При проведении исследований установлено, что наилучшим методом интенсификации процесса извлечения инулина из топинамбура является применение вибрационного воздействия [2]. Собранная нами установка позволяет генерировать колебания в интервале частот 6 - 30 Гц (100 – 1800 об/мин).

2. Оптимизация режимов экстрагирования инулина (гидромодуль, кратность, время, температура). Основными технологическими параметрами, которые влияют на процесс экстракции, являются: продолжительность экстракции, степень измельчения сырья, гидромодуль, температура. В ходе работы установлено, что процесс экстракции инулина из клубней топинамбура необходимо проводить при продолжительности экстракции 60 мин, гидромодуле 1:4, степени измельчения сырья 1-2 мм и температуре 80-85 °С. Степень экстракции инулина при этом составляет 85-90%.

3. Разработка методов фракционирования экстракта. Разработан поэтапный план очистки и фракционирования инулиносодержащего раствора: 1. Грубая фильтрация - бязь; 2. Микрофильтрация - 20 кДа, концентрат - высокомолекулярные соединения (пектин, белки и т.д.); 3. Микрофильтрация - 5 кДа, концентрат – другие высокомолекулярные соединения; 4. Ультрафильтрация - 3 кДа, концентрат - высокомолекулярный инулин, DP=19-35; 5. Нанофильтрация - 2 кДа, концентрат - среднемолекулярный инулин с DP=11-18, а фильтрат - низкомолекулярный инулин с DP=2-10.

Список литературы

- [1] Franck A. // Food polysaccharides and their applications. 2006. CRC Press.
[2] В.Т. Христюк, Ю.Ф. Якуба, М.А. Бабенкова // Реф. журнал КубГАУ. Краснодар. 2011. №7. С.10.

**Технологический эффект отбеливания растительных масел
и особенности выделения на полиминеральных носителях
биологически активных веществ**

Шишкина Ю.О., Строганова Ю.И., Нагорнов Р.С., Разговоров П.Б.
Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия
E-mail: razgovorov@isuct.ru

Биологическая ценность растительных масел во многом определяется содержанием в них хлорофиллов и каротиноидов. Кислородсодержащие каротиноиды – ксантофиллы обеспечивают смеси триглицеридов желтую окраску, а каротины (углеводородные соединения) придают оранжево-красный оттенок. При этом различают двойственное их влияние на окислительные процессы в маслах: в темноте каротиноиды проявляют антиоксидантные, а на свету – прооксидантные свойства.

В работе изучали технологический эффект отбеливания растительных масел (горчичного, рапсового, масла расторопши пятнистой) путем введения в них полиминеральных сорбентов (ООО НПФ «МедикоМед», Москва). На примере горчичного масла с исходным кислотным числом 2.9 мг КОН/г установлены удовлетворительные итоги выделения каротиноидов на полиминеральных носителях (отмученных и высушенных глинистых материалах, добываемых при прокладке метрополитена в крупных городах РФ) путем введения в жидкую фазу 1 мас. % порошковой зеленой глины – 4,20 мг/кг масла (рис. 1).

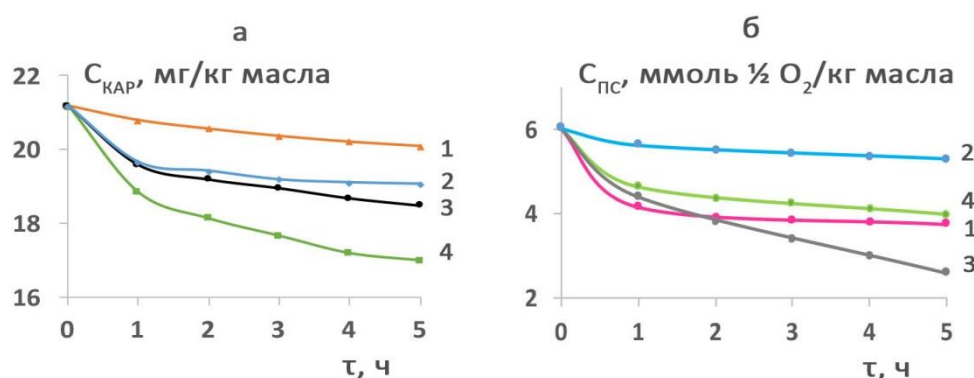


Рис. 1. Выделение каротиноидов (а) и перекисных соединений (б) из горчичного масла с использованием розовой (1), голубой (2), черной (3) и зеленой глины (4).

Первоначально перекисное число горчичного масла составляло 6.2 ммоль $1/2$ O₂ / кг масла и после отбеливания материалом голубой глины оно снизилось на 14%. Достойный результат получен с использованием порошковой черной глины (54%). Таким образом, наряду с концентрированием на поверхности полиминеральных носителей указанных биологически активных веществ, наблюдается эффект повышения сроков хранения масла. Выданы рекомендации по технологическому обеспечению процесса отбеливания растительных масел.

**Практика внедрения унифицированных биохимических эко-технологий
подготовки тканей**

*Шушина О.Е., Топорищева Н.А., Бабанова К.А., Чешкова А.В.
Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия
E-mail: cheshkova@isuct.ru*

К настоящему моменту Правительством Российской Федерации сформирован перечень приоритетных мер с целью отказа от использования устаревших и неэффективных технологий. Обеспечение комплексного подхода к внедрению экологичных и доступных технологий закреплено положениями Федерального закона от 21 июля 2014 г. № 219. [1]. Необходимость совершенствования технологий текстильного отделочного производства связана с значительными экологическими проблемами, диктуемыми наиболее энергоемкими и водо- и ресурсозатратными стадиями подготовки и беления. В Ивановской области, проведена глобальная модернизация отбельных цехов, установлено новое универсальное оборудование, позволяющее обрабатывать ткани различного сырьевого состава и ширины (от 1,5 до 2,8 м).

Решая задачу получения качественного материала, обладающего требуемой капиллярностью и белизной, нами предложено использовать все резервы биохимических процессов. Новые экотехнологии беления позволяют исключить водо- и энергоемкую щелочную отварку и кислацию в процессах беления хлопчатобумажных и смесовых тканей, гипохлоритные обработки - в технологиях подготовки льняных и полульняных тканей, и полностью исключить химические операции при подготовке пестротканей и материалов на основе серого льна. Показана актуальность внедрения двухстадийной ферментативно-пероксидной технологии беления на отделочных предприятиях Ивановской области («Тейковский текстиль» (2000 г.), ОП «Традиции текстиля» (2009 г.), ОСП «Самойловский текстиль» (2014 г.) на линии беления ЛОУ-220. Технология является унифицированной и рекомендована для джиггеров и эжекторов «Родники-текстиль» (г. Родники Ив. обл.) и универсальных линий «Goller-220», «Беннингер»-220 и Кюстерс-220 отделочных предприятий Ивановской области г. Шуя, г. Приволжск и г. Тейково. Доказана возможность сокращения в 2 раза расхода технологической воды, пара и электроэнергии, существенного улучшения качества сточных вод.

Список литературы

[1] Одинцова О.И., Козлова О.В., Чешкова А.В., Гревцов О.В. Информационно-технический справочник по наилучшим доступным технологиям «Производство текстильных изделий (промывка, отбеливание, мерсеризация, крашение текстильных волокон, отбеливание, крашение текстильной продукции)»: новые проблемы или новые возможности / Наилучшие доступные технологии. Применение в различных отраслях промышленности. Сборник статей 7. – М.: Издательство «Перо», 2017. – С. 124-130.

Анализ поверхностных свойств полиэфирсодержащих волокнистых материалов после авиважной обработки

Щавлев М.П., Смирнова С.В.

Ивановский государственный химико-технологический университет,

Иваново, Россия

E-mail: maks.shchavlev.94@mail.ru

Улучшение текстильной переработки полиэфирсодержащих волокнистых материалов на пути превращения волокна в ленту, ровницу, пряжу и ткань, в настоящее время очень актуально. Это связано с ростом потребления полиэфирных волокон, что объясняется их универсальностью и высокими показателями физико-механических свойств. Практически полная неизменность деформационных характеристик в мокром состоянии, высокая термостойкость и биостойкость обеспечили приоритетность полиэфирных волокон по сравнению с другими синтетическими волокнами. Кроме того, в Ивановской области (в г. Вичуге) создается комплекс по производству полиэтилентерефталата текстильного назначения, благодаря чему в нашем крае будут развиваться новые производства для переработки продукции комбината.

Настоящая работа посвящена анализу поверхностных свойств полиэфирсодержащих волокнистых материалов после авиважной обработки различными текстильно-вспомогательными веществами (ТВВ) с целью выбора наиболее эффективных препаратов для разработки композиций, улучшающих подготовку текстильных материалов на стадиях чесания и претрясения.

В работе проведена комплексная оценка влияния химической природы ряда индивидуальных ТВВ, выпускаемых российскими химическими предприятиями на деформационные и электрофизические характеристики текстильных полуфабрикатов. Проведен анализ влияния ТВВ на антистатические свойства исследуемых материалов. Оценены фрикционные и прочностные характеристики исследуемых материалов, а также их эластичность и мягкость.

На основании полученных результатов составлены композиции из наиболее эффективных препаратов, обработка которыми позволяет улучшить поверхностные характеристики полуфабрикатов: понизить удельное диэлектрическое сопротивление полуфабриката с 10^{14} до 10^8 Ом; снизить динамический коэффициент трения нити по металлу на 20-24%; повысить относительную разрывную нагрузку на 5-10% и относительное разрывное удлинение на 10-20%, а также снизить показатель жесткости в среднем на 15-18%.

Изучение морфологии комплексообразующих ионитов

Джалилов А.Т.¹, Тураев Х.Х., Маматкулов Ш.И.²,
Эшкурбонов Ф.Б., Касимов Ш.А., Эшкурбонова М.Б.

¹Ташкентский научно-исследовательский институт химической технологии,
Ташкент, Узбекистан

²УП Учебно-экспериментального Центра Высоких Технологий, Термезский
государственный университет, Термез, Узбекистан
E-mail: furqat-8484@mail.ru

Целью данной работы является электронно-микроскопическое исследование фазовой микроструктуры и состав комплексообразующих ионитов. Морфологии поверхности ионитов проводилась методом СЭМ, чтобы увидеть различимые изменения в их структурах. EDAX устройство показывает элементный состав образцов. Фотографии СЭМ ионитов показаны на рисунках 3,4,5 и 6.

На рисунке 3 представлена фотография микроструктуры поверхности ионитов при увеличении x5000. В изображении видно, что поверхность имеет неоднородное строение, ионит имеет гелиевой структуру в которых прослеживаются сферические, щелевидные поры и имеются более большие и мелкие частицы. Результаты EDAX устройства показали, что в иониты элементный состав представляется в основном углеродом, кислородом, азотом, серой, хлором, натрием.

Содержание их в весовых процентах: ДГТ+ГИПАН С – 53,0%, О – 16,8%, N – 14,1%, Cl - 13,0%, S – 3,1%.

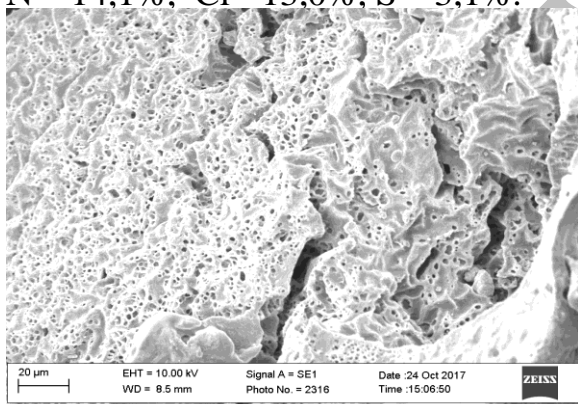


Рис.3 – Микроструктура ДГТ+ГИПАН

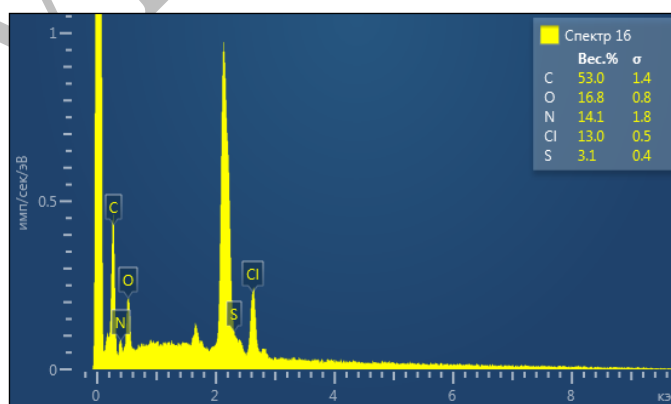


Рис. 5. Химический элементный состав ДГТ+ГИПАН

На основании исследования синтезированных комплексообразующих ионитов [1] показана принципиальная возможность создания конкурентоспособных и экологически чистых сорбционных технологий с применением новых ионитов для процессов гидрометаллургии. Получены новые полифункциональные иониты с высокой обменной емкостью и многих функциональных группы на основе ДГТ и ГИПАНов.

Список литературы

[1] Эшкурбонов Ф.Б. Синтез и исследование амфолита на основе гидролизованного полиакрилонитрила. //Узбекский химический журнал. 2013. №6. С. 13-16.

Исследование оптических свойств комплексообразующих ионитов

Джалилов А.Т.¹, Тураев Х.Х., Маматкулов Ш.И.²,
Эшкурбонов Ф.Б., Касимов Ш.А., Эшкурбонова М.Б.

¹Ташкентский научно-исследовательский институт химической технологии,
²УП Учебно-экспериментального Центра Высших Технологий, Термезский
государственный университет

Целью данной работы является ИК-спектроскопическое, электронно-микроскопическое исследование фазовой микроструктуры и состав комплексообразующих ионитов.

Для изучения строения и химии поверхности, а также для исследования теоретических и прикладных вопросов сорбции на комплексообразующих ионитах используются различные физико-химические методы. Анализ физико-химических характеристик ионитов ДГТ+ГИПАН охарактеризованы данными с помощью ИКС.

Метод ИКС позволяет получать прямые сведения об изменении при сорбции состояния поверхностных групп ионитов и химических связей в сорбированных молекулах и поэтому широко используется для исследования механизма сорбции. ИК-спектры комплексообразующего ионитах представлены на рисунке 1-2.

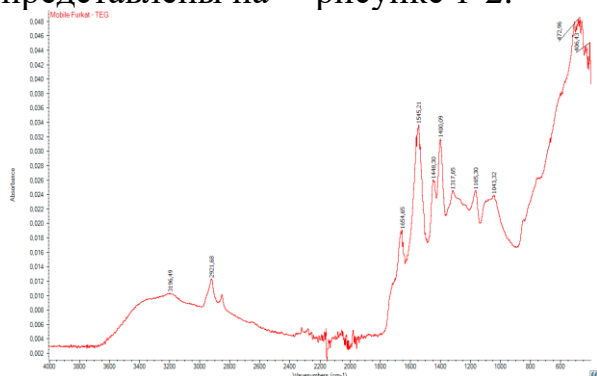


Рис. 1 – ИК-спектр ионита ДГТ–ГИПАН

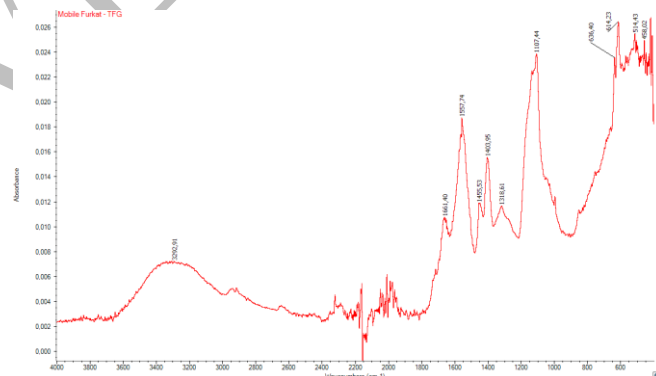


Рис.2 – ИК-спектр ионита ДМТ–ГИПАН

Как видно из рис. 1-2, ИК-спектры ионитов ДГТ+ГИПАН, и ДМТ+ГИПАН имеют большое сходство, что, вероятно, обусловлено близким химическим строением. В их спектрах отсутствуют характеристические частоты эпоксидных групп ($510-640$, $1100-1170$, $3100-3300$ cm^{-1}) и появляются полосы деформационных колебаний N-H ($1540-1665$ cm^{-1}) и валентных колебаний C-N ($1020-1200$ cm^{-1}) связей аминогрупп, что свидетельствует о химическом взаимодействии ДГТ и ДМТ с ГИПАНами. Поглощение в области $1400-1405$ cm^{-1} , обусловленное валентными колебаниями C=S и C=O группы, подтверждает наличие тиольных и оксолных группов в структуре ионитов [1].

Список литературы

[1] Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК- и ЯМР-спектроскопии в органической химии. М.: «Высш. школа», 1971.

**Модификация клеевых составов на основе полихлоропрена
фосфоратсодержащими соединениями в качестве промоторов адгезии**

Юмагулова Ю. И., Кейбал Н. А., Каблов В. Ф.
*Волжский политехнический институт (филиал) Волгоградского
государственного технического университета,
Волжский, Россия
E-mail: ulu19071994@mail.ru*

В настоящее время в резиновой промышленности и в быту широко используются клеи на основе полихлоропрена, которые предназначены для крепления резин друг к другу. Несмотря на распространенность клеев данного вида для них характерны сравнительно невысокие адгезионные показатели. Разработка клеевых составов на основе новых полимеров не всегда экономически оправдана и поэтому использование промоторов адгезии, вводимых в клеевые составы в незначительных количествах и обеспечивающих повышение эксплуатационных свойств клеев, выпускаемых в промышленном масштабе, является актуальной задачей.

Целью данной работы является разработка фосфоратсодержащих модификаторов и их применение в клеевых составах на основе полихлоропрена в качестве промоторов адгезии.

При исследовании полученных фосфоратсодержащих модификаторов на адгезионные свойства клеевых составов на основе полихлоропрена при склеивании резин друг с другом установлено, что наибольшие показатели адгезионной прочности достигаются при введении указанных модификаторов в клеевые составы в количестве 0,5-1,0%. Прочность клеевого соединения возрастает в среднем на 30 – 35 %.

Введение модифицирующей добавки № 3 с 0,5 частями анилина приводит к увеличению поверхностного натяжения и уменьшению угла смачивания. При этом работа адгезии увеличивается.

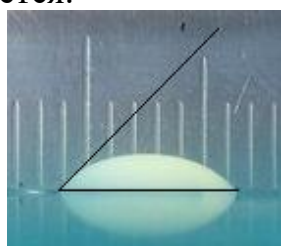


Рисунок 1. Определение краевого угла смачивания.

Таким образом, полученный продукт позволяет значительно повысить качество крепления изделий из вулканизированной резины на основе различных каучуков, улучшить технологические параметры процесса склеивания.

Список литературы

[1] Кейбал Н.А. Модификация клеевых составов на основе полихлоропрена новыми эпокси- и аминосодержащими промоторами адгезии: автореф. дис. на соиск. уч. степ. к.т.н. / Волгоградский государственный технический университет. Волгоград, 2006. – 150 с.

СОДЕРЖАНИЕ

	стр.
ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ	
<u>Нючев А.В.</u> Новые противоопухолевые конъюгаты для фотодинамической терапии	6
<u>Вельмузов А.П.</u> Современные достижения в области получения особо чистых халькогенидных стекол для инфракрасной волоконной оптики	7
<u>Мосягин П.В.</u> Микроэкстракционное концентрирование в аналитической химии	8
<u>Пушкин Д.В.</u> Стереозффект неподеленных электронных пар в структурах кристаллов	10
<u>Markin A.V.</u> Application of precise calorimetry in study of materials based on organic, organoelement and polymeric compounds	11
<u>Мялкин И.В.</u> Современные достижения в области сталеплавильного производства	12
ПРИГЛАШЕННЫЕ ЛЕКЦИИ	
<u>Петлина А.И., Знойко С.А., Шапошников Г.П., Филиппова А.А., Вашурин А.С.</u> Синтез и свойства октазамещенных металлофталоцианинов, сочетающих бифенилоксисаместители и нитрогруппы или фрагменты 1-бензотриазола	13
<u>Липеева А.В., Захаров Д.О., Шульц Э.Э.</u> Новые синтетические трансформации кумарина пепрутеницина	14
<u>Тихомирова Т.В., Говорова Д.К., Шапошников Г.П., Вашурин А.С.</u> Синтез и свойства тетра-4- $\{[(1,1'$ -бифенил)-4-ил]окси $\}$ фталоцианинов с редкоземельными металлами	15
<u>Рогалева Е.Ф., Сержкина Л.Б.</u> Кристаллохимическая роль сукцинат-ионов в структурах кристаллов и первый пример сукцинатауранилата с N-координированными лигандами	17
<u>Румянцев Р.Н., Дао К.К., Ильин А.А., Ужевская У.С., Горянская В.А.</u> Переработка метанола на оксидных железомолибденовых катализаторах	18
<u>Рыжакова А.П., Налбандян В.Б.</u> Синтез никелотеллуридов щелочных металлов	19
<u>Дремичева Е.С.</u> Повышение эффективности очистки нефтесодержащих сточных вод	20
<u>Елохов А.М., Богомоллов Н.В.</u> Экстракция катионов металлов в системах на основе синергетических смесей бис(алкилполиоксиэтилен)фосфата калия и хлорида алкилбензилдиметиламмония	21
<u>Давыдов А.Г., Ткачев Н.К.</u> Межионные взаимодействия в солевых	

расплавах при учете поляризационных эффектов	22
<u>Критская А.Ю., Березин М.Б., Антина Е.В.</u> Влияние различных типов структурной модификации VF_2 -дипиррометенов на их спектрально-люминесцентные свойства и фотостабильность	23
<u>Бурчаков А.В.</u> Фазовый комплекс стабильного тетраэдра $\text{LiF-KI-KF-K}_2\text{CrO}_4$ четырехкомпонентной взаимной системы Li,K F,I,CrO_4	24
<u>Портнова С.В., Ямщикова Ю.Ф.</u> Определение давления насыщенного пара и энтальпий испарения сложных эфиров молочной кислоты	25
<u>Елохов А.М., Лукманова Л.М., Горденчук А.Д.</u> Разработка конверсионного способа получения формиата кальция в системах $\text{Ca}^{2+}, \text{Na}^+ // \text{HCOO}^-, \text{An}^- - \text{H}_2\text{O}$	26
<u>Липина А.А., Авакова Е.О.</u> Оценка миграционной способности выделения акарицидно-репеллентных веществ	27

СЕКЦИОННЫЕ ДОКЛАДЫ

СЕКЦИЯ 1. Органическая, биомедицинская, элементоорганическая химия и химия высокомолекулярных соединений

<u>A. Fayoumi, D. Lyubov and A. Trifonov.</u> Synthesis of alkyl rare earth complexes supported by diphenylmethanido ligands and their application in stereospecific isoprene polymerization	29
<u>Kudaibergen G.K., Burkeev M.Zh., Tazhbaev E.M., Tovstukha K.V.</u> Synthesis of copolymers based on unsaturated polyester resin with methacrylic acid	30
<u>Kudaibergen G.K., Burkeev M.Zh., Tazhbaev E.M., Tovstukha K.V.</u> Synthesis and study of copolymers based on unsaturated polyester resin and vinyl monomer	31
<u>Polozov E.Yu., Zaitsev S.D., Grigoreva A.O.</u> Synthesis of homopolymers and block copolymers in the presence of switchable raft-agents	32
<u>Tskhovrebov A.G.</u> Metal-stabilized pyridinediazotates: synthesis and in vitro studies	33
<u>Voitovich Yu.V., Fedorov A.Yu., Combes S., Morelli X.</u> Exploring Selective Inhibition of the First Bromodomain of the Human Bromodomain and Extra-terminal Domain (BET) Proteins	34
<u>Абдуллина Г.М., Черепанов И.С.</u> Механизмы формирования структуры продуктов реакции Майяра в этанольных средах	35
<u>Абсалямова Э.А., Киселёв А.Н., Сырбу С.А.</u> 5,15-диазапорфирин в реакции Ag-катализируемого фосфорилирования	36
<u>Алатырева О.В., Насертдинова А.Д., Кашапова Л.Р., Хусаинов А.Д., Вольфсон С.И.</u> Получение и свойства динамических термоэластопластов на основе полиизопренового каучука и полипропилена с использованием смоляной вулканизирующей	37

системы

- Алекбаев Д.Р., Самуилов А.Я., Самуилов Я.Д. Исследование процесса термодеструкции карбаматов 38
- Алекбаев Д.Р., Самуилов А.Я., Самуилов Я.Д. Механизм катализа эфирами муравьиной кислоты реакции аминов с диметилкарбонатом 38
- Алыева А.Б., Колякина Е.В. Роль динитронов в синтезе полистирола и полиметилметакрилата 39
- Альмухаметов А.З., Гимазетдинов А.М., Мифтахов М.С. Внутримолекулярное циклопропанирование аллилсиланов, индуцированное фторид-анионом 40
- Андрейчук Е.П., Сиваев И.Б. Взаимодействие бис(дикарболлида никеля) (IV) с фенантролином и бипиридилем. 41
- Аристархова Д.В., Гушин А.В. Синтез металлоорганических соединений висмута и сурьмы и исследование их фоторазложения методом ЭПР 42
- Атангулов А.Б., Маликова Р.Н., Валиуллина К.А. Реакция фосфин-катализируемого [3+2] - циклоприсоединения алленоата с дитерпеновым фрагментом к фуллерену C₆₀ 43
- Ахмедгораева А.Р., Насыбуллина Г.Ф., Минибаева Л.А., Муртазина Л.И., Галимзянова Р.Ю., Закирова Л.Ю., Хакимуллин Ю.Н. Получение реактивных термопластичных герметиков на основе бутадиен-нитрильных каучуков 44
- Ахмедов О.Р., Шомуротов Ш.А., Тураев А.С. Сравнение антибактериальной активности гуанидин пектина с антисептическим средством хлоргексидин 45
- Ахмедов О.Р., Шомуротов Ш.А., Тураев А.С. Влияние показателя рК_а на величину антибактериального действия гуанидин содержащих производных пектина 46
- Багаева А.Н. Об изменениях коэффициентов диффузии пленочных образцов при увеличении толщины полимерной пленки 47
- Базанов А.А., Лукина Д.А. Реакции металлокомплексов на основе dprr-bian лиганда с соединениями, содержащими подвижный атом водорода 48
- Бакирова Э.Р., Садритдинов А.Р. Физико-механические свойства полимерных композитов на основе вторичного полипропилена и древесной муки 49
- Баранников М.В., Ильичев Д.А. Свойства полиамида-6 различного вида после его переработки 51
- Баранов А.П., Беспалова Г.Н., Филиппова Е.В. Отверждение покрытий из композиции для катодного электроосаждения МОЛ-110 52
- Бейсенбаев А.Р., Жакина А.Х., Василец Е.П., Рапиков А.Р., Арнт О.В. Влияние многостенных углеродных нанотрубок на процессы

получения гуминовых кислот и гуминоминеральных композиций в условиях ультразвукового воздействия	53
<u>Берегова Д.А., Кабиров Д.Н., Усачёва Т.Р.</u> Инклюзионное комплексообразование кверцетина с гидроксипропил- β -циклодекстрином в водно-этанольном растворителе	54
<u>Блинова Л.С.</u> Самоорганизация пиридиновых производных <i>трис</i> -(пентафторфенил)германа в монослоях Ленгмюра	55
<u>Боровой В.Ю.</u> Получение полиэтилентерафталата из полиэтилена	56
<u>Букова И.В., Аникеева С.В.</u> Получение имидазолина из гидрохлорида имида	57
<u>Буренкова Е.А., Князева Н.А., Гришин И.Д.</u> Особенности контролируемой полимеризации виниловых мономеров в условиях фотоконтролируемой радикальной полимеризации под действием производных фенотиазина	58
<u>Лизякина О.С., Ваганова Л.Б., Чегерев М.Г., Пискунов А.В., Гришин И.Д.</u> Взаимодействие N-(арил)- <i>о</i> -иминобензохинонов с цианизопропильными радикалами в различных средах	59
<u>Валиев Р.И., Овчинников Г.А., Тухватшин В.С., Талипов Р.Ф.</u> Влияние добавок углеродных нанотрубок на селективность образования 4,4-диметилдиоксана-1,3 по реакции Принса с участием <i>трет</i> -бутанол	60
<u>Варфоломеева С.П., Каблов В.Ф., Кейбал Н.А., Агеев П.А.</u> Разработка фосфоразотсодержащего модификатора для повышения огнетеплостойкости полимерных композиций	61
<u>Васюкова А.С., Базунова А.А.</u> Ферментативная деструкция биоразлагаемых композиционных материалов на основе вторичного полипропилена и растительных наполнителей	62
<u>Верховых В.А., Гушин А.В., Малеева А.И., Лаханина Е.А.</u> Полимеризация стирола в присутствии трифенилсурьмы	63
<u>Власов С.С., Куртуков В.В., Швыркова А.С.</u> Мультимодальная система для терапии злокачественных новообразований: технология получения, исследование высвобождения IN VITRO	64
<u>Воробьев И.И.</u> Высокоселективный безотходный синтез бензилметакрилата	65
<u>Газизов Э.Р.</u> Исследование устойчивости полимер-коллоидных дисперсий на основе золя гидроксида магния и N-поливинилпирролидона	66
<u>Галина А.Р., Шуршина А.С., Кулиш Е.И.</u> О проявлении конформационно-надмолекулярного эффекта при взаимодействии некоторых полисахаридов с антибиотиками	67
<u>Герасимова Т.С., Самохвалова М.В., Калистратова А.В., Ощепков М.С.</u> Реакционная способность диалкилоксалатов в реакциях аминолита	68

<u>Гиричева М.А.,</u> Гушин А.В., Малеева А.И. Реакция трифенилсурьмы и трифенилвисмута с ацетилсалициловой кислотой и трет-бутилгидропероксидом	70
<u>Голубчиков Д.О.,</u> Терехина А.В. Синтез производных 7,8-дигидроксифлавонов – нового поколения терапевтических агентов для лечения нейродегенеративных заболеваний	71
<u>Горковенко Д.А.,</u> Фам Ким Дао, Навроцкий В.А. Коагуляция смеси латексов натурального каучука и поливинилхлорида	72
<u>Григорьева А.О.,</u> Зайцев С.Д., Полозов Е.Ю. Синтез амфифильных сополимеров акриловой кислоты и 2,2,3,3,4,4,5,5-октафторпентилакрилата в условиях обратимой передачи цепи	73
<u>Гришина А.И.,</u> Блинова Л. И., Ильичев В.А., Бочкарев М.Н. Молекулярные f-d люминофоры на основе комплексов Се(III) с органосульфидными лигандами	74
<u>Гришина М.М.,</u> Лукьянова Ю.М., Мацулевич Ж.В. , Хрусталеv В.Н., Борисов А.В. Новый подход к синтезу производных 1,2,4-селенадиазола	75
<u>Грушин П.Н.,</u> Грушин И.Д. Исследование полимеризации глицидилметакрилата под действием систем на основе карборановых комплексах рутения	76
Зотов Ю.Л., <u>Губанов А.Н.,</u> Масленникова А.П. Каталитическое окисление кислородом воздуха 1-н-хлоргексадекана и н-гексадекана	77
<u>Гурина Г.А.,</u> Кисель А.А., Любов Д.М. , Трифонов А.А. Диалкильные комплексы редкоземельных элементов в качестве селективных катализаторов полимеризации изопрена	78
<u>Гырдымова Ю.В.,</u> Судариков Д.В., Шевченко О.Г., Рубцова С.А., Кучин А.В. Синтез и антиоксидантная активность новых тиосесквитерпеноидов	79
<u>Давлюд Д.Н.,</u> Воробьёва Е.В., Буча С.В. Реологические свойства анионных сополимеров акриламида в концентрированных солевых растворах	80
<u>Давыдова Т.М.</u> Влияние природы носителя на катализ процессов диспропорционирования аминов субмикро- и наночастицами никеля	81
<u>Демидов П.А.,</u> Демидова Ю.В. Синтез неионогенных поверхностно-активных веществ на основе карданола	82
<u>Дмитерко В.В.,</u> Певзнер Л.М., Степанова О.В. Синтез 4-(5-п-нитрофенилфур-2-ил)-1,2,3-тиадиазола	83
Степанова О.В., Певзнер Л.М., <u>Дмитерко В.В.</u> Синтез замещенных карбэтоксигидразон 2-бромфенилкетонoв	84
<u>Додонов В.А.,</u> Скатова А.А., Федюшкин И.Л. О химических свойствах дигаллана	85

<u>Долибожко Н.В., Юдашкин А.В.</u> 5'-Метил-2,2',5',2''-тертиофен как структурный блок в синтезе ряда органических люминофоров, содержащих 1,3,4-оксазольный фрагмент	85
<u>Доманина Е.Н., Терехова И.В., Прошин А.Н.</u> Твердые дисперсии производного 1,2,4-гиадиазола с полимерами: получение и исследование свойств	86
<u>Дорская Е.В., Лейкин Ю.А., Пестов С.М.</u> Полимерные сорбенты для извлечения липопротеидов низкой и очень низкой плотности из плазмы	87
<u>Дорская Е.В., Лейкин Ю.А., Пестов С.М.</u> Полимерные сорбенты для коррекции гипериммунных состояний	88
<u>Досниязова А.Г., Мухаметьянова А.Ф., Ишбаева С.М., Атангулов А.Б., Биглова Ю.Н., Сахаутдинов И.М.</u> Синтез новых жирорастворимых циклопентенофуллеренов фосфин-катализируемой реакцией [3+2]-циклоприсоединения 2, 3-диеноатов к фуллерену C ₆₀	90
<u>Досниязова А.Г., Маликова Р.Н., Габдрахманова С.Ф., Ишбаева С.М., Хисамутдинова Р.Ю., Сахаутдинов И.М.</u> Изучение ранозаживляющей активности производных фуллерена C ₆₀ с дитерпеновым блоком на модели термического ожога у крыс	91
<u>Дробков А.В., Алексанян Д.Р., Дутов М.Д., Русина О.Н., Кошелев В.Н.</u> Синтез новых представителей оксимов с трифторметильной группировкой	92
<u>Дрозд К.В.</u> Фармацевтические сокристаллы 4-аминобензойной кислоты	93
<u>Дукова С.В., Зайцев С.Д.</u> Гомо- и сополимеризация метакрисловой кислоты со стиролом в условиях обратимой передачи цепи	94
<u>Дьяченко В.С., Рассказова Е.В., Икрянникова В.В., Бурмистров В.В., Бутов Г.М.</u> Синтез и свойства адамантилсодержащих моно- и диимидазолидин-2,4,5-трионов	95
<u>Чигорина Т.М., Егоров Д.И.</u> Оптически прозрачные полимерные материалы на основе эпоксидных смол	96
<u>Петросян А.А., Егоров Д.М., Питерская Ю.Л., Догадина А.В.</u> Фосфорилирование амидодиэтилмалоната тетраметилэтиндифосфонатом	97
<u>Карцев Д.Д., Чернов И.С., Егоров Д.М., Питерская Ю.Л., Догадина А.В.</u> Особенности взаимодействия хлорацетиленфосфоната с мочевиной	98
<u>Зотов Ю.Л., Ежова К.А.</u> Изучение влияния катализаторов на окисление таллового пека	99
<u>Жила М.Ю., Глушко В.Н.</u> Исследования по синтезу нафтола AS-BS фосфата	100
<u>Жукова Л.Ю., Суханов А.И., Колобова П.А., Комин А.В.</u> Рефрактометрическое исследование систем карбоксилсодержащий	

сополимер – вода	101
<u>Залепкина С.А., Смирнов В.Ф., Мацулевич Ж.В., Борисов А.В.</u> Синтез и биологическая активность производных 2-селенопиридин-1-оксида	102
<u>Замалютин В.В., Безденежных В.А., Флид В.Р., Ничуговский А.И.</u> Синтез 2,2':6',2''-терпиридина и некоторых его интермедиатов конденсацией Поттса	103
<u>Зотов Ю.В., Заправдина Д.М., Зотова Н.Ю., Вершигора Г.К.</u> Смоленская А.А. Разработка методов синтеза многофункциональных добавок для ПВХ-композиций	104
<u>Зейналова С.З., Смирнова Л.А.</u> Гидрогели на основе крахмала и акриламида	105
<u>Зидиханова Л.Ф., Шуршина А.С.</u> Термодинамические характеристики взаимодействия пектина с натриевой солью цефазолина	106
<u>Зилигаева З.А.</u> Синтез и свойства амфифильного блок-сополимера на основе N-изопропилакриламида и 2,2,3,3-тетрафторпропилметакрилата в монослоях Ленгмюра и пленках Ленгмюра-Блоджетт	107
<u>Зуева Ж.В.</u> Изучение влияние оксидов редкоземельных металлов на кинетику отверждения полиорганосилоксанов	108
<u>Иванин С.Н., Бузько В.Ю., Панюшкин В.Т.</u> ЭПР характеристики стеарата гадолия и его гетеролигандного комплекса с дибензоилметаном	109
<u>Иванова Д., Зейналова С.З.</u> Гидрогели на основе крахмала и акриламида	110
<u>Ипатов Д.О., Будруев А.В.</u> Синтез 2-азабицикло[3.2.0]гепта-2,6-диенов при фотоиндуцированной гетероциклизации арилазидов	111
<u>Мухаметьянова А.Ф., Ишбаева С.М., Досниязова А.Г., Биглова Ю.Н., Сахаутдинов И.М.</u> Взаимодействие хлор - и бромметил-6-оксогептоноата с фуллереном C ₆₀	111
<u>Мухаметьянова А.Ф., Ишбаева С.М., Досниязова А.Г., Атангулов А.Б.</u> Взаимодействие 8-метил и 8-этил-1-метилокта-2,3-диеоаната с фуллереном C ₆₀	112
<u>Калачанова Е.П., Образцова Д.М., Григорьева О.Б.</u> Хроматографический контроль реакции морфолина с 1,5-диарилпент-2-ен-4-ин-1-онами	113
<u>Калугин Д.А., Шишкина Ю.О., Разговоров П.Б., Нагорнов Р.С.</u> Извлечение хлорофиллов из оливкового масла под действием органоминеральных сорбентов	114
<u>Канаков Е.А., Есипович А.Л., Белоусов А.С., Миронова В.Ю., Отопкова К.В., Щегутова Е.Н.</u> Влияние природы растворителя на процесс эпоксидирования метиловых эфиров жирных кислот	

пероксидом водорода	115
<u>Каналаш А.А., Знойко С.А., Майзлиш В.Е., Шапошников Г.П., Вашурин А.С.</u> Октазамещенные фталоцианины кобальта(II), содержащих 4-сульфофенилсульфанильные заместители и фрагменты малых гетероциклов	116
<u>Касимов Ш.А., Джалилов А.Т., Тураев Х.Х., Бекназаров Х.С., Пардаев О.Т., Гелдиев Ю.А., Холназаров Б.А.</u> Синтез сорбента на основе эпихлоргидрина	117
<u>Кашина Е.С., Фаткуллина Э.Д., Проскурина В.Е., Галяметдинов Ю.Г.</u> Флокулирующие свойства органо-органических гибридных нанокompозитов	118
<u>Кечина Е.В., Юдашкин А.В.</u> 1-(2,2'-битеноил-5)-тиосемикарбазид в реакции циклодегидратации	119
<u>Кипелкин Е.В., Малеева А.И., Гуцин А.В.</u> Синтез метакрилата тетрафенилсурьмы для получения прозрачного металлосодержащего органического стекла	120
<u>Киреева Ю.Г.</u> Изучение свойств допированного полианилина	121
<u>Киселёв А.Н., Горнухина О.В., Шарапов М.Ф., Вершинина И.А., Сырбу С.А.</u> Синтез и координационные свойства ряда фосфорилпорфиринов	122
<u>Ковалева О.В., Юдашкин А.В.</u> 5-(Тетразол-5-ил)-2,2'-битиофен как структурный блок в синтезе 2,5-дигетарилпроизводных 1,3,4-оксадиазола	123
<u>Козина М.А., Корокин В.Ж.</u> Рыбный коллаген как основа получения биологически активных материалов	124
<u>Козина Т.А., Часова Ю.О., Маткивская Ю.О.</u> Полимеризация алкилакрилата с винилбутиловым эфиром по механизму «живых» цепей	125
<u>Колпакова Е.В., Курамшин А.И., Галкин В.И.</u> Теоретическое изучение взаимодействия 2,6-добензилиденциклогексан-1-она и 3,5-бис(бензилиден)-пипиридин-4-онов с гексакарбонилвольфрамом(0)	126
<u>Колпакова Е.В., Курамшин А.И., Галкин В.И.</u> Экспериментальное изучение взаимодействия 2,6-добензилиденциклогексан-1-она и 3,5-бис(бензилиден)-пипиридин-4-онов с гексакарбонилвольфрамом(0)	127
<u>Копцева Т.С., Соколов В.Г.</u> Взаимодействие гидрида алюминия [(dpp-bian)AlH(Cl)] с фенилацетиленидом натрия	128
<u>Коротких Е.М., Боровикова Л.Н., Писарев О.А.</u> Синтез наночастиц висмута и их стабилизация в смеси β-циклодекстрина с поливинилпирролидоном	129
<u>Шишкин В.Е., Анищенко О.В., Шевченко М.А., Кошелева И.А., Соколов Н.А.</u> Новые структуры N,N'-замещенных C-фосфорилированных малонодиимидатов	130
<u>Кривоколыско Б.С., Доценко В.В., Кривоколыско С.Г.</u>	

Многокомпонентный синтез новых производных гистамина	131
<u>Критский И.Л., Терехова И.В., Шпилов Д.А., Курочкина Г.И., Грачев М.К.</u> Солюбилизирующее действие мономерных, димерных и полимерных циклодекстринов: исследование методом капиллярного электрофореза	132
<u>Крылов А.С., Эрхитуева Е.Б., Свинцицкая Н.И., Догадина А.В.</u> Синтез фосфорилированных имидазо[1,2-<i>a</i>]пиридинов	133
<u>Крымский Е.А., Васина Я.А.</u> Физико-химические свойства фармпрепаратов на основе природных L-α-аминокислот	134
<u>Кузьмина Н.С., Отвагин В.Ф., Нючев А.В., Федоров А.Ю.</u> Синтез фотоактивных противоопухолевых конъюгатов на основе тетрапиррольных соединений	135
<u>Кушнерова О.А., Додонов В.А.</u> Реакции (dpp-bian)GaNa с изоцианатами и изотиоцианатами	136
<u>Лапшин И.В., Басалов И.В., Трифонов А.А.</u> Межмолекулярное гидрофосфинирование алкенов и алкинов на комплексах двухвалентных лантаноидов и кальция	137
<u>Лоханина Е.А., Малеева А.И., Гуцин А.В.</u> Синтез, строение дикротоната триметилсурьмы и введение его в полимерные материалы	138
<u>Лизякина О.С., Ваганова Л.Б., Гришин Д.Ф.</u> Синтез полиметилметакрилата с участием карбазолов в условиях Organocatalyzed ATRP *	139
<u>Лукина О.Д., Красных Е.Л.</u> Синтез, определение индексов удерживания и характеристик сорбции сложных эфиров неопентилгликоля и кислот C2-C6	140
<u>Макаревская Т.Ю., Печникова Н.Л., Агеева Т.А.</u> Способы получения растворимых в водных средах композиций фталоцианината кобальта на основе водорастворимых полимеров	141
<u>Малай В.И., Ожогин И.В., Лукьянов Б.С., Лукьянова М.Б.</u> Новые индолиновые спиропираны нафталинового ряда, содержащие гидроксильную группу в 2H-хроменовом фрагменте	142
<u>Малеева А.И., Гуцин А.В.</u> Синтез кротоната тетрафенилсурьмы	143
<u>Манина Ю.В., Симанская К.Ю., Павловская М.В.</u> Разработка депрессорной присадки к гидроочищенному дизельному топливу	144
<u>Маркелова Е.С., Морозов А.Г.</u> Комплексы щелочноземельных металлов с редокс-активным α-дииминным лигандом – новые катализаторы полимеризации циклических эфиров	145
<u>Меляшова А.С., Смолобочкин А.В., Газизов А.С., Бурилов А.Р.</u> Необычная реакция в ряду N-(4,4-диэтоксипентил)иминов, приводящая к образованию 3-арилиден-1-пирролинов	146
<u>Митусова К.А., Плющенко А.В., Боровикова Л.Н., Киппер А.И., Писарев О.А.</u> Стабилизация наночастиц серебра про теолитическим	

ферментом химотрипсином	147
<u>Михневич Е.А., Сафронов А.П.</u> Термодинамика взаимодействия сополимера на основе акриламида и калиевой соли акриловой кислоты с микрочастицами феррита стронция	148
<u>Моисеева А.А.</u> Функционализация даунорубицина с целью синтеза новых противораковых препаратов	149
<u>Морозова Е.А., Вавилова А.С.</u> Синтез блок-сополимера метилметакрилата и желатина в присутствии комплекса три-н-бутилбора с гексаметилендиамином	150
<u>Морохина А.К., Беспалова Г.Н., Ларин А.Н., Агеева Т.А., Койфман О.И., Шабунин Е.К.</u> Изучение каталитической активности резината кобальта в электроосаждённых покрытиях	151
<u>Мурзаев Р.К., Джалилов А.Т., Таджиходжаев З.А., Нуркулов Ф.Н.</u> Разработка и исследование олигомерных антипиренов с использованием местных сырьевых ресурсов и отходов производства	152
<u>Мустакимов Р.А.</u> Получение ионообменного материала на основе вторичных отходов полипропилена	153
<u>Мустафаева С.Э., Трифонкина О.В., Демидова Н.А., Орлов Ю.Н.</u> Определение эффективности 4-гидрокси-2,2,6,6-тетраметил-4-пиперидин-1-оксида в качестве ингибитора термополимеризации диеновых мономеров	154
<u>Насертдинова А.Д., Кашапова Л.Р., Алатырева О.В., Хусаинов А.Д., Вольфсон С.И.</u> Влияние вулканизационных характеристик пероксидно-смоляной системы на свойства термопластичных вулканизатов на основе полиизопренового каучука и полипропилена	155
<u>Нгуен Тхи Тху, Гибадуллина Э.М., Бурилов А.Р.</u> Реакции α – фосфорилированных 2,6-ди- <i>трет</i> -бутил-4-метил-2,5-циклогексадиенонов с 2,6-диаминопиридином. Синтез и свойства	156
<u>Невестенко М.А., Чернышова Е.Б., Тужиков О.И.</u> Реологические свойства смесей на основе целлюлозы и полиуретанового каучука	157
<u>Нищик Е.В., Мохов В.М.</u> Изучение процесса гидрирования нитроаренов при катализе никелем, нанесенным на цеолит	158
<u>Нищик Е.В., Мохов В.М., Ширханян П.М.</u> Восстановительное алкилирование карбонильных соединений нитроаренами при катализе никелем, нанесенным на цеолит	159
<u>Нормуродов Б.А., Тожиев П.Ж., Тураев Х.Х., Нуркулов Ф.Н., Джалилов А.Т.</u> Синтез и ИК - спектроскопического исследования серосодержащего олигомера	160
<u>Одинокоев А.В., Будруев А.В., Пронина А.Л.</u> Синтез бензизоксазолов путем внутримолекулярной циклизации орто-замещенных арилазидов	161

<u>Осипенко А.А., Полякова И.В., Боровикова Л.Н., Писарев О.А.</u> Селективность сорбции холестерина из плазмы крови гранульными органо-неорганическими поверхностно импринтированными сорбентами	161
<u>Отвагин В.Ф., Нючев А.В., Кузьмина Н.С., Койфман О.И., Федоров А.Ю.</u> Создание гибридных агентов фотодинамической терапии на основе метилфеофорбида- <i>a</i> и 4-ариламинохиназолонов	162
<u>Офицерова Е.С., Шкляренко А.А., Яковлев И.П.</u> S-алкилирование 2-тиобарбитуровой кислоты	163
<u>Пенкаль А.М., Захаров А.А., Гришин И.Д.</u> Синтез новых металлакарборанов рутения(II) с ди- и трифосфиновыми лигандами	164
<u>Петрова Д.В., Семейкин А.С.</u> Изучение реакции амидирования <i>мезо</i> -арилзамещенных порфиринов	165
<u>Печень Н.А., Сазонова Е.В., Гришина Н.Ю., Артемов А.Н.</u> Получение новых производных оксазолидинов, содержащих в своем составе (η^6 -фенил)хромтрикарбонильные группы	166
<u>Планкин Г.С., Селихов А.Н., Трифонов А.А.</u> Трисалкильные комплексы редкоземельных элементов, содержащие активную М-С связь. Синтез, строение и изучение каталитической активности	167
<u>Плетнева М.Ю., Панов А.О.</u> Селективное получение вторичных аминов с использованием промышленных никель- и медьсодержащих катализаторов	168
<u>Плотникова А.В., Габдрахманова Р.Р., Колпакова Е.В., Курамшин А.И., Галкин В.И.</u> Катализируемое комплексами металлов 6 группы присоединение диалкилфосфитов к соединениям с кратной связью, неактивированной электроноакцепторными заместителями	169
<u>Габдрахманова Р.Р., Плотникова А.В., Колпакова Е.В., Курамшин А.И., Галкин В.И.</u> Катализируемое комплексами металлов 6 группы присоединение фосфинистых кислот к циклогексену	170
<u>Покровская Е.А., Белова В.С.</u> Получение модифицированных крахмалов с использованием пероксида водорода и диоксида тиомочевины	171
<u>Полонецкий Д.А., Беляев С.Н.</u> Вязкость зольей. Влияние вязкости на качество просветляющих пленок, нанесенных на кристаллы DKDP	172
<u>Попова М.С., Часова Ю.О.</u> Вязкостно-температурные характеристики раствора сополимера бутилакрилата с винилбутиловым эфиром в диоктилсебацinate в сравнении с коммерческими загущающими присадками	173
<u>Промзелева М.А., Прошин А.Н., Терехова И.В.</u> Улучшение фармакологически значимых свойств производного 1,2,4- тиадиазола посредством комплексообразования с	

циклодекстринами	174
<u>Пронина А.Л., Одинокоев А.В., Будруев А.</u> Синтез замещенных 12-оксо-6,12-дигидроазепино[2,1-b]хиназолинов	175
<u>Карашова В.Э., Пронина А.Л., Одинокоев А.В., Будруев А.В.</u> Влияние полярности среды на синтез замещенных 12-оксо-6,12-дигидроазепино[2,1-b]хиназолинов	176
<u>Ракшин С.О., Голованов А.А.</u> Синтез новых 6-арил-4-замещенных 1,2,3-триазалил-2-метоксипиридинов	177
<u>Рашмакова А.Е., Колякина Е.В.</u> Синтез полистеарилметакрилата в присутствии дитиобензоата и исследование его депрессорных свойств	178
<u>Т.С. Ризбаева, А.В. Смолобочкин, А.С. Газизов, А.Р. Бурилов, М.А. Пудовик.</u> Взаимодействие функционализированных производных 4,4-диэтоксипутан-1-амина с пирозол-5-онами. Синтез новых 2-пиразолилпирролидинов	179
<u>Рогожин А.Е., Есипович А.Л., Рыбкин П.А., Загуменнова Д.В.</u> Исследование процесса переэтерификации рапсового масла этанолом	180
<u>Рубцова Ю.А., Ваганова Л.Б., Малеева А.В., Пискунов А.В., Гришин Д.Ф.</u> Радиальная полимеризация стирола с участием систем на основе монокатехолатов олова(IV) и галогенорганических соединений	181
<u>Савинова М.В., Большакова Е.А., Антонов А.А.</u> Реологические свойства полимерных систем в смеси вода-пропиленгликоль	182
<u>Садиков А.Ю., Кашурин В.С., Корякова А.А., Коротаев М.С.</u> Исследование сополимеризации акриламида и N-[3-(диэтиламино)пропил]метакриламида. Термочувствительные свойства полимеров	183
<u>Селиванова Н.М., Жегалина Т.А., Галяметдинов Ю.Г.</u> Биосовместимые системы доставки лекарственных препаратов на основе лиотропных жидких кристаллов	184
<u>Соттикулов Э.С., Джалилов А.Т., Каримов М.У., Киёмов Ш.Н.</u> Изучение влияния модификатора на прочность и водостойкость геополимера	185
<u>Соттикулов Э.С., Джалилов А.Т., Каримов М.У., Киёмов Ш.Н.</u> Исследование сорбционных свойств ортокремниевой кислоты, модифицированной этаноламинами	186
<u>Стахи С.А., Гришин И.Д.</u> Контролируемый синтез сополимеров акрилонитрила для получения прекурсора углеродного волокна	187
<u>Стерин И.В., Шаталов Д.О., Кедик С.А., Аскретков А.Д., Коваленко А.В.</u> Разработка фармацевтической субстанции разветвленного олигогексаметиленгуанидина гидросукцинат	188
<u>Твердохлебова А.М., Шаталов Д.О., Кедик С.А.</u> Использование	

сополимера N-винилпирролидона с 2-метил-5-винилпиридином для борьбы с гельминтозом	189
<u>Ткачук Е.К.</u> , Апрытина К.В. Определение конформационных переходов макромолекул хитозана	190
<u>Тожиев П.Ж.</u> , Нормуродов Б.А., Тураев Х.Х., Нуркулов Ф.Н., Джалилов А.Т. Изучение физико-механических свойств базальтосодержащих полиэтиленовых композиций	191
<u>Тожиев П.Ж.</u> , Нормуродов Б.А., Тураев Х.Х., Нуркулов Ф.Н., Джалилов А.Т. Влияние количества базальта на показатели горючести полиэтилена	192
<u>Харитонов К.О.</u> , Кадомцева А.В. Триметилгидразиний пропионата дигидрат. Синтез, свойства, применение в медицине	193
<u>Хилько П.Р.</u> , Апевалин И.В., Иванкина О.М., Курунина Г.М. Способ получения N-циклогексил-2-бензтиазолилсульфенамида окислительной конденсацией с использованием пероксида водорода	195
<u>Чебрякова А.И.</u> , Волкова Т.В. Солюбилизация производного адамантана в мицеллярных растворах полимера Pluronic F 127	196
<u>Чеснов А.А.</u> , Тихомирова Т.В., Шапошников Г.П. Тетра-4-(4'-бромфенокси)фталоцианины и сульфокислоты на их основе	197
<u>Ширшин К.К.</u> , Ершов Д.А., Гуцин А.В. Амидирование метиловых эфиров жирных кислот N,N-диметиламинопропиламином в присутствии аминоспиртов	198
<u>Шишкина А.Н.</u> , Шигапова А.Р. Влияние концентрации фталоцианина кобальта на морфологию синтезированного полианилина	199
<u>Шувалов С.Э.</u> , Полозов Е.Ю. Влияние температуры на полимеризацию метилметакрилата в присутствии системы три- <i>n</i> -бутилбор – <i>n</i> -хинон	200
<u>Небыков Д.Н.</u> , <u>Щербакова К.В.</u> Изучение процессов гидрирования непредельных циклических углеводородов в присутствии наночастиц никеля, нанесенных на подложку	201
<u>Эркаев А.М.</u> , Нуркулов Ф.Н., Джалилов А.Т. Исследование модификации хлорсульфированного полиэтиленера эпоксидными модификаторами	202
<u>Яковлев И.В.</u> , Боровикова Л.Н., Киппер А.И., Писарев О.А. Влияние концентрации дауномицина на размерные характеристики нанокompозита антибиотика с наночастицами селена	203
<u>Яхияев Б.М.</u> , Нуркулов Ф.Н., Джалилов А.Т. Исследование азотсодержащих олигомеров для обессеривания природного газа от сероводорода	204

СЕКЦИЯ 2. Неорганическая химия, химия высокочистых веществ

<u>Алахмад Али</u> , Князев А.В. Синтез и исследование урансодержащих соединений аланина и глицина	205
<u>Алексеева Ю.В.</u> , Крашенинникова О.В., Князев А.В. Физико-химическое исследование жеззосодержащих фаз Руддлесдена-Поппера	206
<u>Балкарова Ж.Б.</u> , Потанина Е.А., Болдин М.С., Ланцев Е.А. Керамики для консолидации альфа-отходов, полученные методом Spark Plasma Sintering	207
<u>Балуева К.В.</u> , Плехович А.Д., Вельмузов А.П., Кутьин А.М. Влияние распределения зарядов на атомах и энтальпии взаимодействия в стёклах $GeS_x:Bi$ ($1 < x < 2$) на их люминесцентную активность	208
<u>Бахметьев М.О.</u> , Чаплиёва К.А., Нипрук О.В. Получение и исследование гексауранатов рубидия и цезия	209
<u>Белозеров Ю.С.</u> , Буланов А.Д. Получение высокочистого железа методом разложения пентакарбонила железа	210
<u>Блохина А.Г.</u> , Князев А.В., Лавренова Ж.А., Федоркина Е.О. Высокотемпературные исследования соединения $KNbTeO_6$	211
<u>Боков А.И.</u> , Дмитриенко А.С. Синтез и фазообразование сульфат-фосфатов со структурой минерала эвлитина	212
<u>Борисов Г.А.</u> , Сыров Е.В., Крашенинникова О.В., Князев А.В. Синтез и физико-химические свойства фазы Диона – Якобсона $KCa_2NaNb_4O_{13}$	213
<u>Брюзгина А.В.</u> , Урусова А.С., Черепанов В.А. Структура сложных оксидов в системе Y-Fe-Co-O	214
<u>Бутрина О.В.</u> Кристаллические структуры сложных фосфатов цинка, железа и элементов IVB группы	215
<u>Бутрина О.В.</u> Синтез и исследование сложных фосфатов $Na_{1+2x}Zn_xZr_{2-x}(PO_4)_3$	216
<u>Васильева А.А.</u> , Трошин А.Н. Фосфорсодержащие поллуцитоподобные соединения и керамика на их основе для иммобилизации цезия и стронция	217
<u>Веселова С.В.</u> Изучение магнитных гистерезисных свойств порошков на основе (Sm, R)-(Fe, T)-N, где R = Er, Ho; T = V, Al, полученных при различных режимах механоактивации	218
<u>Волкова А.В.</u> , Румянцев Р.Н., Денисова К.О., Ильин А.А., Ужевская У.С. Синтез и свойства ферритов никеля и кальция	219
<u>Гаврин С.А.</u> , Ревина А.В., Сибиркин А.А. Стеклообразование в системе $TeO_2-WO_3-La_2O_3$	220
<u>Ганущак Ю.В.</u> , Абраменко В.Л. Особенности синтеза и строения молекулярных и внутрикомплексных соединений	

диоксомолибдена(VI) с салицилиден-2-фурфуримилинами	221
<u>Глухова И.О.</u> Синтез и свойства каркасных фосфатов с общей формулой $M_{0.5(1+x)}Fe_xZr_{2-x}(PO_4)_3$ (M = Mn, Co, Ni, Cu, Zn)	222
<u>Горяев В.М., Сибиркин А.А.</u> Сложный оксид $Pr_2Te_2Mo_2O_{13}$ – компонент шихты для получения теллуритных стекол для магнитооптических устройств	223
<u>Гребеньков К.С.</u> Получение изотопнообогатщенного тетрахлорида кремния-28 по реакции тетрафторида кремния-28 и трихлорида алюминия	224
<u>Демидов Д.Н., Князев А.В., Блохина А.Г.</u> Экспериментальное исследование и ab initio расчет фазового перехода в $KTaWO_6$ под высоким давлением	225
<u>Залымова И.А.</u> Синтез и исследование фосфатов $A_{2-x}A'_xMg_{0.5}E_{1.5}(PO_4)_3$ (A/A' = Na, K, Rb, Cs; E = Ti, Zr)	226
<u>Зернова Н.С., Вельмузов А.П.</u> Халькогенидные волоконные световоды для FEWS анализа	228
<u>Каминская Е.И., Кириллов Ю.П., Трошин О.Ю.</u> Изучение кинетики последовательной реакции SiF_4 с $AlCl_3$	229
<u>Козина А.А., Федотова И.Г., Карзанов В.В., Сибиркин А.А.</u> Исследование влияния условий синтеза на оптическую прозрачность стекол системы $TeO_2 - MoO_3 - La_2O_3$	230
<u>Козлова Е.А.</u> Синтез и строение фосфата $Na_3Zr_{1.5}(PO_4)_3$	231
<u>Комшина М.Е., Князев А.В., Савушкин И.А., Лукоянов А.Ю.</u> Изучение теплового расширения сложных силикатов тория	232
<u>Коршак К.С., Буланов Е.Н., Князев А.В.</u> Терморентгенографические исследования $BiCa_4(PO_4)_3O$	233
<u>Кужелев И.А., Трошин О.Ю.</u> Получение и исследование свойств изотопнообогатщенного кварцевого стекла	234
<u>Кузнецов Д.Д., Пермин Д.А.</u> Горячее прессование прозрачной керамики оксида тербия, легированного редкоземельными элементами	235
<u>Лавренов Д.А.</u> Фазообразование двойных фосфатов в системах $M_{0.5+2x}E_{2-x}(PO_4)_3$ (M = Zn, Mn; E = Ti, Zr)	236
<u>Лаптенкова А.В., Селютин А.А.</u> Масс-спектрометрический анализ тонких плёнок на основе гексацианоферратов переходных металлов	237
<u>Лукоянов А.Ю., Комшина М.Е., Савушкин И.А., Баранов Е.В.</u> Структурные исследования двойных нитратов тория состава $NH_4Th(NO_3)_5 \cdot nH_2O$ (n = 5, 9)	238
<u>Майоров П.А.</u> Синтез и исследование сложных фосфатов циркония и металлов в степени окисления +2	239
<u>Маклакова А.В., Волкова Н.Е.</u> Кристаллическая структура и физико-химические свойства соединений, образующихся в системах Ln-Sr-Co-O (Ln = Sm, Gd)	240

<u>Манаков Н.В., Новиков С.А.</u> Кристаллическая структура глутаратууранилата гуанидиния	241
<u>Медведева Ю.А., Замятин О.А.</u> Исследование области стеклообразования в системе $\text{TeO}_2\text{-ZnO-CuO}$	242
<u>Муравьёва А.А., Князев А.В.</u> Комплексное структурное исследование сложных оксидных марганецсодержащих соединений системы $\text{K}_2\text{O-A}^{\text{III}}_2\text{O}_3\text{-MnO}_2$ (A^{III} - Al, Cr, Ga)	243
<u>Мухамедьярова А.Н., Егорова С.Р., Скибина Ю.Д., Чжан Ю., Ламберов А.А.</u> Влияние условий синтеза аморфного гидроксида алюминия методом переосаждения из Al-содержащих растворов по нитратной технологии	244
<u>Наливайко К.А., Титова С.М., Смирнов А.Л., Рычков В.Н.</u> Влияние интенсивности перемешивания на гранулометрический состав и насыпную плотность концентрата урана	245
<u>Натарова Е.С., Рудакова Л.В., Нифталиев С.И.</u> Исследование физико-химических свойств конверсионного карбоната кальция	246
<u>Никулина А.И., Федотова И.Г.</u> Исследование термических свойств стекол системы $\text{TeO}_2\text{-MoO}_3\text{-La}_2\text{O}_3$	247
<u>Одинаев Ш.А.</u> Комплексообразование железа(III) с $\text{N,N}'$ -диэтилтиомочевины в среде 3 моль/л HCl при 318 К	248
<u>Петров С.С., Буланов Е.Н., Лелет М.И., Князев А.В.</u> Изучение бинарной системы $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2\text{-Sr}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$	249
<u>Потанина Е.А., Ланцев Е.А., Болдин М.С., Сахаров Н.В.</u> Композитные керамики на основе вольфраматов и оксида магния	250
<u>Савушкин И.А., Комшина М.Е., Лукоянов А.Ю.</u> Синтез и кристаллохимия тройных фосфатов тория, лантана и двухвалентного элемента	251
<u>Седов В.А.</u> Синтез и изучение строения фосфатов титана, диспрозия и неодима	252
<u>Седов В.А.</u> Получение и исследование фазообразования каркасных фосфатов $\text{Sr}_{0.5+x}\text{M}_x\text{Zr}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ ($\text{M} - \text{Ni, Cu}$) структурного типа NZP	253
<u>Сюй Ц., Коршак К.С., Буланов Е.Н., Князев А.В.</u> Кристаллическая структура и теплофизические свойства $\text{Ba}_5(\text{MnO}_4)_3\text{Cl}$	254
<u>Токарева П.В., Королев Д.А.</u> Синтез, структурные и магнитные характеристики твердых растворов состава $\text{YBaCo}_{4-4x}\text{R}_{4x}\text{O}_7$ ($\text{R} = \text{Al, Zn}$)	255
<u>Токарев М.Г., Потанина Е.А., Болдин М.С., Ланцев Е.А.</u> Получение и исследование керамических композитов на основе молибдатов со структурой шеелита	256
<u>Томилова Т.С., Тимофеева Н.А., Гавришук Е.М.</u> Исследование процесса диффузионного легирования CVD-ZnSe ионами Fe^{2+}	257
<u>Тронов А.П., Толчев А.В.</u> Изучение строения частиц гиббсита методом электронной сканирующей микроскопии	258

<u>Тюрева А.Д., Красникова Т.А., Рыжакова А.П., Налбандян В.Б.</u> Новые тригональные фазы $\text{InR}^{3+}\text{TeO}_6$	259
<u>Усольцева Н.В.</u> Получение дисперсных материалов с наноразмерными фазами электрохимическим окислением меди и алюминия с использованием переменного тока	260
<u>Филатов А.И.</u> Исследование люминесцентных свойств стекол Ge-Ga-As-Se, легированных Pr (3+)	261
<u>Халмирзаева Д.У., Волкова Н.Е., Гаврилова Л.Я.</u> Синтез, структура и кислородная нестехиометрия сложных оксидов общего состава $\text{Sr}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$	262
<u>Хвостова Л.В., Петрова А.В., Волкова Н.Е., Черепанов В.А.</u> Кристаллическая структура сложных оксидов гомологического ряда Раддлесдена-Поппера $\text{Sr}_{2-y}\text{Sm}_y\text{FeO}_{4-\delta}$	263
<u>Шапошников В.А.</u> Определение коэффициента испарения пентакарбонила железа при простой дистилляции	264
<u>Шимин Н.А.</u> Синтез и строение $\text{PbUO}_2(\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)\text{COO})_4$	265
<u>Шипилов А.С.</u> Определение теплоемкости и термодинамических свойств системы $\text{Pb}_{0.5+x}\text{Mg}_x\text{Zr}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ ($x = 0, 0.5$)	266

СЕКЦИЯ 3. Аналитическая химия и экология

<u>Dhyaaldain H.M.</u> Quality analysis control of pharmaceutical medicines that containing ibuprofen	268
<u>Khabletdinova A.I., Yarkaeva Y.A., Zilberg R.A., Sidelnikov A.V.</u> Voltammetric "electronic tongue" based on glassy carbon electrodes modified by polyarylenephthalide composite with melamine and cyanuric acid for recognition of propranolol enantiomers	269
<u>Kuvaeva A.O.</u> The concentration effect research on differentiated determination in a mixture of the lactic and sulfuric acids content in a non-aqueous solvent medium by potentiometric titration	270
<u>Sokolova M.L., Lyalina E.I.</u> Metrological characteristics of the method determination of reduced glutathione by spectrophotometry	271
<u>Аетов А.У., Усманов Р.А., Габитов Р.Р., Мазанов С.В.</u> Окисление уксусной кислоты пероксидом водорода в водной среде в сверхкритических флюидных условиях	272
<u>Аликина М.Д., Тимофеева И.И., Осмоловская О.М., Булатов А.В.</u> Газо-адсорбционное выделение селена на магнитных наночастицах с последующим определением методом ААС	273
<u>Аралкина М.В., Аралкин О.Л., Вяткина О.В., Сетюхова М.В.</u> Новые аналитические методы контроля фенолов в водных растворах	274
<u>Бажин В.Ю., Вяткина О.В., Ярошук А.В., Александрова Д.Д.</u> Получение и применение фермент-полиэлектролитных комплексов с пероксидазной активностью	275

<u>Богуславский В.Б.</u> , Тихонова А.А., Максютова Э.И., Сидельников А.В. Вольтамперометрическое поведение энантиомеров триптофана с использованием электрохимически активированного сенсора	276
<u>Буланова А.А.</u> , Сорочкина Т.Г. Газохроматографическое определение продуктов взаимодействия SiF_4 с AlCl_3	277
Александрова Е.А., <u>Буланова С.А.</u> , Мосягин П.В. Высокочувствительное определение эфиров <i>o</i> -фталевой кислоты в слабоалкогольных напитках	278
<u>Вдовина И.А.</u> , Мосягин П.В. Высокочувствительное газохроматографическое определение хлорпроизводных эфиров ортофосфорной кислоты и полибромированных бифениловых эфиров	278
<u>Гашимова Е.Н.</u> , Абилова У.М., Чырагов Ф.М. Исследование сорбции палладий ион полимерных сорбентов содержащие фрагмент сульфодимезин и NN'-дифенилгуанидин	279
<u>Грубов Р.Е.</u> , Смирнова Л.В., Селивёрстов М.Е. Газохроматографическое определение пестицидов в винах с микроэкстракционным концентрированием	280
<u>Дремичева Е.С.</u> , Мялкин И.В. Расчет возможности химического взаимодействия смешиваемых сточных вод на промышленных предприятиях	281
<u>Ёлкина Ю.С.</u> , Лялина Е.И. Метрологическая характеристика определения растворенного кислорода в растворах сульфата меди (II) с добавлением восстановленного глутатиона GSH методом амперометрии	282
<u>Загородников Н.В.</u> Исследование возможности чувствительного определения некоторых неорганических веществ методом микрокристаллоскопии	283
<u>Кабилова Л.Р.</u> , Яркая Ю.А., Зильберг Р.А., Сидельников А.В. Электрохимическое поведение энантиомеров атенолола на стеклоуглеродном электроде, модифицированном трехкомпонентной смесью полимеров	284
<u>Кабилова Л.Р.</u> , Яркая Ю.А., Зильберг Р.А., Сидельников А.В. Электрохимическая активация поверхности рабочего электрода	285
<u>Карапетян Д.Д.</u> , Игитхян А.Э., Платонов И.А., Колесниченко И.Н. Микроаналитические системы для анализа выдыхаемого воздуха	286
<u>Карсункина А.С.</u> , Лебедев А.Н. Использование сорбентов для определения пластификаторов в воздухе	287
<u>Касьянов З.В.</u> , Ганькова К.Л., Шустов М.В. Фармакогностическое изучение бодяка разнолистного – нового потенциально лекарственного вида растения	288
<u>Китева Е.А.</u> , Григорьева О.Б. Разработка методики	

хроматографического определения состава циркулирующего ацетонитрила на капиллярной колонке	289
<u>Котов С.В.</u> Загрязнение хлорорганическими пестицидами экосистемы северо-восточной части Черного моря в 2016 году	290
<u>Куваева А.О.</u> Исследование влияния температуры на дифференцированное определение в смеси содержания молочной и серной кислот в среде неводных растворителей методом потенциометрического титрования	291
<u>Лебедев А.Н., Карсункина А.С.</u> Получение сорбционных материалов с варьируемой порозностью	292
<u>Лебединец С.А., Почивалов А.С., Вах. К.С., Булатов А.В.</u> Хроматографическое определение меропенема в биологических жидкостях с предварительным концентрированием на принципах дисперсионной жидкостной микроэкстракции	293
<u>Шайдарова Л.Г., Лексина Ю.А., Челнокова И.А., Даминдарова Д.Р., Казакова В.А., Будников Г.К.</u> Проточно-инжекционное амперометрическое определение щавелевой кислоты на углеродном электроде, покрытом плёнкой из нафiona с иммобилизованными наночастицами палладия	294
<u>Лесина Ю.А., Созин А.Ю.</u> Хромато-масс-спектрометрическое исследование примесного состава высокочистых серы и селена	295
<u>Луннов М.С., Васина Я.А.</u> Детоксикация осадков сточных вод	296
<u>Максютова Э.И., Дубровский Д.И., Тихонова А.А., Сидельников А.В.</u> Самомодифицирование сенсора и его контроль с использованием динамической импедансометрии и метода главных компонент	297
<u>Мезенцева О.Л., Слепченко Г.Б.</u> Использование органо-модифицированных электродов для вольтамперометрического определения некоторых психоактивных веществ	298
<u>Мезенцева О.Л., Слепченко Г.Б.</u> Модель кинетики сорбции на торфе ионов железа(III) и меди(II) из сточных вод	299
<u>Наянова Ю.В., Елипашева Е.В.</u> Фотометрический контроль содержания арсенат- и арсенит-ионов в питьевой воде с использованием индикаторов различных классов	300
<u>Николаева А.А., Елипашева Е.В.</u> Применение индикаторов сафранина Т, вариаминового синего и индигокармина для фотометрического определения хрома (III) и хрома(VI)	301
<u>Николаев А.Р.</u> Газохроматографическое определение диэтилфталата в парфюмерии	302
<u>Пардаева Н.Ж., Нормуродов Б.А., Тожиев П.Ж., Касимов Ш.А., Гелдиев Ю.А.</u> Определение содержания йода и брома в термальных водах Узбекистана	302
<u>Пардаева Н.Ж., Нормуродов Б.А., Касимов Ш.А., Тожиев П.Ж.,</u>	

- Гелдиев Ю.А.** Исследование содержания йода и брома в Сурхандарьинских артезианских водах 303
- Петрова О.Н., Лоханина С.Ю., Трубачева Л.В.** Аспекты применения окислителей при молекулярно-абсорбционном спектроскопическом определении содержания марганца в водах 304
- Проворова Ю.Р., Зильберг Р.А.** Вольтамперометрическое определение метионина на стеклоуглеродном электроде, модифицированном полиариленталидом 305
- Санышева Д.А., Лутошкина К.А., Елипашева Е.В.** Фотометрическое определение сурьмы (III,V) с использованием индикатора сафранин Т 307
- Сарсенбекова А.Ж., Халитова А.И., Кенжетаева С.О., Копжасарова А.Б., Жалелов Т.А., Жантурганов Н.Ж.** Изучение взаимодействия рутина с ионами хрома (III) 307
- Сироткин Р.Г., Елипашева Е.В.** Возможности ионохроматографического определения хлоруксусных кислот в водных растворах с использованием различных сорбентов, кондуктометрического и диодно-матричного детекторов 308
- Станкова А.В.** Экстракция катионов металлов в системах вода – оксиэтилированный нонилфенол – высаливатель 309
- Стешин М.О.** Анализ пентакарбонила железа методом масс-спектрометрии высокого разрешения с индуктивно связанной плазмой 310
- Тихонова А.А., Галимханова Р.В., Максютлова Э.И., Сидельников А.В.** Мультисенсорная система на основе графитового и платинового электродов для распознавания препаратов метионина различных производителей 311
- Трус И.Н., Гомеля Н.Д., Бортник Е.В., Воробьева В.И.** Методы очистки воды от ионов меди 313
- Воробьева В.И., Чигиринец Е.Э., Трус И.Н., Фатеев Ю.Ф., Фроленкова С.В.** Ингибирование атмосферной коррозии металлов композициями на основе отходов растительного сырья 314
- Фадеева Д.А.** Определение матричного состава стекол системы Ge–Se–Te методом АЭС-ИСП 315
- Мурзина К.А., Хаблетдинова А.И., Яркаяева Ю.А., Зильберг Р.А.** Вольтамперометрическое определение триптофана на стеклоуглеродном электроде, модифицированном полиариленталидом 316
- Шайхитдинова Ю.Ф., Сухарева Д.А., Гуськов В.Ю.** Хиральные сорбенты на основе супрамолекулярных структур циануровой кислоты с индуцированной хиральностью 317
- Шестак И.В., Воробьева Е.В.** Ресурсосберегающие технологические процессы водоподготовки с использованием водорастворимых

полимеров	318
<u>Шолина А.В.</u> Спектрофотометрическое определение жесткости воды	319
<u>Эркабаев Ф.И.</u> , Исмаилова Н.А. Получение оксида хрома(III) из отработанных хроматсодержащих растворов	320
<u>Эркабаев Ф.И.</u> Влияние природы органического восстановителя на степень восстановления ионов шестивалентного хрома	321

СЕКЦИЯ 4 Теоретическая и квантовая химия, фотохимия и спектроскопия

<u>Kuzmina L.E.</u> , Tran Dinh Phien, Shlykov S. A. Conformational properties of cyanocyclohexane: gas electron diffraction (GED) and quantum chemical calculations (QC)	322
V.I Vorobyova, O.E. Chygyrynets', M.I. Skiba, <u>Pichachi V.V.</u> Quantum chemical studies on corrosion inhibition effect of 2-Methyl-5-(propan-2-yl)phenol	323
<u>Ахметкаримова Ж.С.</u> , Мулдахметов Ж.Х., Аринова А.Е., Ордабаева А.Т., Исабекова Д.С. Синтез композитных катализаторов на основе соли железа на цеолите	324
<u>Белкина Н.В.</u> , Вакулин И.В., Вакулина А.И. Оценка конформационной заселенности (R)-4-ментенола	325
<u>Белкина Н.В.</u> , Вакулин И.В., Талипова Г.Р., Вакулина А.И. Зависимость конформационной заселенности (R)-4-ментанола от температуры	326
<u>Бочаров П.С.</u> , Ксенофонтов А.А., Гусева Г.Б., Антина Е.В. Сравнительный квантово-химический анализ эффектов алкилирования ВODIPY	328
<u>Гельфанд Н.А.</u> , Вовна В.И. Моделирование УФ-вид спектров поглощения β-дикетонатов дифторида бора с ароматическими заместителями	329
<u>Губочкин Н.С.</u> , Фомичев Д.А. Квантово-химическое исследование кинетики реакций окисления сернистых радикалов оксидом азота(IV)	330
<u>Данилов Ф.О.</u> , Шамсиев Р.С. Квантово-химическое моделирование гидрирования фенилацетилен на поверхности палладия	331
<u>Дегтяренко А.И.</u> , Минасян Ю. В., Плехович С.Д., Зеленцов С.В. Квантово-химическое изучение реакции фотохимического окисления ацетилен нитросоединениями	332
<u>Дегтяренко А.И.</u> , Минасян Ю. В., Плехович С.Д., Зеленцов С.В. Изучение механизма окисления алкинов нитросоединениями на примере реакции взаимодействия ацетилен с HNO ₂	333
<u>Ермаков А.А.</u> , Сенников П.Г., Трошин О.Ю. Исследование	

продуктов конверсии SiF_4 в SiCl_4 методом ИК-фурье-спектроскопии	334
<u>Игнатова А.В., Иванов С.Н., Лапыкина Е.А., Гиричева Н.И., Федоров М.С.</u> Орто-дисульфо- и дикарбоновые кислоты бензола - сильные протонодоноры	334
<u>Карякин М.Е., Князев А.А. Галяметдинов Ю.Г.</u> Особенности плазменного усиления люминесценции мезогенных комплексов лантаноидов	336
<u>Касымова М.С., Абуляисова Л.К.</u> Компьютерное моделирование молекулы феноксиметилпенициллина	337
<u>Красникова О.В., Гордцов А.С.</u> Диагностика тромбоза легочных артерий методом инфракрасной спектроскопии сыворотки крови	338
<u>Курбатова М.С., Баранников В.П., Гиричева Н.И.</u> Отнесение сигналов ^1H ЯМР-спектра дипептида $\alpha\text{-Ala-}\alpha\text{-Ala}$ в цвиттер-ионной форме с помощью квантово-химических расчетов методом DFT/GIAO	339
<u>Лихонина А.Е.</u> Устойчивость порфириноидов к действию УФ- и видимого излучения	340
<u>Лысич Д.В., Зеленцов С.В.</u> Основная тенденция совершенствования «взрывной» фотолитографии	341
<u>Малеев А.А., Бухвалова С.Ю., Федоров А.Ю., Игнатов С.К.</u> Оценка биологической активности потенциальных антимиотических агентов - бензоксепинсодержащих аналогов колхицина методом молекулярного докинга	342
<u>Мельникова М.И., Плотникова Л.В., Нечипоренко А.П., Успенская М.В.</u> Методы рефрактометрии и ИК-спектроскопии отражения в исследовании растительных масел и их купажей	343
<u>Минасян Ю.В., Дегтяренко А.В., Плехович С.Д., Зеленцов С.В.</u> Квантово-химическое моделирование реакции фотоокисления олефинов ароматическими нитросоединениями в триплетном состоянии	344
<u>Минасян Ю.В., Дегтяренко А.И., Плехович С.Д., Зеленцов С.В.</u> Механизм реакции окисления para-ClPhNO_2 олефинов в триплетном состоянии	345
<u>Овсянников Д.В., Фомичёв Д.А.</u> Механизм фотохимического переноса атома водорода от амина к нитросоединению	346
<u>Первухина Н.В., Федоров М.С.</u> Теоретическое исследование электронных спектров поглощения 1-аминонафталин-8-сульфо кислоты и ряда её производных	348
<u>Пичахчи В.В., Фатеев Ю.Ф., Чигиринец Е.Э.</u> Квантово-химические расчеты структурных и энергетических параметров 3,5-диметокси-4-гидроксибензальдегида	349
<u>Плотникова Н.А., Нечипоренко У.Ю., Плотникова Л.В.,</u>	

Успенская М.В., Ишевский А.Л. Исследование масляных и CO ₂ -экстрактов растительного сырья оптическими методами	350
Еськова Е.В., Пущина А.В., <u>Пустолайкина И.А.</u> Квантово-химический расчет протонного обмена в системе ·CH ₂ OH радикал – ион гидроксония	351
Пущина А.В., Еськова Е.В., <u>Пустолайкина И.А.</u> Теоретическая оценка константы скорости реакции протонного обмена в кислых водных растворах оксиметильного радикала	352
Турабджанов С.М., <u>Рахимова Л.С.</u> , Юсупова Д., Бекназарова И.К. Изучение сорбции ионов меди квантово-химическим методом	353
<u>Романова Ю.М.</u> , Троицкая Д.Е., Кочетова Л.Б. Квантово-химическое моделирование механизмов реакций N-алкиланилинов с бензолсульфонилхлоридом в газовой фазе и растворителе	354
<u>Сагдеев Д.О.</u> , Шамилов Р.Р., Воронкова В.К., Суханов А.А., Галяметдинов Ю.Г. Магнитные и оптические свойства наночастиц Mn: CdS/ZnS	355
<u>Солдатова К.М.</u> , Гиричева Н.И., Смирнова А.И., Усольцева Н.В. Электронные спектры поглощения производных порфирина. Эксперимент и теория	357
<u>Суворова О.А.</u> , Федоров М.С., Кораблева М.С. Электронные спектры поглощения анионов 1,8-нафтосультама и его замещенных: TDDFT исследования	358
<u>Улесова Д.А.</u> , Соснин И.М., Писарева В.С., Романов А.Е., Викарчук А.А. Влияние концентрации модельного поллютантана фотокаталитическую активность наночастиц ZnO	359
<u>Улесова Д.А.</u> , Писарева В.С. Исследование флуоресцентных свойств комплексных соединений цинка с 3,3',4',5,7-пентагидроксифлавоном	360
<u>Улитин Н.В.</u> , Биктимиров Д.Р., Терещенко К.А., Харлампики Х.Э. Решение обратной задачи химической кинетики для процесса окисления кумола	361
Нурмуродов Т.Ш., <u>Улитин Н.В.</u> , Зиятдинов Н.Н., Моделирование процесса окисления кумола в программной среде UniSim Design	362
<u>Филиппова А.А.</u> , Кернер А.А., Чернова А.А., Знойко С.А., Вашурин А.С. Выявление электронных эффектов моно- и бизамещения 1-имино-1n-изоиндол-3-амина	363
<u>Фомичев Д.А.</u> , Овсянников Д.В. Влияние растворителя на энергетические параметры фотоокисления сероводорода с помощью нитрометана	364
<u>Чернуха В.А.</u> , Фомичёв Д.А., Зеленцов С.В. Квантово-химическое моделирование водородных связей в системе фоторезист – фенолформальдегидная смола	365
<u>Шиян Д.А.</u> , Тахаутдинова А.В., Терещенко К.А., Улитин Н.В.,	

Колесов С.В. Теоретическое описание кинетики радикально инициируемой полимеризации стирола с участием ферроцена или титаноцендихлорида	366
Чернова Е.М., <u>Шпилева К.Е.</u> , Гиричева Н.И. Устойчивость водородосвязанных комплексов типа $A \cdots X \cdots A$	367
<u>Щеголева А.И.</u> , Григорьева О.Б. Теоретическое квантово-химическое обоснование механизма реакции нуклеофильного присоединения морфолина к 1,5-диарилпент-2-ен-4-ин-1-онам	368
<u>Щелоков М.А.</u> , Зеленцов С.В., Леонов Е.С. Фотохимическое восстановление металлов в системе полиоксометаллат/поливинил-N-пирролидон	369
<u>Ыбрахим С.А.</u> , Курманова А.Ф., Кутжанова К.Ж., Пустолайкина И.А. Ab-initio исследования основности некоторых аминов	370
<u>Янкова Ю. Н.</u> , Люткин А. С., Орлов В.Ю. Изучение воздействия электрического поля на фрагмент структуры альбумина	371

СЕКЦИЯ 5 Физическая химия

<u>Kornilov D.A.</u> , Anikin O.V., Shulyat'ev A.A., Kiselev V.D. Kinetics and thermochemistry of an unusual $[2\pi+2\sigma+2\sigma]$ -cycloaddition of quadricyclane with tetracyanoethylene and 4-phenyl-1,2,4-triazoline-3,5-dione	373
<u>Kornilov D.A.</u> , Anikin O.V., Kolesnikova A.O., Kiselev V.D. Cyclic and acyclic N=N bonds in reactions with some alkenes, cyclic dienes, cycloheptatriene and cyclooctatetraene	374
<u>Агафонов М.А.</u> , Терехова И.В. Растворимость метотрексата в биорелевантных средах	375
<u>Амосов А.А.</u> , Гусарова Е.В., Шпилова А.С., Князева С.С. Термодинамическое исследование и низкотемпературная рентгенография гевеина	376
<u>Афонин П.Д.</u> , Смирнова Н.Н. Химическая термодинамика терполимеров монооксида углерода и α -олефинов	377
Агаева К.Х., <u>Багиев В.Л.</u> Влияние состава вольфрам-молибден оксидных катализаторов на их активность в реакции окисления этанола	378
Мамедова С.Г., <u>Багиев В.Л.</u> Исследование фазового состава медь оксидных систем	379
<u>Бажанова А.И.</u> , Осипова В.В., Галяметдинов Ю.Г. Исследование фазового поведения в лиотропных жидкокристаллических системах	380
<u>Безднин А.Е.</u> , Маркин А.В., Смирнова Н.Н., Семенов К.Н. Химическая термодинамика $C_{60}Br_{24}$	381
<u>Вавилов Е.С.</u> , Бирюков А.И., Ковалев И.Н., Толчев А.В. Проводимость растворов электролитов с добавками водных	

дисперсий многослойных углеродных нанотрубок	382
<u>Валиева И.А., Саутина Н.В., Галяметдинов Ю.Г.</u> Исследование жидкокристаллической системы лецитин/ пропиленгликоль/ вода/вазелиновое масло с экстрактом малахита	383
<u>Вахромеева А.Е.</u> Кристаллическая структура и кислородная нестехиометрия сложных оксидов, образующихся в системе Nd-Ca-Fe-O	384
<u>Волкова М.А., Кузьмина И.А., Погонин А.Е., Кузьмина К.И., Белова Н.В., Шарнин В.А.</u> Энергетика сольватации и структура эфира 18-краун-6 в неводных растворителях	385
<u>Галкина М.С., Фомин В.М., Поддельский А.И.</u> Особенности окисления 1,1'-диэтилферроцена бис-о-семихинолятом дихлороолова(IV) в органических растворителях	386
<u>Геворгян В.А., Галкина М.С., Фомин В.М.</u> Получение и свойства α -ферроценилкарбениевого иона	387
<u>Глушенкова Е.В., Шмуклер Л.Э., Сафонова Л.П.</u> Влияние катиона в составе протонных ионных жидкостей на электропроводность полимерных электролитов	388
<u>Горюнова П.Е., Смирнова Н.Н., Сологубов С.С., Маркин А.В.</u> Термодинамические свойства привитого сополимера хитозана с поли(2-этилгексилакрилатом)	389
<u>Гусарова Е.В., Шпилова А.С., Князева С.С.</u> Термодинамические свойства мио-инозитола	390
<u>Евграфова А.А., Булидорова Г.В.</u> Влияние гидрофобизирующих добавок на электрокинетический потенциал частиц косметических пигментов	391
<u>Емельянов В.В., Красных Е.Л.</u> Синтез, идентификация и энтальпии сорбции сложных эфиров пентаэритрита	392
<u>Жукова К.О., Шамилов Р.Р., Галяметдинов Ю.Г.</u> Синтез и люминесцентные свойства квантовых точек дисульфида меди и индия и их гибридов	393
<u>Завалишин М.Н., Гамов Г.А.</u> Устойчивость комплексов оснований Шиффа пиридоксаль-5-фосфата и гидразидов пиридинкарбоновых кислот с ионом Ni^{2+} в водном растворе	394
<u>Заппарова Л.Р., Осипова В.В., Галяметдинов Ю.Г.</u> Влияние широкозонного проводника на оптические свойства наночастицы CdSe	395
<u>Калиничева Я.А., Галкина М.С.</u> Особенности окисления ферроцена и его производных ионами серебра	396
<u>Кимяшов А.А., Ряшенцев Д.С.</u> Фазовые равновесия в системе Fe-Al-O при температуре 1273 К	397
<u>Козырева М.С., Сухаренко М.А., Гаркушин И.К.</u> Описание химического взаимодействия в четырехкомпонентной взаимной	

- системе $\text{Li,Na,Cs}||\text{F,Cl}$ конверсионным методом 398
Коннова М.Е., Чернова М.М., Востриков С.В., Пимерзин А.А.
 Термодинамический анализ реакций гидрирования-
 дегидрирования потенциальных органических носителей водорода. 399
Коткова П.С., Смирнова Н.Н., Перевезенцев А.А., Маркин А.В.
 Термодинамические свойства композита на основе
 полифенилхиноксалина и наночастиц оксида железа (III) 400
Кочергин Б.А., Романова Г. Н., Соломонов А.В., Гончаренко А.А.,
 Румянцев Е.В. Инкапсуляция билирубина в циклодекстринах и
 получение гибридных функциональных материалов на их основе 401
Буланова А.В., Кравец Н.С., Гаркушин И.К., Губанова Т.В.
 Трехкомпонентная система $\text{LiCl-LiVO}_3\text{-Li}_2\text{WO}_4$ 402
Крохина Т.Г., Урусова А.С., Аксенова Т.В., Черепанов В.А.
 Твердые растворы $\text{Nd}_{2-x}\text{Ca}_x\text{CoO}_{4-\delta}$ и $\text{Nd}_{2-y}\text{Ca}_y\text{O}_3$: структура и
 свойства 403
Крупин А.С., Хайруллина Р.Р., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.
 Поляризованная люминесценция ЖК комплекса европия (III) 404
Кузнецова А.А., Молодцов П.А., Макарова А.С., Макаров С.В.
 Влияние оксидов тиомочевины на процесс гидроксирования
 кумарина пероксидом водорода в водных растворах 405
Кузнецова А.С., Ермакова Л.Э., Волкова А.В. Структурные и
 электроповерхностные свойства пористых стекол марки 8В-НТ в
 водных растворах FeCl_3 405
Кузнецова А.С., Брумм Д.А., Сухаренко М.А. Исследование
 трехкомпонентной системы $\text{CsF-CsBr-Cs}_2\text{MoO}_4$ 407
Кузьмина Д.А., Климова М.Н., Саломатина Е.В., Смирнова Л.А.
 Исследование физико-химии воднокислых растворов хитозана
 методом электропроводности 408
Ламакина О.С., Фадейкина И.Н. Импедансная спектроскопия
 пленок полианилина 409
Левина А.А., Богдан Н.О., Буянова Е.С. Структурные и
 функциональные характеристики сложных оксидов на основе
 ниобата лантана, полученных двойным замещением
 $\text{La}_{1-x}\text{V}_x\text{Nb}_{1-y}\text{W}_y\text{O}_{4\pm\delta}$ 410
Лякаев Д.В., Афанасьев М.А., Смирнова Н.Н., Шарутин В.В.,
 Маркин А.В. Термодинамическое исследование $\text{Ph}_4\text{SbOC(O)CSPH}$ и
 $\text{Ph}_3\text{Sb(OC(O)CSPH)}_2$ 411
Макарова А.Э., Волкова Н.Е., Гаврилова Л.Я. Твердые растворы
 $\text{Ba}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$: кристаллическая структура и свойства 412
Макаров И.М., Иванова Э.С., Курунина Г.М. Исследование
 производства анилина с целью усовершенствования процесса 413
Максютова А.А., Исмоилова Г.С., Моисеева Е.Д., Зимин Ю.С.
 Кинетика окисления урацила озон-кислородной смесью

в водных растворах	414
<u>Мальшев Г.М.</u>, Сидоров А.А., Бурчаков А.В. Фазовые равновесия в квазибинарной системе $\text{LiKCrO}_4\text{-LiRbCrO}_4$	415
<u>Милонова М.В.</u>, Шаронов Н.Ю. Кинетика реакции жидкофазной гидрогенизации 4-нитробензойной кислоты на скелетном никеле	416
<u>Милонова М.В.</u>, Шаронов Н.Ю. Кинетика реакции жидкофазной гидрогенизации 4-нитрофенола на скелетном никеле в 2-пропанол-вода различного состава	417
<u>Михалкина О.В.</u>, Губанова Т.В. Поиск низкоплавких составов в тройной взаимной системе из фторидов и нитратов натрия и цезия	418
<u>Пешкина К.Г.</u>, Ткачев Н.К. Образование комплексных соединений в галогенидных расплавах трехвалентных элементов в присутствии растворителя	419
<u>Пискунова В.С.</u>, Новичков Р.В., Зуев Б.К. Изучение химической иммобилизации пепсина на аминированной поверхности наночастиц кремнезема	420
<u>Працкова С.Е.</u> Расчет фазовых диаграмм системы $\text{H}_2\text{O} - \text{KOH} - \text{KCl}$	421
<u>Працкова С.Е.</u> Изучение термодинамических свойств системы $\text{H}_2\text{O} - \text{LiOH}$ методом Питцера	422
<u>Пряжникова М.И.</u>, Горюнова П.Е. Термодинамические характеристики блок-сополимера хитозана с полилактидом	423
<u>Пузикова Д.С.</u>, Хусурова Г.М., Дергачева М.Б. Исследование свойств модифицированных CdSe-фотоанодов	424
<u>Рахматуллина Г.И.</u>, Низамеев И.Р. Химическое осаждение железа на поверхность графита из водного раствора нитрата железа	425
<u>Рыбакова А.И.</u>, Саутина Н.В., Головешкина Д.Ю., Галяметдинов Ю.Г. Солюбилизация L-лизина в обратных микроэмульсиях H_2O/бис-(2-этилгексил)сульфосукцинат натрия/изопропилмиририлат	426
<u>Рыбенкова М.Д.</u>, Галкина М.С., Ключевский К.В. Влияние специфической и неспецифической сольватации на окисление производных ферроцена в смешанных растворителях	427
<u>Сармини Ю.А.</u>, Смирнова Н.Н., Маркин А.В., Музафаров А.М. Калориметрическое изучение дендримера первой генерации с концевыми триметилсилильными группами	428
<u>Козлов А.А.</u>, <u>Сёмина Ю.А.</u>, Флид В.Р. Исследование поверхности упорядоченных структур из полимерных микросфер в качестве подложек для гетерогенного катализа	429
<u>Красных Е.Л.</u>, Дружинина Ю.А., Сушкова С.В., <u>Смирнова Я.А.</u> Синтез и определение индексов удерживания сложных эфиров лимонной кислоты	430
<u>Степашкин Н.А.</u>, Иванов Н.С., Суходолов Н.Г. Электрохимические свойства пленок Ленгмюра-Блоджетт, содержащих наночастицы	

гексацианоферрата кобальта	431
<u>Ступикова С.А., Ксенофонтов А.А., Гусева Г.Б., Антина Е.В.</u> Твердотельные материалы для детектирования ДМФА в воздухе на основе этилцеллюлозы, допированной бис(дипиррометенатом) цинка(II)	431
<u>Тарасова Н.С., Рыжкова Д.С., Данилушкина Е.Г.</u> Исследование стабильного симплекса $2\text{KBr}\cdot\text{BaBr}_2\text{-BaMoO}_4\text{-BaBr}_2$ трехкомпонентной взаимной системы $\text{K, Ba} \parallel \text{Br, MoO}_4$	432
<u>Тюрникова А.С., Егорова Е.М.</u> Фазовые равновесия в трехкомпонентной системе $\text{NaBr-Na}_2\text{CrO}_4\text{-Na}_2\text{WO}_4$	433
<u>Филиппов И.А., Федоров М.С., Сырбу С.А.</u> Мезоморфные свойства системы 4-н-пропилорикоричной кислоты и 1,2-бис(4-пиридил)этана состава 2:1	434
<u>Хамидуллин Н.Н., Салихов Д.Ф., Ялышев У.Р., Бадртдинова А.И.</u> Оценка эффективности водотделения от шламовых отходов от шламовых отходов горных пород высокомолекулярными флокулянтами	436
<u>Цыганова И.В.</u> Механизм термической деструкции соли Мора в изотермическом режиме	437
<u>Чеснокова Н.А., Граждан К.В., Куранова Н.Н., Гущина А.С.</u> Тепловые эффекты взаимодействия меди(II) с никотинат-ионом в водных растворах этанола	438
<u>Курбанова Б.Н., Чибунова Е.С., Кумеев Р.С., Волкова Т.В., Терехова И.В.</u> Изучение влияния циклодекстринов и полимеров на мембранную проницаемость метотрексата	439
СЕКЦИЯ 6. Прикладные исследования и материалы	
<u>Karpov A.V.</u> The definition of energy of natural gas	440
<u>Kasimov Sh.A., Djalilov A.T., Turaev Kh.Kh., Pardayev O.T., Eshqurbonov F.B., Geldiyev Yu.A.</u> Synthesis of polycondensation sorbent	441
<u>Mechergui A., Akhmetshina A., Vorotyntsev I.</u> Properties of methanesulfonate based Deep Eutectic Solvents for gases capturing purposes	442
<u>Plashyhin S.V., Antropov A.S.</u> Flue gas desulphurisation	442
<u>Чеботарева К.В., Абдрахманова М.Ж., Александрина А.Ю.</u> Изучение синергии бинарных смесей ПАВ для оптимизации рецептуры синтетических моющих средств	444
<u>Авакова Е.О., Кузьменко В.А.</u> Определение мольных соотношений полиэлектролитов в процессе образования интерполиэлектролитных комплексов между полидиаллилдиметиламмоний хлоридом и Акремонами	445
<u>Авдоница Д.Н., Мялкин И.В.</u> Концентрация кислорода в металле	

при выплавке низко- и среднеуглеродистой стали в ДСП-160	446
<u>Агеев М.И., Мялкин И.В., Сафонов В.М.</u> Оценка изменения количества и состава неметаллических включений в ходе непрерывной разливки стали	447
<u>Андранович О.С., Трегелева Л.Р., Демьянцева Е.Ю., Смит Р.А.</u> Роль температуры в коллоидизации сульфатного мыла в водных растворах	448
<u>Арифуллин И.Р., Большакова Е.А., Семенова Ю.И.</u> Добавки для депарафинизации масляных фракций на основе сополимеров высших алкил(мет)акрилатов и N-алкилакриламидов	449
<u>Жакина А.Х., Арнт О.В., Кудайберген Г.К.</u> Синтез магнитного сорбента на основе гуминовой кислоты	450
<u>Жакина А.Х., Арнт О.В., Кудайберген Г.К.</u> Исследования морфологии поверхности магнитного сорбента на основе гуминовой кислоты	451
<u>Ахметкаримова Ж.С., Мулдахметов Ж.Х., Аринова А.Е., Ордабаева А.Т., Исабекова Д.С.</u> Каталитическое гидрирование антрацена	452
<u>Басырова С.И., Шилова С.В., Третьякова А.Я.</u> Полиэлектродитные комплексы хитозана с пектином и их применение в инкапсулировании	453
<u>Белова В.С., Балмасов А.В., Ларионов А.В.</u> Электрохимическое осаждение блестящих никелевых покрытий в присутствии гетероциклических соединений	454
<u>Блинова Л.И., Ильичев В.А., Бочкарев М.Н.</u> Ате-комплексы лантаноидов с перфторированным 2-меркаптобензотиазолом. Синтез, строение и люминесцентные свойства.	455
<u>Бобровская С.А., Шлеина А.Н., Курис Ю.Е., Шумилова Е.Ю., Протопопов А.В.</u> Химическая переработка растительных масел	456
<u>Шлеина А.Н., Бобровская С.А., Курис Ю.Е., Шумилова Е.Ю., Протопопов А.В.</u> Исследование продуктов химической модификации подсолнечного масла методом ИК-спектроскопии	457
<u>Бобылев Н.С., Андреева Е.А., Смирнова С.В.</u> Оценка влияния ультразвуковой обработки шерсти на результаты крашения	458
<u>Большакова Е.А., Арифуллин И.Р.</u> Разработка полимерных азотсодержащих диспергаторов для масел	458
<u>Большакова Е.А., Савинова М.В.</u> Разработка метода оценки диспергирующей способности полимерных присадок для масел	459
<u>Бургуа-Зебальос Д., Гафарова Э.Б.</u> Влияние содержание олова на пассивацию катализатора Zn-ZSM-5 (90) при получении ароматических углеводородов из ПБФ	460
<u>Бургуа-Зебальос Д., Гафарова Э.Б.</u> Пассивация катализатора Zn-ЦВМ (30) оловом при получении ароматических углеводородов из пропан-бутановых фракций	462

- Висурханова Я.А., Лазарева Е.С., Иванова Н.М. Электрокаталитическая активность цинксодержащих композитов полианилина с анилиноформальдегидным полимером 463
- Соболева Е.А., Висурханова Я.А., Иванова Н.М. Структура композитов полианилина с CuCl_2 и FeO и их электрокаталитические свойства 464
- Вишневский В.Ю., Майданик А.А., Макух Т.А., Медведь А.О., Сухов П.В., Берестнева Ю.В., Ракша Е.В., Савоськин М.В. Исследование физико-химических свойств соединений соинтеркалирования нитрата графита 465
- Власов С.С., Ровкина К.И. Определение оптимальных технологических параметров получения водорастворимых полисахаридов березы повислой (*Bétula péndula*) 466
- Газизов Э.Р., Гуськова М.В. Оптимизация получения полимер-коллоидных дисперсий на основе N- поливинилпирролидона и гидроксида цинка 467
- Ибатуллин И.М., Камалов А.Н., Гафиятуллина С.И. Диэлектрические свойства композиционных материалов на основе дисперсно-наполненной эпоксидной смолы 468
- Голованова В.А., Тупикова Е.Н. Коррозионный мониторинг лёгких сплавов в средах, имитирующих морскую воду 469
- Гуляева Ю.А., Фролов В.В., Войтович О.Г., Коротнева И.С. Получение искусственных дисперсий на основе изопренового каучука и казеината калия для создания адгезированных систем 470
- Гусейнова М.А., Смирнова Л.А., Саломатина Е.В. Покрытия на основе хитозана с бактерицидными свойствами для титановых имплантатов 471
- Матрунчик Ю.В., Воробьёва Е.В., Давлюд Д.Н., Шестак И.В. Получение и использование новых полимерных материалов на основе гидрогелей 472
- Демидов П.А., Демидова Ю.В. Разработка инновационного метода получения макрономеров для производства поликарбоксилатных суперпластификаторов 473
- Каблов В.Ф., Новопольцева О.М., Кейбал Н.А., Кочетков В.Г., Крюкова Д.А., Гордеева Е.В., Егорова С.А. Разработка и исследование свойств эластомерных теплозащитных материалов, содержащих каолиновое микроволокно 474
- Каблов В.Ф., Еременко Д.В., Усихина М.С., Кейбал Н.А., Крекалева Т.В. Исследование влияния гидрофильного наполнителя на огнезащитные свойства эпоксидных композитов 475
- Ефрюшин Д.Д., Шуткина Д.А., Попов К.А. Термический анализ технических лигнинов и продуктов их ацилирования 476
- Ефрюшин Д.Д., Шуткина Д.А., Попов К.А. Расчет эффективной

энергии активации термоокислительной деструкции технических лигнинов и продуктов их ацилирования	477
<u>Жанабаева А.К., Дергачева М.Б., Пузикова Д.С.</u> Получение тонких пленок селенида галлия	478
<u>Звада А.А., Каблов В.Ф., Новопольцева О.М., Грачева Н.В.</u> Природные противостарители для резин	479
<u>Зеленкова Т.Н., Пученькина А.В., Темирсултанова Л.В., Козлова О.В.</u> Изучение процессов переводной печати по целлюлозным материалам в присутствии отечественных полимеров	480
<u>Исполатова Г.С., Зайцева А.О.</u> Разработка микрокапсулированного препарата, предназначенного для функциональной отделки текстильного материала	481
<u>Каткова Д.А., Кейбал Н.А., Каблов В.Ф.</u> Разработка пропиточных составов на основе фосфорсодержащих соединений для синтетических кордных нитей	482
<u>Киреева Ю.Г.</u> Композиция на основе кремнийорганических смол и алкоксисиланов	483
<u>Ковалёв П.Е., Липин А.А.</u> Кинетика вакуумной сушки хлопковой целлюлозы	484
<u>Кравченко М.А.</u> Использование минералов как протекторов УФ – излучения	485
<u>Криушенко С.С., Стюнина А.О., Акулиничева А.А., Антипова Е.А., Короткова Н.П.</u> Повышение экологической безопасности ПУ-клеев	486
<u>Криушенко С.С., Стюнина А.О., Акулиничева А.А., Антипова Е.А., Короткова Н.П.</u> Полиуретановые инъекционные составы для ремонта и гидроизоляции строительных конструкций	487
<u>Кружилина И.М., Белокурова О.А., Одинцова О.И.</u> Моющие композиции для текстиля на основе новых марок отечественных ПАВ	488
<u>Кулевич В.П., Слаутин О.В., Фатыхова А.Г.</u> Получение покрытий из алюминидов железа на поверхности стали с использованием высокоэнергетического воздействия	489
<u>Куликова А.А., Липин А.Г.</u> Электродиализное концентрирование раствора нитрата аммония	490
<u>Куриленко И.А., Гафарова Э.Б.</u> Исследование коксовых отложений катализаторов получения низкозастывающих дизельных топлив	491
<u>Куриленко И.А., Гафарова Э.Б.</u> Влияние пассивации оловом галлий алюмосиликата при получении ароматических углеводородов из пропан-бутановых фракций	492
<u>Лаптенкова А.В., Селютин А.А.</u> Синтез, структурные и электрохимические особенности перспективных катодных материалов на основе ферроцианидных комплексов 3d-металлов	493
<u>Левина Е.В., Мялкин И.В., Сафонов В.М.</u> Оценка влияния	

параметров плавки на выход годного в ДСП	494
<u>Лемешева М.В.,</u> Погожев Ю.С., Яцюк И.В., Потанин А.Ю., Вершинников В.И., Левашов Е.А. Исследование стойкости защитной гетерофазной керамики к высокотемпературному окислению	495
<u>Маноли О.А.,</u> Ширманова В.В., Козлова О.В. Создание экотехнологий печати пигментами с использованием связующих нового поколения	496
<u>Миронова А.А.,</u> Владимирцева Е.Л. Применение фторированного алюмосиликата при колорировании текстильных материалов пигментами	497
<u>Морозов Р.А.,</u> Тупикова Е.Н. Автоклавное получение дисперсных фаз, содержащих платину или палладий в оксидной матрице MoO_3 - Al_2O_3	498
<u>Мотченко А.О.,</u> Антонов Ю. Каблов В.Ф., Кейбал Н.А. Увеличение предела огнетеплостойкости полимерных композиций за счет введения в них аппретированных микроуглеродных волокнистых наполнителей	499
<u>Муллагалиев И.Н.,</u> Салихов Р.Б. Полевые транзисторы на основе тонких пленок органических веществ	500
<u>Нарыжный Д.А.,</u> Каблов В.Ф., Новопольцева О.М., Кочетков В.Г. Исследование свойств огнетеплозащитных материалов, содержащих циркониевые микросферы	501
<u>Небукин В.О.,</u> Липин А.Г. Капсулирование гранул с использованием дисперсий полимеров	502
<u>Новгородская Е.И.</u> Использование экстракта жмыха граната в косметических средствах	503
<u>Новикова А.В.,</u> Пермин Д.А. Оптическая керамика на основе твёрдых растворов оксидов редкоземельных элементов (Y, Sc, Lu), легированных ионами иттербия	504
<u>Нургалиева Г.Р.,</u> Низамеев И.Р., Стрельник И.Д., Карасик А.А., Кадиров М.К. Морфологические особенности агрегации дифосфинового комплекса кобальта на твердой поверхности	505
<u>Осипова Е.О.,</u> Позняк Н.И. Использование смеси пенообразователей для повышения эффективности обогащения калийных руд	506
<u>Паламарчук А.А.,</u> Христофорова И.А. Получение пенопластов на основе ПВХ	507
<u>Петрова Л.С.,</u> Малышева К.А., Носкова Ю. Антимикробная отделка целлюлозных материалов	508
<u>Петрунина Е.С.,</u> Камалетдинова С.И., Заббарова Э.И. Физико- химические свойства полимерного пленочного связующего	509
<u>Полушин Е.Г.,</u> Ширманова В.В., Козлова О.В. Придание	

текстильным материалам функциональных свойств с применением метода дублирования	510
<u>Проворова Ю.Р., Зильберг Р.А.</u> Вольтамперометрический «электронный язык» для распознавания энантиомеров триптофана с использованием стеклоуглеродных электродов, модифицированных α -, β - и γ - циклодекстринами	511
<u>Промзелева М.А., Терехова И.В.</u> Разработка новых лекарственных композиций, предназначенных для терапии ревматоидного артрита	512
<u>Пудовкин В.В., Каблов В.Ф., Новопольцева О.М., Кочетков В.Г.</u> , Исследование свойств огнетеплозащитных материалов, содержащих алюмосиликатные микросферы	512
<u>Пузикова Д.С., Хусурова Г.М., Дергачева М.Б.</u> Влияние местоположения освещения на величину квантового выхода	514
<u>Пышкин Д.А., Мялкин И.В., Сафонов В.М.</u> Исследование гидродинамических процессов в кристаллизаторе тонкослябовой МНРС	515
<u>Разинов А.Л., Чигорина Е.А., Убаськина Ю.А., Рябенко В.С., Ковтун И.Д.</u> Тиражирование технологии получения рафинированного углеводородного растворителя с заданным интервалом кипения на основе отечественного сырья	516
<u>Райко Е.С., Гусак Э. Н., Александрина А. Ю.</u> Влияние полимерных добавок на устойчивость пен растворов индивидуальных и бинарных смесей анионных и неионогенных ПАВ	517
<u>Рапиков А.Р., Жакина А.Х., Василец Е.П., Бейсенбаев А.Р.</u> Исследование активизирующего влияния многостенных углеродных нанотрубок на процессы получения гуминовых кислот в условиях микроволнового воздействия	518
<u>Ровкина К.И., Власов С.С.</u> Подбор антиоксиданта для получения очищенного фосфотидилхолина	519
<u>Ровкина К.И., Власов С.С.</u> Разработка нового антигипертензивного лекарственного средства на основе 1-о-гесадецил-2-о-металкарбамоилглицерина и исследование его антигипертензивной активности	520
<u>Рябкова О.А., Саломатина Е.В.</u> УФ - чувствительные полититаноксид-содержащие терполимеры, как основа материалов с переключаемым режимом смачивания	521
<u>Сазанова Т.С., Воротынцев И.В.</u> Разработка моноинструментального экспресс-метода для диагностики полимерных мембран на основе атомно-силовой микроскопии	522
<u>Самсоненко И.А.</u> Ингибирование при пиролизе синтетических углеводов	523
<u>Самсоненко И.А.</u> Перспективные сорбенты для выделения гелия адсорбционными методами	524

<u>Сафаргалин И.Н.</u> , Муллагалиев И.Н., Салихов Р.Б. Датчики аммиака на основе тонких пленок полианилинов	525
<u>Сергеева М.С.</u> , Малышев В.М., Петухов А.Н., Воротынцев В.М. Концентрирование ксенона из природного газа методом газогидратной кристаллизации	526
<u>Проничев Д.В.</u> , <u>Серов А.Г.</u> , Артемьев Н.А., Кривченко Н.В. Коррозионная стойкость алюминидов-железа на стальной подложке	527
<u>Слаутин О.В.</u> , <u>Серов А.Г.</u> , Коваль Н.Р., Кривченко Н.В. Абразивное изнашивание слоистых металло-интерметаллидных композитов системы Ti-Fe	528
<u>Каблов В.Ф.</u> , <u>Куцов А.Н.</u> , <u>Кейбал Н.А.</u> , <u>Крекалева Т.В.</u> <u>Ситников Е.Е.</u> , <u>Шапоров Е.В.</u> Разработка рецептур набухающих резин	529
<u>Скотникова Д.С.</u> , <u>Мочалова А.Е.</u> , <u>Смирнова Л.А.</u> Привитые и блок-сополимеры хитозана с виниловыми мономерами – высокоэффективные флокулянты, коагулянты, сорбенты	530
<u>Скуднев В.Ю.</u> , <u>Бузько В.Ю.</u> , <u>Вызулин С.А.</u> Влияние метода синтеза на ФМР характеристики наноразмерного никель-цинкового феррита	530
<u>Скуднев В.Ю.</u> , <u>Бузько В.Ю.</u> , <u>Вызулин С.А.</u> Отражение эффекта замещения металлов на ФМР характеристиках наноразмерного никель-цинкового феррита	531
<u>Сметанников С.М.</u> , <u>Кейбал Н.А.</u> , <u>Каблов В.Ф.</u> Разработка клеевых композиций для защиты металлоконструкций гуммированием холодным способом	532
<u>Смирнова А.С.</u> , <u>Шибашов А.В.</u> Исследование процесса образования полимерной пленки карбамидных смол в процессе низкочастотного ультразвукового воздействия	533
<u>Солопов В.А.</u> , <u>Каблов В.Ф.</u> , <u>Новопольцева О.М.</u> , <u>Кочетков В.Г.</u> , <u>Бурмистров В.В.</u> Исследование адамантилсодержащих соединений в качестве ингредиентов резиновых смесей	534
<u>Строганова Ю.И.</u> , <u>Шишкина Ю.О.</u> , <u>Разговоров П.Б.</u> , <u>Нагорнов Р.С.</u> Получение и возможность применения экструдированных органо-неорганических сорбентов для повышения сортности растительных масел	535
<u>Субботина К.О.</u> Регенерация сульфида натрия в кислотно-щелочном способе производства сульфатной целлюлозы	537
<u>Танкиева З.И.</u> , <u>Гафарова Э.Б.</u> Регенерация катализаторов гидроизомеризации с помощью синхронного термического анализа	537
<u>Танкиева З.И.</u> , <u>Гафарова Э.Б.</u> Определение общей кислотности катализаторов получения ароматических углеводородов из пропан-бутановых фракций	539
<u>Тарабанов Р.В.</u> , <u>Гафурова А.В.</u> Способы получения	

- композиционных керамических материалов на основе гексагонального нитрида бора методом реакционного и жидкофазового спекания 540
- Трухин Г.О., Гафарова Э.Б. Влияние содержания цинка на конверсию пропан-бутановой смеси при получении ароматических углеводородов на катализаторе Zn-ZSM-5 (90) 541
- Трухин Г.О., Гафарова Э.Б. Влияние содержания цинка на конверсию пропан-бутановой смеси при получении ароматических углеводородов на катализаторе Zn-ЦВМ (30) 542
- Убаськина Ю.А. Исследование влияния компонентов кремнистого сырья на его адсорбционные свойства 543
- Умбаров И.А., Тураев Х.Х., Алимназаров Б.Х., Умбарова М.И. Способ выделения элементного йода из концентратов 544
- Файзуллина Ю.Г., Проворова Ю. Р., Яркая Ю. А., Зильберг Р. А. Вольтамперометрическая сенсорная система для распознавания энантиомеров пропранолола в лекарственных формах 545
- Фалалеева Т.С., Лопатина Е.В., Проскурина В.Е., Галяметдинов Ю.Г. Инновационный способ флокуляционной очистки отработанных трансформаторных масел 546
- Хабарова Д.С., Тупикова Е.Н. Гидротермальный синтез платина-хромового катализатора 547
- Харламова А.Н., Щирая К.В., Демьянцева Е.Ю. Влияние неионогенных веществ на адсорбционные свойства катионного ПАВ 548
- Хижнякова К.Н., Лоханина С.Ю., Трубачева Л.В. Многокомпонентные образцы состава воды как средство оценивания качества результатов, получаемых в аналитических лабораториях 549
- Цыбулько Н.О., Кейбал Н.А., Каблов В.Ф. Огнезащитные покрытия для резин на основе хлорсульфированного полиэтилена модифицированные ПВХ волокнами 550
- Чебанова О.Т., Субботина К.О. Влияние кремнийорганических полимеров на пенообразование черного щелока в производстве сульфатной целлюлозы 551
- Чернова Е.Н., Владимирцева Е.Л. Влияние размеров частиц минералов на эффективность модификации свойств шерстяного волокна алюмосиликатами 553
- Черныш И.В. Косметическое мыло с антибактериальными свойствами на основе природных компонентов 554
- Шарипов М.С. Влияние состава полимерно-композиционных загустителей на качество навбивных хлопчатобумажных тканей с активными красителями 555
- Шашмуринов Ю. Г., Бездетнова А. Е., Кочнев А. В. , Марков В. Ф.,

Маскаева Л. Н. Разработка сенсорного элемента для определения в воздухе NO ₂ на основе тонких пленок Cd _x Pb _{1-x} S с использованием различных солей кадмия	556
<u>Шварев Р.Р., Войтович В.А., Захарычев Е.А., Карт М.А.</u> Разработка и получение одноупаковочной силикатной краски с использованием аппаратов вихревого слоя	557
<u>Шипилова А.С., Князев А.В., Гусарова Е.В.</u> Оптимизация режима экстрагирования инулина из сырья, его фракционирование по степени полимеризации	558
<u>Шишкина Ю.О., Строганова Ю.И., Нагорнов Р.С., Разговоров П.Б.</u> Технологический эффект отбеливания растительных масел и особенности выделения на полиминеральных носителях биологически активных веществ	559
<u>Шушина О.Е., Топорищева Н.А., Бабанова К.А., Чешкова А.В.</u> Практика внедрения унифицированных биохимических эко-технологий подготовки тканей	560
<u>Щавлев М.П., Смирнова С.В.</u> Анализ поверхностных свойств полиэфирсодержащих волокнистых материалов после авиважной обработки	561
Джалилов А.Т., Тураев Х.Х., Маматкулов Ш.И., <u>Эшкурбонов Ф.Б., Касимов Ш.А., Эшкурбонова М.Б.</u> Изучение морфологии комплексообразующих ионитов	562
Джалилов А.Т., Тураев Х.Х., Маматкулов Ш.И., <u>Эшкурбонов Ф.Б., Касимов Ш.А., Эшкурбонова М.Б.</u> Исследование оптических свойств комплексообразующих ионитов	563
<u>Юмагулова Ю.И., Кейбал Н.А., Каблов В.Ф.</u> Модификация клеевых составов на основе полихлоропрена форфоразотсодержащими соединениями в качестве промоторов адгезии	564

**XXI ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
МОЛОДЫХ УЧЁНЫХ-ХИМИКОВ
(с международным участием)**

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Нижний Новгород, 15-17 мая 2018 г.

Печатается в авторской редакции

Ответственные за выпуск:

А.В. Князев, Е.А. Асабина

Оригинал-макет:

Е.А. Асабина, О.В. Крашенинникова, Е.Н. Буланов

Формат

Бумага офсетная. Печать офсетная. Усл. печ. л.

Заказ № . Тираж экз.

Отпечатано с готового оригинал-макета

в типографии «...»

603009, г. Нижний Новгород, ул. Шекспира, 10

