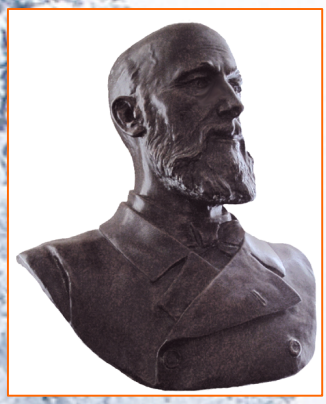
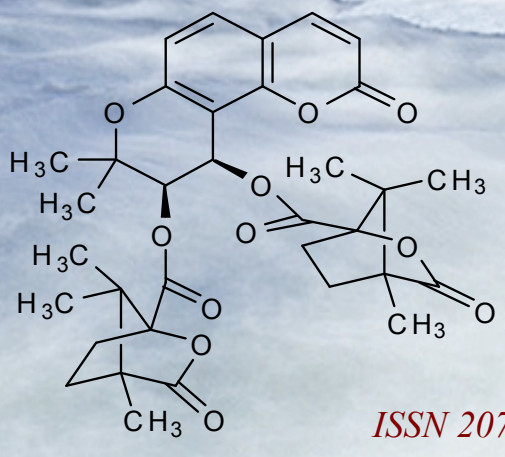
Бутлеровские сообщения

№1, том 33. 2013



ISSN 2074-0212



ISSN 2074-0948

International Edition in English:

Butlerov Communications

Тематический раздел: Химико-фармацевтические исследования. **Обзор**
Подраздел: Зависимости структура-активность. *Регистрационный код публикации:* 13-33-1-1
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 24 декабря 2012 г. УДК 615.32.

Современное состояние синтеза и исследования анти-ВИЧ активности соединений ряда 2*H*-1-бензопиран-2-она

© Абышев[1]*+ Азад Зиядович, **Абышев[2] Рашад Азадович**,
Гадзиковский[1] Станислав Валентинович, **Нгуен[1] Ван Хай**
и **Морозова[1] Виктория Александровна**

[1] *Кафедра фармацевтической химии ГБОУ ВПО Санкт-Петербургская химико-фармацевтическая академия Министерства здравоохранения. Ул. Проф. Попова, 14. г. Санкт-Петербург, 197376. Россия. Тел.: (812) 234-13-59. E-mail: azabyshev@mail.ru*

[2] *Санкт-Петербургский Центр по профилактике и борьбе со СПИД и инфекционными заболеваниями. Наб. Обводного канала, 179. г. Санкт-Петербург, 198103. Россия. Тел.: (812) 251-08-53.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

***Ключевые слова**: анти-ВИЧ кумарины, каланолид, ДКК.*

Аннотация

Пандемия Вируса Иммунодефицита Человека (ВИЧ) / Синдрома Приобретённого Иммунодефицита (СПИД) является серьезной угрозой для здоровья и развития человечества, и поиск эффективных соединений, обладающих анти-ВИЧ активностью был, есть и будет актуальной проблемой. В последние годы был достигнут значительный прогресс в области разработки лекарств против ВИЧ. Было найдено множество органических гетероциклических соединений различных классов природного и синтетического происхождения, в том числе и производных 2*H*-1-бензопирана (кумарина) с различной структурой, которые проявляли анти-ВИЧ активность. Данный обзор демонстрирует разнообразие структур и активность, именно, кумаринов синтетического и природного происхождения с уникальным механизмом действия, ссылаясь на различные этапы репликации ВИЧ. Недавние исследования с использованием различных кумаринов показали, что некоторые из них служат сильными ненуклеозидными ингибиторами обратной транскриптазы, другие же – ингибиторы ВИЧ-интегразы или ВИЧ-протеазы. Поэтому во множестве научных центров за рубежом активно ведутся исследовательские работы по разработке новых препаратов и их комбинированных форм для лечения ВИЧ-инфекции, которые были бы эффективны как для первой линии терапии, так и в отношении устойчивых мутантов. Исследования, проводимые на соединениях, обладающих анти-ВИЧ активностью дают надежду и оптимизм по этому поводу. В этом обзоре описаны последние достижения в открытии, структурные модификации и изучении зависимости структура–активность в отношении некоторых производных кумаринов, проявляющих выраженную анти-ВИЧ активность.

Содержание

Введение
1. Группа каланолидов
2. Группа пиранокумаринов – производные дикамфоноилкеллактона
3. Группа фурокумаринов и терпеноидных кумаринов
4. Группа 4-фенилкумаринов

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-1-22 *Подраздел:* Биохимия и биотехнология.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции " Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений"
http://butlerov.com/synthesys/
УДК 579.695; 546.85; 502.55; 661.63. Поступила в редакцию 24 декабря 2012 г.

Возможность анаэробной детоксикации белого фосфора

© **Миндубаев**[1]*+ **Антон Зуфарович**, **Алимова**[2] **Фарида Кашифовна**, **Ахоссийенагбе**[2] **Серж Коджо**, **Болормаа**[2] **Чулуун**, **Волошина**[1] **Александра Дмитриевна**, **Кулик**[1] **Наталья Владимировна**, **Минзанова**[1] **Салима Тахиятулловна**, **Миронова**[1] **Любовь Геннадьевна** и **Яхваров**[1]* **Дмитрий Григорьевич**

[1] *Учреждение РАН Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН. Ул. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия.*
E-mail: mindubaev@iopc.ru

[2] *Кафедра биохимии. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Университетская, 18. г. Казань, 420008, Республика Татарстан. Россия.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *детоксикация, белый фосфор, осадки сточных вод, анаэробные условия, кинетика выделения газа.*

Аннотация

Впервые показана возможность деградации белого фосфора под действием осадка сточных вод водоочистных сооружений. Установлено, что в результате токсического воздействия продуктов разложения белого фосфора происходит угнетение метаногенного процесса деятельности микроорганизмов, а последующая адаптация микрофлоры к действию токсиканта приводит к полной биодеградации и переработке белого фосфора в нетоксичные продукты. Четко установлено, что белый фосфор угнетает рост микроорганизмов не сразу после внесения, а спустя несколько дней или даже недель. Это означает, что токсическим действием обладают промежуточные продукты деградации, накапливающиеся в субстратах. Также по изменению состава выделяющихся газообразных продуктов можно делать вывод о большей устойчивости к белому фосфору эубактерий по сравнению с метаногенами. Агрегатное состояние белого фосфора и режим термостатирования (мезофильный или термофильный) не оказывают заметное влияние на жизнедеятельность анаэробных микроорганизмов в его присутствии. Методом ядерного магнитного резонанса установлено, что белый фосфор в результате контакта с активным илом окисляется до водорастворимых соединений. Показано, что скорость деградации белого фосфора прямо пропорциональна активности метаболических процессов микрофлоры – свидетельство в пользу именно биологической деструкции. Методом ГХМС установлено влияние белого фосфора на состав микробных метаболитов – резкое увеличение содержания скатола и *п*-крезола по сравнению с контролем. Получены культуры микроорганизмов, растущих на субстратах с содержанием белого фосфора 0.01 и даже 0.1%.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Токсикологическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-1-35
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 12 декабря 2012 г. УДК 340.67:615:21:7.099.074:543.544.

Изолирование лекарственных веществ из плазмы крови методом твердофазной экстракции

© Чувина Наталья Александровна, **Стрелова[+] Ольга Юрьевна**
и **Куклин* Владимир Николаевич**
Кафедра фармацевтической химии. Санкт-Петербургская химико-фармацевтическая академия Министерства здравоохранения. Ул. Проф. Попова, д.14, Лит. А. г. Санкт-Петербург. 197376. Россия. Тел.: (812) 234-13-59, 8-921-912-7257. E-mail: ous.chim-tox@yandex

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *плазма крови, лекарственные вещества, твердофазная экстракция, патронов компании Waters Oasis, высокоэффективная жидкостная хроматография.*

Аннотация

Статья посвящена изучению возможности применения метода твердофазной экстракции на основе патронов марки Oasis для изолирования из плазмы крови некоторых лекарственных веществ различного химического строения с целью химико-токсикологического анализа. Патрон Oasis HLB может быть рекомендован при проведении нецеленаправленного исследования на токсические вещества из группы лекарственных, при целенаправленном исследовании биологической жидкости на производные барбитуровой кислоты следует использовать патроны марки Oasis MAX, патроны Oasis WAX и WCX не следует использовать для изолирования исследуемые лекарственные вещества из плазмы крови, так как они не задерживаются на сорбенте патрона.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Клеточный метаболизм. *Регистрационный код публикации:* 13-33-1-43
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 12 декабря 2012 г. УДК 581.1:577.1.

Исследование показателей проявления окислительного стресса в проростках вики в присутствии хлорида никеля

© **Абрамова Эльвира Александровна**[+] и **Иванищев Виктор Васильевич***
Кафедра ботаники и технологии растениеводства. Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого. Пр-т Ленина, 125. г. Тула, 300026. Россия. E-mail: abramea@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *никель, окислительный стресс, пероксид водорода, перекисное окисление липидов, каталаза, пероксидаза.*

Аннотация

Определены показатели стрессового воздействия ионов никеля в проростках вики. Изучены особенности функционирования компонентов антиоксидантной защиты в формирующихся проростках в ходе раннего онтогенеза.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Спектроскопия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-1-47
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 28 января 2013 г. УДК 543.421/424.

Влияние таблетирования образцов на метрологические характеристики анализа комбикормов методом спектроскопии в ближнем ИК-диапазоне

© **Баюнов* Александр Павлович** и **Смарыгин[+] Сергей Николаевич**
Кафедра неорганической и аналитической химии. Российский государственный аграрный университет – МСХА им. К.А.Тимирязева. Ул. Тимирязевская, 49. г. Москва, 127550. Россия. Тел.: (499) 976-03-81. E-mail: aleksandr-bajunov@rambler.ru, ssmarygin@timacad.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *БИК-спектроскопия, воспроизводимость, комбикорма, таблетирование.*

Аннотация

Рассмотрено применение таблетирования образцов комбикормов как способа пробоподготовки и его влияние на метрологические характеристики анализа комбикормов методом спектроскопии диффузного отражения в ближней инфракрасной области. Установлено, что при таблетировании снижается влияние различных факторов на воспроизводимость спектров. Предложен способ контроля качества пробоподготовки образцов комбикормов, основанный на изучении корреляционных зависимостей относительного стандартного отклонения от интенсивности спектра.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-1-55
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 28 января 2013 г. УДК 547.759.

Функционализация пиррольного цикла в нафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-онах

© Каргина Ольга Ивановна, **Биндарева Анна Вадимовна**
и **Горностаев*[+] Леонид Михайлович**
Кафедра химии. Красноярский государственный педагогический университет им. В.П. Астафьева. Ул. А. Лебедевой, 89. г. Красноярск, 660049. Россия. Тел.: (391) 217-17-29. E-mail: gornostaev@kspu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *аминометилирование, 1-амино-2-метилнафто[1,2,3-cd]индол-6(2H)-он, 1-нитро-2-метилнафто[1,2,3-cd]индол-6(2H)-он, 1-хлорацетиламино-2-метилнафто[1,2,3-cd]индол-6(2H)-он, нуклеофильное замещение, функционализация нафто[1,2,3-cd]индол-6(2H)-она.*

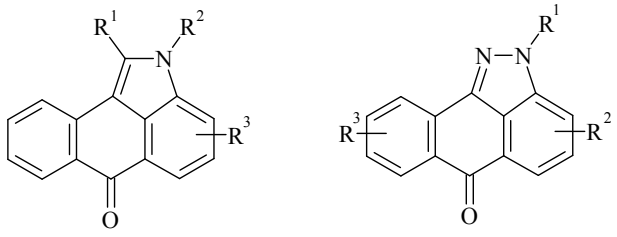
Аннотация

Изучены пути функционализации пиррольного цикла в нафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-онах. Рассмотрены реакции нуклеофильного замещения нитрогруппы в 1-нитро-2-метилнафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-оне под действием аренолов, арентиолов и тиогликолевой кислоты. Аминометилирование нафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-она протекает по атому азота. На основе 1-амино-2-метилнафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-она и хлорацетилхлорида получен 1-хлорацетиламино-2-метилнафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-он, в котором атом хлора замещен вторичными аминами.

Введение

Производные нафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-она (**I**) обладают практически важными свойствами. В работах, выполненных в последнее время, подобные вещества патентуются в качестве компонентов электролюминесцентных композиций [1-3]. Нафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-оны (пирролантроны) (**I**) являются гетероаналогами антра[1,9-*cd*]пиразол-6(2*H*)-онов (**II**), противоопухолевая активность которых предопределяет использование некоторых из них в качестве медицинских препаратов (схема 1) [4, 5].

Схема 1

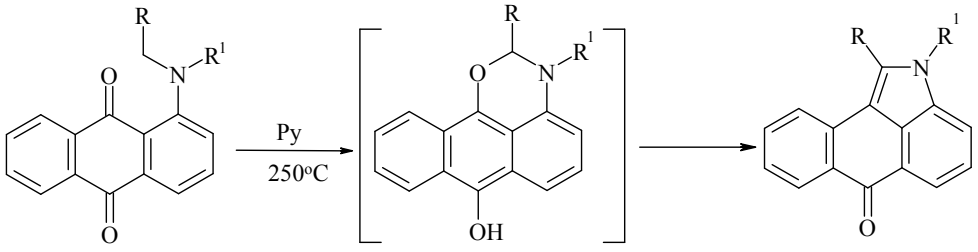


I **II**

Именно этим обстоятельством обусловлен интерес к поиску путей функционализации пирролантронов **I**.

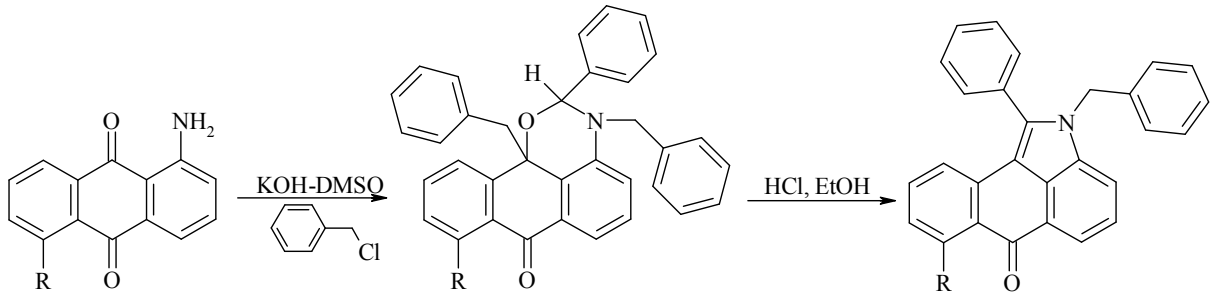
Как правило, пирролантроны, содержащие различные заместители в карбо- или гетероциклах получают способами [6-8] не включающими в качестве исходного вещества простейший пирролантрон **Ia** (схемы 2 и 3).

Схема 2



R = H, CH_3; R^1= CH_3, C_2H_5

Схема 3



R = H, Cl, NH_2

Экспериментальная часть

Спектры ЯМР ^{1}H записаны на спектрометре *Bruker DRX* (*500 МГц*) в ДМСО-d6, внутренний стандарт – ТМС. Масс-спектры регистрировали на приборе *Finnigan MAT 8200*. Элементный анализ проводили на приборе *EURO EA 3000*. Температуры плавления определены на микронагревательном столике *Boëtius*. Ход реакций и чистоту синтезированных соединений контролировали методом ТСХ на пластинах *Silufol*, растворитель – ацетон–толуол, 1:4.

1-Амино-2-метилнафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-он (Iв). В 50 мл этилового спирта кипятили 1.668 г (6 ммоль) соединения **Iб** и 8 мл гидразин-гидрата в присутствии 1.30 г Pd/C 20 мин. После горячего фильтрования фильтрат упаривали до 30 мл, выпавшие после охлаждения оранжевые кристаллы отфильтровывали, промывали водой. Перекристаллизовывали из спирта. Выход 0.975 г (65%), Т.пл. = 289 °С. Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м.д.: 3.70 с (3H, CH_3), 7.21 т (1H, H^4, *J* 7.5 Гц), 7.26 т (1H, H$^{8(9)}$, *J* 7.5 Гц), 7.50 д (1H, H^3, *J* 7.5 Гц), 7.57 уш.с (2H, NH_2), 7.64 т (1H, H$^{8(9)}$, *J* 7.5 Гц), 7.80 д (1H, H^5, *J* 7.5 Гц), 8.22 д (1H, H^7, *J* 7.5 Гц), 8.40 д (1H, H^{10}, *J* 7.5 Гц). Масс-спектр, *m/z* ($I_{отн.}$, %): 248 $[M]^+$ (100), 233 (22), 165 (9), 32 (48). Найдено, %: C 77.58; H 4.92; N 11.04. $C_{26}H_{12}N_2O$. Вычислено, %: C 77.42; H 4.84; N 11.29.

1-(2-Карбоксиметилтио)нафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-он (II). В 10 мл ДМСО нагревали 0.556 г (2 ммоль) соединения **Iб**, 0.304 г (4 ммоль) тиогликолевой кислоты и 0.552 (4 ммоль) K_2CO_3 при 70 °С 40 мин. По окончании реакции к реакционной смеси добавляли 3 мл AcOH (1:1) и 5 мл H_2O. Выпавший после охлаждения темно-желтый осадок отфильтровывали, промывали водой. Перекристаллизовывали из толуола. Выход 0.52 г (80%), Т.пл. = 228 °С. Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м.д.: 3.75 с (2H, CH_2), 4.00 с (3H, CH_3), 7.49 т (1H, H^4, *J* 7.5 Гц), 7.61 т (1H, H $^{8(9)}$, *J* 7.5 Гц), 7.78 т (1H, H$^{9(8)}$, *J* 7.5 Гц), 7.97 д (1H, H^3, *J* 7.5 Гц), 8.00 д (1H, H^5, *J* 7.5 Гц), 8.34 д (1H, H^7, *J* 7.5 Гц), 8.86 д (1H, H^{10}, *J* 7.5 Гц), 12.85 уш. с (1H, OH). Масс-спектр, *m/z* ($I_{отн.}$, %): 323 $[M]^+$ (48), 264 (100), 232 (13), 203 (16), 32 (42). Найдено, %: C 67.08; H 3.91; N 4.35; S 9.68. $C_{18}H_{13}NO_3S$. Вычислено, %: C 66.87; H 4.03; N 4.35; S 9.91.

2-Метил-1-феноксинафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-он (IIIа). В 10 мл ДМСО нагревали 0.834 г (3 ммоль) соединения **Iб**, 0.282 г (3 ммоль) фенола и 0.414 (3 ммоль) K_2CO_3 при 60 °С 20 мин. По окончании реакции к реакционной смеси добавляли 5 мл AcOH (1:1). Выпавший после охлаждения желтый осадок отфильтровывали, промывали горячей водой. Перекристаллизовывали из бензола. Выход 0.70 г (72%), Т.пл. = 182 °С. Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м.д.: 3.75 с (3H, CH_3), 7.17 т (1H, H$^{4'}$, *J* 7.0 Гц), 7.20 т (2H, H^{4,8}, *J* 8.0 Гц), 7.37-7.46 м (3H, H$^{9,2',6'}$), 7.57 д (2H, H$^{3',5'}$, *J* 7.0 Гц), 7.60 д (1H, H^7, *J* 8.0 Гц), 7.98 д (1H, H^3, *J* 8.0 Гц), 8.02 д (1H, H^5, *J* 8.0 Гц), 8.33 д (1H, H^{10}, *J* 8.0 Гц). Масс-спектр, *m/z* ($I_{отн.}$, %): 325 $[M]^+$ (82), 248 (92), 165 (79), 77 (100). Найдено, %: C 81.48; H 4.60; N 4.37. $C_{22}H_{15}NO_2$. Вычислено, %: C 81.23; H 4.62; N 4.31.

2-Метил-1-[(4-метил)тиофенокси]нафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-он (IIIб). В 10 мл ДМСО нагревали 0.834 г (3 ммоль) соединения **Iб**, 0.372 г (3 ммоль) 4-метилтиокрезола и 0.414 (3 ммоль) K_2CO_3 при 60 °С 20 мин. По окончании реакции к реакционной смеси добавляли 5 мл AcOH (1:1). Выпавший после охлаждения желтый осадок отфильтровывали, промывали горячей водой. Перекристаллизовывали из толуола. Выход 0.90 г (84%), Т.пл. = 216-217 °С. Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м.д.: 2.20 с (3H, CH_3), 3.90 с (3H, NCH_3), 7.12 с (4H, H$^{2',3',5',6'}$), 7.47 т (1H, H^8, *J* 7.5 Гц), 7.65 т (1H, H^4, *J* 7.5 Гц), 7.71 т (1H, H^9, *J* 7.5 Гц), 8.01 д (1H, H^3, *J* 7.5 Гц), 8.03 д (1H, H^5, *J* 7.5 Гц), 8.34 д (1H, H^7, *J* 7.5 Гц), 8.73 д (1H, H^{10}, *J* 7.5 Гц). Масс-спектр, *m/z* ($I_{отн.}$, %): 355 $[M]^+$ (100), 340 (41), 203 (30), 123 (6). Найдено, %: C 77.63; H 4.75; N 4.15; S 8.97. $C_{23}H_{17}NOS$. Вычислено, %: C 77.75; H 4.79; N 3.94; S 9.01.

2-Метил-1-[(4-*трет*-бутил)фенокси]нафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-он (IIIв). В 10 мл ДМСО нагревали 0.417 г (1.5 ммоль) соединения **Iб**, 0.207 г (1.5 ммоль) 4-*трет*-бутилфенола и 0.207 (3 моль) K_2CO_3 при 60 °С 30 мин. Реакционную смесь охлаждали до 20 °С и выливали в 100 г льда. Выпавший желтый осадок отфильтровывали, промывали горячей водой. Перекристаллизовывали из толуола.

Выход 0.50 г (87%), Т.пл. = 156 °С. Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м.д.: 1.26 с (9H, C(CH$_3$)$_3$), 3.75 с (3H, NCH$_3$), 7.08 с (2H, H$^{2',6'}$, *J* 8.5 Гц), 7.38 т (1H, H^8, *J* 8.0 Гц), 7.43 д (2H, H$^{3',5'}$, *J* 8.5 Гц), 7.56-7.61 м (3H, H^{4,7,9}), 7.97 д (1H, H^3, *J* 8.0 Гц), 8.02 д (1H, H^5, *J* 8.0 Гц), 8.33 д (1H, H^{10}, *J* 8.0 Гц). Масс-спектр, *m/z* ($I_{отн.}$, %): 381 [*M*]$^+$ (75), 248 (100), 165 (67), 150 (17). Найдено, %: C 81.77; H 6.10; N 3.65. $C_{26}H_{23}NO_2$. Вычислено, %: C 81.89; H 6.04; N 3.67.

1-Хлорацетиламино-2-метилнафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-он (IV). В 50 мл диоксана кипятили 2.70 г (10.88 ммоль) соединения **Iв** с 15.60 г (138 ммоль) хлорацетихлорида 2 ч. Реакционную смесь охлаждали до 20 °С и добавляли 15 мл H_2O. Выпавший осадок коричневого цвета отфильтровывали, промывали водой, спиртом. Перекристаллизовывали из толуола. Выход 2.34 г (66%), Т.пл. = 224 °С. Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м.д.: 3.75 с (3H, CH$_3$), 4.60 с (2H, CH$_2$CO), 7.45 т (1H, H$^{8(9)}$, *J* 7.5 Гц),7.58 т (1H, H^4, *J* 7.5 Гц), 7.72 т (1H, H$^{8(9)}$, *J* 7.5 Гц), 7.96 д (1H, H^3, *J* 7.5 Гц), 7.99 д (1H, H^5, *J* 7.5 Гц), 8.01 д (1H, H^7, *J* 7.5 Гц), 8.34 д (1H, H^{10}, *J* 7.5 Гц). Масс-спектр, *m/z* ($I_{отн.}$, %): 326 [*M*+2]$^+$ (22), 325 [*M*+1]$^+$ (12), 324 [*M*]$^+$ (71), 247 (71), 165 (57), 32 (100). Найдено, %: C 66.59; H 3.75; Cl 10.68; N 8.47. $C_{18}H_{13}ClN_2O_2$. Вычислено, %: C 66.56; H 4.01; Cl 10.94; N 8.63.

2-Метил-1-[(4-метилпиперазин-1-ил)ацетиламино]нафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-он (Va). В 5 мл ДМСО нагревали 0.20 г (0.616 ммоль) соединения **IV** и 0.90 г (9 ммоль) 1-метилпиперазина при 60 °С 30 мин. Выпавший после охлаждения желтый осадок отфильтровывали, промывали водой. Перекристаллизовывали из толуола. Выход 0.20 г (84%), Т.пл. = 261 °С. Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м.д.: 2.21 (3H, CH$_3$), 2.24 уш. с (4H, пиперазин), 3.32 уш. с (4H, пиперазин), 3.40 с (2H, CH$_2$), 3.75 с (3H, NCH$_3$), 7.43 т (1H, H$^{8(9)}$, *J* 8.0 Гц), 7.57 т (1H, H^4, *J* 8.0 Гц), 7.70 т (1H, H$^{8(9)}$, *J* 8.0 Гц), 7.94 д (1H, H^3, *J* 8.0 Гц), 7.96 д (1H, H^5, *J* 8.0 Гц), 7.98 д (1H, H^{10}, *J* 8.0 Гц), 8.34 д (1H, H^7, *J* 8.0 Гц), 10.60 уш. с (1H, NH). Масс-спектр, *m/z* ($I_{отн.}$, %): 388 [*M*]$^+$ (8), 113 (100), 70 (73), 32 (40). Найдено, %: C 70.75; H 5.93; N 14.17. $C_{23}H_{24}N_4O_2$. Вычислено, %: C 71.13; H 6.18; N 14.43.

1-[(4-Бензилпиперазин-1-ил)ацетиламино]-2-метилнафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-он (Vб). В 8 мл ДМСО нагревали 0.30 г (0.924 ммоль) соединения **IV** и 1.014 г (5.760 ммоль) 1-бензилпиперазина при 60 °С 30 мин. По окончании реакции реакционную смесь охлаждали до 40 °С и добавляли 3 мл H_2O. Выпавший после охлаждения желтый осадок отфильтровывали, промывали водой. Перекристаллизовывали из толуола. Выход 0.31 г (72%), Т.пл. = 225 °С. Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м.д.: 2.54-2.72 м (8H, пиперазин), 3.40 с (2H, CH$_2$CO), 3.55 с (2H, $\underline{CH_2}$Ph), 3.75 с (3H, NCH$_3$), 7.32-7.36 м (5H, бензил), 7.43 т (1H, H$^{8(9)}$, *J* 8.0 Гц), 7.56 т (1H, H^4, *J* 8.0 Гц), 7.65 т (1H, H$^{8(9)}$, *J* 8.0 Гц), 7.94 д (1H, H^3, *J* 8.0 Гц), 7.96 д (1H, H^5, *J* 8.0 Гц), 7.98 д (1H, H^{10}, *J* 8.0 Гц), 8.34 д (1H, H^7, *J* 8.0 Гц), 10.60 с (1H, NH). Масс-спектр, *m/z* ($I_{отн.}$, %): 465 [*M*+1]$^+$ (3), 248 (5), 189 (85), 91 (100), 32 (89). Найдено, %: C 74.72; H 5.84; N 11.90. $C_{29}H_{28}N_4O_2$. Вычислено, %: C 75.00; H 6.03; N 12.07.

2-Метил-1-[(4-пиримидин-2-илпиперазин-1-ил)ацетиламино]нафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-он (Vв). В 2 мл H_2O растворяли 0.27 г (2.53 ммоль) Na_2CO_3 и 0.60 г (2.53 ммоль $C_{11}H_{16}N_2\cdot 2HCl$) 1-пиримидинпиперазина дигидрохлорида, приливали к 0.30 г (0.924 ммоль) соединения **IV** растворенного в 8 мл ДМСО и нагревали при 60 °С 4 ч. По окончании реакции реакционную смесь охлаждали до 40 °С и добавляли 3 мл H_2O. Выпавший после охлаждения желтый осадок отфильтровывали, промывали водой. Перекристаллизовывали из толуола. Выход 0.37 г (89%), Т.пл. = 256 °С. Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м.д.: 2.72 уш. с (4H, пиперазин), 3.49 с (2H, CH$_2$CO), 3.74 с (3H, NCH$_3$), 3.90 уш. с (4H, пиперазин), 6.65 т (1H, H$^{4'}$ пиримидин, *J* 5.0 Гц), 7.44 т (1H, H$^{8(9)}$, *J* 8.0 Гц), 7.57 т (1H, H^4, *J* 8.0 Гц), 7.72 т (1H, H$^{8(9)}$, *J* 8.0 Гц), 7.96-8.00 м (3H, H^{3,5,7}), 8.34 д (1H, H^{10}, *J* 8.0 Гц), 8.39 д (2H, H$^{3',5'}$ пиримидин, *J* 5.0 Гц), 10.71 с (1H, NH). Масс-спектр, *m/z* ($I_{отн.}$, %): 453 [*M*+1]$^+$ (3), 274 (11), 177 (100), 91 (28), 32 (17). Найдено, %: C 68.96; H 5.19; N 18.49. $C_{26}H_{24}N_6O_2$. Вычислено, %: C 69.03; H 5.31; N 18.58.

1-{[4-(1,3-Бензодиоксол-5-илметил)пиперазин-1-ил]ацетиламино}-2-метилнафто[1,2,3-*cd*]-индол-6(2*H*)-он (Vг). В 6 мл ДМСО нагревали 0.20 г (0.616 ммоль) соединения **IV** и 0.30 г (1.59 ммоль) 1-пиперонилпиперазина при 60 °С 2 ч. По окончании реакции реакционную смесь охлаждали до 40 °С и добавляли 3 мл H_2O. Выпавший после охлаждения желтый осадок отфильтровывали, промывали водой. Перекристаллизовывали из толуола. Выход 0.26 г (84%), Т.пл. = 255 °С. Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м.д.: 2.52-2.72 м (8H, пиперазин), 3.39 с (2H, CH$_2$CO), 3.45 с (2H, $\underline{CH_2}$Ph), 3.74 с (3H, NCH$_3$), 6.00 с (2H, O$\underline{CH_2}$O), 6.78 д (1H, H^6, *J* 8.0 Гц), 6.85-6.90 м (2H, H$^{2',5'}$), 7.43 т (1H, H$^{8(9)}$, *J* 8.0 Гц), 7.56 т (1H, H^4, *J* 8.0 Гц), 7.66 т (1H, H$^{8(9)}$, *J* 8.0 Гц), 7.94 д (1H, H^3, *J* 8.0 Гц), 7.95 д (1H, H^5, *J* 8.0 Гц), 7.98 д (1H, H^7, *J* 8.0 Гц), 8.33 д (1H, H^{10}, *J* 8.0 Гц), 10.60 уш. с (1H, NH). Масс-спектр, *m/z* ($I_{отн.}$, %): 508 [*M*]$^+$ (0.7), 233 (18), 135 (100), 91 (18), 32 (82). Найдено, %: C 70.56; H 5.38; N 10.81. $C_{30}H_{28}N_4O_4$. Вычислено, %: C 70.87; H 5.51; N 11.02.

2-(Морфолин-4-илметил)нафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-он (VIa). В 10 мл диоксана нагревали 0.420 г (14 ммоль) параформа и 2.436 г (28 ммоль) морфолина при 40 °С. Через 30 мин добавляли 0.06 г (0.6 ммоль) CuCl и выдерживали 10 мин, затем присыпали 0.86 г (3.92 ммоль) соединения **Ia**,

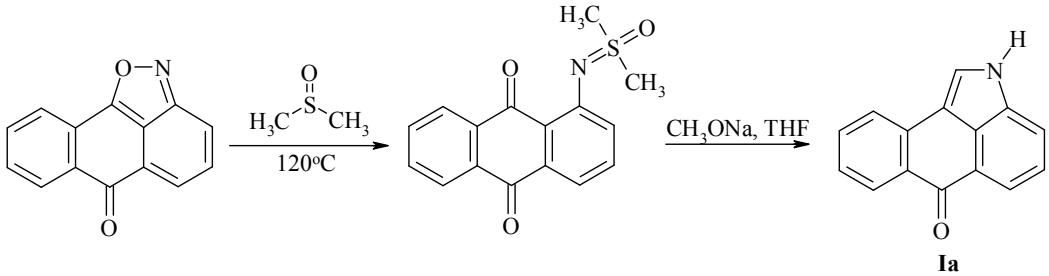
увеличивали температуру до 80 °С и нагревали 2 ч. По окончании реакции реакционную смесь охлаждали до 20 °С и выливали в 100 г льда. Выпавший темно-желтый осадок отфильтровывали, промывали водой. Перекристаллизовывали из толуола. Выход 1.20 г (96%), Т.пл. = 157 °С. Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м.д.: 2.58 уш. т (4H, O(CH_2)$_2$, *J* 4.0 Гц), 3.58 уш. т (4H, N(CH_2)$_2$, *J* 4.0 Гц), 5.15 с (2H, CH_2), 7.44 т (1H, H$^{8(9)}$, *J* 7.5 Гц), 7.57 т (1H, H^4, *J* 7.5 Гц), 7.73 т (1H, H$^{8(9)}$, *J* 7.5 Гц), 7.99 д (1H, H^3, *J* 7.5 Гц), 8.11 д (1H, H^5, *J* 7.5 Гц), 8.13 д (1H, H^7, *J* 7.5 Гц), 8.32 д (1H, H^{10}, *J* 7.5 Гц), 8.46 с (1H, H^1). Масс-спектр, *m/z* ($I_{отн.}$, %): 318 $[M]^+$ (6), 232 (11), 218 (10), 100 (100), 56 (54), 32 (29). Найдено, %: C 75.73; H 5.64; N 8.59. $C_{20}H_{18}N_2O_2$. Вычислено, %: C 75.47; H 5.66; N 8.81.

2-[(4-Фенилпиперазин-1-ил)метил]нафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-он (VIб). В 7 мл диоксана нагревали 0.21 г (7 ммоль) параформа и 2.26 г (14 ммоль) 1-фенилпиперазина при 40 °С. Через 30 мин добавляли 0.03 г (0.3 ммоль) CuCl и выдерживали 10 мин, затем присыпали 0.43 г (1.96 ммоль) соединения **Iа**, увеличивали температуру до 80 °С и нагревали 30 мин. По окончании реакции реакционную смесь охлаждали до 20 °С и выливали в 100 г льда. Выпавший желтый осадок отфильтровывали, промывали водой. Перекристаллизовывали из толуола. Выход 0.64 г (83%), Т.пл. = 159-160 °С. Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м.д.: 2.74 уш. т (4H, пиперазин, *J* 4.5 Гц), 3.14 уш. т (4H, пиперазин, *J* 4.5 Гц), 5.25 с (2H, CH_2), 6.74 т (1H, H$^{4'}$ фенил, *J* 8.0 Гц), 6.87 д (2H, H$^{2',6'}$, *J* 8.0 Гц), 7.16 т (2H, H$^{3',5'}$, *J* 8.0 Гц), 7.44 т (1H, H$^{8(9)}$, *J* 8.0 Гц), 7.59 т (1H, H^4, *J* 8.0 Гц), 7.73 т (1H, H$^{8(9)}$, *J* 8.0 Гц), 7.99 д (1H, H^3, *J* 8.0 Гц), 8.12 д (1H, H^5, *J* 8.0 Гц), 8.17 д (1H, H^7, *J* 7.5 Гц), 8.32 д (1H, H^{10}, *J* 7.5 Гц), 8.49 с (1H, H^1). Масс-спектр, *m/z* ($I_{отн.}$, %): 219 $[M\text{-}C_{11}H_{14}N_2]^+$ (27), 175 (100), 56 (11), 32 (29). Найдено, %: C 79.38; H 5.89; N 10.31. $C_{26}H_{23}N_3O$. Вычислено, %: C 79.39; H 5.85; N 10.69.

Результаты и их обсуждение

Для получения функционализированных пирролантронов мы использовали пирролантрон **Iа**, синтезируемый простым, недавно описанным способом (схема 4) [9].

Схема 4

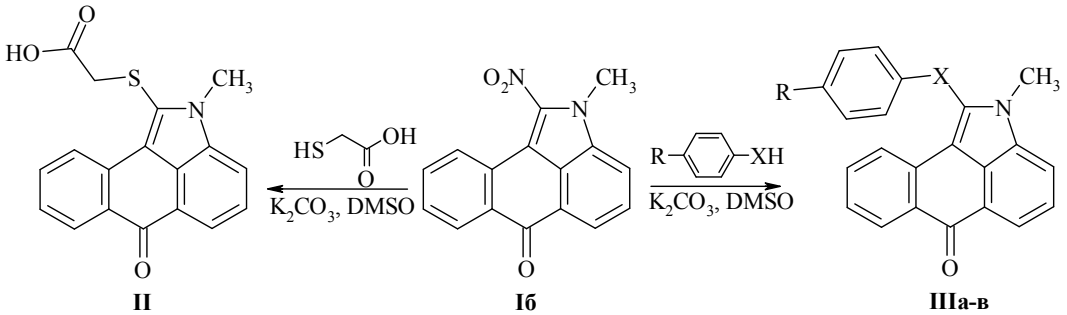


Iа

В рамках данной работы нами рассмотрены способы модификации, позволяющие вводить различные заместители в первое и второе положения пиррольного цикла.

При взаимодействии 1-нитро-2-метилпирролантрона (**Iб)**, полученного последовательным метилированием и нитрованием вещества **Iа** [10], с аренолами, арентиолами и тиогликолевой кислотой получены 1-замещенные пирролантроны **II**, **IIIа-в** (схема 5).

Схема 5



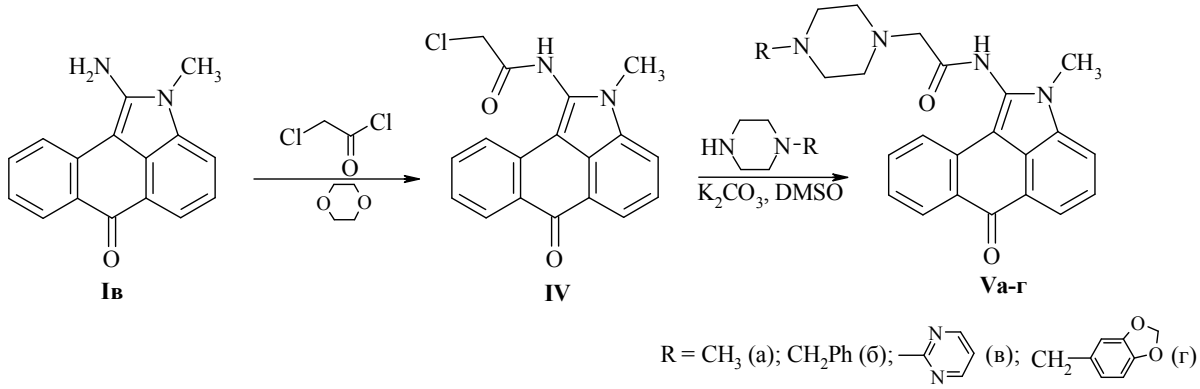
II **Iб** **IIIа-в**

R = H, X = O (а); R = CH_3, X = S (б); R = $C(CH_3)_3$, X = O (в)

Таким образом нами установлено, что нитрогруппа, находящаяся в положении 1 пирролантрона **Iб**, может подвергаться нуклеофильному замещению не только алифатическими аминами [11], но и *O*-, *S*-нуклеофилами. Структура веществ **II**, **IIIа-в** подтверждена физико-химическими методами (см. экспериментальную часть).

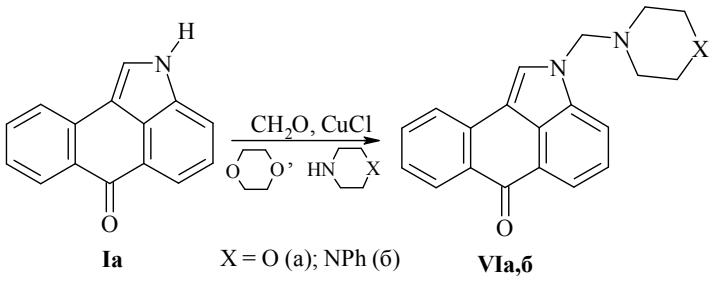
1-Нитро-2-метилпирролантрон (**Iб)** был восстановлен нами до 1-амино-2-метилпирролантрона (**Iв)** модифицированным способом – восстановлением исходного вещества **Ib** гидразин-гидратом в присутствии Pd/C. Полученное при этом соединение **Iв** легко реагирует с хлорацетилхлоридом образуя 1-хлорацетиламино-2-метилпирролантрон (**IV**). В амиде **IV** атом хлора сохраняет нуклеофильную подвижность; взаимодействие этого вещества со вторичными аминами позволяет синтезировать соответствующие ω-диалкиламинопроизводные **Va-г** (схема 6).

Схема 6



Также нами установлено, что пирролантрон **Ia** аминометилируется по атому азота (схема 7).

Схема 7



Заметим, что в отличие от данного случая, аминометилирование индола, пиррола и их производных протекает по атомам углерода [12].

Выводы

1. Найдены новые способы функционализации нафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-она.
2. Нитрогруппа в 1-нитро-2-метилнафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-оне обладает высокой нуклеофильной подвижностью и замещается под действием аренолов и арентиолов.
3. На основе 1-хлорацетиламино-2-метилнафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-она получены ω-диалкиламинопроизводные.
4. Аминометилирование нафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-она протекает по атому азота пиррольного цикла.

Литература

[1] H. Takahashi, and Y. Iizumi. *JPN Patent Appl. Publ.* no. 2000-200 683, **2000**; *Chem. Abstr.* **2000**. Vol.133. No.12. P.220.
[2] H. Takahashi, and Y. Iizumi. JPN Patent Appl. Publ. no. 2000-260 565, **2000**; Database: CAPLUS.
[3] H. Takahashi, , K. Miyauchi, and M. Tsuruoka. JPN Patent Appl. Publ. no. 2000-087 026, **2000**; Database: CAPLUS.

[4] H.D. Hollis Showalter, J.L. Johnson, J.V. Hoftiezer, W.R. Turner, L.M. Werbel, W.R. Leopold, J.L. Shillis, R.C. Jackson, E.F. Elslager. Anthrapyrazole anticancer agent. Synthesis and structure – activity relationships against murine leukemia. *J. Med. Chem.* **1987**. Vol.30. P.121-131.
[5] V.G. Beylin, N.L. Colby, O.P. Goel, J.E. Haky, D.R. Johnson, J.L. Johnson, G.D. Kanter, R.L. Leeds, B. Leja, E.P. Lewis, C.D. Rithner, H.D. Hollis Showalter, A.D. Sercel, W.R. Turner, S.E. Ahlendorf. Anticancer anthrapyrazoles. Improved syntheses of clinical agent CI-937, CI-941 and piroxantrone hydrochloride. *J. Heterocyclic Chem.* **1989**. Vol.26. P.85-95.
[6] Денисов В.Я., Анишина Л.Н., Фокин Е.П. Термолиз 1-диалкиламиноантрахинонов – новый путь синтеза производных антра[1,9-*bc*]пиррола. *ХГС*. **1975**. №10. С.1360-1363.
[7] S. Arai, S. Yamauchi, T. Yamauchi, M. Hida. Synthesis of 2,6-dihydronaphth[1,2,3-*cd*]indol-6-ones. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **1991**. Vol.64. P.324-326.
[8] S. Arai, S. Yamauchi, Y. Moriya, T. Tanaka, Y. Yamazaki, H. Inoue, T. Yamauchi, M. Hida. Synthesis of 2,6-dihydronaphth[1,2,3-*cd*]indol-6-one derivatives and their fluoresce nce properties. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **1991**. Vol.64. P.3417-3421.
[9] Каргина О.И., Горностаев Л.М., Нефёдов А.А. Синтез и особенности внутримолекулярных основнокатализируемых гетероциклизаций 1-*S,S*-диалкил-*N*-(9,10-антрахинон-1-ил)сульфоксимидов в нафто[1,2,3-cd]индол-6(2*H*)-оны. *ЖОрХ*. **2013**. Т.49. №1. С.79-85.
[10] Казанков М.В., Садовых Е.Г. Реакции замещения пирролантронов. *ХГС*. **1978**. №10. С.1356-1360.
[11] Горностаев Л.М., Каргина О.И. Синтез 1-аминонафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-онов. *ХГС*. **2012**. №8. С.1262-1265.
[12] Джоуль Дж., Смит Г. Основы химии гетероциклических соединений. Пер. с англ. *М.: Мир*. **1975**. 382с.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-1-55
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 28 января 2013 г. УДК 547.759.

Функционализация пиррольного цикла в нафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-онах

© Каргина Ольга Ивановна, **Биндарева Анна Вадимовна**
и **Горностаев*[+] Леонид Михайлович**
Кафедра химии. Красноярский государственный педагогический университет им. В.П. Астафьева. Ул. А. Лебедевой, 89. г. Красноярск, 660049. Россия. Тел.: (391) 217-17-29. E-mail: gornostaev@kspu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *аминометилирование, 1-амино-2-метилнафто[1,2,3-cd]индол-6(2H)-он, 1-нитро-2-метилнафто[1,2,3-cd]индол-6(2H)-он, 1-хлорацетиламино-2-метилнафто[1,2,3-cd]индол-6(2H)-он, нуклеофильное замещение, функционализация нафто[1,2,3-cd]индол-6(2H)-она.*

Аннотация

Изучены пути функционализации пиррольного цикла в нафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-онах. Рассмотрены реакции нуклеофильного замещения нитрогруппы в 1-нитро-2-метилнафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-оне под действием аренолов, арентиолов и тиогликолевой кислоты. Аминометилирование нафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-она протекает по атому азота. На основе 1-амино-2-метилнафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-она и хлорацетилхлорида получен 1-хлорацетиламино-2-метилнафто[1,2,3-*cd*]индол-6(2*H*)-он, в котором атом хлора замещен вторичными аминами.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-1-61
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 19 декабря 2012 г. УДК 547.856.1.

Транс-2-[2-(1-нафтил)винил]- и *транс*-2-[2-(2-флуоренил)винил]-3-фенил-*3H*-хиназолин-4-оны: синтез и фотофизические свойства

© Носова[1+] **Эмилия Владимировна**, **Ступина**[1] **Татьяна Викторовна**, **Липунова**[2] **Галина Николаевна** и **Чарушин**[1,2]*** Валерий Николаевич**

[1] *Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Россия. Тел.: (343) 375-45-01. E-mail: emily74@rambler.ru*

[2] *Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН. Ул. С. Ковалевской, 22. г. Екатеринбург, 620219. Россия. Тел.: (343) 362-30-65. E-mail: lipunova@ios.uran.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *стириловые красители, фотолюминесценция, стирилбензазины, хиназолин-4-оны, 2-метил-3,1-бензоксазин-4-он, (арил)метиленфениламины.*

Аннотация

Осуществлен синтез новых стирилхиназолинонов трансформацией гетерокольца 2-метил-3,1-бензоксазин-4-онов под действием (нафталин-1-ил)- и (9*H*-флуорен-2-ил)-метиленфениламинов при кипячении в ледяной уксусной кислоте в присутствии ацетата натрия. Исследованы спектры поглощения и фотолюминесценции полученных соединений.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-1-65
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 31 января 2013 г. УДК 547.239.

Синтез 1,3-дизамещенных мочевин и бисмочевин – структурных элементов для супрамолекулярных соединений

© Зубович[1+] Екатерина Александровна, **Бурмистров[1]* Владимир Владимирович**, **Лысых[1] Борис Анатольевич**, **Дьяконов[1] Сергей Владимирович**, **Данилов[1] Дмитрий Владимирович** и **Бутов[2]* Геннадий Михайлович**

[1] *Волгоградский государственный технический университет. ВолгГТУ. Пр. им. Ленина, 28. г. Волгоград, 400005. Россия. Тел.: (917) 848-49-18. E-mail: ekamneva@rambler.ru*

[2] *Волжский политехнический институт (филиал) Волгоградского государственного технического университета. Ул. Энгельса, 42а. г. Волжский, 404121. Волгоградской область. Россия. Тел.: (8443) 22-19-59 E-mail: butov@volpi.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *изоцинат, адамантан, адамантил, мочевина, 1,3-диметиладамантан.*

Аннотация

Синтезированы 1,3-дизамещенные мочевины и бисмочевины – производные адамантана, которые могут быть использованы в качестве молекулярных составляющих для синтеза супрамолекулярных комплексов, в частности, ротаксанов или как мономеры для супрамолекулярных циклодекстриновых полимеров. Реакции проводились в мягких условиях с высокими выходами. В статье представлены данные по синтезу новых 1.3-адамантилдизамещенных мочевин и бисмочевин.

Full Paper _____ *Thematic Section:* Quantum-Chemical Researches.
Registration Code of Publication: 12-32-10-68 *Subsection:* Biochemistry.
Publication is available for discussion in the framework of the on-line Internet conference "*Butlerov readings*".
http://butlerov.com/readings/
Contributed: September 25, 2012.

Mechanism for apigenin complexing with cellular phosphatidylcholine

© **Ruslan S. Nasibullin**,*+ **Roza I. Galeeva**, and **Zulfia D. Yusupova**
Bashkir State Medical University. Lenin St.,3. Ufa, 450000. E-mail: med-fis@yandex.ru

*Supervising author; +Corresponding author

Keywords: *complexing, flavonoids, NMR-spectroscopy*.

Abstract

Quantum-chemical methods, as well as ^{13}C and ^{1}H NMR spectroscopy, have been used for studying the complexing of trihydroxyflavone (apigenin) molecule with cellular phosphatidylcholine (lecithin). Change of electronic structure and conformation states of lecithin is shown. The energy of complexing has been defined.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Координационная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-1-69
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 28 января 2013 г. УДК 54-386.

Синтез и строение комплексных соединений переходных металлов с некоторыми α-карбонилсодержащими арилгидразонами

© Ковальчукова[1]*+ Ольга Владимировна, Аль Тахан[1,2] Рана Абдулила Аббас, Зайцев[1]* Борис Ефимович, Страшнова[1] Светлана Болеславна, Волянский[3] Олег Вениаминович и Кузнецов[3] Дмитрий Николаевич
[1] *Кафедра общей химии. Российский университет дружбы народов. Ул. Миклухо-Маклая, 6. г. Москва, 117198. Россия. Тел. (495) 955-08-60.*
[2] *Кафедра химии. Технологический институт. г. Багдад. Ирак.*
[3] *Кафедра органической химии. Московский государственный университет дизайна и технологии. Ул. Садовническая, 33. г. Москва, 117997. Россия. E-mail okovalchukova@mail.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *комплексные соединения, арилгидразоны, синтез, спектральные характеристики, константы образования, корреляции.*

Аннотация

Выделены в кристаллическим состоянии и изучены совокупностью спектральных методов исследования 8 комплексных соединений марганца(II), никеля(II), меди(II) и кадмия(II) с некоторыми α-карбонилсодержащими арилгидразонами. На основании спектральных характеристик (ИК, электронная спектроскопия) определен характер координации и предложены схемы строения координационных соединений.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Квантово-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-1-74 *Подраздел:* Органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 54-386. Поступила в редакцию 4 февраля 2013 г.

Электронные спектры поглощения и строение 6-(2-метил-5-оксо-1-фенил-4,5-дигидро-1*H*-имидазол-4-илазо)-1-оксо-2,5-дигидро-1*H*-бензо[4,5]имидазо[1,2-c]пиримидин-7-карбоновой кислоты

© **Ковальчукова**[1]*+ **Ольга Владимировна**, **Рябов**[1] **Михаил Алексеевич**,
Аль Тахан[1,2] **Рана Абдулила Аббас**, **Зайцев**[1]* **Борис Ефимович**,
Страшнова[1] **Светлана Болеславна** и **Волянский**[1] **Олег Вениаминович**
[1] *Кафедра общей химии. Российский университет дружбы народов. Ул. Миклухо-Маклая, 6. г. Москва, 117198. Тел.: (495) 955-08-60. E-mail: okovalchukova@mail.ru*
[2] *Кафедра химии. Технологический институт. г. Багдад. Ирак.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *электронная спектроскопия, квантово-химические расчеты, ППП, PM3, бензо[4,5]имидазо[1,2-c]хиназолин, производные.*

Аннотация

Спектральными (электронная спектроскопия) и квантово-химическими (ППП, PM3) методами изучены таутомерные и ионные формы 6-(2-метил-5-оксо-1-фенил-4,5-дигидро-1*H*-имидазол-4-илазо)-1-оксо-2,5-дигидро-1*H*-бензо[4,5]имидазо[1,2-c]пиримидин-7-карбоновой кислоты. Показано его преимущественное существование в виде неплоского CH-азо таутомера.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Квантово-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-1-78 *Подраздел:* Органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 54-386. Поступила в редакцию 4 февраля 2013 г.

Квантово-химическое моделирование металлохелатных циклов фенилазопроизводных метилфлороглюцина

© Страшнова*[+] Светлана Болеславна, **Ковальчукова* Ольга Владимировна**,
Ромашкина Екатерина Петровна, **Авраменко Оксана Владимировна**
и **Волянский Олег Вениаминович**

Кафедра общей химии. Российский университет дружбы народов. Ул. Миклухо-Маклая, 6.
г. Москва, 117198. Россия. Тел.: (495) 955-08-60. E-mail sstrashnova@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *металлохелатный цикл, метилфлороглюцина, квантово-химическое моделирование, теория функционала плотности.*

Аннотация

Проведено квантово-химическое моделирование пяти- и шестичленных металлохелатных циклов комплекса Ni^{2+} с 2-фенил-4-нитро-2,4,6-тригидрокситолуолом H_4L.

На основании соответствия изменений в экспериментальных и рассчитанных электронных спектрах поглощения при комплексообразовании определен наиболее предпочтительный тип координации.

Тематический раздел: Термодинамические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Металлургия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-1-83
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 6 февраля 2013 г. УДК 669.793.

Термодинамические свойства богатых легкоплавким компонентом сплавов свинец-скандий

© Шубин[1+] Алексей Борисович, **Шуняев[1]* Константин Юрьевич**
и **Ямщиков[2] Леонид Федорович**
[1] *Институт металлургии УрО РАН. Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Россия.*
Тел.: (343) 232-91-38. E-mail: abshubin@gmail.com
[2] *Уральский федеральный университет. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Россия.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *скандий, свинец, сплав, термодинамические свойства, структура.*

Аннотация

В работе методом электродвижущих сил (ЭДС) изучены парциальные термодинамические свойства скандия в его жидких сплавах со свинцом в температурном интервале 650-1040 К. Измерения производили, пользуясь двумя различными модификациями метода ЭДС. Первая (классический метод) включала измерение потенциалов при достаточно длительном периоде установления термодинамического равновесия, последовательно во всем температурном диапазоне (с получением политермических зависимостей). Вторая (хронопотенциометрический метод) давала возможность производить изотермическое измерение в течение достаточно короткого временного интервала, с дальнейшим исследованием массива таких измерений, выполненных при различных температурах. Результаты обеих методик хорошо согласуются между собой, что дает возможность объединить их в виде одной линейной зависимости. Парциальная энергия Гиббса скандия в жидком двухфазном сплаве состава ($L + Pb_6Sc_5$) (где L – жидкий раствор скандия в свинце) описывается уравнением: $\Delta G_{Sc} = - (90.93 \pm 2.1) + (6.7 \pm 2.3)\cdot 10^{-3}$ T, кДж/моль Sc.

Тематический раздел: Химико-технологические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-1-87
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 17 января 2013 г. УДК 66.067.9:661.11:661.715.3.

Очистка октена-1 от винилиденовых соединений реакцией олигомеризации

© Ахмедьянов[1+] Михаил Сергеевич, **Ахмедьянова[1] Раиса Ахтямовна**, **Лиакумович[1]* Александр Григорьевич**, **Гнездилов[1] Олег Иванович** и **Урядов[2] Владимир Георгиевич**

[1] *Кафедра синтетического каучука;* [2] *Кафедра органической химии. Казанский государственный технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.:* [1)] *(843) 231-43-91,* [2)] *(843) 231-43-81. E-mail:* [1)] *xyp36@mail.ru ,* [2)] *vguryadov@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *полиэтилен, α-олефины, винилиденовые соединения.*

Аннотация

Исследован процесс очистки фракции α-олефинов C_8 от винилиденовых соединений, основанный на отделении α-олефина от олигомеризованных в мягких условиях винилиденовых соединений. Показана эффективность предлагаемой технологии.

Тематический раздел: Химическая технология. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Полимерная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-1-93
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 17 ноября 2012 г. УДК 541.64+678.664.

Синтез сложных ароматических олигоэфирдиолов и термостойких полиуретановых лаков на их основе

© Пасерб[+] Мария Александровна, **Бакирова* Индира Наилевна**
и **Самуилов Александр Яковлевич**

Кафедра технологии синтетического каучука. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-95-89. E-mail: paserbm@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *оксиэтилированный дифенилолпропан, сложные ароматические олигоэфрдиолы, термостойкие полиуретановые покрытия.*

Аннотация

Синтезированы ароматические олигоэфирдиолы с использованием бис-2-гидроксиэтилового эфира 4,4′-диоксидифенил-2,2-пропана. На их основе получены полиуретановые покрытия лако-красочного назначения. Установлено, что покрытия характеризуются высокой термостойкостью, твердостью, прочностью и адгезией. Показано, что твердость покрытий закономерно возрастает с увеличением концентрации полиизоцианата и уменьшением молекулярной массы олигоэфирдиола.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Неорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-1-97
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 23 декабря 2012 г. УДК 546.561,221.1;546.682.3,221.1.

Тематическое направление: Гидрохимический синтез пленок халькогенидов металлов. Часть 16.

Гидрохимическое осаждение и исследование тонких пленок в системе $Cu_2S–In_2S_3$

© Туленин[1] Станислав Сергеевич, **Марков[1,2]* Вячеслав Филиппович**, **Маскаева[1,2+] Лариса Николаевна** и **Кузнецов[3] Михаил Владимирович**

[1] *Кафедра физической и коллоидной химии. ФГАОУ ВПО Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Свердловская область. Россия. Тел.: (343) 375-93-18. E-mail: stast1989@mail.ru*

[2] *Кафедра химии и процессов горения. Уральский институт ГПС МЧС России. Ул. Мира, 22. г. Екатеринбург, 620022. Россия. Тел.: (343) 360-81-68. E-mail: mln@ural.ru*

[3] *Институт химии твердого тела. Уральское отделение РАН. Ул. Первомайская, 91. г. Екатеринбург, 620990. Россия. Тел.: (343) 362-33-56. E-mail: kuznetsov@ihim.uran.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *гидрохимическое осаждение, сульфид меди (I), сульфид индия(III), тонкие пленки, тип проводимости, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия.*

Аннотация

Впервые методом гидрохимического осаждения из водных растворов "хлорид индия − хлорид меди − гидроксид натрия − тиокарбамид" и "хлорид индия − хлорид меди − гидроксид натрия − трилон Б − тиокарбамид" получены тонкие пленки $In_xCu_{1-x}S_yO_{1-y}$ с содержанием индия до 9.63 ат%. С использованием метода рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии установлено распределение и атомарные соотношения элементов в синтезированных образцах. Электронно-микроскопические исследования выявили изменение микроструктуры пленок в зависимости от температуры осаждения и состава реакционной смеси. Синтезированные тонкопленочные соединения обладают *n*-типом проводимости.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-1-104 *Подраздел:* Неорганическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.183. Поступила в редакцию 02 февраля 2013 г.

Сорбция платины(IV) модифицированным углеродминеральным сорбентом

© **Коваленко[+] Татьяна Александровна** и **Адеева* Людмила Никифоровна**
Кафедра неорганической химии. Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского. Пр. Мира, 55А. г. Омск, 644077. Россия. Тел.: (3812) 26-81-99. E-mail: kovalenko_85@list.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *сорбция, платина, модифицированный сорбент, полианилин, углеродминеральный сорбент, десорбция.*

Аннотация

Приведены результаты исследования селективного извлечения платины(IV) с использованием синтезированного модифицированного углеродминерального сорбента. Сорбент модифицирован полианилином в форме эмеральдин-основания. Емкость полученного сорбента по платине(IV) составляет 62 мг/г, и не снижается в присутствии ионов меди(II), никеля(II), железа(III), сульфат-ионов в концентрациях на порядок превышающих концентрацию платины(IV). ИК-спектроскопией показано, что сорбция платины на модифицированном сорбенте происходит по аминогруппам. В качестве элюента может быть использован солянокислый раствор тиомочевины.

Тематический раздел: Термодинамические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-1-109
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 31 января 2013 г. УДК 536.423.

Равновесная функция распределения кластеров по размерам в конечной системе

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович
Лаборатория моделирования. Институт теплофизики СО РАН. Пр. Лаврентьева, 1. г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org

***Ключевые слова**: изолированная и изотермическая системы, микроканоническая и каноническая ансамбли, кластер, наночастица, функция распределения по размерам, термодинамическое равновесие.*

Аннотация

Методами статистической термодинамики найдена равновесная функция распределения кластеров (наночастиц) по размерам в системе, состоящей из конечного числа молекул (атомов), находящихся в конечном замкнутом объеме при постоянной полной энергии (изолированная система). На основе кинетического уравнения нуклеации используя однокапельное приближение функция распределения найдена как для изолированной, так и для изотермической системы. Полученные результаты сравниваются с данными компьютерного моделирования конечных двухмерных систем.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Термодинамические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-1-122 *Подраздел:* Фазовые равновесия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 536.71. Поступила в редакцию 30 января 2013 г.

О значении изохорной теплоёмкости в критической точке фазового равновесия газ-жидкость

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович
Лаборатория моделирования. Институт теплофизики СО РАН. Пр. Лаврентьева, 1.
г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org

***Ключевые слова**: теплоёмкость, скорость звука, однокомпонентное вещество, фазовое равновесие газ-жидкость, критическая точка.*

Аннотация

Популярно мнение, что скорость звука в критической точке фазового равновесия газ-жидкость однокомпонентного вещества обращается в нуль, что является следствием обращения в бесконечность изохорной теплоемкости на критической изохоре при критической температуре. Однако нет экспериментального доказательства последнего, так как никем в опытах не получено бесконечное значение теплоемкости в критической точке. Нами показано, что поведение изохорной теплоемкости вблизи критической точки может быть описано неаналитической функцией, имеющей конечное значение в критической точке, так что скорость звука в критической точке не равна нулю. Эта функция дает конечное значение для скачка изохорной теплоёмкости при критической плотности при переходе через критическую точку.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-1-126 *Подраздел:* Физико-химия высоких температур.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 536.468. Поступила в редакцию 29 декабря 2012 г.

Особенности постановки задач при численном исследовании зажигания металлизированного конденсированного вещества локальным источником энергии

© Глушков[+] Дмитрий Олегович и **Стрижак* Павел Александрович**
Кафедра автоматизации теплоэнергетических процессов. Национальный исследовательский Томский политехнический университет. Пр. Ленина, 30. г. Томск, 634050. Россия.
Тел.: (3822) 70-17-77 (доп. 1910). E-mail: dmitriyog@tpu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *зажигание, металлизированное конденсированное вещество, теплообмен, частица, пластина, математическое моделирование.*

Аннотация

Проведено сопоставление результатов анализа закономерностей зажигания структурно-неоднородного конденсированного вещества одиночной, нагретой до высоких температур частицей малых размеров и «горячей» массивной пластиной в рамках моделей двумерного и одномерного теплопереноса соответственно. Определены времена задержки зажигания металлизированного конденсированного вещества. Установлены масштабы влияния теплосодержания локального источника энергии на интегральные характеристики процесса. Показано, что использование модели теплопереноса с граничными условиями первого рода приводит к большим отклонениям по времени задержки зажигания.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Химия комплексных соединений. *Регистрационный код публикации:* 13-33-1-133
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 20 декабря 2012 г. УДК 541.49+54.061.

Изучение растворимости комплексных соединений общей формулой $aM^nCl_n \cdot mZnCl_2 \cdot pEt_2O$ в среде диэтилового эфира (где M = Li, Mg, Ca, Sr, Ba; a = 1-2; n = l-2; m = l.2; p = 2-6; Et_2O – диэтиловый эфир)

© **Михайлов**[1]*** Юрий Михайлович**, **Гатина**[1]*** Роза Фатыховна**,
Омаров[2+] **Залимхан Курбанович** и **Шакурская**[1] **Оксана Николаевна**
Федеральное казенное предприятие "Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов". Ул. Светлая, 1. г. Казань, 420033. Россия.
Тел.: (843) 544-07-21. E-mail: gniihp@bancorp.ru; [2)] *Тел.: (843) 541-76-02. E-mail: omarov@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *комплексные соединения, диэтиловый эфир, растворимость.*

Аннотация

При изотермическом изучении растворимости в системах M^nCl_n-$ZnCl_2$-Et_2O, 298 К установлены области равновесной кристаллизации комплексов состава: $aM^nCl_n \cdot mZnCl_2 \cdot pEt_2O$ (где M = Li, Mg, Ca, Sr, Ba; n = l-2; m = l.2; p = 2-6; Et_2O – диэтиловый эфир) и образования хлоридных комплексных соединений: $LiCl \cdot ZnCl_2 \cdot 4Et_2O$, $LiCl \cdot ZnCl_2 \cdot 4Et_2O$, $MgCl_2 \cdot ZnCl_2 \cdot 2Et_2O$, $CaCl_2 \cdot ZnCl_2 \cdot 4Et_2O$, $SrCl_2 \cdot ZnCl_2 \cdot 4Et_2O$, $2BaCl_2 \cdot ZnCl_2 \cdot 6Et_2O$.

Обнаруженные комплексные соединения были выделены. Методом элементного анализа установлен состав фаз, образующихся в системе $aM^nCl_n \cdot mZnCl_2 \cdot pEt_2O$.

Тематический раздел: Исследование новых материалов. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Координационная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-1-139
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 20 декабря 2012 г. УДК 541.49+54.061.

Сорбент сероводорода на основе комплексного соединения формулой $MgCl_2 \cdot ZnCl_2 \cdot 2Et_2O$ (где Et_2O – диэтиловый эфир)

© **Михайлов**[1]*** Юрий Михайлович**, **Гатина**[1]*** Роза Фатыховна** и **Омаров**[2+] **Залимхан Курбанович**
Федеральное казенное предприятие "Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов". Ул. Светлая, 1. г. Казань, 420033. Россия. Тел.: [1)] *(843) 544-07-21,* [2)] *(843) 541-76-02.*
E-mail: [1)] *gniihp@bancorp.ru ,* [2)] *omarov@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *комплексное соединение, сорбент, сероводород, газоочистка.*

Аннотация

Получен сорбент сероводорода, состоящий из комплексного соединения формулой $MgCl_2 \cdot ZnCl_2 \cdot 2Et_2O$ (где Et_2O – диэтиловый эфир) на твердом пористом носителе.

Проведен ряд экспериментов по изучению сорбционных свойств полученного сорбента сероводорода.

Тематический раздел: Исследование новых материалов. **Краткое сообщение**
Подраздел: Кинетика и катализ. *Регистрационный код публикации:* 13-33-1-143
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 20 декабря 2012 г. УДК 541.49+54.061.

Катализатор окисления сероводорода, состоящий из комплексного соединения формулой $LiCl \cdot ZnCl_2 \cdot 4(C_2H_5)_2O$ на носителе

© **Михайлов**[1]*** Юрий Михайлович**, **Гатина**[1]*** Роза Фатыховна** и **Омаров**[2+] **Залимхан Курбанович**
Федеральное казенное предприятие "Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов". Ул. Светлая, 1. г. Казань, 420033. Россия. Тел.: [1)] *(843) 544-07-21,* [2)] *(843) 541-76-02.*
E-mail: [1)] *gniihp@bancorp.ru ,* [2)] *omarov@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *комплексные соединения, диэтиловый эфир, катализатор, сероводород.*

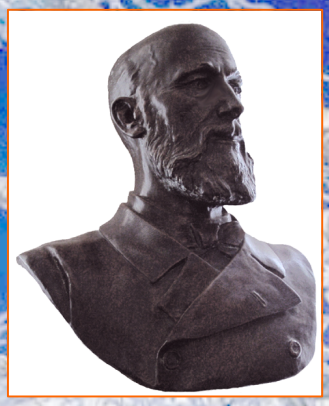
Аннотация

Получен катализатор окисления сероводорода, состоящий из комплексного соединения формулой $LiCl \cdot ZnCl_2 \cdot 4(C_2H_5)_2O$ на твердом пористом носителе.

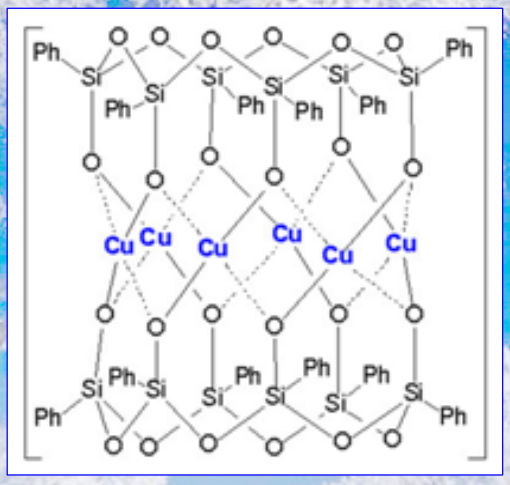
Проведен ряд экспериментов по изучению каталитических свойств нового катализатора при различных условиях.

Butlerov Communications

No.2, Vol.33. 2013



ISSN 2074-0948



National Edition in Russian:

Бутлеровские сообщения

ISSN 2074-0212

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Обзор**
Подраздел: Неорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-2-1
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 11 февраля 2013 г. УДК 579.695; 546.85; 502.55; 661.63.

Биологическая деградация белого фосфора: осуществимость и перспективы

© Миндубаев*[+] Антон Зуфарович, **Волошина Александра Дмитриевна** и **Яхваров Дмитрий Григорьевич**

Учреждение РАН Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН. Ул. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. E-mail: mindubaev@iopc.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *детоксикация, белый фосфор, биодеградация, токсичные отходы производств.*

Аннотация

Обезвреживание белого фосфора является актуальной проблемой, затрагивающей охрану окружающей среды и здоровье населения. Несмотря на широкое промышленное (и, вопреки официальным запретам, военное) применение белого фосфора, принадлежность к первому классу опасности, эффективные методы детоксикации для него не найдены до сих пор. В представленном обзоре рассматриваются потенциальные возможности и первые результаты биологической деградации белого фосфора – эффективного и малоопасного метода, хорошо зарекомендовавшего себя на многих продуктах химической промышленности.

Содержание

Введение
1. Свойства элементного фосфора
2. Токсикология белого фосфора
3. Воздействие на окружающую среду
4. Детоксикация белого фосфора: пути решения проблемы
5. Биологическая активность соединений восстановленного фосфора. Элементный фосфор в природе.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-2-18 *Подраздел:* Электрохимия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 547.639.5 +543.55. Поступила в редакцию 12 февраля 2013 г.

Тематическое направление: ДНК-сенсор на основе стеклоуглеродного электрода, модифицированного поли(Нейтральным красным). Часть 1.

Влияние ДНК на вольтамперометрические и импедиметрические характеристики электрода

© Порфирьева Анна Вениаминовна, **Кузин Юрий Иванович**,
Стойкова Екатерина Евгеньевна, **Белякова Светлана Викторовна**,
Евтюгин* Геннадий Артурович и **Будников[+] Герман Константинович**
Кафедра аналитической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова.
Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008.
Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 233-74-91. E-mail: Herman.Budnikov@ksu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

***Ключевые слова**: ДНК-сенсор, биосенсор, электрополимеризация, измерение электрохимического импеданса, пьезокварцевое микровзвешивание.*

Аннотация

Разработаны новые ДНК-сенсоры на основе стеклоуглеродных электродов, модифицированных полимерной формой феназинового красителя Нейтрального красного. Полимеризацию красителя проводили в резиме многократного циклирования потенциала. Процесс осаждения полимера независимо контролировали с помощью пьезокварцевого микровзвешивания. Установлено влияние нативной и денатурированой ДНК на вольтамперные и импедиметрические характеристики покрытия. Присутствие ДНК влияет на обратимость редокс-превращений Нейтрального красного в составе слоя, а также на сопротивление переноса заряда и емкость слоя в зависимости от способа включения нативной и термически денатурированной ДНК. Изменения указанных характеристик обусловлены электростатическими взаимодействиями и степенью разделения заряда в слое. Найденные закономерности поведения ДНК-сенсора могут найти применение для определения биологически активных соединений, специфически связывающихся с ДНК.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия ферментов. *Регистрационный код публикации:* 13-33-2-27
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 12 февраля 2013 г. УДК 577.112.083+577.152.321.

Тематическое направление: Физико-химические методы активации пектинолитических ферментов. Часть 1.

Ионный обмен на сильных ионитах

© Донцов Андрей Геннадиевич
Лаборатория биохимии и биотехнологии. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биологии Коми научного центра УрО РАН. Ул. Коммунистическая, 28. г. Сыктывкар, 167982. Республика Коми. Россия. Тел.: (8212) 43-68-28. E-mail: dontsov@ib.komisc.ru

Ключевые слова: *полигалактуроназы, активация, ионный обмен, сильные иониты.*

Аннотация

Применение сильных ионитов для очистки и выделения полигалактуроназ не приводит к существенной инактивации ферментов. Высокая избирательность очистки растворов пектинолитического препарата Пектофоетидин Г3х сильным анионитом Amberlite CG-400 достигается в слабокислой среде, а сильным катионитом Amberlite CG-120 – в нейтральной. Обработки сильными катионитами Amberlite CG-120 и КУ-2-8 при pH среды выше 5.0 приводят к активации полигалактуроназ на 20-50%. Выделение полигалактуроназ из ферментных растворов с помощью указанных катионитов в слабокислой среде приводит к увеличению выхода общей активности после десорбции в 1.25-1.50 раз по сравнению с количеством адсорбированной активности.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия ферментов. *Регистрационный код публикации:* 13-33-2-33
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 18 февраля 2013 г. УДК 577.112.083+577.152.321.

Тематическое направление: Физико-химические методы активации пектинолитических ферментов. Часть 2.

Термо-химическая активация полигалактуроназ

© Донцов Андрей Геннадиевич

Лаборатория биохимии и биотехнологии. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биологии Коми научного центра УрО РАН. Ул. Коммунистическая, 28. г. Сыктывкар, 167982. Республика Коми. Россия. Тел.: (8212) 43-68-28. E-mail: dontsov@ib.komisc.ru

Ключевые слова: *активация полигалактуроназ, термообработка, термопротекторы, ультра- и диафильтрация.*

Аннотация

Исследована возможность активации и очистки полигалактуроназ методом термо-химической обработки. Установлено, что применение термопротекторов в процессе диафильтрации ферментных растворов при 40 °С позволяет повысить выход активности и степень очистки ферментов. В качестве термопротекторов использовались глицерин, ЭДТА и бычий сывороточный альбумин.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-2-36 *Подраздел:* Физико-химия целлюлозы.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
УДК 541.64: 547.458. Поступила в редакцию 18 февраля 2013 г.

Изучение температурных переходов в полисахаридах по данным ядерной магнитной релаксации

© Смотрина[1]*[+] Татьяна Валерьевна и **Смирнов[2] Александр Константинович**
[1] *Кафедра физики. Поволжский государственный технологический университет. Пл. Ленина, 3. г. Йошкар-Ола, 424000. Республика Марий Эл. Россия. Тел.: (8362) 68-68-04. E-mail: tatyana-smotrina@yandex.ru*
[2] *Кафедра общей химии. Марийский государственный университет. Пл. Ленина, 1. г. Йошкар-Ола, 424000. Республика Марий Эл. Россия. Тел.: (8362) 42-55-94.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *целлюлоза, гемицеллюлозы, хитозан, ядерная магнитная релаксация, температурные переходы.*

Аннотация

Импульсным методом ЯМР при анализе температурных зависимостей скоростей спин-спиновой и спин-решеточной релаксации в интервале 20-280 ^{o}C изучены температурные переходы в целлюлозах различного происхождения, хитозане и гемицеллюлозах. Определены температуры начала перехода стеклования в сухих полисахаридах.

Тематический раздел: Химия в сельском хозяйстве. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Биохимия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-2-41
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
Поступила в редакцию 26 июля 2012 г. УДК 633.18:631.67.5.

Режим орошения и продуктивность маловодопотребного риса в условиях пустынной зоны Калмыкии

© **Дедова**[1] **Эльвира Батыревна**, **Белопухов**[2] **Сергей Леонидович**
и **Шабанов**[3] **Рустам Михайлович**
[1,3] *Калмыцкий филиал ГНУ ВНИИГиМ Россельхозакадемии. ул. Городовикова, д.1. г. Элиста. Республика Калмыкия. Россия. E-mail: kf_vniigim@mail.ru*
[2] *Российский государственный аграрный университет – МСХА имени К.А. Тимирязева. Ул. Тимирязевская, 49. г. Москва, 127550. Россия. Тел.: (499) 976-32-16. E-mail: belopuhov@mail.ru*

*****Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова*: маловодопотребный рис, орошение, дождевание, удобрения, урожайность.*

Аннотация

В статье представлены результаты полевых экспериментов по возделыванию различных сортов риса при поливе дождеванием в аридных условиях Калмыкии, позволяющие получать 4-5 т/га зерна риса при поддержании предполивного порога увлажнения на уровне 80-85% наименьшей влагоемкости на фоне внесения азотно-фосфорных удобрений.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Препаративная химия.
Регистрационный код публикации: 13-33-2-48 *Подраздел:* Органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 547.74. Поступила в редакцию 12 февраля 2013 г.

Синтез 1-(3-алкоксипропил)-5-арил-4-ацил-3-гидрокси-3-пирролин-2-онов и их взаимодействие с гидразингидратом

© **Гейн*[+] Владимир Леонидович**, **Бобылева Александра Александровна, Левандовская Елена Болеславовна** и **Вахрин Михаил Иванович**
Пермская государственная фармацевтическая академия. ул. Полевая, д.2. г. Пермь, 614990. Россия. Тел: (342) 233-55-01; 236-90-50; E-mail: geinvl48@mail.ru.

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *синтез, 1-(3-алкоксипропил)-5-арил-4-ацил-3-гидрокси-3-пирролин-2-оны, гидразингидрат, 4-арил-3-ацил-5-(3-алкоксипропил)-4,6-дигидропирроло[3,4-c]пиразол-6-оны.*

Аннотация

При взаимодействии 3-алкоксипропиламина со смесью ароматического альдегида и метилового эфира ацилпировиноградной кислоты получены 1-(3-алкоксипропил)-5-арил-4-ацил-3-гидрокси-3-пирролин-2-оны, которые в реакции с гидразингидратом образуют 4-арил-3-ацил-5-(3-алкоксипропил)-4,6-дигидропирроло[3,4-*c*]пиразол-6-оны.

Краткое сообщение *Тематический раздел:* Препаративная химия.
Регистрационный код публикации: 13-33-2-52 *Подраздел:* Элементоорганическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции " Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений"
http://butlerov.com/synthesys/
УДК 546.185 +547.551.2+547.53.024+548.312.3. Поступила в редакцию 25 января 2013 г.

Синтез и кристаллическая структура тетрабромоаурата бутилтрифенилфосфония $[Ph_3BuP]^+[AuBr_4]^-$

© Шарутин*+ Владимир Викторович, Сенчурин Владислав Станиславович и Шарутина Ольга Константиновна

Кафедра органической химии. Национальный исследовательский Южно-Уральский государственный университет. Пр-т им. В.И. Ленина, 76. Челябинск 454080. Россия. Тел.: (351) 267-95-39. E-mail: vvsharutin@rambler.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *тетрабромоаурат, бутилтрифенилфосфоний, синтез, строение.*

Аннотация

Взаимодействием гидрата золотобромистоводородной кислоты с бромидом бутилтрифенилфосфония в ацетоне получен комплекс $[Ph_3BuP]^+[AuBr_4]^-$ (**I**). По данным РСА, кристалл комплекса **I** представлен тетраэдрическими катионами $[Ph_3BuP]^+$ (длины связей P-C_{Ph} и P-C_{Bu} 1.790(8)-1.799(8) и 1.790(8) Å соответственно, углы CPC 107.9(4)°-110.7(4)°) и плоскоквадратными центросимметричными анионами $[AuBr_4]^-$ (углы BrAuBr 88.91(4)°- 91.09(4)° и 177.64(5)-180°), длины связей Au-Br составляют 2.4104(10)-2.4246(11) Å).

Введение

В продолжение исследования синтеза комплексов переходных металлов [1-11] нами получен по реакции гидрата золотобромистоводородной кислоты с бромидом бутилтрифенилфосфония в ацетоне комплекс $[Ph_3BuP]^+[AuBr_4]^-$ (**I**) и исследовано его строение.

Экспериментальная часть

Синтез комплекса I. Смесь 0.129 г (0.32 ммоль) бромида бутилтрифенилфосфония и 0.22 г (0.32 ммоль) гидрата золотобромистоводородной кислоты в 10 мл ацетона выдерживали при 20 °С в течение 24 ч. Образовавшиеся темно-коричневые кристаллы сушили. Получили 0.224 г (83%) комплекса с Тпл. 160 °С. ИК спектр (ν, $см^{-1}$): 3057, 2960, 2926, 2872, 1587, 1484, 1436, 1398, 1376, 1336, 1316, 1190, 1161, 1111, 995, 893, 788, 747, 723, 689, 529, 509, 488. Найдено, %: С 31.28, Н 2.93. Для $C_{22}H_{24}PAuBr_4$ вычислено, %: С 31.59, Н 2.87. ИК спектр **I** снимали на ИК-спектрометре *Bruker Tensor 27* в таблетках KBr. РСА кристалла **I** проводили на дифрактометре *D8 QUEST* фирмы *Bruker* (Mo K_α-излучение, λ = 0.71073 Å, графитовый монохроматор). Сбор, редактирование данных и уточнение параметров элементарной ячейки, а также учет поглощения проведены по программам SMART и SAINT-*Plus* [12]. Все расчеты по определению и уточнению структуры **I** выполнены по программам SHELXL/PC [13].

Структура **I** определена прямым методом и уточнена методом наименьших квадратов в анизотропном приближении для неводородных атомов. Основные кристаллографические данные и результаты уточнения структуры **I** приведены в табл. 1, координаты и температурные факторы атомов – в табл. 2, основные длины связей и валентные углы – в табл. 3.

Полные таблицы координат атомов, длин связей и валентных углов депонированы в Кембриджском банке структурных данных (№919526; deposit@ccdc.cam.ac.uk; http://www.ccdc.cam.ac.uk).

Результаты и их обсуждение

Синтез и строение комплексных соединений золота, содержащих фосфониевые катионы и анионы $[AuCl_4]^-$, описано на единичных примерах [8-11]. Подобные комплексы с анионами $[AuBr_4]^-$ в литературе не описаны.

Нами установлено, что взаимодействие бромида бутилтрифенилфосфония с гидратом золотобромистоводородной кислоты при мольном соотношении реагентов 1:1 в ацетоне приводит к образованию кристаллов желтого цвета комплекса **I**:

$$[Ph_3BuP]^+Br^- + HAuBr_4 \cdot 9H_2O \rightarrow [Ph_3BuP]^+[AuBr_4]^- + HBr + 9\,H_2O$$

По данным РСА, кристалл комплекса **I** состоит из бутилтрифенилфосфониевых катионов и двух типов кристаллографически независимых тетрабромоауратных анионов (рис. 1).

Табл. 1. Кристаллографические данные, параметры эксперимента и уточнения структуры соединения **I**

Параметр	Соединение
Формула	$C_{22}H_{24}PBr_4Au$
M	835.99
T, K	273.15
Сингония	Моноклинная
Пр. группа	P2/c
a, Å	17.3756(11)
b, Å	8.8749(5)
c, Å	16.5758(9)
α,°	90.00
β,°	96.013(4)
γ,°	90.00
V, Å^3	2542.0(3)
Z	4
ρ(выч.), г/см^3	2.184
μ, мм$^{-1}$	12.144
F(000)	1560.0
Форма кристалла (размер, мм)	0.1 × 0.08 × 0.04
Область сбора данных по θ, град	4.72-46.34°
Интервалы индексов отражений	-13 ≤ h ≤ 19, -9 ≤ k ≤ 9, -18 ≤ l ≤ 18
Измерено отражений	16517
Независимых отражений	3604[R(int) = 0.0857]
Переменных уточнения	256
GOOF	0.974
R-факторы по $F^2 > 2\sigma(F^2)$	$R_1 = 0.0362$, $wR_2 = 0.0595$
R-факторы по всем отражениям	$R_1 = 0.0838$, $wR_2 = 0.0712$
Остаточная электронная плотность (min/max), e/A^3	1.01 / -0.67

Табл. 2. Координаты атомов (×10^4) и их изотропные эквивалентные температурные параметры (Å^2×10^3) в структуре **I**

Атом	*x*	*y*	*z*	$U_{экв}$
Au1	10000	5000	5000	52.42(18)
Au2	5000	2623.2(5)	2500	48.28(17)
Br1	9651.6(7)	2772.5(13)	5710.3(7)	88.5(4)
Br2	8781.4(6)	4817.1(12)	4147.7(6)	78.8(3)
Br3	5282.6(6)	2700.9(12)	1107.0(5)	74.1(3)
Br4	6372.5(6)	2567.2(12)	2931.3(6)	70.3(3)
P1	7499.0(14)	9621(2)	5170.3(13)	43.5(6)
C30	8897(6)	8684(13)	2539(6)	97(4)
C29	8693(6)	9845(12)	3143(6)	89(4)
C28	8266(5)	9238(10)	3797(5)	64(3)
C27	8031(5)	10404(9)	4403(5)	54(3)
C1	8101(5)	8374(9)	5819(5)	39(2)
C6	8887(6)	8483(10)	5872(5)	54(3)
C5	9340(6)	7559(12)	6382(6)	63(3)
C4	9003(7)	6532(12)	6839(6)	68(3)
C14	6563(6)	13314(12)	6714(7)	73(3)
C13	6602(6)	11843(13)	6973(6)	72(3)
C12	6878(5)	10733(10)	6495(5)	58(3)
C11	7135(5)	11099(10)	5761(5)	42(2)
C16	7074(6)	12545(11)	5498(6)	87(4)
C15	6790(7)	13630(12)	5970(7)	104(5)
C2	7761(5)	7336(10)	6290(5)	52(2)
C3	8219(7)	6411(10)	6800(5)	66(3)
C21	6710(5)	8553(9)	4677(4)	38(2)
C22	6009(5)	9265(10)	4453(5)	51(3)
C23	5421(6)	8486(13)	4046(5)	69(3)
C24	5516(6)	7012(12)	3862(6)	67(3)
C25	6187(7)	6293(10)	4070(6)	65(3)
C26	6801(5)	7072(10)	4482(5)	54(3)

Табл. 3. Основные длины связей и валентные углы в структуре **I**

Связь	*d*, Å	Угол	*ω*, град.
Au1-Br1^1	2.4105(10)	Br1Au1Br1^1	180.00(4)
Au1-Br1	2.4104(10)	Br1Au1Br2	88.91(4)
Au1-Br2	2.4246(11)	Br1^{1}Au1Br2	91.09(4)
Au1-Br2^1	2.4246(11)	Br1^{1}Au1Br2^1	88.91(4)
Au2-Br3^2	2.4115(9)	Br1^{1}Au1Br2^1	91.09(4)
Au2-Br3	2.4115(9)	Br2^{1}Au1Br2	180.0
Au2-Br4^2	2.4174(11)	Br3Au2Br3^2	176.72(6)
Au2-Br4	2.4174(11)	Br3Au2Br4^2	90.63(3)
P1-C27	1.790(8)	Br3^{2}Au2Br4^2	89.44(3)
P1-C1	1.799(8)	Br3Au2Br4	89.44(3)
P1-C11	1.790(8)	Br3^{2}Au2Br4	90.63(3)
P1-C21	1.793(8)	Br4Au2Br4^2	177.64(5)
C30-C29	1.505(12)	C27P1C1	110.7(4)
C29-C28	1.478(10)	C27P1C11	110.0(4)
C28-C27	1.527(10)	C27P1C21	107.9(4)
C1-C6	1.364(11)	C11P1C1	109.9(4)
C1-C2	1.379(10)	C11P1C21	109.9(4)
		C21P1C1	108.4(4)

Атомы размножены операцией симметрии:
^{1} 2-x, 1-y, 1-z; ^{2} 1-x, +y, 1/2-z

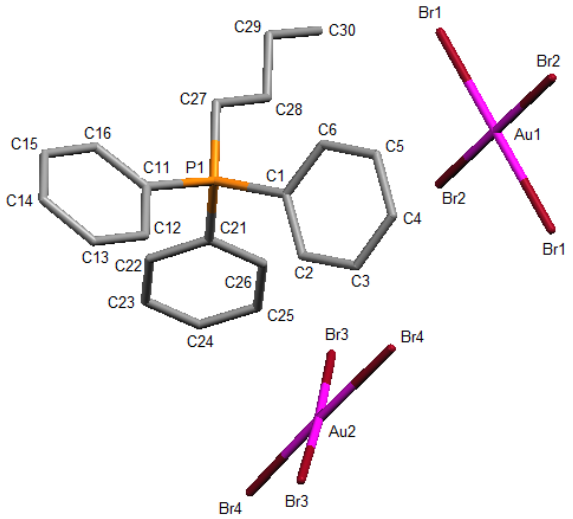


Рис. 1. Строение комплекса **I** (атомы водорода не показаны)

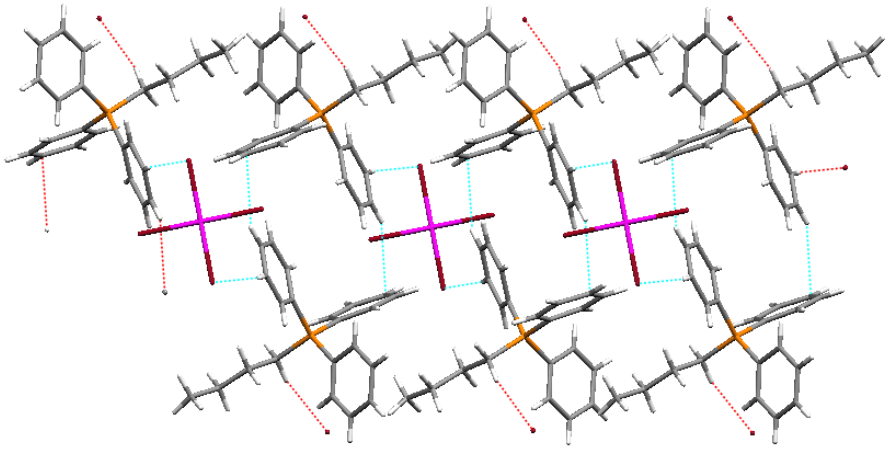


Рис. 2. Система «опорных» контактов C-H···Br в кристалле **I**

Катионы бутилтрифенилфосфония имеют тетраэдрическое строение (длины связей P-C_{Ph} и P-C_{Bu} составляют 1.790(8)-1.799(8) и 1.790(8) Å соответственно, углы CPC равны 107.9(4)°-110.7(4)°). В плоскоквадратных анионах $[AuBr_4]^-$ комплекса **I** расстояния Au-Br изменяются в интервале 2.4104(10)-2.4246(11) Å, а углы ClAuCl – в интервалах 88.91(4)°- 91.09(4)° и 177.64(5)-180°. В кристалле **I** наблюдаются «опорные» контакты C-H···Br между атомами брома анионов $[AuBr_4]^-$ и атомами водорода бутильного и двух фенильных лигандов катиона $[Ph_3BuP]^+$, расстояния между которыми варьируют от 2.95 до 3.02 Å, что близко к сумме ван-дер-ваальсовых радиусов атомов H и Br 3.1 Å [14] (рис. 2).

Выводы

Взаимодействие гидрата золотобромистоводородной кислоты и бромида бутилтрифенилфосфония в ацетоне приводит к образованию комплекса $[Ph_3BuP]^+[AuBr_4]^-$, в котором катион и анион имеют тетраэдрическую и плоскоквадратную конфигурацию соответственно; структурная организация в кристалле обусловлена слабыми водородными связями типа C-H···Br.

Литература

[1] Шарутин В.В., Сенчурин В.С., Шарутина О.К. Синтез и строение комплекса палладия $[Ph_4P]_2[PdCl_4]$. *Бутлеровские сообщения.* **2011**. Т.28. №20. С.31.

[2] Шарутин В.В., Сенчурин В.С., Шарутина О.К. Синтез и строение комплекса платины $[Ph_4Sb(dmso)][PtCl_5(dmso)]$. *Бутлеровские сообщения.* **2011**. Т.28. №20. С.35.

[3] Шарутин В.В., Сенчурин В.С., Шарутина О.К., Винокурова Л.Н. Взаимодействие хлорида тетрафенилфосфония с тетрахлорплатинатом калия в диметилсульфоксиде. *Бутлеровские сообщения.* **2011**. Т.27. №16. С.65.

[4] Шарутин В.В., Сенчурин В.С., Шарутина О.К., Гущин А.В. Синтез и строение комплекса палладия $[Ph_4Sb(DMSO)][PdBr_3(DMSO)]$. *Бутлеровские сообщения.* **2012**. Т.29. №2. С.26.

[5] Шарутин В.В., Сенчурин В.С., Шарутина О.К., Гущин А.В. Синтез и строение комплексов платины: $[Ph_4Sb]^+_2[PtBr_6]^{2-}$, $[Bu_4N]^+_2[PtBr_6]^{2-}$, $[Ph_4Sb(DMSO)]^+[PtBr_5(DMSO)]^-$ и $[Bu_4N]^+[PtBr_5(DMSO)]^-$. *Бутлеровские сообщения.* **2012**. Т.30. №4. С.55.

[6] Шарутин В.В., Шарутина О.К., Сенчурин В.С. Синтез и строение комплексов палладия: $[Ph_4Sb]^+_2[Pd_2I_6]^{2-}$, $[Ph_4Sb(DMSO)]^+_2[Pd_2I_6]^{2-}$, $[Ph_3AmP]^+_2[Pd_2I_6]^{2-}$ и $[Ph_3EtP]^+_2[Pd_2I_6]^{2-}$. *Бутлеровские сообщения.* **2012**. Т.30. №6. С.50.

[7] Шарутин В.В., Сенчурин В.С., Шарутина О.К., Гущин А.В. Особенности взаимодействия тетрабромопалладийводородной кислоты с бромидами тетраорганилфосфония в различных растворителях. Синтез и строение комплексов палладия: $[Ph_3(cyclo\text{-}C_5H_9)P]^+_2[Pd_2Br_6]^{2-}$, $[Ph_3BuP]^+_2[Pd_2Br_6]^{2-}$, $[Ph_3AmP]^+_2[Pd_2Br_6]^{2-}$, $[Ph_3(cyclo\text{-}C_5H_9)P]^+[PdBr_3(DMSO)]^-$, $[Ph_3BuP]^+[PdBr_3(DMSO)]^-$ и $[Ph_3AmP]^+[PdBr_3(DMSO)]^-$. *Бутлеровские сообщения.* **2012**. Т.30. №6. С.41.

[8] Шарутин В.В., Сенчурин В.С., Шарутина О.К., Пакусина А.П., Фастовец О.А. Синтез и строение комплексов золота и меди: $[Ph_3PhCH_2P]^+[AuCl_4]^-$, $[NH(C_2H_4OH)_3]^+[AuCl_4]^- \cdot H_2O$ и $[Ph_3EtP]_2^+[Cu_2Cl_6]^{2-}$. *Журн. неорган. химии.* **2010**. Т.55. №9. С.1499.

[9] Шарутин В.В., Сенчурин В.С., Фастовец О.А. Пакусина А.П., Шарутина О.К. Синтез и кристаллические структуры гексахлороплатината, тетрахлороаурата и гексахлоростанната тетрафенилсурьмы (V) $[Ph_4Sb]^+_2[PtCl_6]^{2-}$, $[Ph_4Sb]^+[AuCl_4]^-$, $[Ph_4Sb]^+_2[SnCl_6]^{2-}$. *Коорд. химия.* **2008**. Т.34. №5. С.373.

[10] Шарутин В.В., Сенчурин В.С., Фастовец О.А., Пакусина А.П., Шарутина О.К. Синтез и строение смешаннолигандных комплексных соединений сурьмы $[Et_2NH_2]_4^+[SbCl_2Hal_4]^{3-}[Cl]^{1-}$ (Hal = I, Br) и золота $[Ph_3PMe]_2^+[AuCl_2Br_2]^{1-}[AuHal_2]^{1-}$ (Hal = Cl, Br). *Бутлеровские сообщения*. **2007**. Т.11. №2. С.43.

[11] Шарутин В.В., Сенчурин В.С., Шарутина О.К., Винокурова Л.Н. Синтез и кристаллическая структура тетрахлороаурата бутилтрифенилфосфония $[Ph_3BuP]^+[AuCl_4]^-$. *Бутлеровские сообщения*. **2011**. Т.27. №16. С.68-71.

[12] Bruker (**1998**). SMART and SAINT-Plus. Versions 5.0. Data Collection and Processing Software for the SMART System. *Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, USA.*

[13] Bruker (**1998**). SHELXTL/PC. Versions 5.10. An Integrated System for Solving, Refining and Displaying Crystal Structures From Diffraction Data. *Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, USA.*

[14] Бацанов С.С. Атомные радиусы элементов. *Журн. неорг. химии.* **1991**. Т.36. №12. С.3015.

Краткое сообщение *Тематический раздел:* Препаративная химия.
Регистрационный код публикации: 13-33-2-52 *Подраздел:* Элементоорганическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции " Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений"
http://butlerov.com/synthesys/
УДК 546.185 +547.551.2+547.53.024+548.312.3. Поступила в редакцию 25 января 2013 г.

Синтез и кристаллическая структура тетрабромоаурата бутилтрифенилфосфония $[Ph_3BuP]^+[AuBr_4]^-$

© Шарутин*+ Владимир Викторович, Сенчурин Владислав Станиславович и Шарутина Ольга Константиновна

Кафедра органической химии. Национальный исследовательский Южно-Уральский государственный университет. Пр-т им. В.И. Ленина, 76. Челябинск 454080. Россия. Тел.: (351) 267-95-39. E-mail: vvsharutin@rambler.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *тетрабромоаурат, бутилтрифенилфосфоний, синтез, строение.*

Аннотация

Взаимодействием гидрата золотобромистоводородной кислоты с бромидом бутилтрифенилфосфония в ацетоне получен комплекс $[Ph_3BuP]^+ [AuBr_4]^-$ (**I**). По данным РСА, кристалл комплекса **I** представлен тетраэдрическими катионами $[Ph_3BuP]^+$ (длины связей P-C_{Ph} и P-C_{Bu} 1.790(8)-1.799(8) и 1.790(8) Å соответственно, углы CPC 107.9(4)°-110.7(4)°) и плоскоквадратными центросимметричными анионами $[AuBr_4]^-$ (углы BrAuBr 88.91(4)°- 91.09(4)° и 177.64(5)-180°), длины связей Au-Br составляют 2.4104(10)-2.4246(11) Å).

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Элементоорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-2-55
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции " Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений"
http://butlerov.com/synthesys/
Поступила в редакцию 7 февраля 2013 г. УДК 547.243.

Синтез и строение *μ-оксо*[*трис*(2-метокси,5-бромфенил)трифторацетатосурьмы]

© Шарутин*[+] Владимир Викторович, **Сенчурин Владислав Станиславович** и **Шарутина Ольга Константиновна**

Кафедра органической химии. Национальный исследовательский Южно-Уральский государственный университет. Пр-т им. В.И. Ленина, 76. Челябинск 454080. Россия. Тел.: (351) 267-95-39. E-mail: vvsharutin@rambler.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *μ-оксо[трис(2-метокси,5-бромфенил)трифторацетатосурьма], синтез, строение.*

Аннотация

Взаимодействием эквимолярных количеств *трис*(2-метокси,5-бромфенил)сурьмы, трифторуксусной кислоты и пероксида водорода получена *μ-оксо*[*трис*(2-метокси,5-бромфенил)трифторацетатосурьма] с выходом 92%. По предварительным данным рентгеноструктурного анализа атомы сурьмы в молекулах *μ-оксо*[*трис*(2-метокси,5-бромфенил)трифторацетатосурьмы] имеют тригонально-бипирамидальную координацию с атомами кислорода в аксиальных положениях. Длины связей Sb-C, Sb-$O_{мост}$, Sb-$O_{терм}$ и величина угла SbOSb равны 2.106(10)-2.139(11); 1.919(10), 1.932(10); 2.135(12)-2.334(12) Å и 168.05(8)° соответственно.

Письмо в редакцию *Тематический раздел:* Препаративная химия.
Регистрационный код публикации: 13-33-2-58 *Подраздел:* Органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 548.737. Поступила в редакцию 19 февраля 2013 г.

Синтез и молекулярная структура 4-ацетил-5-карбоксиметил-5-метил-2-оксо-3-фенилоксолана

© Зинина[1+] Евгения Александровна, Сорокин[1]* Виталий Викторович и Старикова[2] Зоя Александровна

[1] *Кафедра органической и биоорганической химии. Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского. Ул. Астраханская, 83. г. Саратов, 410012. Россия. Тел.: (8452) 27-14-91. E-mail: sorokinvv@info.sgu.ru, evgeniyaaz@rambler.ru*

[2] *Лаборатория рентгеноструктурных исследований. Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН. Ул. Вавилова, 28, В-334. г. Москва, ГСП-1, 119991. Россия. Тел.: (499) 135-92-71. E-mail: star@xray.ineos.ac.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *4-ацетил-5-карбоксиметил-5-метил-2-оксо-3-фенилоксолан, синтез, рентгеноструктурный анализ.*

Аннотация

Перекисным окислением 2*t*,4*t*-диацетил-5*t*-гидрокси-5*c*-метил-3*r*-фенилциклогексанона получен 4*t*-ацетил-5*c*-карбоксиметил-5*t*-метил-2*t*-оксо-3*r*-фенилоксолан с оксолановым кольцом в форме "полукресло", *транс*-псевдоэкваториальным расположением фенильного и ацетильного заместителя, а также *транс*-расположением карбоксиметильного и ацетильного заместителей.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-2-60 *Подраздел:* Супрамолекулярная химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 544-72. Поступила в редакцию 14 февраля 2013 г.

Влияние полиморфизма на рецепторные свойства супрамолекулярного рецептора

© **Зиганшин*[+] Марат Ахмедович**, **Синичкина Рада Ильдаровна**,
Горбачук* Валерий Виленович и **Стойков Иван Иванович**
Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский (Приволжский) федеральный университет.
Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 233-73-09.
E-mail: Marat.Ziganshin@ksu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *каликсарен, полиморфизм, клатрат, молекулярное распознавание, термогравиметрия, дифференциальная сканирующая калориметрия, масс-спектрометрия, кварцевые микровесы.*

Аннотация

В настоящей работе с помощью совмещенного метода термогравиметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии с масс-спектрометрическим определением газообразных продуктов разложения изучены теплофизические свойства и термическая стабильность 5,11,17,23-тетра(*трет*-бутил)-25,26,27,28-тетракис[*N*-(2-ацетоксиэтил)карбамоилэтокси]-2,8,14,20-тетратиакаликс[4]арена в конфигурациях «конус», «частичный конус» и «1,3-альтернат». Определены температурные интервалы существования полиморфных модификаций каликсарена в конфигурациях «конус» и «частичный конус». Методом микровзвешивания на кварцевых микровесах изучено влияние полиморфизма каликсарена на его рецепторные свойства. Показана зависимость сорбционной емкости рецептора от истории приготовления его тонкого слоя на сенсорах.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-2-68 *Подраздел:* Полимерная химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.64, 678.01:53. Поступила в редакцию 18 февраля 2013 г.

Исследование реологических свойств эпоксидных олигомеров в широком диапазоне температур

© **Амиров**[1]*** Рустэм Рафаэльевич**, **Андрианова**[2] **Кристина Александровна**,
Хасанов[2] **Руслан Рауфович**, **Петрова**[2] **Анна Александровна**,
Амирова[2] **Лилия Миниахмедовна**, **Зиганшин**[1] **Марат Ахмедович**
и **Герасимов**[1+] **Александр Владимирович**

[1] *Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский (Приволжский) Федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 233-71-45. Факс: (843) 233-74-16. E-mail: Alexander.Gerasimov@ksu.ru*

[2] *Кафедра производства летательных аппаратов ИАНТЭ. Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева. Ул. Л. Толстого, 15. г. Казань, 420012. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 236-64-94.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *эпоксидный олигомер, диановые смолы, новолачные смолы, вязкое течение, реология, энергия активации, температура стеклования, дифференциальная сканирующая калориметрия.*

Аннотация

Методом ДСК определены температуры стеклования ряда диановых и новолачных эпоксидных олигомеров и исследованы их реологические свойства. Показано, что энергия активации вязкого течения (E_η) в широком интервале температур для всех изученных эпоксидных олигомеров зависит от температуры. В области низких температур значения $(E_\eta)_1$ для всех олигомеров находятся в пределах 200-230 кДж/моль, тогда как при высоких температурах величины $(E_\eta)_2$ зависят от средней молекулярной массы олигомера, и для выбранного ряда соединений находятся в интервале 17-46 кДж/моль.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-2-74 *Подраздел:* Полимерная химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.6. Поступила в редакцию 6 февраля 2013 г.

Определение элементного состава азидосодержащих олигомеров методом ИК-спектроскопии

© **Альмашев* Ринат Олегович**, **Орехова Анастасия Олеговна**,
Романько Надежда Андреевна, **Кипрова[+] Анна Викторовна**,
Нуруллина Елена Валентиновна, **Таразова Эльвира Наилевна**,
Гатина Роза Фатыховна и **Михайлов Юрий Михайлович**
Федеральное казенное предприятие "Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов". Ул. Светлая, 1. г. Казань, 420033. Республика Татарстан. Россия. E-mail: anekolab@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *ИК-спектроскопия, азидосодержащие олигомеры, элементный анализ*

Аннотация

В статье описан способ определения элементного состава олигомеров 3,3-бис(азидометил)-оксетана методом ИК-спектоскопии. Разработанный способ позволяет получить полный элементный состав (C, H, N, O) по ИК спектрам образца. Элементный анализ используют только для первоначальной калибровки.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Препаративная химия.
Регистрационный код публикации: 13-33-2-80 *Подраздел:* Супрамолекулярная химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 547.1'128.577.15.025. Поступила в редакцию 8 февраля 2013 г.

Наночастицы меди и кобальта, стабилизированные гиперразветвленными полиэфирополиолами

© **Кутырева**[1]*+ **Марианна Петровна**, **Гатаулина**[1] **Альфия Ринатовна**, **Медведева**[1] **Ольга Игоревна**, **Улахович**[1] **Николай Алексеевич** и **Стойков**[2] **Иван Иванович**

[1] *Кафедра неорганической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. КФУ. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 233-71-65. E-mail: Marianna.Kutyreva@kpfu.ru*

[2] *Кафедра органической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. КФУ. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 233-74-62. E-mail: Ivan.Stoikov@kpfu.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *наночастицы металлов, гиперразветвленные полиэфирополиолы.*

Аннотация

Разработана методика синтеза наночастиц меди Cu/H30 и кобальта Co/H30, стабилизированных гиперразветвленным полиэфирополиолом третьей генерации на основе 2,2-дигидроксиметилпропановой кислоты (ГРПО H30). По данным рентгенофазового анализа и УФ-спектрофотометрии установлено, что образцы наночастиц Cu/H30 содержат металлическую медь. В наночастицах Co/H30 помимо металлического кобальта присутствует оксидная фаза. Методом просвечивающей электронной микроскопии для образца наночастиц меди Cu/H30 в матрице ГРПО H30 обнаружены сферические частиц размером 4 нм и гексагональные агрегаты металлической меди размером 12-26 нм. Для соединения Co/H30 обнаружены ленты размера 166.7 нм на 2083.3 нм вытянутой формы. Каждая лента собрана из ориентированных наночастиц кобальта размером 3-9 нм.

Тематический раздел: Исследование новых соединений. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Химия металлорганических соединений. *Регистрационный код публикации:* 13-33-2-87
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений"
http://butlerov.com/synthesys/
Поступила в редакцию 19 декабря 2012 г. УДК 542.91:547.128:542.957.

Взаимодействие каркасного медьфенилсилоксана с органосиланолятами щелочных металлов

© Завин[1+] Борис Григорьевич, Сергиенко[1]* Наталья Васильевна, Черкун[1] Наталия Владимировна, Транкина[1] Екатерина Сергеевна, Старикова[1] Ольга Михайловна, Стрелкова[1] Татьяна Васильевна и Мякушев[2] Виктор Давидович

[1] *Институт элементоорганических соединений имени А.Н. Несмеянова Российской академии наук. Ул. Вавилова, 28. г. Москва, 119991. Россия. Тел.: (499) 135-93-54. E-mail: zavin@ineos.ac.ru*

[2] *Институт синтетических полимерных материалов имени Н.С. Ениколопова Российской академии наук. Ул. Профсоюзная, 70. г. Москва, 117393. Россия. Тел.: (495) 332-58-33. E-mail: vidam@ispm.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

***Ключевые слова**: металлосилоксаны, биметаллические соединения, каркасные медь-фенилсилоксаны, органосиланоляты щелочных металлов, сендвичевые и глобулярные металлокомплексы.*

Аннотация

На примере медь-фенилсилоксана $[PhSiO_2]_6Cu_6[PhSiO_2]_6$ сендвичевого строения изучен механизм взаимодействия нейтральных каркасных металлосилоксанов с щелочными органосиланолятами [RSi(O)OM] (M = Na, K, Li; R = C_6H_5- и CH_2=CH-). Обнаружено, что в мягких условиях первоначально образуются биметаллические каркасные Cu,M-фенилсилоксаны того же строения (выход ≤ 92%). Эти соединения содержат характерные кластерные структуры $[Cu_4M_4]$ образующиеся при замещении ионов Cu^{2+} в кластерах $[Cu_6]$ ионами щелочного металла M^+, а также при связывании ионов Cu^{2+} силанолят-анионами. В более жестких условиях (с увеличением температуры и продолжительности реакции) имеет место изомеризация каркасных молекул с образованием «вторичных» каркасных структур, а также «гибридных» металлосилоксанов на более поздних стадиях процесса. Состав и строение образующихся продуктов установлены с помощью элементного анализа, а также путём деструктивного силилирования МОС, с последующим анализом образующихся TMS-производных с помощью ГПХ и спектроскопии ЯМР ^{1}H.

Тематический раздел: Теоретическое моделирование. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия взрывчатых веществ. *Регистрационный код публикации:* 13-33-2-95
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 20 февраля 2013 г. УДК 541.124.16:541.126.2:541.128.

Зависимость вероятности взрыва от экспозиции при импульсном фотоинициировании

© Зверев* Антон Сергеевич, **Кречетов* Александр Георгиевич**, **Митрофанов[+] Анатолий Юрьевич**, **Ободовский* Илья Михайлович** и **Терентьева* Анастасия Олеговна**

Кафедра физической химии. Кемеровский государственный университет. Ул. Красная, 6. г. Кемерово, 650043. Россия. Тел.: (384-2) 58-81-17. E-mail: lira@kemsu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *лазерное инициирование, очаги, взрыв.*

Аннотация

В работе проанализирована зависимость вероятности взрыва от экспозиции при импульсном фотоинициировании энергетических материалов. С учетом очагового характера процесса зарождения реакции взрывного разложения, получены выражения, описывающие эту зависимость. Полученные выражения хорошо описывают экспериментальные данные.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Неорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-2-99
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 14 февраля 2013 г. УДК 53.03.13.

Тематическое направление: Гидрохимический синтез пленок халькогенидов металлов. Часть 17.

Оценка условий образования твердых растворов $Pb_{1-x}Sn_xSe$ методом ионообменного замещения путем анализа эффективных произведений растворимости селенидов металлов

© Смирнова[1+] Зинаида Игоревна, **Маскаева[1,2] Лариса Николаевна**, **Воронин[3] Владимир Иванович** и **Марков[1,2]* Вячеслав Филиппович**

[1] *Кафедра физической и коллоидной химии. ФГАОУ ВПО Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Свердловская область. Россия. Тел.: (343) 375-93-18. E-mail: mln@ural.ru*

[2] *Кафедра химии и процессов горения. Уральский институт ГПС МЧС России. Ул. Мира, 22. г. Екатеринбург, 620022. Россия. Тел.: (343) 360-81-68.*

[3] *Институт физики металлов УрО РАН. Ул. Софьи Ковалевской, 34. г. Екатеринбург, 620041.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *ионообменный синтез, твердые растворы $Pb_{1-x}Sn_xSe$, селенид свинца, селенид олова, произведение растворимости, ионные равновесия.*

Аннотация

Предложен расчетный метод оценки условий ионообменного замещения металлов на межфазной границе «$PbSe_{тв}$ − водный раствор соли олова(II)», основанный на анализе величин эффективных произведений растворимости индивидуальных халькогенидов PbSe и SnSe в растворах разного лигандного состава. Выполнен расчет соответствующих изменений энергии Гиббса ионообменной реакции с целью определения возможности формирования твердых растворов $Pb_{1-x}Sn_xSe$ в реакционных системах, содержащих в качестве лигандов ацетат-, цитрат-, хлорид-, нитрат-, тартрат- и этилендиаминтетраацетат-ионы. Показано, что анализ эффективных произведений растворимости селенидов металлов может быть полезен при определении условий гидрохимического синтеза $Pb_{1-x}Sn_xSe$ методом соосаждения.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Аналитическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-2-107
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 7 февраля 2013 г. УДК 543.42.

Применение комплекса спектральных методов для исследования отходов производства алюминия

© Таразова* Эльвира Наилевна, **Альмашев[+] Ринат Олегович**,
Романько Надежда Андреевна, **Кипрова Анна Викторовна**,
Сергеев Денис Станиславович, **Гатина Роза Фатыховна** и **Михайлов Юрий Михайлович**
Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов. Ул. Светлая, 1. г. Казань, 420033. Республика Татарстан. Россия. E-mail: anekolab@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *алюминий, переработка, спектроскопия, шламы.*

Аннотация

Проведено исследование применимости методов эмиссионной спектроскопии, атомно-абсорбционной и ИК-спектроскопии для качественного и количественного анализа образцов шламовых полей неизвестного состава. Показано, что метод ИК-спектроскопии позволяет с наименьшими трудозатратами оценить наличие анионов в анализируемой пробе. Отработаны методики определения металлов в составе отходов производства алюминия и проведена их метрологическая оценка.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Неорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-2-113
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 19 февраля 2013 г. УДК 537.621.

Магнитные свойства сплавов Pb-Sc

© Упоров[1+] Сергей Александрович, Зиниград[2] Михаил, Луговской[3] Алекс, Митрофанов[1]* Валентин Яковлевич, Федорова[1] Ольга Михайловна и Быков[1] Виктор Анатольевич

[1] *Федеральное бюджетное учреждение науки Институт металлургии УрО РАН. Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Тел.: (343) 232-91-16. E-mail: segga@bk.ru*
[2] *Ariel University. Ariel, Israel. Phone: +7 (972) 547 776 413. E-mail: rector@ariel.ac.il*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *свинцовые сплавы, скандий, магнитные свойства, сверхпроводимость.*

Аннотация

В работе экспериментально исследованы методом вибрационной магнитометрии сплавы свинца, содержащие до 6 ат.% скандия в интервале температур T = 4-300 K. Обнаружено, что все образцы обладают сверхпроводимостью при температурах ниже 7 K. В нормальном (несверхпроводящем) состоянии все изученные сплавы проявляют диамагнитные свойства. Установлено, что скандий немонотонным образом изменяет магнитные характеристики сплавов. Полученные результаты обсуждаются в предположении о существовании в базисной свинцовой матрице наноразмерных дисперсойдов интерметаллидов скандия.

Тематический раздел: Технологические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Нанохимия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-2-119
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 15 февраля 2013 г. УДК 546.05.

Получение нанопорошков оксида алюминия и циркония из растворов их солей методом распылительной сушки

© Лямина[1]*+ Галина Владимировна, **Илела Алфа Эдисон**[1],
Качаев[1] **Артем Алексеевич**, **Амантай Далбанбай**[1],
Колосов[2] **Петр Владимирович** и **Чепрасова**[2] **Марина Юрьевна**
[1] *Кафедра наноматериалов и нанотехнологии. Институт физики высоких технологий. Томский политехнический университет. Пр. Ленина, 30. г. Томск, 634050. Россия. Тел.: (3822) 41-91-47. E-mail: lyamina@tpu.ru*
[2] *Кафедра органической химии. Химический факультет. Алтайский государственный университет. Пр. Ленина, 61. г. Барнаул, 656049. Россия. Тел.: (3852) 66-66-82. E-mail: csycdtnf@mail.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *оксид алюминия, оксид циркония, нанопорошки, нанораспылительная сушка.*

Аннотация

В работе была показана возможность применения нанораспылительной сушки (*Nano Spray Dryer B-90*) для получения порошков Al_2O_3 и ZrO_2. Установлено, что распылительная сушка позволяет получать гранулы оксида алюминия и циркония размером от 0.5 до 5 мкм, состоящие из наночастиц размером 100 нм и меньше.

Тематический раздел: Термодинамические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Фазовые равновесия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-2-125
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 18 февраля 2013 г. УДК 541.123.5+543.572.3.

Стабильный тетраэдр LiF-KCl-KBr-$LiKMoO_4$ пятикомпонентной взаимной системы Li,K||F,Cl,Br,MoO_4

© **Бехтерева* Екатерина Михайловна**, **Гаркушин* Иван Кириллович**
и **Демина$^+$ Мария Александровна**
Кафедра общей и неорганической химии. Самарский государственный технический университет.
Ул. Молодогвардейская, 244. г. Самара, 443100. Самарская область. Россия.
Тел.: (846) 242-36-92. E-mail: masha.demina2010@yandex.ru

*Ведущий направление; $^+$Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *дифференциальный термический анализ, фазовая диаграмма, непрерывные ряды твердых растворов, фазовые равновесия.*

Аннотация

Методом дифференциального термического анализа изучены фазовые равновесия в стабильном тетраэдре LiF-KCl-KBr-$LiKMoO_4$ пятикомпонентной взаимной системы Li,K||F,Cl,Br,MoO_4. Разграничены объемы кристаллизации фаз, описаны фазовые реакции для каждого элемента фазовой диаграммы.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия палеоматериалов. *Регистрационный код публикации:* 13-33-2-129
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 6 февраля 2013 г. УДК 535.377 + 539.1.074.

Методические особенности термолюминесцентного датирования археологической керамики с использованием термолюминесцентных детекторов излучения

© Алукер[1]* Надежда Леонидовна, **Бобров[2] Владимир Васильевич**
и **Суздальцева[2,1+] Яна Михайловна**
[1] *Кафедра физической химии. Кемеровский государственный университет. Ул. Красная, 6. г. Кемерово, 650043. Россия. Тел.: (384-2) 58-35-27.*
[2] *Институт экологии человека СО РАН. Пр-т Ленинградский, 10. г. Кемерово, 650065. Россия. Тел.: 950 596 6141. E-mail: y-komarova@mail.ru.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

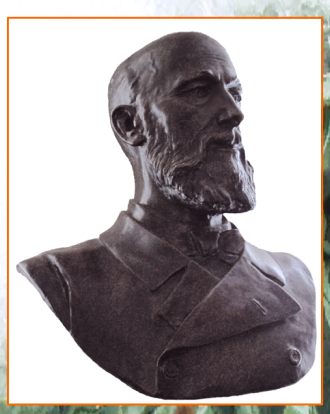
Ключевые слова: *термолюминесценция, детектор, тестовая доза облучения, мощность дозы, ионизирующее излучение, термолюминесцентное датирование, археологическая керамика.*

Аннотация

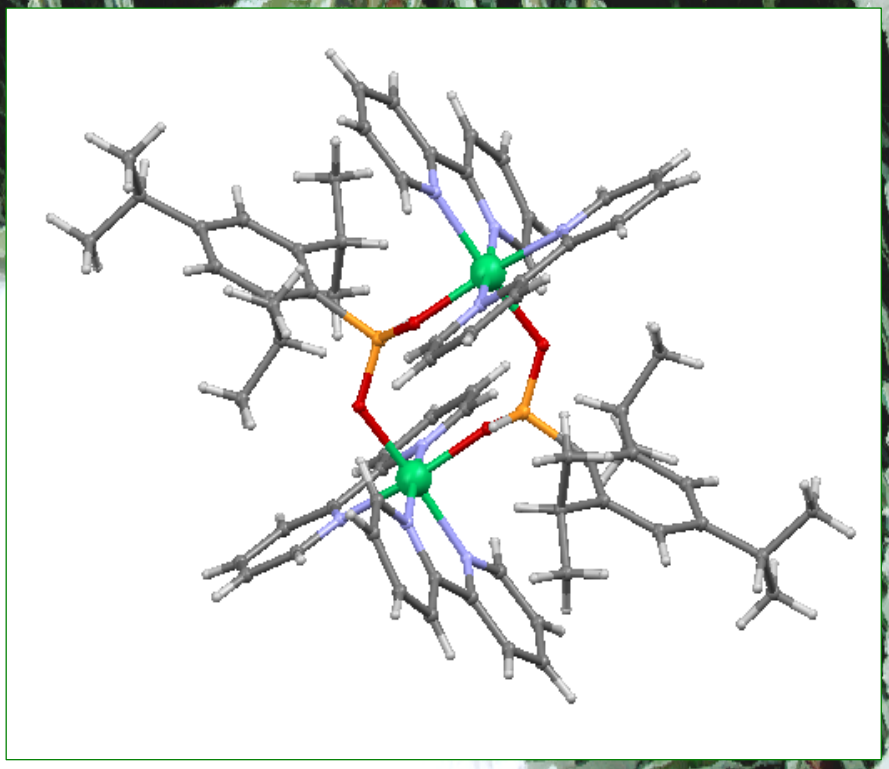
В работе метод термолюминесцентного датирования применен для определения возраста археологической керамики (палеокерамики). Изучены образцы керамики с раскопок поселения Автодром-2 Новосибирской области. Исследована зависимость интенсивности термолюминесценции от фракционного размера археологических объектов, изучены элементные составы палеокерамики и детекторов *ТЛД-К*, проведены расчеты эффективных атомных номеров (Zэфф) материалов, проведено определение содержания радионуклидов в образцах почв из которых извлечены артефакты.

Butlerov Communications

No.3, Vol.33. 2013



ISSN 2074-0948



ISSN 2074-0212

National Edition in Russian:

Бутлеровские сообщения

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Обзор**
Подраздел: Химия ксенобиотиков. *Регистрационный код публикации:* 13-33-3-1
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 1 марта 2013 г. УДК 579.695; 546.85; 502.55; 661.63.

Тематическое направление: Биодеградация как метод переработки отходов. Часть 1.

Биодеградации ксенобиотиков

© **Миндубаев***+ **Антон Зуфарович** и **Яхваров Дмитрий Григорьевич**
Учреждение РАН Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН.
Ул. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. E-mail: mindubaev@iopc.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *биодеградация, детоксикация, токсичные отходы производств.*

Аннотация

Одной из серьезнейших проблем современной цивилизации является переработка отходов. Одним из путей ее решения является метод биодеградации – наиболее естественный и экологически безопасный способ уничтожения отходов городов, промышленности и сельского хозяйства. Представленный обзор ставит задачу осветить возможности биодеградации, затронуть ее сильные и слабые стороны и причины недостаточной реализации в настоящее время. В нем представлено значительное количество конкретных примеров биодеградации разнообразных классов веществ, многие из которых уже вошли в практику.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-3-38 *Подраздел:* Аналитическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 543. Поступила в редакцию 1 марта 2013 г.

Вопросы пробоподготовки и определения токсикантов в объектах окружающей среды

© Смирнов[1]* Александр Константинович и **Смотрина[2+] Татьяна Валерьевна**
[1] *Кафедра общей химии. Марийский государственный университет. Пл. Ленина, 1.*
г. Йошкар-Ола, 424000. Республика Марий Эл. Россия. Тел.: (8362) 42-40-31. E-mail: aksmi@yandex.ru
[2] *Кафедра физики. Поволжский государственный технологический университет. Пл. Ленина, 3.*
г. Йошкар-Ола, 424000. Республика Марий Эл. Россия. Тел.: (8362) 68-68-04.
E-mail: tatyana-smotrina@yandex.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *остаточные количества пестицидов, почва, влагосодержание, разделение, количественный анализ.*

Аннотация

Проведено критическое рассмотрение методик количественного определения остаточных количеств пестицидов в пробах воды и почвы. Подобраны оптимальные условия разделения и количественного определения с использованием газохроматографической системы *Кристалл 2000 М.*

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-3-42 *Подраздел:* Теплофизика энергетических материалов.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 629.7. Поступила в редакцию 26 февраля 2013 г.

Тепловой взрыв смесевых энергетических материалов на основе различных горючих-связующих и окислителей

© **Попок*[+] Владимир Николаевич** и **Ильиных Константин Федорович**
Открытое акционерное общество «Федеральный научно-производственный центр «Алтай».
Ул. Социалистическая, 1. г. Бийск, 659322. Алтайский край. Россия.
Тел.: (3854) 30-19-37. E-mail: vnpopok@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *тепловой взрыв, смесевые энергетические материалы, горючие-связующие, триазольный пластификатор, окислители.*

Аннотация

В статье представлены результаты определения параметров теплового взрыва смесевых энергетических материалов на основе инертного горючего связующего и двух типов активного связующего – на основе триазольного и смесевого нитроэфирного пластификаторов. В качестве окислителей рассмотрены перхлорат и нитрат аммония. Показано, что наиболее перспективным горючим-связующим в плане термической стойкости и параметров теплового взрыва является связующее с триазольным пластификатором.

Тематический раздел: Исследование реакционной способности. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Супрамолекулярная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-3-49
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений"
http://butlerov.com/synthesys/
Поступила в редакцию 1 марта 2013 г. УДК 54.05:542.9:546.9.

Исследование влияния условий реакции на процесс образования и кристаллизации биядерных комплексов никеля(II)

© Трофимова[1] Екатерина Александровна, **Добрынин[1] Алексей Борисович**, **Синяшин[1] Олег Герольдович** и **Яхваров[1,2]*[+] Дмитрий Григорьевич**

[1] *Отдел координационной химии и наноматериалов. Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, КазНЦ РАН. Ул. Ак. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 273-48-93. E-mail: trofimova-kate@mail.ru*

[2] *Кафедра физической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 233-73-46. E-mail: yakhvar@iopc.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *арилфосфонистые кислоты, 2,2'-бипиридил, биядерные комплексы никеля(II), кристаллизация, мостиковые лиганды, сольвотермический синтез.*

Аннотация

Исследовано влияние условий реакции на процесс образования биядерных комплексов $[Ni_2(\mu\text{-}O_2P(H)Ar)_2(bpy)_4]Br_2$, где Ar = Ph (**1**), 2,4,6-триметилфенил (Mes, **2**), 2,4,6-триизопропилфенил (Tipp, **3**), 9-антрацил (Ant, **4**), bpy = 2,2'-бипиридил, при взаимодействии комплекса $[NiBr_2(bpy)_2]$ с арилфосфонистыми кислотами ArP(O)(OH)H, где Ar = Ph (**1a**), Mes (**2a**), Tipp (**3a**), Ant (**4a**). Установлено, что образование кристаллических образцов комплексов **2** и **4** имеет место при комнатной температуре, в то время как кристаллизация комплексов **1** и **3** протекает только в условиях сольвотермического синтеза при повышенной температуре.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Нанохимия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-3-55
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 22 февраля 2013 г. УДК 546.05.

Синтез наноразмерных оксидов алюминия и циркония из водных и водно-спиртовых растворов с полиэтиленгликолем

© **Лямина**[1]*+ **Галина Владимировна**, **Илела**[1] **Алфа Эдисон**, **Двилис**[1] **Эдгар Сергеевич**, **Божко**[1] **Ирина Александровна** и **Гердт**[2] **Антонина Павловна**

[1] *Кафедра наноматериалов и нанотехнологии. Институт физики высоких технологий. Томский политехнический университет. Пр. Ленина, 30. г. Томск, 634050. Россия. Тел.: (3822) 41-91-47. E-mail: lyamina@tpu.ru*

[2] *Кафедра органической химии. Химический факультет. Алтайский государственный университет. Пр. Ленина, 61. г. Барнаул, 656049. Россия. Тел.: (3852) 66-66-82. E-mail: csycdtnf@mail.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *Оксид алюминия, оксид циркония, нанопорошки, нанораспылительная сушка.*

Аннотация

В работе была показана возможность применения нанораспылительной сушки (*Nano Spray Dryer B-90*) для получения порошков Al_2O_3 и ZrO_2. Было установлено, что использование спиртовых растворов и стабилизатора (полиэтиленгликоль) для синтеза оксида циркония позволяет увеличить содержание тетрагональной фазы. Использование водно-спиртовых растворов позволяет увеличить количество гранулированного продукта.

Тематический раздел: Технологические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Регенерация воды в промышленных процессах. *Регистрационный код публикации:* 13-33-3-63
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 13 марта 2013 г. УДК 54.058/66-911.48+66.935.4.

Некоторые аспекты регенерации технологической воды в переработке кислых гудронов

© Федосеева[1]*+ Елена Николаевна, Зорин[1]* Аркадий Данилович, Занозина[1] Валентина Федоровна, Жебряков[1] Евгений Владимирович, Бацинин[1] Василий Николаевич, Кузнецова[1] Татьяна Васильевна, Гущина[2] Елена Аркадьевна, Маркова[1] Марина Леонидовна и Горячева[1] Наталия Михайловна

[1] *Лаборатория прикладной химии и экологии. Научно-исследовательский институт химии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского". Пр. Гагарина, 23, корп.5. г. Нижний Новгород, 603950. Россия. Тел.: (831) 465-81-66. E-mail: enfedoseeva@front.ru*

[2] *Кафедра химии НГСХА. ФГБОУ ВПО Нижегородская государственная сельскохозяйственная академия (НГСХА). Пр. Гагарина, 97. г. Нижний Новгород, 603107. Россия. Тел.: (831) 462-65-08, (831) 462-78-17. Факс: (831) 466-06-84. E-mail: adzorin@mail.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *кислый гудрон, сульфокислоты, оборотная вода, коллоидный раствор, коллоидная частица, коагуляция, флокуляция, устойчивость дисперсии, поверхностно-активные свойства.*

Аннотация

Обработка кислых гудронов водой является одним из этапов разработанного авторами способа получения битумных материалов из отходов нефтеперерабатывающей промышленности. Работа посвящена изучению причин устойчивости коллоидного раствора, образующегося при фазовом разделении смеси кислого гудрона и воды, состава и поверхностно-активных свойств исследуемой дисперсии, а также подбору способа регенерации дисперсионной среды – воды с целью возвращения последней в цикл обработки кислого гудрона.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-33-3-81
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 1 марта 2013 г. УДК 547.793.

Координационные соединения натрия и калия 4,6-динитро-5,7-диаминобензофуроксана

© Юсупова[1]*+ Луиза Магдануровна, Енейкина[2]* Татьяна Александровна, Васютина[1] Екатерина Анатольевна, Гатина[2] Роза Фатыховна и Покалюхин[2] Николай Алексеевич

[1] *Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (343) 231-40-88.*

[2] *Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов. Ул. Светлая, 1. г. Казань, 420033. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 541-76-02. E-mail: hgm1961@ rambler.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *координационные соединения, синтез, производные динитробензофуроксанов, ИК-спектроскопия.*

Аннотация

Впервые синтезированы координационные соединения натрия и калия 4,6-динитро-5,7-диаминобензофуроксана методом «сборки» из 4,6-динитро-5,7-дихлорбензофуроксана, гидрокарбоната натрия (калия) и хлорида аммония в водной среде. Методами элементного, рентгеноструктурного анализа, ИК спектроскопией и дифференциальной сканирующей калориметрией установлены структуры комплексов хелатного типа и изучена их чувствительность к механическому и тепловому воздействиям.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Препаративная химия.
Регистрационный код публикации: 13-33-3-88 *Подраздел:* Органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 547.793.2. Поступила в редакцию 18 марта 2013 г.

Реакции 4-*R*-амино-7-нитро-2,1,3-бензоксадиазолов с нитрующими и нитрозирующими реагентами

© Кузнецова Анастасия Сергеевна и **Горностаев*[+] Леонид Михайлович**
Кафедра химии. Красноярский государственный педагогический университет им. В.П. Астафьева. Ул. А. Лебедевой, 89. г. Красноярск, 660049. Россия. Тел.: (391) 217-17-29. E-mail: gornostaev@kspu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *2,1,3-бензоксадиазолы, нитрование, нитрозирование, гетероциклизация, перегруппировки.*

Аннотация

4-Арил- и бензиламино-7-нитро-2,1,3-бензоксадиазолы взаимодействуют с нитрующими и нитрозирующими реагентами с участием арильного, бензофуразанового карбоциклов или вторичной аминогруппы в зависимости от типа реагента.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Химия красителей. *Регистрационный код публикации:* 13-33-3-93
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 4 марта 2013 г. УДК 677.494.027.42.04:547.

Синтез новых азопроизводных метилфлороглюцина – потенциальных красителей и пигментов для текстильных материалов

© **Алафинов**[1] **Андрей Иванович**, **Кобраков**[1]*+ **Константин Иванович**, **Кузнецов**[1] **Дмитрий Николаевич** и **Дмитриева**[2] **Мария Борисовна**

[1] *Кафедра органической химии. Московский государственный университет дизайна и технологии. Ул. Малая Калужская, 1. г. Москва, ГСП-1, 119991. Россия. Тел.: (495) 955-35-58. E-mail: occd@mail.ru*

[2] *Центр биологического контроля лаборатории микрофильмирования и реставрации документов. Российский государственный архив научно-технической документации. Ул. Профсоюзная, 82. г. Москва, 117393. Россия. Тел.: (495) 335-00-95. E-mail: biorest.maria@gmail.com*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *2,4,6-тригидрокситолуол, метилфлороглюцин, азосочетание, крашение, фунгицидная активность.*

Аннотация

В статье приводятся данные по синтезу и свойствам неописанных ранее азопроизводных 2,4,6-тригидрокситолуола, представляющих интерес в качестве потенциальных азокрасителей для текстильных материалов различного состава.

Краткое обозрение *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-3-100 *Подраздел:* Добавки к кормам для рыб.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
УДК 547.258. Поступила в редакцию 10 марта 2013 г.

Тематическое направление: Добавки к кормам из амаранта для выращивания рыбы. Часть 2.

Особенности минерального состава листьев амаранта

© **Лапин**[1]*+ **Анатолий Андреевич**, **Зеленков**[2] **Валерий Николаевич**
и **Гречухина**[1] **Лилия Георгиевна**

[1] *Кафедра "Водные биоресурсы и аквакультура". Казанский государственный энергетический университет. Ул. Красносельская, 51. г. Казань, 420066. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 519-43-53. E-mail: lapinanatol@mail.ru*

[2] *Отделение «Физико-химическая биология и инновации» Российской академии естественных наук, Всероссийский научно-исследовательский институт овощеводства Российской академии сельскохозяйственных наук, г. Москва. Россия.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *амарант, стебли и листья амаранта, семена амаранта, биологически активные добавки, макро- и микроэлементы, кормопроизводство, животноводство, рыбоводство.*

Аннотация

В обзоре показано перспективность использования кормовых добавок из амаранта для выращивания рыбы. Для растений амаранта характерны высокие концентрации таких макроэлементов, как кальций, магний, фосфор, и микроэлементов, как марганец, кремний, железо, цинк и медь, что говорит о перспективах применения амаранта в качестве кормовой добавки в корма для рыб как источника биогенных минеральных элементов при профилактике заболеваний, связанных с их дефицитом.

Содержание

Введение
1. Проблема минеральных добавок к кормам для рыб
2. Сортовые особенности минерального состава семян амаранта
3. Сортовые особенности минерального состава листьев амаранта
4. Особенности накопления амарантом кальция

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Химия красителей *Регистрационный код публикации:* 13-33-3-109
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 4 марта 2013 г. УДК 547.71.8.

Эффективный экспресс метод тестирования препаратов для защиты текстильных материалов от биоповреждений

© **Дмитриева**[1] **Мария Борисовна**, **Кузнецов**[2]*[+] **Дмитрий Николаевич**, **Кобраков**[2] **Константин Иванович** и **Сафонов**[3] **Валентин Владимирович**

[1] *Центр биологического контроля лаборатории микрофильмирования и реставрации документов. Российский государственный архив научно-технической документации. Ул. Профсоюзная, 82. г. Москва, 117393. Россия. Тел.:(495) 335-00-95. E-mail: biorest.maria@gmail.com*

[2] *Кафедра органической химии. Московский государственный университет дизайна и технологии. Ул. Малая Калужская, 1. г. Москва, ГСП-1, 119991. Россия. Тел.: (495) 955-35-58. E-mail: occd@mail.ru*

[3] *Кафедра химической технологии волокнистых материалов. Московский государственный университет дизайна и технологии. Ул. Малая Калужская, 1. г. Москва, ГСП-1, 119991. Россия. Тел.: (495) 955-35-58.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *биостойкость тканей, биоцид, фунгицидная защита, фунгицидные красители, наночастицы серебра и меди.*

Аннотация

В статье предложен модифицированный диско-диффузионный метод для тестирования биоцидной активности. Метод, широко используемый для изучения активности антибиотиков, был нами приспособлен для оценки фунгистойкости текстильных материалов. Предложенный метод позволяет получить информацию о фунгицидной активности большого количества образцов за короткое время (3-7 дней) и применять определенные виды грибов для разных заданных целей. В нашей работе мы тестировали образцы тканей, окрашенные и обработанные разными синтетическими препаратами, в частности пиразолсодержащими азокрасителями и растворами коллоидного серебра. Тест культуры для заражения образцов были выбраны из группы плесневых грибов, часто встречающихся на поврежденных тканях. Рассмотрены два примера применения модифицированного метода, обсуждаются преимущества и недостатки экспресс метода.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-3-116 *Подраздел:* Химия полисахаридов.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 547.458.87+547.458.88+577.114. Поступила в редакцию 21 февраля 2013 г.

Тематическое направление: Полисахариды плодов. Часть I.

Общая химическая характеристика полисахаридов плодов граната (*Punica granatum* L.)

© **Шахматов**[1]* **Евгений Геннадьевич**, **Макарова**[1]* **Елена Николаевна**, **Михайлова**[2]* **Елена Андрияновна**, **Шубаков**[2+] **Анатолий Александрович** и **Оводов**[2] **Юрий Семенович**

[1] *Лаборатория химии растительных полимеров. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии Коми научного центра УрО РАН. Ул. Первомайская, 48. г. Сыктывкар, 167982. Республика Коми. Россия. Тел.: (8212) 21-99-16. E-mail: shachmatow-eg@ya.ru*

[2] *Отдел молекулярной иммунологии и биотехнологии. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физиологии Коми научного центра УрО РАН. Ул. Первомайская, 50. г. Сыктывкар, 167982. Республика Коми. Россия. Тел.: (8212) 24-10-01. E-mail: shubakov@physiol.komisc.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *полисахариды, пектины, гемицеллюлозы, моносахаридный состав, содержание белка, Punica granatum, биологическая активность полисахаридов.*

Аннотация

С помощью ранее разработанного метода выделения полисахаридов из растительного сырья путем последовательных экстракций водой, оксалатом аммония и растворами щелочей из корки и перегородок плодов граната получен ряд полисахаридных фракций. Дана общая химическая характеристика выделенных полисахаридов и определена их биологическая активность. Фракции, экстрагированные водой и оксалатом аммония, относятся к классу пектиновых полисахаридов. Фракции, экстрагированные растворами щелочей, принадлежат к гемицеллюлозам. Наибольшей биологической активностью в отношении влияния на всхожесть, энергию прорастания и скорость роста проростков и корней злаковых культур (пшеница, рожь, овес) обладает фракция пектинов, выделенная из плодов граната экстракцией оксалатом аммония.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-3-122 *Подраздел:* Оценка биохимических показателей.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 616.316-008.8, 616.316.5-002. Поступила в редакцию 14 марта 2013 г.

Сравнительная оценка показателей крови и смешанной слюны пациентов на фоне обострения паренхиматозного паротита

© Бельская[1]*+ Людмила Владимировна, Коршунов[2] Андрей Сергеевич и Ивасенко[2] Петр Иванович

[1] *Кафедра химической технологии. Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского. Проспект Мира, 55а. г. Омск, 644077. Россия. Тел.: (3812) 64-24-10. Факс: (3812) 64-24-10. E-mail: LudaB2005@mail.ru*

[2] *Кафедра челюстно-лицевой хирургии. Омская государственная медицинская академия. Ул. Ленина, 12. г. Омск, 644043. Россия.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *паренхиматозный паротит, абсцедирование, смешанная слюна, химический состав.*

Аннотация

Проведена сравнительная оценка эффективности биохимических показателей сыворотки крови у больных с первичным обострением паренхиматозного паротита с аналогичными показателями смешанной слюны данной группы пациентов. Выявлены высокие коэффициенты корреляции в биологических жидкостях по показателям общего белка, хлоридов, АлАТ, АсАТ, фосфатазы, амилазы и креатинина. Полученные информативные показатели смешанной слюны можно использовать при обследовании больных с первичным обострением паренхиматозного паротита на догоспитальном этапе для установления степени тяжести, прогноза и эффективности проводимых лечебных мероприятий в качестве высокоточного, неинвазивного патогномоничного теста.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-3-126 *Подраздел:* Токсикологическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 54.061. Поступила в редакцию 15 марта 2013 г.

Синтетический каннабиноид А-836,339 – способы идентификации

© Мащенко Петр Сергеевич
Кафедра токсикологической химии. Пермская государственная фармацевтическая академия Минздрава России. Ул. Полевая, 2. г. Пермь, 614990. Пермский край. Россия.
Тел.: (342) 282-58-65. E-mail: kaftox@mail.ru

Ключевые слова: *синтетический каннабиноид, А-836,339, наркотические средства, способы идентификации.*

Аннотация

Синтетические каннабиноиды – относительно обширная группа органических соединений, представляющая большой интерес для науки. Относительно недавно на нелегальном рынке России появился ещё один представитель группы синтетических каннабиноидов – А-836,339, обладающий психоактивными свойствами. В рамках работы по изучению новых психоактивных веществ были получены основные качественные характеристики вещества (масс-спектр, ИК спектр, УФ спектр).

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-3-130 *Подраздел:* Физико-химия взрывчатых веществ.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.6. Поступила в редакцию 21 февраля 2013 г.

Особенности молекулярных взаимодействий в бинарной системе нитрат целлюлозы-наполнитель

© **Альмашев* Ринат Олегович**, **Енейкина Татьяна Александровна**, **Селиванова Лилия**, **Романько Надежда Андреевна**, **Кипрова[+] Анна Викторовна**, **Таразова Эльвира Наилевна**, **Гатина Роза Фатыховна** и **Михайлов Юрий Михайлович**
Федеральное казённое предприятие «Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов». Ул. Светлая, 1. г. Казань, 420033. Республика Татарстан. Россия.
E-mail: anekolab@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *ИК-спектроскопия, наполнитель, нитрат целлюлозы, молекулярные взаимодействия, октоген, гексоген.*

Аннотация

Методом ИК-спектроскопии исследовано межмолекулярное взаимодействие в системах нитрат целлюлозы (НЦ) – октоген (гексоген). Установлено, что стабильность молекулярных комплексов НЦ-октоген (гексоген) зависит от свойств НЦ, вида и содержания наполнителя и характеризуется энергиями водородных связей (Е) в интервале 12.1-33.2 кДж/моль. Наиболее сильное межмолекулярное взаимодействие в рассмотренном диапазоне ввода наполнителей (0-80 % масс.) наблюдается в составах гексоген-коллоксилин, начиная с соотношения компонентов 60:40 за счет большего количества образующихся молекулярных комплексов (Е = 33.2 кДж/моль). Для составов октоген – коллоксилин сохраняется аналогичная зависимость, но при меньшей величине энергии водородных связей (Е = 16.1-25.1 кДж/моль). В составах гексоген (октоген) – пироксилин оптимальной с точки зрения образования прочных межмолекулярных комплексов являются составы с содержанием наполнителя ~60 % масс. (Е = 27.1 и 25.1 кДж/моль соответственно).

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-3-138 *Подраздел:* Полимерные биоматериалы.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.64. Поступила в редакцию 28 февраля 2013 г.

Молекулярная подвижность компонентов в сшитых гидрогелях на основе хитозана

© **Смотрина**[1]*+ **Татьяна Валерьевна** и **Кильдеева**[2]* **Наталия Рустемовна**
[1] *Кафедра физики. Поволжский государственный технологический университет. Пл. Ленина, 3. г. Йошкар-Ола, 424000. Республика Марий Эл. Россия. Тел.: (8362) 68-68-04. E-mail: tatyana-smotrina@yandex.ru*
[2] *Кафедра аналитической, физической и коллоидной химии. Московский государственный текстильный университет им. А.Н. Косыгина. Ул. М. Калужская, 1. г. Москва, 119071. Россия. Тел.: (495) 955-33-77. E-mail: kildeeva@mail.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

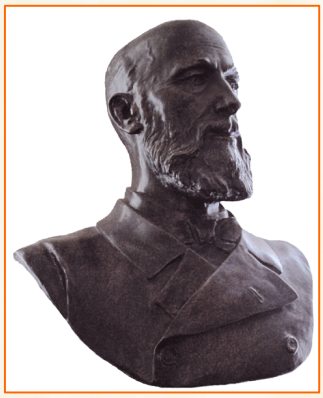
Ключевые слова: *хитозан, гидрогели, ядерная магнитная релаксация, молекулярная подвижность.*

Аннотация

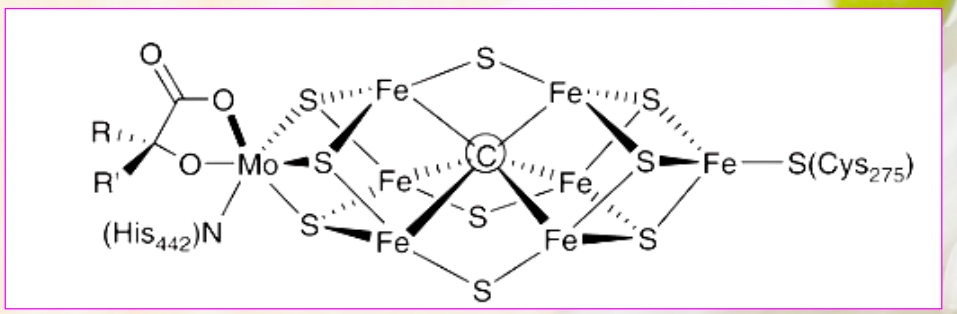
Методом ядерной магнитной релаксации изучены процессы спин-решеточной и спин-спиновой релаксации протонной намагниченности воды в гидрогелях на основе хитозана, полученных при варьировании pH и концентрации сшивающего реагента. Показана взаимосвязь между структурой гидрогеля и подвижностью удерживаемой воды. Проанализирован характер изменения структуры высушенных гидрогелей в процессе их повторного набухания в парах воды. Показана корреляция результатов сорбционного метода и метода ЯМР.

Butlerov Communications

No.4, Vol.34. 2013



ISSN 2074-0948



ISSN 2074-0212

National Edition in Russian:

Бутлеровские сообщения

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Обзор**
Подраздел: Химия ксенобиотиков. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-1
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 1 марта 2013 г. УДК 579.695; 546.85; 502.55; 661.63.

Тематическое направление: Биодеградация как метод переработки отходов. Часть 2.

Взгляд на проблему. Являются ли ксенобиотики ксенобиотиками?

© **Миндубаев*[+] Антон Зуфарович** и **Яхваров Дмитрий Григорьевич**
Учреждение РАН Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН.
Ул. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. E-mail: mindubaev@iopc.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *биодеградация, детоксикация, ксенобиотики, метаболиты, природные вещества.*

Аннотация

Представленный обзор ставит задачу осветить возможности биодеградации, затронуть ее сильные и слабые стороны и причины недостаточной реализации в настоящее время. Но обзор не ограничивается только этим: в нем также подробно представлен ряд примеров выработки самими живыми организмами веществ, традиционно считающимися чуждыми живой природе. Это расширяет взгляд на возможности биосферы и открывает перед биодеградацией новые перспективы в будущем.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Коллоидная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-21
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 4 апреля 2013 г. УДК 541.182644.001.5.

Форма и механизм разряда волновых стохастических кластеров вблизи углеграфитовых регистрирующих электродов

© **Сухарев*[+] Юрий Иванович**, **Марков Борис Анатольевич**,
Крутикова Оксана Михайловна и **Кузнецов Александр Львович**
Кафедра химии твердого тела и нанопроцессов. Челябинский государственный университет.
Ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454000. Россия.
Тел.: (963) 460-27-75. E-mail: Yuri_Sucharev@mail.ru.

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *лагранжевы отображения, оксигидратные гелевые системы, коллоидные кластеры, самопроизвольный пульсационный поток, спайковый выплеск, диффузный двойной электрический слой, бичастичные взаимодействия, топологический континиум, диссоциативно-диспропорциональное разрушение макромолекул, теория Уитни, геометрия каустик.*

Аннотация

Всеохватное распространение и изучение периодических процессов нашло яркое применение в когерентной химии, то есть химии колебательно-периодических процессов. Но при этом есть определённая сложность: в классической неорганической химии и коллоидной химии колебательная парадигма развития явлений и процессов практически не разработана и не понята. Следовательно, мы упускаем из поля зрения многие тонкие коллоидно-химические явления, которые могут быть весьма существенными и значимыми при адсорбции и катализе, например. Гелевые оксигидратные системы (ГОС) редкоземельных элементов, а также оксиды-гидроксиды некоторых d-элементов, таких как цирконий, ниобий, титан и другие, интересны тем, что, являясь весьма труднорастворимыми, склонны к диссоциации по кислотно-основному механизму, а, следовательно, к проявлению ионообменных и адсорбционных свойств. Их свойства слабо или совсем не воспроизводимы, хотя, казалось бы, предприняты все условия и средства для полного воспроизведения начальных параметров.

Исследования нелинейных свойств подобных гелевых оксигидратных систем обнаружили следующие особенности: колебательную дилатантность, колебательную (пульсационную) электрическую проводимость, самопроизвольный электроток гелевой самоорганизации на фоне поляризационных явлений, окрашенность гелевых систем, колебательные оптические и сорбционные свойства и многое другое.

Тематический раздел: Электрохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Химия комплексных соединений. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-39
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений"
http://butlerov.com/synthesys/
Поступила в редакцию 4 апреля 2013 г. УДК 544.02:544.032.5:544.6:546.9.

Электрохимические свойства новых биядерных комплексов никеля(II), образованных *{μ-O_2P(H)Ar}*$^-$ мостиковыми лигандами

© **Трофимова**[1] **Екатерина Александровна**, **Бабаев**[1] **Василий Михайлович**, **Ризванов**[1] **Ильдар Хамидович**, **Синяшин**[1] **Олег Герольдович** и **Яхваров**[1,2]*$^+$ **Дмитрий Григорьевич**

[1] *Отдел координационной химии и наноматериалов. Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, КазНЦ РАН. Ул. Ак. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 273-48-93. E-mail: trofimova-kate@mail.ru*

[2] *Кафедра физической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 233-73-46. E-mail: yakhvar@iopc.ru*

*Ведущий направление; $^+$Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *биядерные комплексы никеля(II), мостиковые {μ-O_2P(H)Ar}*$^-$ *лиганды, циклическая вольтамперометрия, электрохимия, масс-спектрометрия.*

Аннотация

При использовании метода циклической вольтамперометрии и препаративного электролиза исследованы электрохимические свойства биядерных комплексов никеля $[Ni_2(\mu\text{-}O_2P(H)Ar)_2(bpy)_4]Br_2$, где Ar = Ph, 2,4,6-триметилфенил, 2,4,6-триизопропилфенил, bpy = 2,2'-бипиридил, и $[Ni_2(\mu\text{-}O_2P(H)Tipp)_2(bpy)_4](BF_4)_2$. Установлено, что электрохимическое восстановление/окисление исследованных никельорганических комплексов является ступенчатым химически обратимым процессом и приводит к образованию новых комплексов, содержащих никель(II), никель(I) и никель(0) координационные центры.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Препаративная химия.
Регистрационный код публикации: 13-34-4-46 *Подраздел:* Химия элементоорганических соединений.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений”
http://butlerov.com/synthesys/
УДК 544.023.523. Поступила в редакцию 10 апреля 2013 г.

Исследование взаимодействия оксида молибдена(VI) с полифенилсилоксаном

© **Васильева[+] Виктория Викторовна**, **Аликовский* Александр Владимирович**, **Красицкая Светлана Георгиевна**, **Юртаева Екатерина Викторовна** и **Баланов Михаил Иванович**

Кафедра общей, неорганической и элементоорганической химии. Школа естественных наук. Дальневосточный федеральный университет. Ул. Октябрьская, 27. г. Владивосток, 692900. Россия. Тел.: (914) 691-87-41. E-mail: vasilevavik@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *молибден, полимеры, синтез, полигетеросилоксаны, силоксановая связь.*

Аннотация

Исследовано взаимодействие полифенилсилсесквиоксана с оксидом молибдена(VI) в среде органических растворителей. Показано, что взаимодействие между реагентами протекает только в присутствии *н*-бутанола. Процесс полимеробразования происходит за счет бутоксилирования исходных веществ определяющим является бутоксилирование именно оксида молибдена(VI). Изучение процессов взаимодействия реагентов позволило разработать эффективный метод получения полимолибденфенилсилоксанов с регулируемым соотношением кремния к молибдену.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Элементоорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-51
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции " Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений"
http://butlerov.com/synthesys/
Поступила в редакцию 13 мая 2012 г. УДК 547.26'118.

Конденсация α-фосфорилированных карбонильных соединений с бифункциональными азотистыми соединениями

© **Исмаилов**[1] **Валех Мехрали оглы**, **Мамедов**[1] **Искандер Алирза оглы**, **Юсубов**[1] **Нифталы Надир оглы** и **Москва**[2]*[+] **Виктор Владимирович**
[1] *Бакинский государственный университет. Ул. 3. Халилова, 23. AZ-1148, Баку. Азербайджан. E-mail: niftali-yusubov@rambler.ru*
[2] *Кафедра органической химии. Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева. Миусская пл., 9. г. Москва, 125047. Россия.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *фосфаты органические, полигалогеналканы, алкилирование, гетероциклы.*

Аннотация

Изучена конденсация фосфорилированных карбонильных соединений – фосфональдегидов и фосфонкетонов с различными бифункциональными соединениями. В отличие от фосфорилированных альдегидов фосфоноацетон реагирует с участием активированного метиленового звена.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Металлоорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-55
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений"
http://butlerov.com/synthesys/
Поступила в редакцию 20 марта 2013 г. УДК 547.243.

Трис(2-метоксифенил)висмут. Строение и реакция окислительного присоединения.

© Шарутин*[+] Владимир Викторович, **Шарутина Ольга Константиновна**
и **Сенчурин Владислав Станиславович**
Кафедра органической химии. Национальный исследовательский Южно-Уральский государственный университет. Проспект им. В.И.Ленина, 76. г. Челябинск, 454080. Россия. Тел.: (351) 267-95-39. E-mail: vvsharutin@rambler.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *трис(2-метоксифенил)висмут, строение, фенилпропиоловая кислота.*

Аннотация

По данным рентгеноструктурного анализа атомы висмута в молекулах *трис*(2-метоксифенил)висмута имеют тетрагональную координацию с атомами углерода арильных заместителей и неподеленной электронной парой в вершинах тетраэдра. Длины связей Bi-C и величины углов CBiC равны 2.243(15)-2.255(18) Å и 92.5(5)-95.3(8)° соответственно. Расстояния между атомами висмута и кислорода метоксигрупп (Bi···OCH_3) составляют 3.055(17)-3.129(18) Å, вследствие чего координационное число атома Bi возрастает до шести. Взаимодействием *трис*(2-метоксифенил)висмута, фенилпропиоловой кислоты и пероксида водорода (мольное соотношение 1:2:1) с выходом 92% получен *бис*(фенилпропиолат) *трис*(2-метоксифенил)висмута и определено его строение.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-59
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 3 марта 2013 г. УДК 547.458.88:547.587.11.

Взаимодействие пектинов с 4- и 5-аминосалициловыми кислотами

© Борисова[1+] **Наталья Сергеевна**, **Тимербаева**[2] **Гузель Рамилевна**,
Зимин[1] **Юрий Степанович** и **Мустафин**[1]*** Ахат Газизьянович**

[1] *Кафедра физической химии и химической экологии. Башкирский государственный университет. Ул. З. Валиди, 32. г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 229-96-94. E-mail: NSGuskova@rambler.ru*

[2] *Кафедра информационных технологий математических и естественных наук. Филиал Уфимского государственного нефтяного технического университета. Ул. Девонская, 54а. г. Октябрьский, 452600. Республика Башкортостан. Россия.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *пектин, аминосалициловая кислота, комплексообразование, спектрофотометрия, денсиметрия, константа устойчивости.*

Аннотация

Изучено комплексообразование пектинов (яблочного и цитрусового) и их окисленных фракций с 4- и 5-аминосалициловыми кислотами в водной среде. Методами спектрофотометрии и денсиметрии определен состав образующихся комплексных соединений равный 1:1, то есть на одно дисахаридное звено биополимера приходится одна молекула аминосалициловой кислоты. Двумя спектральными методами оценены константы устойчивости, значения которых свидетельствуют об образовании довольно прочных комплексов. Результаты экспериментальных исследований указывают на то, что в комплексообразовании принимают участие аминогруппы 4- и 5-аминосалициловых кислот и карбоксильные группы пектинов или их окисленных фракций.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия высоких температур. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-65
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 25 марта 2013 г. УДК 544-72.

Влияние параметров активации висмутхромцеолитной системы на превращения *н*-гексана

© **Кузьмина*[+] Раиса Ивановна**, **Аниськова Татьяна Владимировна**, **Пилипенко Антон Юрьевич** и **Степанов Михаил Юрьевич**

Кафедра нефтехимии и техногенной безопасности. Институт химии. Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Астраханская 83, корп. 1. г. Саратов, 410012. Россия. Тел.: (8452) 52-50-07. E-mail: kuzminaraisa@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *н-гексан, н-гептан, висмутхромовоцеолитный катализатор, активация, воздух, водород.*

Аннотация

Проведено исследование превращения *н*-гексана в интервале температур 300-500 °С. Установлено, что процесс превращения *н*-гексана включает в себя реакции изомеризации, ароматизации, дегидроциклизации, алкилирования.

Тематический раздел: Исследование катализаторов. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия высоких температур. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-69
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 5 апреля 2013 г. УДК 541.1 544.4.

Исследование нановолокнистых катализаторов на основе оксидов алюминия и титана в реакции крекинга пропана

© Маркова[1,2+] Екатерина Борисовна, **Красильникова[1]* Ольга Константиновна**, **Серов[2]* Юрий Михайлович** и **Копылов[2] Владимир Викторивич**

[1] *Федеральной бюджетное учреждение Академии наук Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН (ИФХЭ РАН). Ленинский пр.31, к.4. г. Москва, 119071. Россия.*
E-mail: krasilnikovaok@inbox.ru

[2] *Федеральной бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Российский университет дружбы народов». Ул. Миклухо-Маклая, 6. г. Москва, 117198. Россия.*
E-mail: ebmarkova@gmail.com

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *катализ, пропан, оксид алюминия, оксид титана.*

Аннотация

Исследованы катализаторы на основе аэрогеля из нитей оксида алюминия, покрытых слоем диоксида титана в реакции крекинга пропана при атмосферном давлении. Для полученных катализаторов определена оптимальная температура реакции, а также селективности по этилену и пропилену для каталитической конверсии пропана при атмосферном давлении. Была изучена стабильность и возможность регенерации катализаторов в зависимости от времени контакта и температуры.

Тематический раздел: Исследование новых материалов. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия взрывчатых веществ. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-75
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 20 марта 2013 г. УДК 543-4.

Сенсорные материалы для визуального детектирования гексогена, ТАТБ и других низколетучих полинитросоединений

© Копчук[1,2+] Дмитрий Сергеевич, Звонарев[2] Сергей Владимирович, Ковалев[2] Игорь Сергеевич, Зырянов[1,2]* Григорий Васильевич, Цейтлер[2] Татьяна Алексеевна, Хасанов[2] Альберт Фаридович, Русинов[1,2] Владимир Леонидович и Чупахин[1,2] Олег Николаевич

[1] *Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН. Ул. Ковалевской, 22. Ул. Академическая, 20. г. Екатеринбург, 620990. Россия.*
Тел./факс: (343) 369-30-58. E-mail: dkopchuk@mail.ru

[2] *Уральский федеральный университет. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Россия.*
Тел./факс: (343) 375-45-01.

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *полинитросоединения, сенсорные материалы, electrospinning, электроформование, 3-арил-6-индолил-1,2,4-триазин-5-(4H)-оны, пентиптицены.*

Аннотация

Показано увеличение эффективности тушения в газовой фазе люминесценции напроксенсодержащих 3-арил-6-индолил-1,2,4-триазин-5-(4*H*)-онов, а также 1,4-дизамещенных пентиптиценов при взаимодействии с полинитросодержащими соединениями (ТАТБ, ТНТ, пикриновая кислота, динитротолуол) за счет получения на их основе нановолокнистых материалов с применением процедуры электроспиннинга (электроформования). Подобраны условия проведения электроспиннинга для получения материалов, обладающих необходимыми свойствами.

Тематический раздел: Исследование новых материалов. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия сплавов. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-79
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 1 апреля 2013 г. УДК 669.3.017.

Взаимодействие медно-оловянных порошков с эвтектическим расплавом галлий-индий

© **Шубин[+] Алексей Борисович**, **Шуняев* Константин Юрьевич**,
Гуляева Роза Иосифовна и **Федорова Ольга Михайловна**
Институт металлургии УрО РАН. ИМЕТ УрО РАН. Ул. Амундсена, 101.
г. Екатеринбург, 620016. Россия. Тел.: (343) 232-91-38. E-mail: abshubin@gmail.com

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *галлий, медь, индий, олово, сплав, структура, термические свойства.*

Аннотация

Диффузионно-твердеющие припои на основе галлия не содержат свинца. Эти сплавы обладают специфическими реологическими свойствами. Их синтез включает, как правило, механическое смешение таких исходных компонентов, как металлические порошки (наполнители) и жидкие галлиевые сплавы. Далее полученные металлические пасты претерпевают необратимые фазовые превращения, в результате которых формируется твердый сплав с особой структурой (композит). В данной работе методами сканирующей электронной микроскопии и рентгеноспектрального микроанализа были исследованы микроструктуры ряда диффузионно-твердеющих сплавов Cu-Ga-In-Sn. Также были проведены эксперименты с применением дифференциального сканирующего калориметра, которые дали возможность уточнить фазовый состав сплавов.

Тематический раздел: Термодинамические исследования. **Дискуссионная рубрика**
Подраздел: Фазовые равновесия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-83
Редакционный комментарий: Публикуемая статья является дискуссионной, как минимум, по одной фундаментально важной проблеме – это возможность или невозможность использования аналитического и неаналитического описания в критической и околокритической областях фазового равновесия. Рецензенты высказали общепринятое мнение о невозможности аналитического описания критических параметров. Однако, у автора публикации имеются аргументированные доводы в пользу собственной правоты. В связи с чем, редактора журнала посчитали целесообразным вынести на публичное обсуждение данную проблематику и попытаться посредством активации дискуссии на эту тему подойти чуть-чуть ближе к истине.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 4 марта 2013 г. УДК 536.71.

О некоторых следствиях аналитичности термического уравнения состояния в критической точке фазового равновесия жидкость-газ

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович
Лаборатория моделирования. Институт теплофизики СО РАН. Пр-т Лаврентьева, 1. г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org

Ключевые слова*: фазовое равновесие, условия термодинамического равновесия, частные производные давления по плотности, критическая точка, уравнение состояния, устойчивость.*

Аннотация

Показано, что в случае, когда 1) $0<\beta<1/2$, или 2) $\beta=1/2$ и $\left.\frac{\partial^2 p(T,v)}{\partial v \partial T}\right|_{v=v_c,T=T_c}=0$, где β критический индекс, третья и четвертая частные производные давления по объему в расчете на одну частицу в критической точке фазового перехода газ-жидкость однокомпонентного вещества равны нулю, если термическое уравнение состояния (зависимость давления от температуры и объема) является аналитической функцией температуры и объема в критической точке, и критическая изотерма имеет нулевой наклон и перегиб при критическом объеме. Доказано, что в критической точке фазового равновесия жидкость-газ термодинамически равновесное однородное состояние однокомпонентного вещества неустойчиво.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Квантово-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-34-4-90 *Подраздел:* Неорганическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 544.162.7. Поступила в редакцию 8 апреля 2013 г.

Теоретическая оценка силового поля перфторгидразина

© Белик Александр Васильевич
Кафедра химической технологии и вычислительной химии. Челябинский государственный университет. Ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454001. Россия.
Тел.: (351) 799-70-66. E-mail: belik@csu.ru

Ключевые слова: *перфторгидразин, силовые коэффициенты, координаты X_δ^0, квантово-химические расчеты (DFT), геометрия молекул, частоты нормальных колебаний.*

Аннотация

Впервые получено силовое поле молекулы тетрафторгидразина в координатах X_δ^0. Для этого проведены квантово-химические расчеты B3LYP 6-311 G++(3df,3pd) и полученная матрица силовых коэффициентов переведена из декартовых координат во внутренние координаты. В результате появилась возможность анализа силовых коэффициентов связей. Вычислены частоты нормальных колебаний и проведено их отнесение.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физическая органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-95
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 8 апреля 2013 г. УДК 536.461; 536.25.

Физико-химические особенности сорбции производных триазолов из водно-ацетонитрильных растворов

© Джабиева Сара Али Кызы, **Курбатова*[+] Светлана Викторовна**, **Белоусова Зоя Петровна** и **Финкельштейн Елена Евгеньевна**
Кафедра физической химии и хроматографии. Самарский государственный университет. Ул. Акад. Павлова, 1. г. Самара, 443011. Россия. Факс: (846) 334-54-17. E-mail: curbatsv@ samsu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *бензтриазол, высокоэффективная жидкостная хроматография, октадецилсиликагель, ацетонитрил, электрическая проводимость растворов.*

Аннотация

Приведены результаты хроматографического исследования сорбции некоторых производных азолов из водноацетонитрильных растворов. Показано влияние природы и положения функциональных групп и заместителей в молекулах азолов, их кислотно-основных свойств на характер взаимодействий сорбата с неподвижной фазой и элюентом. Проанализировано влияние состава элюента на хроматографическое удерживание триазолов.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-34-4-102 *Подраздел:* Физическая органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.64:536.7. Поступила в редакцию 27 марта 2013 г.

Об особенностях вискозиметрического исследования хитозана в растворе уксусной кислоты

© Чернова Валентина Витальевна, **Туктарова[+] Ирина Фанисовна**
и **Кулиш* Елена Ивановна**
Химический факультет. Башкирский государственный университет. Ул. Заки Валиди, 32.
г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (987) 586-36-84.
E-mail: tuktarova_irina@rambler.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *хитозан, полиэлектролиты, вискозиметрия, конформация.*

Аннотация

Проанализированы некоторые подходы к определению значений характеристической вязкости хитозана путем обработки данных вискозиметрии. Показано, что особенностью исследования хитозана является то, что при растворении он становится полиэлектролитом, что приводит к некоторым сложностям при оценке его характеристической вязкости. Утверждается, что используя метод, разработанный Иржаком и Барановым, можно адекватные оценить значения характеристической вязкости, а следовательно и объем, занимаемый макромолекулой хитозана, который, в свою очередь, определяется степенью протонирования макромолекулы хитозана в растворе уксусной кислоты.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Хроматография. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-107
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 1 апреля 2013 г. УДК 544.723.2.

Изучение удерживания некоторых производных адамантана на сверхсшитом полистироле из водно-ацетонитрильного элюента

© Константинов[1+] Анатолий Вячеславович, Шафигулин[1*+] Роман Владимирович, Буланова[1*] Анджела Владимировна, Ермохин[2] Владимир Анатольевич и Пурыгин[2] Петр Петрович

[1] *Кафедра физической химии и хроматографии. Самарский государственный университет. Ул. Академика Павлова, 1. г. Самара, 443011. Россия. Тел.: (846) 334-54-47. E-mail: konav88@mail.ru*
[2] *Кафедра органической, биоорганической и медицинской химии. Самарский государственный университет. Ул. Академика Павлова, 1. г. Самара, 443011. Россия. Тел.: (846) 334-54-59. E-mail: puryginpp2002@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *сорбция, высокоэффективная жидкостная хроматография, производные адамантана.*

Аннотация

Исследовано хроматографическое поведение производных адамантана. Рассчитаны факторы удерживания (k) и константы распределения (K_x). Рассчитаны термодинамические характеристики, такие, как изменение стандартной дифференциальной мольной энергии адсорбции Гиббса ($-\Delta G^o$), стандартных молярных изменений энтальпии ($-\Delta H^o$), энтропийных членов (A) и стандартные молярные изменения энтропии ($-\Delta S^o$) при переходе сорбата из объемного раствора в поверхностный слой.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Краткое сообщение**
Подраздел: Сорбционная активность. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-113
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 25 марта 2013 г. УДК 544.723:622.357.5.

Химическое модифицирование дисперсного кремнезёма-опоки

© **Кондрашова**[1+] **Анжела Владимировна** и **Кузьмина**[2]* **Раиса Ивановна**
[1] *Кафедра «Химия». Саратовский государственный аграрный университет им. Н.И. Вавилова. Ул. Соколовая, 335. г. Саратов, 410005. Тел.: (845-2) 69-23-46. E-mail: angela70-03@mail.ru*
[2] *Кафедра «Нефтехимии и техногенной безопасности». Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского. Ул. Астраханская, 83. г. Саратов, 410012. Тел.: (845-2) 51-26-75. E-mail: kuzminaraisa@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *природный сорбент, модифицирование, кинетика сорбции, адсорбционная ёмкость.*

Аннотация

Исследована кинетика сорбции ионов меди и кобальта на природной опоке при температурах 20 и 60 °С. Повышение температуры сорбции привело к увеличению адсорбционной ёмкости и к увеличению степени очистки. Для увеличения сорбционной активности природной опоки проведено химическое модифицирование путём обработки её поверхности различными веществами-модификаторами.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-34-4-116 *Подраздел:* Токсикологическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 340.67:543.51/.544.43:615.074. Поступила в редакцию 3 марта 2013 г.

Идентификация маркеров каннабимиметиков PB-22 и PB-22F в моче методом ГХ-МС

© Катаев[1+] Сергей Сергеевич, **Зеленина[1] Надежда Борисовна**
и **Дворская[2]* Оксана Николаевна**

[1] *Судебно-химическое отделение. ГКУЗОТ «Пермское краевое бюро судебно-медицинской экспертизы». Ул. Старцева, 61. г. Пермь, 614077. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 210-67-83. E-mail: forenschemist@narod.ru*

[2] *Кафедра токсикологической химии. ГБОУ ВПО Пермская государственная фармацевтическая академия Министерства здравоохранения Российской Федерации. Ул. Полевая, 2. г. Пермь, 614990. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 282-58-64. E-mail: kaftox@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *каннабимиметики, метаболизм, ферментативный гидролиз, твердофазная экстракция, газовая хроматография – масс-спектрометрия.*

Аннотация

Описаны маркеры, позволяющие установить факт употребления каннабимиметиков PB-22 и PB-22F в процедуре скрининга мочи с применением методов твердофазной экстракции и газовой хроматографии с масс-спектрометрией. Выполнена идентификация 1-пентил-1*H*-индол-3-карбоновой и 1-(5-фторпентил)-1*H*-индол-3-карбоновой кислот в моче потребителей курительных смесей, содержащих каннабимиметики PB-22 и PB-22F. Установлено, что метаболизм PB-22 и PB-22F проходит через разрыв сложноэфирной связи, основные метаболиты PB-22 и PB-22F выводятся с мочой в конъюгированном виде. Получены газохроматографические и масс-спектрометрические характеристики некоторых производных 1-пентил-1*H*-индол-3-карбоновой и 1-(5-фторпентил)-1*H*-индол-3-карбоновой кислот, которые могут быть полезны в практике судебно-химического и химико-токсикологического анализа.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Токсикологическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-123
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 3 апреля 2013 г. УДК 615.214.32: 615.9:543.544.5.

Обнаружение тианептина и морфина в биологической жидкости хроматографическими методами при совместном присутствии

© Люст Елена Николаевна
Кафедра токсикологической химии. Пермская государственная фармацевтическая академия. г. Пермь, 614070. а/я 2600. Россия. Тел.: (342) 282-58-65. E-mail: elenalyust@mail.ru

***Ключевые слова**: антидепрессанты, тианептин, химико-токсикологическое исследование, тонкослойная хроматография, высокоэффективная жидкостная хроматография, хромато-масс-спектрометрия.*

Аннотация

Статья посвящена проблеме злоупотребления антидепрессантом тианептином («Коаксил®», «Stablon®»). В наркологической практике встречались случаи комбинированного употребления тианептина с опиатами, что обуславливает необходимость разработки методик их обнаружения при совместном присутствии в биоматериале. Исследование включает поиск условий пробоподготовки биологического объекта (мочи) и разработке методик совместного определения тианептина с опиатами хроматографическими методами.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Биохимия клеточных культур. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-129
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 21 марта 2013 г. УДК 577.123.:612.014.43.

Влияние салициловой кислоты на обмен внутриклеточного белка в культуре ткани *Polyscias filicifolia*

© Кириллова* Надежда Васильевна, Белых[+] Юрий Вячеславович и Спасенкова Ольга Михайловна

Кафедра биохимии. Санкт-Петербургская государственная химико-фармацевтическая академия. Ул. проф. Попова, 14. г. Санкт-Петербург, 1977376. Россия.
Тел.: (812) 234-90-33. Факс: 234-60-44. E-mail: kirillovanv47@mail, yuriybelykh@pochta.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *кругооборот внутриклеточного белка, культура тканей лекарственных растений.*

Аннотация

Изучали влияние салициловой кислоты на состояние общего белка в культивируемых клетках штамма *Polyscias filicifolia*. Установлено, что внесение в среду культивирования различных концентраций салициловой кислоты оказывало дозозависимый эффект на содержание внутриклеточного белка. Достоверное увеличение содержания общего белка в клетках наблюдали при действии салициловой кислоты в дозах 0.05 и 0.1 мкмоль/100 г сырой биомассы. Более высокие дозы салициловой кислоты (0.17 мкмоль/100 г сырой биомассы) приводили к снижению содержания внутриклеточного белка. Добавление салициловой кислоты (0.1 мкмоль/100 г сырой ткани) в среду культивирования клеток *Polyscias filicifolia* вызывала индукцию биосинтеза внутриклеточного белка в клетках каллуса на фоне снижения распада и увеличения времени его функционирования.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Химия хитин-клюкановых комплексов. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-135
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 22 марта 2013 г. УДК 541.64.

Изменение структуры хитин-глюкановых комплексов грибов в результате сорбции ионов меди(II)

© Смотрина[+] Татьяна Валерьевна и **Киселева* Лариса Александровна**
Кафедра физики. Поволжский государственный технологический университет. Пл. Ленина, 3. г. Йошкар-Ола, 424000. Республика Марий Эл. Россия. Тел.: (8362) 68-68-04. E-mail: tatyana-smotrina@yandex.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *хитин-глюкановый комплекс, структура, сорбция, рентгеноструктурный анализ.*

Аннотация

Методом рентгеноструктурного анализа изучены структурные особенности хитин-глюкановых комплексов (ХГК) грибов *Aspergillus niger* и *Pleurotus Ostreatus*, выращенных на различных средах и отличающихся условиями выделения ХГК. Показано влияние общей степени кристалличности (СК) и СК хитиновой компоненты ХГК на его сорбционную способность по отношению к ионам меди. Рассмотрено влияние сорбированных ионов меди на упорядоченность хитиновой компоненты ХГК.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 577.112.083+577.152.321. Поступила в редакцию 5 апреля 2013 г.

Тематическое направление: Физико-химические методы активации пектинолитических ферментов. Часть 3.

Применение кальций-содержащих агентов для коагуляционной и адсорбционной очистки полигалактуроназ

© Донцов Андрей Геннадиевич

*Лаборатория биохимии и биотехнологии. Институт биологии Коми научного центра УрО РАН.
Ул. Коммунистическая, 28. г. Сыктывкар, 167982. Республика Коми. Россия.
Тел.: (8212) 43-68-28. E-mail: dontsov@ib.komisc.ru*

Ключевые слова: *полигалактуроназы, активация, брушит, гидроксиапатит, коагуляция, адсорбция.*

Аннотация

Исследована возможность применения кальций-содержащих агентов для очистки и активации полигалактуроназ. Применение брушита ($CaHPO_4$) наиболее эффективно при необходимости осветления ферментных растворов перед их концентрированием, тогда как гидроксиапатит ($Ca_5(PO_4)_3OH$) может применяться для быстрого выделения полигалактуроназ из раствора или их фракционирования. Показано, что использование брушита и гидроксиапатита позволяет провести активацию полигалактуроназ в процессе их коагуляционной и адсорбционной очистки, а также увеличить выход ферментативной активности.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Химия в сельском хозяйстве.
Регистрационный код публикации: 13-34-4-144 *Подраздел:* Биохимия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
УДК 633.2/.3:631.67 (252.37). Поступила в редакцию 26 июля 2012 г.

Продуктивность и качество *Amaranthus Paniculatus* в смешанных посевах при орошении в условиях Калмыкии

© Дедова[1] Эльвира Батыревна, Белопухов[2]*+ Сергей Леонидович
и **Даваев[3] Александр Владимирович**

[1] *Калмыцкий филиал ГНУ ВНИИГиМ Россельхозакадемии. Ул. Городовикова, д.1. г. Элиста. Республика Калмыкия. Россия. E-mail: kf_vniigim@mail.ru*

[2] *Российский государственный аграрный университет – МСХА им. К.А. Тимирязева. Ул. Тимирязевская, 49, г. Москва, 127550. Россия. Тел.: (499) 976-32-16. E-mail: belopuhov@mail.ru*

[3] *Калмыцкий НИИСХ Россельхозакадемии. Пр-т Городовикова, д.5. г. Элиста. Республика Калмыкия. Россия. 358011. Тел.: (847 22) 3-65-29, 3-65-58. E-mail: davaev.a.v@mail.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *амарант, кормовые культуры, смешанные посевы, аридная зона, орошение, зеленая масса, тяжелые металлы.*

Аннотация

В статье представлены данные об эффективности возделывания культуры амаранта в смешанных посевах однолетних трав на орошении в условиях аридного климата Республики Калмыкия. Исследованиями выявлены наиболее продуктивные посевы, способные формировать по два укоса и характеризующиеся высокими показателями качества надземной массы. Изучен химический состав растительных образцов методом ближней инфракрасной спектроскопии и атомно-абсорбционным анализом. Установлено, что выращивание сельскохозяйственных культур на фоне повышенных доз минеральных удобрений приводит к увеличению содержания макро- и микроэлементов в продукции.

Тематический раздел: Химия в сельском хозяйстве. **Краткое сообщение**
Подраздел: Биохимия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-149
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 1 апреля 2013 г. УДК 543.51; 547.913.

Тематическое направление: Влияние биологически активных соединений на состав, строение и содержание основных продуктов биосинтеза растений. Часть 1.

Влияние обработки растений гербицидами на характер биосинтеза эфирного масла *Mentha piperita* L. сорта Янтарная

© **Сушкова**[1] **Людмила Олеговна**, **Дмитриева**[1] **Валерия Львовна**,
Дмитриев[1]*[+] **Лев Борисович** и **Белопухов**[2]*[+] **Сергей Леонидович**
[1] *Российский государственный аграрный университет – МСХА им. К.А. Тимирязева. Ул. Тимирязевская, 49. г. Москва, 127550. Россия. E-mail: dmitrievlev@timacad.ru*
[2] *Кафедра физической и органической химии. Российский государственный аграрный университет - МСХА им. К.А. Тимирязева. Ул. Тимирязевская, 49. г. Москва, 127550. Россия. Тел.: (499) 976-32-16. E-mail: belopuhov@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *эфирное масло, мята, ГЖХ-МС, гербициды, регуляторы роста.*

Аннотация

В вегетационном опыте изучено влияние различных концентраций гербицида, являющегося объектом патентного оформления – ингибитора фитоиндесатуразы (группа HRAC:F1), на содержание и состав эфирного масла *Mentha piperitha* L. сорта Янтарная. Было выявлено, что при обработки препаратом в зависимости от его концентрации имеют место существенные изменения в соотношении основных компонентов ЭМ. Действие препарата не связано непосредственно с блокировкой работы фитоиндесатуразы.

Состав масла определялся в учебно-научном центре коллективного пользования – сервисной лаборатории комплексного анализа химических соединений РГАУ-МСХА имени Тимирязева с использованием аппаратно-программного комплекса ГЖХ-МС *Clarus 600 C*.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Химия в сельском хозяйстве.
Регистрационный код публикации: 13-34-4-152 *Подраздел:* Биохимия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
УДК 631.811.98. Поступила в редакцию 16 апреля 2013 г.

Термодинамика и кинетика процессов прорастания семян белого люпина

© Гришина[1] Екатерина Анатольевна, Белопухов[1+] Сергей Леонидович и Цыгуткин[2] Александр Семенович

[1] *Кафедра физической и органической химии;* [2] *Лаборатория белого люпина. Российский государственный аграрный университет – МСХА им. К.А. Тимирязева. Ул. Тимирязевская, 49. г. Москва, 127550. Россия. Тел.: (499) 976-32-16. E-mail: belopuhov@mail.ru, asz.ru@mail.ru*

Ключевые слова: *люпин, льняная костра, гуминовые кислоты, энтальпия, энтропия.*

Аннотация

Проведено исследование динамики роста и развития семян белого люпина на начальных этапах проращивания в условиях предварительной обработки семян физиологически активными веществами. Обработку семян проводили экстрактами из гумифицированной льняной костры, которые содержали гуминовые и фульвокислоты 1-2%. Проращивание проводили при температурах 12 и 22 ^{o}C. Установлено, что динамика развития проростков при температуре 12 ^{o}C при использовании экстрактов не уступает развитию проростков при температуре 22 ^{o}C без обработки. Кинетика роста и развития проростков охарактеризована эффективными константами скорости роста и термодинамическими величинами.

Тематический раздел: Агрохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Биохимия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-4-157
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
Поступила в редакцию 23 апреля 2013 г. УДК 631.:631.582:631.445.24.

Исследование волокна льна-долгунца, выращенного с применением экстрактов из гумифицированной льняной костры

© Гришина Екатерина Анатольевна и **Белопухов*[+] Сергей Леонидович**
Кафедра физической и органической химии. Российский государственный аграрный университет - МСХА им. К.А. Тимирязева. Ул. Тимирязевская, 49. г. Москва, 127550. Россия.
Тел.: (499) 976-32-16. E-mail: belopuhov@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

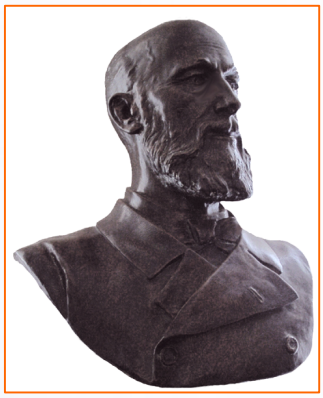
Ключевые слова*: термогравиметрический анализ, энергия активации, волокно льна-долгунца, ИК-спектроскопия.*

Аннотация

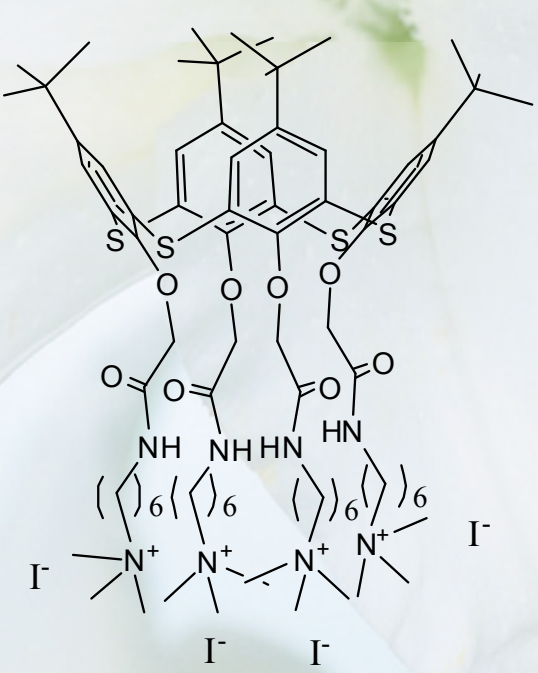
Проведено исследование льняного волокна методами инфракрасной спектроскопии, термогравиметрии и дифференциально-термического анализа, определено содержание α-целлюлозы, тяжелых металлов. Образцы волокна льна-долгунца получены в полевом опыте с применением физиологически активных веществ, извлеченных методом экстракции из гумифицированной льняной костры, для обработки посевов в период вегетации.

Butlerov Communications

No.5, Vol.34. 2013



ISSN 2074-0948



ISSN 2074-0212

National Edition in Russian:

Бутлеровские сообщения

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Супрамолекулярная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-5-1
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 17 апреля 2013 г. УДК 547.241:547.471.

Синтез новых водорастворимых производных *п-трет*-бутилтиакаликс[4]арена, содержащих четвертичные аммонийные фрагменты

© Падня[1] Павел Леонидович, **Андрейко[1] Елена Анатольевна**, **Харисова[1] Алиса Завдатовна**, **Зуев[2] Юрий Федорович** и **Стойков[1,2]*+ Иван Иванович**

[1] *Кафедра органической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 233-74-62. E-mail: ivan.stoikov@mail.ru*

[2] *Казанский институт биохимии и биофизики КНЦ РАН. Ул. Лобачевского, 2/31. г. Казань, 420111. Республика Татарстан. Россия.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *динамическое светорассеяние, тиакаликс[4]арены, синтез, синтетические рецепторы, молекулярное распознавание, супрамолекулярная химия.*

Аннотация

Синтезированы тетразамещенные по нижнему ободу *п-трет*-бутилтиакаликс[4]арены, содержащие первичные аминогруппы, четвертичные аммонийные и циклические амидные фрагменты. Установлено, что образование циклических амидных фрагментов в тиакаликс[4]аренах протекает в случае алифатических диаминов с этилиденовым мостиковым фрагментом.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-5-11
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 15 апреля 2013 г. УДК 547.781+547.568.5+547.455.

Синтез производных дибазола

© **Мещерякова Наталья Валерьевна**, **Бобровский Сергей Игоревич**, **Белоусова*[+] Зоя Петровна**, **Зарубин Юрий Павлович** и **Пурыгин Петр Петрович**
Кафедра органической, биоорганической и медицинской химии. Самарский государственный университет. Ул. Акад. Павлова, 1. г. Самара, 443011. Самарская область. Россия.
Тел.: (846) 334-54-59. E-mail: zbelousova@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *дибазол, 4-(2-бензил-1Н-бензимидазол-1-илметил)фенол, 2-(2-бензил-1Н-бензимидазол-1-илметил)фенол, 4-(2-бензил-1Н-бензимидазол-1-илметил)фенил-2,3,4,6-тетра-О-ацетил-β-D-глюкопиранозид.*

Аннотация

Осуществлен синтез производных дибазола: 2-(2-бензил-1*H*-бензимидазол-1-илметил)фенола, 4-(2-бензил-1*H*-бензимидазол-1-илметил)фенола, 4-(2-бензил-1*H*-бензимидазол-1-илметил)фенил-2,3,4,6-тетра-*O*-ацетил-β-*D*-глюкопиранозида. Структура полученных соединений подтверждена методами ИК и ЯМР ^{1}H спектроскопии. С использованием программы *HyperChem 7.52* построены модели молекул синтезированных производных бензимидазола и рассчитаны их физико-химические характеристики. По оценке предполагаемой биологической активности в программе *PASS Professional 2007* синтезированные соединения могут обладать полезными в фармакологии видами биологического действия.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-34-5-16 *Подраздел:* Коллоидная химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.182644.001.5. Поступила в редакцию 24 апреля 2013 г.

Задача о каустиках стохастических потоковых кластеров оксигидратных систем

© Марков Борис Анатольевич, **Сухарев Юрий Иванович**
и **Апаликова Инна Юрьевна**

Кафедра химии твердого тела и нанопроцессов. Челябинский государственный университет.
Ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454000. Россия.
Тел.: (963) 460-27-75. E-mail: Yuri_Sucharev@mail.ru.

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *лагранжевы отображения, каустики, оксигидратные гелевые системы, оксигидратный шум, коллоидные кластеры, самопроизвольный пульсационный ток, спайковый выплеск, диффузный двойной электрический слой.*

Аннотация

Известно, что уравнение движения частиц в геле подчиняется вязким уравнениям гидродинамики. Соответственно, можно записать систему уравнений движения кластеров в геле, близкое по виду системе уравнений динамики плазмы. Каустикой называется множество вырожденных критических точек некоторой функции, описывающей явление. Поэтому, построив достаточно простое линейное решение уравнения динамики, можно найти эти критические точки.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-34-5-22 *Подраздел:* Физико-химия высоких температур.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 536.468. Поступила в редакцию 1 марта 2013 г.

Математическое моделирование зажигания гелеобразного конденсированного вещества одиночными разогретыми металлическими и неметаллическими частицами

© Глушков[+] Дмитрий Олегович, Жданова Алена Олеговна
и Стрижак Павел Александрович*
Национальный исследовательский Томский политехнический университет. пр. Ленина, 30.
г. Томск, 634050. Россия. Тел.: (3822) 70-17-77, доп. 1910. E-mail: dmitriyog@tpu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *зажигание, плавление, испарение, кристаллизация, окисление, гелеобразное конденсированное вещество, нагретая частица, моделирование.*

Аннотация

Выполнено математическое моделирование основных физико-химических процессов и фазовых переходов при зажигании гелеобразного конденсированного вещества (топлива) в условиях локального нагрева. Рассмотрены условия взаимодействия приповерхностного слоя топлива с разогретыми до высоких температур металлическими (сталь, алюминий) и неметаллическими (керамика, углерод) частицами различной физической природы. Определены значения основной интегральной характеристики процесса – времени задержки зажигания. Установлены зависимости времени задержки зажигания топлива от температуры частицы. Проведено сопоставление условий зажигания гелеобразных конденсированных веществ при локальном нагреве с твердыми и жидкими горючими веществами.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-34-5-34 *Подраздел:* Физико-химия взрывчатых веществ.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 662.311. Поступила в редакцию19 апреля 2013 г.

Анализ возможности прогнозирования реологических характеристик наполненных лаковых композиций на основе нитратов целлюлозы

© Селиванова Лилия Исхаковна, **Енейкина* Татьяна Александровна**,
Гайнутдинова[+] Наталья Сергеевна, **Павлов Анатолий Петрович**,
Ибнеева Диляра Рустемовна, **Хацринов Алексей Ильич**,
Гатина Роза Фатыховна и **Михайлов Юрий Михайлович**
Федеральное казенное предприятие "Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов". Ул. Светлая, 1. г. Казань, 420033. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 544-07-21, 544-09-82. E-mail: 173gniihp@gmail.com

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *нитратцеллюлозный лак, наполнитель, объёмная доля, эффективная вязкость, относительная вязкость.*

Аннотация

Представлена зависимость эффективной вязкости наполненных 2%-ных растворов нитратов целлюлозы от концентрации октогена, имеющая экстремальный характер с ярко выраженными минимумами при концентрации наполнителя ~15 и ~50 % масс. Установлено, что в связи с многофакторностью характера реологических свойств гетерогенных лаковых нитратцеллюлозных композиций, ни одна из известных математических зависимостей не может быть применена для прогнозирования реологического поведения систем при формировании сферических порохов.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-5-41
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 10 апреля 2013 г. УДК 678.012.

Исследование физико-химических свойств азидосодержащих олигомеров и полиуретанов на их основе

© Альмашев* Ринат Олегович, **Орехова Анастасия Олеговна**, **Романько Надежда Андреевна**, **Кипрова[+] Анна Викторовна**, **Нуруллина Елена Валентиновна**, **Таразова Эльвира Наилевна**, **Гатина Роза Фатыховна** и **Михайлов Юрий Михайлович**

Федеральное казённое предприятие «Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов». Ул. Светлая, 1. г. Казань, 420033. Республика Татарстан, Россия. E-mail: anekolab@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *ИК-спектроскопия, азидосодержащие олигомеры.*

Аннотация

Показано, что с помощью метода ИК-спектроскопии можно экспрессно и с большой достоверностью установить проходит ли синтез согласно теоретическим предпосылкам, и образуются ли в результате азидосодержащие олигомеры с высоким содержанием N_3 групп. Показано, что азидосодержащие олигомеры легко идентифицируются по полосе погло-щения азидной группы, которая имеет частоту 2100±20 $см^{-1}$, хлорсодержащие олигомеры, отсутствием в ИК спектрах полос поглощения, характерных для азидных групп и наличие достаточно интенсивных полос поглощения в области 710-730 $см^{-1}$ (υ_{C-Cl}) и υ = 1240 $см^{-1}$ (ω_{CH2Cl}).

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-5-49
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 10 апреля 2013 г. УДК 541.6.

Гидрохимическое осаждение поливинилацетата из водной дисперсии

© Альмашев* Ринат Олегович, **Романько Надежда Андреевна**, **Енейкина Татьяна Александровна**, **Солдатов Сергей Васильевич**, **Кипрова[+] Анна Викторовна**, **Таразова Эльвира Наилевна**, **Гатина Роза Фатыховна** и **Михайлов Юрий Михайлович**

Федеральное казённое предприятие «Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов». Ул. Светлая, 1. г. Казань, 420033. Республика Татарстан, Россия. E-mail: anekolab@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *поливинилацетат, сульфат алюминия, межмолекулярное взаимодействие, ИК-спектроскопия, УФ-спектроскопия.*

Аннотация

Исследовано взаимодействие водных дисперсий поливинилацетата с сульфатом алюминия при различных соотношениях реагентов. Установлена оптимальная концентрация сульфата алюминия, обеспечивающая полное высаживание ПВА из водной дисперсии. Рассмотрен механизм образования ассоциатов типа $Al^{3+}\ldots{}^{-}O=C<$, которые количественно выпадают из дисперсии в виде осадка. Протекание комплексообразования подтверждено ИК и УФ спектрами водных растворов и осадков.

Тематический раздел: Химико-технологические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Кинетика и катализ. *Регистрационный код публикации:* 13-34-5-55
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 8 мая 2013 г. УДК 544-72.

Исследования кинетических параметров процесса очистки раствора от примесей кобальта и никеля металлическим цинком

© **Колесников*[+] Александр Васильевич** и **Бурмистров Владимир Александрович**
Кафедра аналитической и физической химии. Челябинский государственный университет. Ул. Братьев Кашириных, 129. г. Челябинск, 454001. Россия. E-mail: avkzinc-gu@yandex.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *очистка, восстановление, кобальт, никель, водород, активирующие добавки, медь, сурьма, кинетика, скорость, энергия активации, разряд катионов.*

Аннотация

Получены величины кинетических параметров очистки растворов от примесей кобальта, никеля и восстановления водорода металлическим цинком. Процесс очистки проходил в водных растворах без сульфата цинка и в его присутствии. В растворы дополнительно вводили активирующие добавки меди и сурьмы. Показано, что полученные кинетические кривые разряда катионов водорода характерны для топохимических реакций, и процессы протекают на поверхности раздела твердой и жидкой фазы. Экспериментальные данные позволяют объяснить причину ускоренного разряда катионов водорода в растворах, содержащих сульфат цинка, и повышенного расхода, при этом, металлического цинка (цинковой пыли) при промышленной очистке цинксульфатных растворов от примесей.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-34-5-60 *Подраздел:* Нанохимия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 66.011, 544.032. Поступила в редакцию 23 апреля 2013 г.

Особенности микронного диапазона размеров порошковых частиц

© Игнатьев* Игорь Эдуардович и **Сипатов[+] Иван Сергеевич**
Институт металлургии УрО РАН. Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург. Россия.
Тел.: (343) 232-90-42. E-mail: ivan.sipatov@gmail.com

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *агломерация порошков, конгломерация порошков, математическое моделирование, виброобработка.*

Аннотация

Представлены зависимости сопротивления деформации порошковой частицы, плотности порошковой прессовки, конгломерации частиц сухого порошка, спекания частиц порошка и их способности к измельчению под воздействием вибрации в среде расплава от размера самих частиц. На основе полученных зависимостей показывается, что граница свойств макро- и нано-объектов проходит в узком размерном диапазоне 1-15 мкм, и при измельчении объекта его размер в мате-матических моделях следует учитывать, начиная именно с этого диапазона.

Тематический раздел: Химическая кибернетика **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-5-67
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 24 апреля 2013 г. УДК 004.0+541.515+541.571.

Программа с элементами искусственного интеллекта для оценки энтальпии образования радикалов по кинетическим данным

© Туманов* Владимир Евгеньевич, **Прохоров**[+] **Андрей Иванович**
и **Соловьева Маина Ефимовна**
Институт проблем химической физики РАН. г. Черноголовка, 142432.
Московская обл. Россия. Факс: (496) 522-35-07. E-mail: tve@icp.ac.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *интеллектуальный программный агент, энтальпия образования радикала, энтальпия образования молекулы, модель пересекающихся парабол, энергия диссоциации связи, энергия стабилизации радикала.*

Аннотация

Разработан интеллектуальный программный агент, реализующий алгоритм оценки энтальпии образования свободных радикалов по кинетическим данным на основе гибридной базы знаний. Описана логическая структура базы знаний и алгоритм работы интеллектуального агента. Приведены результаты вычислительного эксперимента по предсказанию значений энтальпий образования свободных радикалов, производных от ацеталей. Проведено сравнение значений вычисленных энтальпий образования радикалов производных от ацеталей, нитрилов и нитросоединений с литературными данными. Сравнение показывает хорошее согласие с данными литературных источников. Построены линейные корреляции между энтальпией образования свободных радикалов, производных от ряда замещенных ацеталей. Вычислена энергия стабилизации замещенных фенильных радикалов. Показано, что сопряженная система π-электронов рядом с радикальным центром дестабилизирует радикал, как для электронодонорных, так и для электроноакцепторных заместителей.

Тематический раздел: Термодинамические исследования. **Дискуссионная рубрика**
Подраздел: Фазовые равновесия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-5-75
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 22 апреля 2013 г. УДК 536.71, 536.22, 536.23.

Связь параметров критической точки фазового перехода газ-жидкость с температурой Бойля

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович
Лаборатория моделирования. Институт теплофизики СО РАН. Пр-т Лаврентьева, 1. г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org

Ключевые слова*: критическая температура, критический объем, критическое давление, температура Бойля, уравнение состояния Ван-дер-Ваальса, фазовый переход жидкость-газ.*

Аннотация

Показано, что для 21 реального вещества отношение температуры Бойля к произведению критической температуры и критического фактора сжимаемости с высокой точностью равно числу 9, предсказываемому уравнением состояния Ван-дер-Ваальса. Предложено соотношение для нахождения критического объема через отношение температуры Бойля к критическому давлению. Предложена также формула для определения критического объема через критическую температуру и параметры прямой линии единичной сжимаемости.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Методологические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-34-5-80 *Подраздел:* Аналитическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 543.054.2, 543.51. Поступила в редакцию 15 апреля 2013 г.

Исследование метрологических характеристик количественного многоэлементного анализа неорганических наноматериалов методом масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой при электротермическом испарении

© Гильмутдинов[1] Альберт Харисович, Волошин[2+] Александр Викторович и Нагулин[2]* Константин Юрьевич

[1] *Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева – КАИ. Ул. К. Маркса, 10. г. Казань, 420111. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-01-06.*
[2] *Институт физики. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 233-7220.*
E-mail: alexandr.voloshin@kpfu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *метрологические характеристики, масс-спектрометрия, электротермический испаритель, метод добавок.*

Аннотация

На примере гидроксиапатита с известным содержанием марганца исследованы метрологические характеристики метода масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой при вводе анализируемого вещества путем его электротермического испарения. Показано, что прямое испарение твердых веществ обеспечивает улучшение метрологических характеристик по сравнению с традиционным методом пробоподготовки по методу «мокрой химии».

Тематический раздел: Исследование новых материалов. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Химия полимеров. *Регистрационный код публикации:* 13-34-5-85
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 17 апреля 2013 г. УДК 541.64:678.

Исследование надмолекулярной организации металлкоординированных полиуретанов

© **Давлетбаева**[1]*+ **Ильсия Муллаяновна**, **Давлетбаев**[2] **Руслан Сагитович**, **Гумерова**[1] **Олеся Рустамовна**, **Зарипов**[1] **Ильназ Ильдарович** и **Парфенов**[3] **Виктор Всеволодович**

[1] *Кафедра технологии синтетического каучука. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-95-88. E-mail: davletbaeva09@mail.ru*

[2] *Кафедра материаловедения, сварки и структурообразующих технологий. Казанский национальный исследовательский технический университет. Ул. К. Маркса, 10. г. Казань, 420111. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 238-44-10 E-mail: Darus@rambler.ru*

[3] *Кафедра физики твердого тела. Казанский (приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 233-71-48. E-mail: Viktor.Parfenov@ksu.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *металлокомплексное структурирование, полиуретаны, объемные координационные соединения меди, стопочные структуры, термомеханический анализ, диэлектрические потери, надмолекулярная организация.*

Аннотация

Разработаны объемные координационные соединения меди, проявляющие каталитическую активность в реакциях низкотемпературной диссоциации уретановых групп и способность к взаимодействию с изоцианатными группами с последующим формированием азоароматических производных. Формирование стопочных упорядоченных структур благодаря образованию азогрупп и последующему их координационному связыванию является условием реализации переноса носителей заряда сквозь стопки, что приводит к возможности скачкообразного падения удельного объемного электрического сопротивления полиуретанов. Установлено, что в матрице полимера происходит формирование жестких блоков координационно-связанных азогрупп, оказывающих значительное влияние как на надмолекулярную организацию полиуретанов, так и на комплекс их физико-механических свойств.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Биохимия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-5-91
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 11 апреля 2013 г. УДК 541.49.183:546.562.'723:547.854.5.

Изучение взаимодействия белков с биологически активными азотсодержащими гетероциклическими соединениями при различных значениях pH

© Чухно[+] Александр Сергеевич, **Дмитриева* Ирина Борисовна**, **Банкина Анастасия Николаевна** и **Бриллиантова Елизавета Юрьевна**
Кафедра физической и коллоидной химии. Санкт-Петербургская государственная химико-фармацевтическая академия. Ул. Профессора Попова, 14. г. Санкт-Петербург, 197376. Россия. Тел.: (812) 234-11-38. E-mail: alex-chuhno@yandex.ru, amylee2208@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *азотсодержащие гетероциклические соединения, сорбция, изоэлектрическая точка.*

Аннотация

В работе для исследования был выбран ряд азотсодержащих гетероциклических соединений. В качестве белков были использованы сывороточный альбумин, казеин, желатина. Исследования проводили в водных дисперсиях.

В присутствии гетероциклических соединений наблюдалось смещение значений изоэлектрической точки (ИЭТ), что говорит об их специфической сорбции на белках. При этом катионная форма азотсодержащего гетероциклических соединений смещает ИЭТ в основную область, а анионная – в кислую область. В некоторых случаях имело место появление двух ИЭТ, одной более кислой, другой более щелочной. По величине изменения значения ИЭТ оценивалась способность конкретного азотсодержащего гетероциклического соединения к взаимодействию с белками. Появление комплекса отражалось на спектрах.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Исследование новых материалов.
Регистрационный код публикации: 13-34-5-100 *Подраздел:* Биохимия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 661.683.2:667:613.5. Поступила в редакцию 16 апреля 2013 г.

Бактерицидное действие экспериментального композиционного материала защитно-декоративного назначения

© Богданов Всеволод Николаевич, **Буханов Владимир Дмитриевич**, **Везенцев* Александр Иванович** и **Воронцова[+] Ольга Александровна**
Кафедра общей химии. Белгородский государственный национальный исследовательский университет. НИУ БелГУ. Ул. Победы, 85. г. Белгород, 308015. Россия. Тел.: (4722) 30-11-50. E-mail: vorontsova@bsu.edu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *бактерицидное действие, Escherichia coli, Staphylococcus aureus, нанодисперсный гидросиликат калия, защитно-декоративное покрытие.*

Аннотация

Определена чувствительность *Escherichia coli* и *Staphylococcus aureus* к композиции защитно-декоративного покрытия и ее отдельным компонентам. Увеличение доли гидросиликата калия приводит к увеличению бактериостатических свойств. Рекомендуемое соотношение пленкообразователей для бактерицидных покрытий: 75-90 % масс. гидросиликата калия, 10-25 % масс. и 0.5-1.0 % масс. пиритиона цинка.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-34-5-106 *Подраздел:* Физико-химия взрывчатых веществ.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 629.7. Поступила в редакцию 29 апреля 2013 г.

Механическая активация сокристаллизации некоторых нитросоединений

© **Попок*[+] Владимир Николаевич**, **Бычин Николай Валерьевич**,
Попок Николай Иванович и **Шеин Николай Васильевич**
Открытое акционерное общество «Федеральный научно-производственный центр «Алтай».
Ул. Социалистическая, 1. г. Бийск, 659322. Алтайский край. Россия.
Тел.: (3854) 30-19-37. E-mail: vnpopok@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *сокристаллизат, механическая активация, раствор, расплав, термические методы анализа, ИК-спектроскопия.*

Аннотация

В статье представлены результаты исследований физико-химических свойств сокристаллизатов, полученных механической активацией, в сравнении с данными для сокристаллизатов, полученных из растворов и расплавов. Рассмотрена широкая номенклатура нитросоединений – тринитротолуол, тринитробензол, октоген, гексанитрогексаазаизовюрцитан, *N,N*-диметилметилендинитрамин. Показана высокая эффективность механической активации, как метода получения сокристаллизатов, в сравнении с методами получения из раствора и расплава.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-34-5-124 *Подраздел:* Физическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.49.183:546.562.'723:547.854.5. Поступила в редакцию 30 апреля 2013 г.

Сорбция ионов H^+ и OH^- на хлорофилле, влияние pH на устойчивость водных дисперсий хлорофилла

© Чухно Александр Сергеевич, **Дмитриева* Ирина Борисовна**,
Силаева$^+$ Дарья Сергеевна, **Сенина Анна Сергеевна**,
Кошевенко Анастасия Сергеевна и **Назипова Альбина Ринатовна**
Кафедра физической и коллоидной химии. Санкт-Петербургская государственная химико-фармацевтическая академия. Ул. Профессора Попова, 14. г. Санкт-Петербург, 197376. Россия.
Тел.: (812) 234-11-38. E-mail: dasha.com.92@mail.ru , alex-chuhno@yandex.ru

*Ведущий направление; $^+$Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *хлорофилл, точка нулевого заряда, изоэлектрическая точка.*

Аннотация

Проведены исследования влияния однозарядных электролитов (KC1, HC1) на сорбцию ионов H+ и OH- на хлорофилле, в зависимости от состава водной фазы (концентрации KC1 и pH). Исследования сорбции ионов проводились методом непрерывного потенциометрического титрования. Все исследования проводились после очистки раствора от углекислого газа.

Установлено, что точка нулевого заряда хлорофилла в растворах KC1 изменяется в диапазоне pH от 4.0 до 3.0. Определена изоэлектрическая точка хлорофилла спектрофотометрическим и вискозиметрическим методом. Показано, что $pH_{иэт}$ и $pH_{тнз}$ совпадают. Доказано, что изменение pH влияет на величину порога коагуляции.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Супрамолекулярная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-5-131
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 29 апреля 2013 г. УДК 547.6.

Эффективный синтез пиллар[5]аренов и пиллар[6]аренов в качестве новых синтетических рецепторов ацетилхолина

© Зырянов[1,2]* Григорий Васильевич, Майер[2] Алиса Анатольевна, Ельцов[2] Олег Станиславович, Копчук[1,2+] Дмитрий Сергеевич, Ковалев[2] Игорь Сергеевич, Никонов[2] Игорь Леонидович, Хасанов[2] Альберт Фаридович, Рудкевич[3] Дмитрий, Русинов[1,2] Владимир Леонидович и Чупахин[1,2] Олег Николаевич

[1] *Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН. Ул. Ковалевской, 22. Ул. Академическая, 20. г. Екатеринбург, 620990. Россия. Тел./факс: (343) 369-30-58. E-mail: dkopchuk@mail.ru*

[2] *Уральский федеральный университет. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Россия. Тел./факс: (343) 375-45-01.*

[3] *Техасский Университет в Арлингтоне. Ул. С. Неддерман., 701. г. Арлингтон, Техас, 76013. США. Тел./факс: (817) 272-2011*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *синтетические рецепторы, пилларарены, ацетилхолин, инкапсулирование.*

Аннотация

Разработан эффективный синтез пиллар[5]- и пиллар[6]аренов с алкильными заместителями разнообразной длины из коммерчески доступных реагентов (1,4-диалкоксибензола и параформа или 1,3,5-триоксана в присутствии кислот Льюиса). Продукты циклоолигомеризации выделены с высокими выходами и с большой степенью олигоселективности. В присутствии ацетилхолина 1,4-бис(додецилокси)пиллар[5]арен образует комплекс включения в соотношении 1:1, что наблюдается методом ЯМР ^{1}H.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Теоретическое моделирование.
Регистрационный код публикации: 13-34-5-136 *Подраздел:* Физико-химия высоких температур.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 533.6. Поступила в редакцию 31 июля 2013 г.

Упрощенная математическая модель оценки тепловых режимов воздействия очага возгорания на слой почвы после стадии зажигания лесного горючего материала

© **Барановский**[1]*+ **Николай Викторович** и **Тойчуев**[2] **Рахманбек Маматкадырович**
[1] *Кафедра теоретической и промышленной теплотехники. Национальный исследовательский Томский политехнический университет. Пр. Ленина, 30. г. Томск, 634050. Россия. Тел.: (3822) 56-36-13. E-mail: firedanger@narod.ru*
[2] *Институт медицинских проблем Южного отделения Национальной академии наук Кыргызской Республики. Ул. Узгенская, 130-А. г. Ош. Кыргызская Республика.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

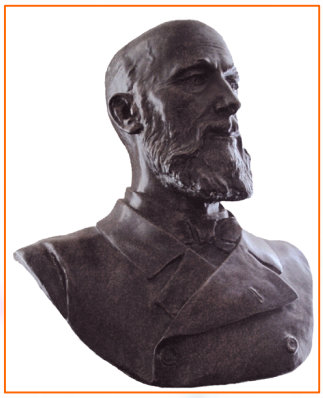
Ключевые слова: *лесной пожар, тепловой режим, почва, лесной горючий материал, зажигание, воздействие повышенных температур.*

Аннотация

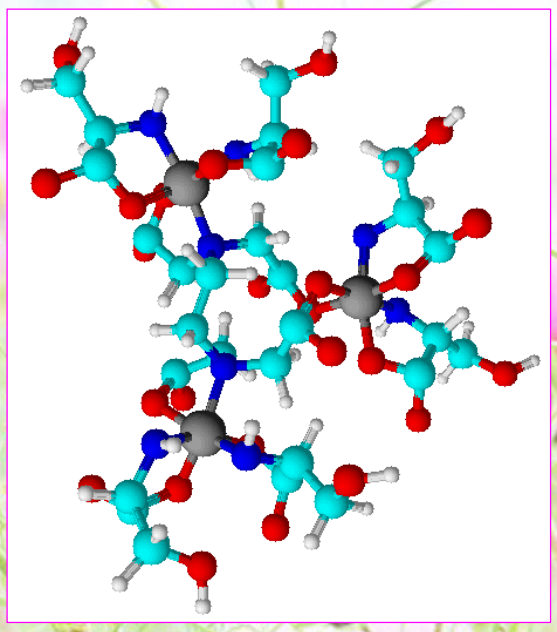
В статье рассматривается упрощенная модель воспламенения слоя лесного горючего материала и представлена базовая математическая модель оценки влияния тепловых режимов лесного пожара на почвы. Модель представлена совокупностью уравнений теплопроводности с соответствующими начальными и граничными условиями. Проведен численный анализ влияния различных очагов лесного пожара на температурное распределение в верхних слоях почвы. Результаты могут быть применены для анализа пограничных режимов жизнедеятельности микроорганизмов в почве.

Butlerov Communications

No.6, Vol.34. 2013



ISSN 2074-0948



ISSN 2074-0212

National Edition in Russian:

Бутлеровские сообщения

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Нанохимия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-6-1
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 6 мая 2013 г. УДК 547.1'128.577.15.025.

Биохимическая активность композиционных составов наночастиц биофильных металлов и гиперразветвленных полиэфирополиолов

© Кутырева[1]*+ Марианна Петровна, Гатаулина[1] Альфия Ринатовна, Медведева[1] Ольга Игоревна, Стойков[2] Иван Иванович и Улахович[1] Николай Алексеевич

[1] *Кафедра неорганической химии;* [2] *Кафедра органической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.:* [1)] *(843) 233-71-65,* [2)] *233-74-62.*
E-mail: [1)] *Marianna.Kutyreva@kpfu.ru ;* [2)] *Ivan.Stoikov@kpfu.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *антимикотики, протеиназа Candida albicans, наночастицы металлов, гиперразветвленные полиэфирополиолы.*

Аннотация

Методом химического восстановления в среде стабилизатора синтезированы наночастицы кобальта и меди на платформе гиперразветвленной полиэфирополипропионовой кислоты третьей генерации $H30(CH_2CH_2COOH)_{22}$. Размер наночастиц, определенный методами рентгенофазового анализа и просвечивающей электронной микроскопии, составляет 10±4 нм для частиц металлической меди в $Cu/H30(CH_2CH_2COOH)_{22}$, 4±1 нм для металлического кобальта и 2-5 нм для его оксидов в $Co/H30(CH_2CH_2COOH)_{22}$. Оценена и сопоставлена антипротеиназная активность стабилизаторов – гиперразветвленного полиэфирополиола H30, $H30(CH_2CH_2COOH)_{22}$ и композиционных наночастиц меди и кобальта на их основе по отношению к секреторной аспарагиновой протеиназе *Candida albicans*.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Супрамолекулярная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-6-9
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 8 мая 2013 г. УДК 544-72.

Инкапсуляция макроциклическим рецептором летучих органических веществ из их бинарных смесей

© Зиганшин*[+] Марат Ахмедович, Синичкина Рада Ильдаровна и Горбачук* Валерий Виленович
Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский (Приволжский) федеральный университет.
Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 233-73-09. E-mail: Marat.Ziganshin@ksu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *каликсарен, полиморфизм, клатрат, молекулярное распознавание, энтальпия, термогравиметрия, дифференциальная сканирующая калориметрия, масс-спектрометрия.*

Аннотация

В настоящей работе с помощью совмещенного метода термогравиметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии с масс-спектрометрическим определением газообразных продуктов разложения изучены процессы клатратообразования *трет*-бутилкаликс[6]арена при насыщении его парами бинарных смесей органических соединений. Определены температурные интервалы стабильности и разложения полученных смешанных клатратов. Оценено содержание каждого органического компонента бинарной смеси в соединениях включения. Проанализировано взаимное влияние двух «гостей» на термические свойства полученных клатратов. Рассчитанные значения энтальпии процесса ухода «гостя» из клатрата сопоставлены с энтальпиями парообразования этих «гостей» при температурах их кипения.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Коллоидная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-6-15
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 16 июня 2013 г. УДК 541.182644.001.5.

Первичная, вторичная, третичная и четвертичная структурные организации гелевых оксигидратов

© Сухарев Юрий Иванович
Кафедра химии твердого тела и нанопроцессов. Челябинский государственный университет.
Ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454000. Россия.
Тел.: 89634602775. E-mail: Yuri_Sucharev@mail.ru.

Ключевые слова: *лагранжевы отображения, оксигидратные гелевые системы, коллоидные кластеры, самопроизвольный пульсационный поток, спайковый выплеск, диффузный двойной электрический слой, диссоциативно-диспропорциональное разрушение макромолекул, теория Уитни, геометрия каустик.*

Аннотация

Как нам сейчас представляется структурная организация гелевых оксигидратов весьма напоминает белковую. Еще К. Линдстрём-Ланг предложил выделять 4 уровня структурной организации белков: первичную, вторичную, третичную и четвертичную структуры. Хотя такое деление уже несколько устарело, но им продолжают пользоваться. Для белков естественна первичная структура, когда прослеживается последовательность аминокислотных остатков полипептида, что определяется структурой его гена и генетическим кодом. То есть первичная структура – это последовательность аминокислотных остатков в полипептидной цепи. Иное дело оксигидраты *d*- и *f*-элементов. Первичную структуру оксигидратов следует рассматривать как своеобразные критические точки некоторых комплексных гладких функций (по В.И. Арнольду). Физически эти особенности связаны с геометрией разрушения и связывания ДЭС макромолекул гелей оксигидратов и их старения.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия взрывчатых веществ. *Регистрационный код публикации:* 13-34-6-27
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 25 июня 2013 г. УДК 535.372:535.341:66.092-977.

Разложение монокристаллов ТЭНа, при термообработке до температуры плавления

© Алукер[1]* Надежда Леонидовна, **Денисов[2] Геннадий Степанович**, **Иванова[1+] Екатерина Вячеславовна**, **Кидибаев[2]* Мустафа Мусаевич** и **Пашпекин[1] Александр Сергеевич**

[1] *Кафедра физической химии. Кемеровский государственный университет. Ул. Красная, 6. г. Кемерово, 650043. Кемеровская область. Россия. Тел.: (3842) 58-81-17. E-mail: lira@kemsu.ru.*
[2] *Лаборатория кристаллофизики. Институт физико-технических проблем и материаловедения НАН Киргизии. Пр.Чуй, 265. г. Бишкек, 720071. Кыргызская Республика. Тел.: +996 (312) 65-76-98. E-mail: kidibaev@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *ТЭН, разложение, плавление, спектры поглощения, спектры флуоресценции.*

Аннотация

Измерены спектры поглощения монокристаллов тетранитрата пентаэритрита (ТЭНа) в широком спектральном диапазоне от 190 до 3300 нм, а также спектры люминесценции до и после отжига монокристаллов. Проведены измерения спектров поглощения в процессе нагрева образцов при определенных температурах, вплоть до температуры плавления. Измерены спектр поглощения расплава и люминесценции переплавленного ТЭНа. Это позволило высказать предположения о механизме медленного разложения ТЭНа при термообработке.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-34-6-38 *Подраздел:* Физико-химия взрывчатых веществ.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.124.16:541.126.2:541.128. Поступила в редакцию 25 июня 2013 г.

Лазерное инициирование ТЭНа при низких освещённостях

© Алукер[1+] Эдуард Давыдович, **Кречетов[1]* Александр Георгиевич**,
Кидибаев[2]* Мустафа Мусаевич и **Королёва[2]* Татьяна Станиславовна**
[1] *Кафедра физической химии. Кемеровский государственный университет. Ул. Красная, 6. г. Кемерово, 650043. Россия. Тел.: (384-2) 58-81-17. E-mail: lira@kemsu.ru*
[2] *Лаборатория кристаллофизики. Институт физико-технических проблем и материаловедения НАН Киргизии. Пр.Чуй, 265. г. Бишкек, 720071. Кыргызская Республика. Тел.: +996 (312) 65-76-98 E-mail: kidibaev@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *тетранитропентаэритрит, лазерное инициирование, взрыв, горячие точки.*

Аннотация

Предложен метод раздельного определения эффективности фотохимического и термохимического механизмов при лазерном инициировании энергетических материалов. В основе метода лежит различие в инерционности актуальных для инициирования фото- и термохимических процессов, приводящее к различной зависимости эффективности этих механизмов от длительности инициирующего импульса при резко различающихся мощностях инициирования. Проведена экспериментальная проверка метода для тетранитрата пентаэритрита (ТЭНа) при инициировании для освещённостей 10^9 Вт/см^2 с $\lambda = 1064$ нм и 10^4 Вт/см^2 с $\lambda = 1070$ нм. Полученные результаты позволяют сравнить эффективности фото и термохи-мического механизмов для случая чистого ТЭНа (фотохимический механизм) и ТЭНа с 0.1% сажи (термохимический механизм): порог инициирования для фотохимического механизма ~4 Дж/см^2, для термохимического ~14 Дж/см^2.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия взрывчатых веществ. *Регистрационный код публикации:* 13-34-6-43
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 20 июня 2013 г. УДК 662.311.

Временная оптимизация смешения октогена и нитратцеллюлозного лака при формировании композиционных материалов

© **Гайнутдинова[+] Наталья Сергеевна**, **Енейкина* Татьяна Александровна**, **Селиванова Лилия Исхаковна**, **Павлов Анатолий Петрович**, **Ибнеева Диляра Рустемовна**, **Гатина Роза Фатыховна**, **Хацринов Алексей Ильич** и **Михайлов Юрий Михайлович**
Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов. Ул. Светлая, 1. г. Казань, 420033. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 544-07-21, 544-09-82. E-mail: gniihp@bancorp.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *перемешивание, октоген, крутящий момент.*

Аннотация

Представлены результаты исследования процесса смешения октогена с 25%-ным нитратцеллюлозным лаком, полученным на основе этилацетата по двум технологиям: в двухроторном смесителе и в объемном аппарате с мешалкой. Равномерность распределения наполнителя (качество смешения) оценивалась по двум критериям: по достижению постоянной величины крутящего момента и минимального значения средне-арифметической погрешности измерения концентрации наполнителя в объеме лака. Сравнением величин крутящего момента на примере смешения октогена и углерода установлено влияние природы наполнителя на характер перемешивания. Рассмотрены возможные причины принципиального отличия характера перемешивания октогена (экстемальная зависимость) и углерода (симбатная зависимость) при постоянной концентрации полимерного лака.

Тематический раздел: Фихико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия жидких кристаллов. *Регистрационный код публикации:* 13-34-6-51
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 17июня 2013 г. УДК 544.252.2.

Динамика фазовых переходов в лиотропном жидком кристалле на основе *N*-додецил-*N*-(2-гидроксиэтил)-*N*,*N*-диметиламмоний бромида

© Ахмадияров[1] Айдар Анфисович, **Вандюков[2] Александр Евгеньевич**, **Сайфина[2] Алина Фуадовна**, **Лукашенко[3] Светлана Сергеевна**, **Захарова[3] Люция Ярулловна** и **Коваленко[1,2]*+ Валерий Игнатьевич**

[1] *Кафедра инженерной экологии. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 238-56-94. E-mail: koval@iopc.ru*

[2] *Отдел физико-химических исследований. Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН. Ул. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 273-93-65. E-mail: koval@iopc.ru*

[3] *Отдел супрамолекулярной химии. Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН. Ул. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 273-93-65.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова*: лиотропный жидкий кристалл, ламеллярная фаза, Фурье-спектроскопия комбинационного рассеяния света, порошковая рентгеновская дифрактометрия.*

Аннотация

Серия мезоморфных фазовых переходов (гексагональная → биконтинуальная кубическая → ламеллярная) *N*-додецил-*N*-(2-гидроксиэтил)-*N*,*N*-диметиламмоний бромида исследована методом поляризационной оптической микроскопии, используя методику спонтанного испарения воды из капли разбавленного раствора мезогена. Методика спонтанного испарения воды использована в экспериментах рентгеновской дифрактометрии и спектроскопии комбинационного рассеяния света. Показаны конформационные перестройки углеводородного хвоста при фазовых переходах. Определены структурные особенности ламеллярной лиотропной жидкокристаллической фазы.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия высоких температур. *Регистрационный код публикации:* 13-34-6-57
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 4 июня 2013 г. УДК 544.47.

Влияние неорганических солей на кинетику каталитического пиролиза древесины

© **Белый[+] Владимир Александрович** и **Удоратина* Елена Васильевна**
Институт химии Коми НЦ УрО РАН. Ул. Первомайская, 48. г. Сыктывкар, 167000. Россия.
E-mail: skeyling@yandex.ru

*Ведущий направление, [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *пиролиз, биомасса, неорганические соли, кинетика.*

Аннотация

Методом термогравиметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии изучен процесс пиролиза древесины хвойной и лиственной пород. Выявлено влияние катализаторов – неорганических солей – на температуру начала термодеструкции и выход угля. В результате кинетических исследований определены порядок реакции и энергия активации начальной стадии пиролиза древесины.

Тематический раздел: Прикладные исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Биохимия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-6-65
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 2 июля 2013 г. УДК 631-41.

Гуминовые кислоты из кремнеземистого сапропеля: ИК-спектроскопический и термический анализ

© Адеева* Людмила Никифоровна, **Платонова Дарья Сергеевна**, **Масоров Михаил Сергеевич** и **Диденко[+] Татьяна Александровна**
Кафедра неорганической химии. Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского. Пр. Мира, 55А. г. Омск, 644077. Россия. Тел.: (3812) 26-81-99. E-mail:kovalenko_85@list.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *гуминовая кислота, сапропель, коэффициент доли стабильных группировок, ИК-спектроскопия.*

Аннотация

Показано, что действием на сапропель раствором щелочи и последующим осаждением кислотой могут быть выделены гуминовые кислоты. Проводилось варьирование условий эксперимента для наиболее полного извлечения гуминовой кислоты из сапропеля. Установлены уравнения регрессии, показывающие влияние концентрации щелочи, температуры и продолжительности процесса на эффективность выделения гуминовых кислот и их зольность. Термическим анализом изучены превращения гуминовых кислот, выделенных из сапропеля в интервале температур 40-1000 ºС на воздухе. ИК-спектроскопические исследования подтвердили наличие в составе гуминовых кислот сапропеля разнообразных функциональных групп. По методике Боэма определено количество кислородсодержащих функциональных группировок, которое позволяет предположить, что гуминовые кислоты могут быть использованы в качестве сорбента тяжелых металлов.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Исследование новых материалов.
Регистрационный код публикации: 13-34-6-70 *Подраздел:* Технология очистки воды.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.183. Поступила в редакцию 20 июня 2013 г.

Бифункциональный сорбент для очистки сточных вод, полученный из сапропеля

© Адеева[1]* Людмила Никифоровна, Платонова[1] Дарья Сергеевна, Пужель[1] Александр Владимирович, Диденко[1+] Татьяна Александровна и Белых[2] Николай Александрович

[1] *Кафедра неорганической химии. Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского. Пр. Мира, 55А. г. Омск, 644077. Россия. Тел.: (3812) 26-81-99. E-mail: kovalenko_85@list.ru*
[2] *ОАО ОмПО "Радиозавод им. А. С. Попова" (Релеро). Ул. 10 лет Октября, 195. г. Омск, 644009. Россия. Тел.: (3812) 66-63-69.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *бифункциональный сорбент, сапропель, емкость сорбента, нефтепродукты, ионы никеля (II).*

Аннотация

Показано, что термической обработкой сапропеля на воздухе при температуре 300-350 ^{o}C может быть получен бифункциональный сорбент, способный извлекать органические вещества и ионы металлов из водных растворов. Емкость сорбента по ионам никеля(II) составляет 51.0±2.0 мг/г, величина сорбции нефтепродуктов 33.1±1.2 мг/г при их начальной концентрации 1.0 мг/мл. На примере промывных вод участка никелирования радиозавода установлено, что полученный бифункциональный сорбент способен одновременно извлекать ионы металла и нефтепродукты из водных растворов. Приведено сравнение характеристик сорбента, полученного термической обработкой сапропеля в воздушной среде при температуре 300 ^{o}C и сорбента, полученного карбонизацией сапропеля в инертной среде при температуре 700 ^{o}C.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Исследование новых материалов.
Регистрационный код публикации: 13-34-6-76 *Подраздел:* Строительные материалы.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 691.55:547.419.1. Поступила в редакцию 31 мая 2013 г.

Влияние замедлителей твердения на основе 1-гидроксиэтилиден-1,1-дифосфоновой кислоты на свойства гипсовых вяжущих

© Бердник[1]*+ Ирина Витальевна, Краснов[2] Сергей Александрович
и Магдеев[1] Ильдар Мухтарович

[1] *Технологическая лаборатория;* [2] *Отдел координационной химии и наноматериалов.*
Учреждение Российской академии наук Институт органической и физической химии
им. А.Е. Арбузова Казанского научного центра Российской академии наук.
Ул. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 273-93-44. Факс: (843) 272-73-34. E-mail: berdnik@iopc.ru

*Ведущий направление, +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *гипс, гипсо-известковые смеси, замедлитель схватывания и твердения гипсовых вяжущих, 1-гидроксиэтилиден-1,1-дифосфоновая кислота, триэтаноламин.*

Аннотация

Методом графической визуализации изучена зависимость продолжительности твердения гипсовых и известково-гипсовых растворов от добавок солей 1-оксиэтилиден-1,1-дифосфоновой кислоты с триэтаноламином. Показан синергизм действия компонентов добавки как замедлителя твердения по отношению к гипсу-полугидрату, а также к известково-гипсовым растворам. Предложен адсорбционный механизм эффекта.

Тематический раздел: Химико-технологические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Элементоорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-6-83
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений"
http://butlerov.com/synthesys/
Поступила в редакцию 18 июня 2013 г. УДК 661.718.1:541.49.

Оптимизация некоторых параметров в синтезах метил-*О,О*-ди(оксиранилметил)фосфоната

© Бердник Ирина Витальевна
Учреждение Российской академии наук Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова Казанского научного центра Российской академии наук.
Ул. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 273-93-44. Факс: (843) 272-73-34. E-mail: berdnik@iopc.ru

Ключевые слова: *метил-О,О-ди-(оксиранилметил)фосфонат, гидроксиметилоксиран, технологический эксперимент, оптимизация, графическая визуализация.*

Аннотация

Для технологического процесса производства метил-*О,О*-ди(оксиранилметил)фосфоната по реакции гидроксиметилоксирана с дихлорметилфосфонатом установлена взаимосвязь выхода продукта с параметрами, характеризующими качество исходного сырья и условия синтеза. Выявленные зависимости представлены в форме многопараметрических регрессий и 3D–поверхностей. Исследование поверхностей позволило определить оптимальные условия ведения процесса. Соблюдение оптимума режима технологического процесса привело к существенному повышению выхода продукта.

Тематический раздел: Теоретические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Аналитическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-6-91
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 11 июля 2013 г. УДК 543.24:547.1.

Метод определения точки эквивалентности по результатам потенциометрических измерений

© Бердник*[+] Ирина Витальевна и **Бердник Владимир Васильевич**
Технологическая лаборатория. Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова Казанского научного центра Российской академии наук. Ул. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 273-93-44. Факс: (843) 272-73-34. E-mail: berdnik@iopc.ru

*Ведущий направление, [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *потенциометрическое титрование, аппроксимации кривой титрования, анализ погрешностей, метил-О,О-ди(оксиранилметил)фосфонат.*

Аннотация

Предложена шестипараметрическая функция для аппроксимации кривых потенциометрического титрования. Показано, что эта функция достаточно хорошо описывает реальные кривые титрования. Разработан алгоритм определения точки эквивалентности, основанный на определении параметров этой функции по результатам потенциометрического титрования методом наименьших квадратов. Проделаны оценки устойчивости предложенного способа определения к погрешностям измерения. Практическая пригодность метода продемонстрирована на примере нахождения содержания основного вещества в метил-*О,О*-ди(оксиранилметил)фосфонате.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-34-6-98 *Подраздел:* Физико-химия комплексных соединений.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.49 + 543.420.62 + 546.74. Поступила в редакцию 11 июля 2013 г.

Полиядерные комплексонаты никеля(II) в водных растворах *β*-гидрокси-*α*-аминопропионовой кислоты

© Корнев* Виктор Иванович и **Булдакова[+] Надежда Сергеевна**
Кафедра неорганической и аналитической химии. Удмуртский государственный университет.
Ул. Университетская, 1. г. Ижевск, 426034. Удмуртская республика. Россия.
Тел.: (3412) 91-64-34. E-mail: nah@uni.udm.ru

*Ведущий направление, [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *комплексные соединения, комплекс, лиганд, никель(II), этилендиаминтетрауксусная кислота, серин, константа устойчивости, структура комплексов.*

Аннотация

Методом абсорбционной спектроскопии и pH-метрии изучено образование комплексов, содержащих ионы никеля(II), а также этилендиаминтетрауксусную (ЭДТА, $Edta^{4-}$) и *β*-гидрокси-*α*-аминопропионовую кислоты (сирин, HSer). Методом математического моделирования установлено, что для описания экспериментальных зависимостей абсорбций от кислотности среды и концентраций реагирующих компонентов наиболее вероятные математические модели включают в качестве параметров константы диссоциации лигандов (K_i), константы гидролиза металлов (K_{ir}) и константы устойчивости (β) гомолигандных, гетеролигандных и полиядерных комплексов общего состава $[Ni_mSer_nEdta_r]^{2m-n-4r}$ (m = 1-4, n = 0-8, r = 0-1). Рассчитаны константы равновесия реакций и константы устойчивости образующихся комплексов. Определены границы значений pH существования найденных комплексов.

Тематический раздел: Исследование новых материалов. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия целлюлозы. *Регистрационный код публикации:* 13-34-6-105
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 24 мая 2013 г. УДК 676.84.

Исследование процесса структуризации целлюлозно-наполненного материала

© Солдатов[+] Сергей Васильевич, **Енейкина Татьяна Александровна**, **Хохлов* Владимир Александрович**, **Чистюхин Вадим Николаевич**, **Гатина Роза Фатыховна** и **Михайлов[1] Юрий Михайлович**

Федеральное казенное предприятие «Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов». Ул Светлая, 1. г. Казань, 420033. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 544-07-21. E-mail: sternsoldatov@mail.ru

[1] *ВПК при Правительстве РФ*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *инертный материал, физико-механические характеристики, целлюлоза, поливинилацетат.*

Аннотация

Рассчитаны удельные поверхности различных видов целлюлоз: волокон, опилок хвойных в виде хлопьев и опилок лесных хвойных неопределенной формы, древесной муки. Изучена зависимость структурно-механических свойства материала от вида целлюлозы: усадка, предел прочности при растяжении и относительное удлинение. Показано, что требуемый предел прочности материала (16.3-22.5 МПа) достигается при использовании целлюлозы волокнистой формы.

Разработан состав инертного материала на основе целлюлозы и поливинилацетата, обеспечивающий идентичные со штатным аналогом условия переработки методом фильтрационного литья и физико-механические характеристики и позволяющий проводить проверку исправности функционирования оборудования.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Химия целлюлозы. *Регистрационный код публикации:* 13-34-6-113
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
Поступила в редакцию 22 мая 2013 г. УДК 547.458.

Изменение тонкой структуры целлюлозы в результате гетерогенных процессов модифицирования

© Смотрина[1]*+ Татьяна Валерьевна, **Лежнина[1]* Марина Михайловна**,
Сергеев[2] Роман Владимирович и **Новиков[2] Петр Сергеевич**
[1] *Кафедра физики.* [2] *Кафедра лесной селекции, недревесных ресурсов и биотехнологии. Поволжский государственный технологический университет. Пл. Ленина, 3. г. Йошкар-Ола, 424000. Республика Марий Эл. Россия. Тел.: (8362) 68-68-04. E-mail: tatyana-smotrina@yandex.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *целлюлоза, гемицеллюлозы, структура, модифицирование, мерсеризация, ядерная магнитная релаксация.*

Аннотация

Методом релаксационной спектроскопии ЯМР проанализированы изменения тонкой структуры целлюлозы в ходе щелочной обработки при варьировании концентрации реагента и времени воздействия. Показано, что время спин-решеточной релаксации является параметром, чувствительным как к изменению степени кристалличности целлюлозы в результате мерсеризации, так и к полиморфному переходу целлюлозы I в целлюлозу II. Высказано предположение об образовании в результате мерсеризации более упорядоченной мезофазы в аморфных областях целлюлозы. Продемонстрирована взаимосвязь между процессами спин-спиновой релаксации сорбированной воды и глубиной структурных изменений в технической целлюлозе в результате ее постадийной обработки диметильсульфоксидом и растворами щелочей.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Исследование новых материалов.
Регистрационный код публикации: 13-34-6-118 *Подраздел:* Физическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 548.55; 681.7.068.2; 535-15. Поступила в редакцию 17 июня 2013 г.

ИК-световоды нано- и микрокристаллической структуры для обнуляющей интерферометрии

© **Корсаков Александр Сергеевич**, **Врублевский Дмитрий Станиславович**,
Жукова Лия Васильевна*[+] и **Корсаков Виктор Сергеевич**
Уральский Федеральный Университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина.
Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Россия. Тел.: (343) 375-44-45. E-mail: l.v.zhukova@ustu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *фотонно-кристаллические ИК-световоды, твердые растворы галогенидов серебра, обнуляющая интерферометрия, средний ИК-диапазон.*

Аннотация

Разработаны и получены методом экструзии ИК-световоды на основе новых кристаллов твердых растворов галогенидов серебра и одновалентного таллия. Световоды пропускают от 2.0 до 40.0-45.0 мкм в зависимости от состава и работают в одномодовом режиме на длине волны 10.6 мкм. Измерены и рассчитаны их оптические свойства и фундаментальные характеристики, рассмотрена возможность применения ИК-световодов в качестве модовых фильтров в обнуляющей интерферометрии при поиске землеподобных планет.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Геохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-34-6-124 *Подраздел:* Нефтехимия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 550.41:552.578.2. Поступила в редакцию 18 мая 2013 г.

Нефтенасыщенность слабопроницаемых пород Миннибаевской площади Ромашкинского месторождения (на примере скв. 20355)

© Косачев[1]*+ Игорь Павлович и **Каюкова[2] Галина Петровна**

[1] *Технологическая лаборатория;* [2] *Лаборатория химии и геохимии нефти. Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова Казанского научного центра Российской академии наук.*
Ул. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 272-73-84. Факс: (843) 272-73-34. E-mail: kosachev@iopc.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *слабопроницаемые породы, девон, битумоиды, углеводородный состав, нефтенасыщенность, Миннибаевская площадь, Ромашкинское месторождение.*

Аннотация

Выявлена нефтенасыщенность слабопроницаемых пород верхнего девона Миннибаевской площади Ромашкинского месторождения в интервале глубин 1486-1522 м, составляющая в среднем 0.13%. Показано, что состав битумоидов, определенный совокупностью методов ИК спектроскопии, ГЖХ, термического анализа и ЭПР, представляет собой смесь высокомолекулярных нафтеновых и ароматических углеводородов с небольшой долей изопреноидных и нормальных алканов, подвергнувшихся гипергенному воздействию. Установлено, что минеральная матрица образцов является ассоциацией карбонатных пород, присутствие в которых битумоидов связано с миграцией нефти из нижележащих терригенных толщ девона.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-34-6-130 *Подраздел:* Биохимия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 544.72+544.77. Поступила в редакцию 7 июля 2013 г.

Электрокинетические свойства хлорофилла в водных растворах 1-, 2- и 3-зарядных катионов

© Родионова[1+] Екатерина Юрьевна, Дмитриева[2*+] Ирина Борисовна и Чухно Александр Сергеевич

Кафедра физической и коллоидной химии. Санкт-Петербургская государственная химико-фармацевтическая академия. Ул. Профессора Попова, 14. г. Санкт-Петербург, 197376. Россия. Тел.: (812) 234-11-38. E-mail: rodionova_e_y@mail.ru, irina@dmitriyev.ru, alex-chuhno@yandex.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *хлорофилл, электрокинетические свойства, микроэлектрофорез, изоэлектрическая точка.*

Аннотация

Методом микроэлектрофореза проведены исследования электрокинетических свойств водных дисперсий хлорофилла в зависимости от времени адсорбции и состава водной фазы (pH, присутствия катионов калия, натрия, магния, железа(II) или железа(III)), определена их изоэлектрическая точка $pH_{ИЭТ}$ = 3.3±0.1. Установлено, что влияние одно и двухзарядных катионов соответствует их заряду и положению в лиотропном ряду. В водных дисперсиях хлорофилла в присутствии этих катионов наблюдается аномальная зависимость электрокинетического потенциала от ионной силы раствора. Трехзарядный катион железа вызывает перезарядку частиц хлорофилла и смещение изоэлектрической точки в щелочную область по сравнению с катионами натрия, калия, магния и железа(II).

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Биохимия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-6-135
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 28 июля 2013 г. УДК 544.72+544.77.

Электрокинетические свойства гемоглобина в водных растворах 1-, 2- и 3-зарядных ионов

© Родионова[1+] Екатерина Юрьевна, Дмитриева Ирина Борисовна[2]* и Чухно Александр Сергеевич

Кафедра физической и коллоидной химии. Санкт-Петербургская государственная химико-фармацевтическая академия. Ул. Профессора Попова, 14. г. Санкт-Петербург, 197376. Россия. Тел.: (812) 234-11-38. E-mail: rodionova_e_y@mail.ru , irina@dmitriyev.ru, alex-chuhno@yandex.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *гемоглобин, электрокинетические свойства, микроэлектрофорез, изолектрическая точка.*

Аннотация

Методом микроэлектрофореза изучено влияния одно-, двух- и трёхзарядных анионов и катионов (K^+, Na^+, Ca^{2+}, Mg^{2+}, Fe^{2+}, Fe^{3+}, CO_3^{2-}, $HPO_4^{2-}/H_2PO_4^-$, Cl^-, SO_4^{2-}, $C_3H_5O(COO)_3^{3-}$) на электрокинетические свойства водных дисперсий гемоглобина. Установлено, что значения электрокинетического потенциала гемоглобина зависят от заряда, размера ионов и ионной силы раствора в соответствии с классической теорией двойного электрического слоя. Показано, что карбонат-ионы и катионы железа (II и III) сорбируются на гемоглобине специфически, остальные ионы – неспецифически, так как не смещают значение изоэлектрической точки гемоглобина по сравнению с потенциал определяющими ионами H^+ и OH^-.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Краткое сообщение**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-6-141
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 1 июля 2013 г. УДК 547.462.3 + 547.586.2.

Тематическое направление: Имиды малеиновой кислоты и их производные. Часть 3.

Аллиловый эфир 4-(2,5-диоксо-2,5-дигидро-1*H*-пирролил)фенилуксусной кислоты

© Колямшин*[+] Олег Актарьевич, **Данилов Владимир Александрович** и **Кольцов Николай Иванович**

Кафедра физической химии и высокомолекулярных соединений. Чувашский государственный университет им. И.Н. Ульянова. Московский пр., 15. г. Чебоксары, 428015. Чувашская республика. Россия. Тел.: (8352) 45-24-68. E-mail: oleg.kolyamshin@yandex.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *моноамиды малеиновой кислоты, малеинимиды, циклизация, ИК и ЯМР ^{1}H спектры.*

Аннотация

Взаимодействием аллилового эфира 4-аминофенилуксусной кислоты с малеиновым ангидридом получен соответствующий моноамид малеиновой кислоты, последующей циклизацией которого выделен соответствующий малеинимид – аллиловый эфир 4-(2,5-диоксо-2,5-дигидро-1*H*-пироллил)фенилуксусной кислоты. Синтезированные соединения охарактеризованы данными ИК и ЯМР ^{1}H спектроскопии.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Теоретические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-34-6-144 *Подраздел:*Термодинамика.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 539.196. Поступила в редакцию 18 мая 2013 г.

Точное решение кинетического уравнения для одноступенчатого процесса роста и распада

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович
Лаборатория моделирования, Институт теплофизики СО РАН. Пр. Лаврентьева, 1. г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org

***Ключевые слова**: кинетическое уравнение, процессы роста и распада, источник, сток.*

Аннотация

Найдено точное решение кинетического уравнения роста (рождения) в присутствии источников (стоков) для произвольной зависимости скорости роста от номера состояния (или размера). Показано, что присутствие источника приводит к уширению распределения по состояниям (или размерам). Показано также, что полученное решение может быть использовано для приближенного определения функции распределения зародышей в случае большого пересыщения пара. Найдено также точное решение кинетического уравнения распада в присутствии источников (стоков) для произвольной зависимости скорости распада от номера состояния (или размера).

Тематический раздел: Термодинамические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Фазовые равновесия. *Регистрационный код публикации:* 13-34-6-151
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 8 мая 2013 г. УДК 536.71, 536.22, 536.23.

Связь параметров критической точки фазового перехода газ–жидкость с плотностью кристалла при нулевой абсолютной температуре

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович
Лаборатория моделирования, Институт теплофизики СО РАН. Пр. Лаврентьева, 1. г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org

Ключевые слова: *критическая температура, критический объем, критическое давление, критические параметры, уравнение состояния, фазовый переход жидкость-газ.*

Аннотация

Эмпирическая формула Тиммерманса, связывающая плотность кристалла при нулевой абсолютной температуре с параметрами критической точки фазового перехода жидкость-газ, теоретически выведена на основе уравнения Ван-дер-Ваальса и условий фазового равновесия.

Рассмотрены трехпараметрические уравнения состояния $p(T,v) = kT/(v-b) - a/v^{\alpha}$ и $p(T,v) = kT/v + B/v^{\beta+1} - \tilde{N}/v^{\beta}$, позволяющие описать критическую точку любого однокомпонентного вещества. Формула Тиммерманса получена из первого уравнения состояния приближенно, а из второго уравнения – точно.

Тематический раздел: Теоретические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Моделирование физико-химических процессов. *Регистрационный код публикации:* 13-34-6-157
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 6 мая 2013 г. УДК 519.6.

Численное моделирование физико-химических процессов при вулканизации многожильного кабельного изделия

© Иванова[+] Евгения Владимировна и **Стрижак* Павел Александрович**
Национальный исследовательский Томский политехнический университет. пр. Ленина, 30. г. Томск, 634050. Россия. Тел.: (3822) 70-17-77, доп. 1910. E-mail: zhenya1@tpu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

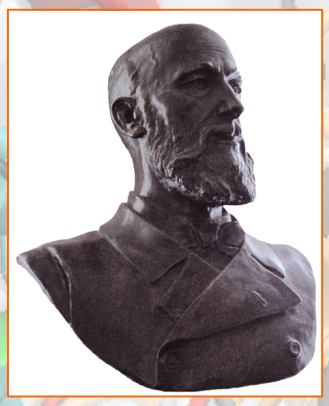
Ключевые слова: *тепломассоперенос, вулканизация, кабельное изделие, полимеризация, изоляционная оболочка, моделирование.*

Аннотация

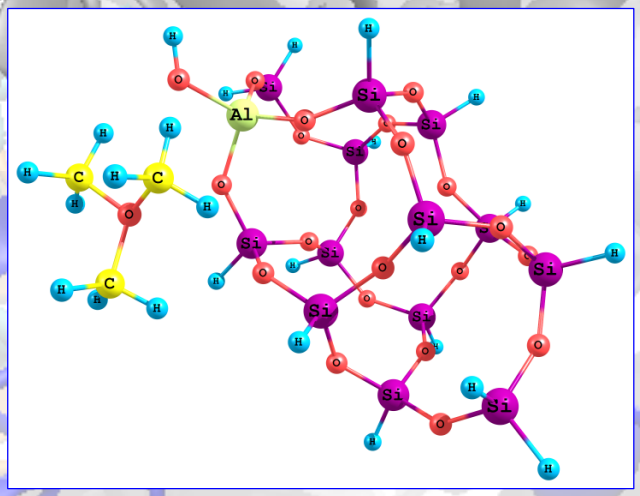
Выполнено численное исследование интегральных характеристик вулканизации многожильного кабельного изделия на базе модели тепломассопереноса, учитывающей комплекс основных физико-химических процессов. Приведены характерные времена полной полимеризации оболочки типичного многожильного кабеля. Установлено влияние внутренней структуры кабеля на характеристики вулканизации его внешней изоляционной оболочки.

Butlerov Communications

No.7, Vol.35. 2013



ISSN 2074-0948



ISSN 2074-0212

National Edition in Russian:

Бутлеровские сообщения

Тематический раздел: Теоретические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-7-1
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 5 июля 2013 г. УДК 539.143.43:539.199.

Эволюция поляризации трёхспиновых групп и их вклад в форму линии ЯМР в твёрдом теле

© Кулагина[1+] Татьяна Павловна, **Карнаух[1]* Григорий Ефимович** и **Андрианов[1,2]* Сергей Андреевич**

[1] *Институт проблем химической физики РАН. Пр-т. Семенова, 1. г. Черноголовка, 142432. Московская обл. Россия. Тел.: (496) 522- 18-79. E-mail: tan@icp.ac.ru*

[2] *Московский авиационный институт. Волоколамское шоссе, 4. г. Москва, 125993. Россия. Тел.: (499) 158-43-33. Факс: (499) 158-29-77.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова*: трехспиновая группа, спад свободной индукции, форма линии, диполь-дипольное взаимодействие, поляризация.*

Аннотация

В работе получено кинетическое уравнение ЯМР спектров для твердых тел, содержащих выделенные трехспиновые группы. Из уравнения для матрицы плотности рассчитано аналитическое выражение сигнала спада свободной индукции для системы трех дипольно-связанных спинов.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Квантово-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-7-10 *Подраздел:* Супрамолекулярная химия.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 54-126, 544.122.4, 544.18. Поступила в редакцию 12 июля 2013 г.

Супрамолекулярная организация хромофоров в нелинейно-оптических эпоксиаминных олигомерах с дендритными хромофор-содержащими фрагментами

© Шарипова[+] Анастасия Владимировна, **Фоминых Ольга Дмитриевна**
и **Балакина* Марина Юрьевна**

Лаборатория химии углеродных наноматериалов. Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, КазНЦ РАН. Ул. Ак. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 272-73-43. E-mail: a.v.sharipova@yandex.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *нелинейно-оптическая активность, молекулярное моделирование, квантово-химические расчеты, олигомеры, хромофоры.*

Аннотация

Методами молекулярного моделирования исследована структура модельных олигомеров на основе диглицидилового эфира бисфенола-А (ДГЭБА) с ковалентно присоединенными дендритными фрагментами, содержащими азохромофоры, а также самих дендритных фрагментов. При исследовании димеров обнаружены конформации со стекинг-организацией хромофорных групп. Особенности связывания в подобных стекинг-структурах исследованы в рамках топологического подхода «Атомы в молекулах», установлено существование ван-дер-Ваальсовых взаимодействий между хромофорами. Для стекинг-структуры и отдельного хромофора квантово-химически методом TDHF на уровне HF, а также с использованием DFT (функционалы B3LYP и B97D) рассчитаны электрические характеристики (дипольный момент μ и молекулярные поляризуемости α, β). Установлено, что наличие стекинг-структур способствует увеличению нелинейно-оптичекой (НЛО) активности молекулярной системы.

Тематический раздел: Квантово-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Биохимия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-7-19
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 3 июля 2013 г. УДК 577.153.

Взаимодействие глицеральдегид-3-фосфатдегидрогеназы человека с кофактором по данным молекулярного докинга

© **Макшакова[+] Ольга Николаевна** и **Ермакова* Елена Андреевна**
Казанский институт биохимии и биофизики КазНЦ РАН. Ул. Лобачевского, 2/31. г. Казань, 420111. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 292-62-88. E-mail: makshakova@gmail.com

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *глицеральдегид-3-фосфатдегидрогеназа, никотинамиддинуклеотид, молекулярный докинг.*

Аннотация

Проведен анализ взаимодействия тетрамера глицеральдегид-3-фосфатдегидрогеназы с кофактором НАД расчетными методами. Метод молекулярного докинга был применен для определения энергия взаимодействия молекул кофактора с белком, метод Gaussian network model был использован для оценки изменения подвижности основной цепи белка в результате связывания кофактора. Показано, что молекулы кофактора образуют устойчивые комплексы с тетрамером белка, при этом энергия взаимодействия одной молекулы кофактора с разными субъединицами апо-формы белка различаются незначительно. В то же время присутствие других молекул НАД в комплексе систематически уменьшает энергию взаимодействия белок – кофактор, что может давать вклад в отрицательную кооперативность связывания молекул кофактора с тетрамером глицеральдегид-3-фосфатдегидрогеназы.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Квантово-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-7-24 *Подраздел:* Физическая органическая химия.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". http://butlerov.com/readings/
УДК 544.723.54:543.421/.424, 661.183.6:661.726, 544.183. Поступила в редакцию 26 апреля 2013 г.

Влияние температуры на механизм и продукты превращения диметилового эфира на поверхности цеолитных катализаторов ZSM-5

© Родионов[+] Александр Сергеевич, **Широбокова Галина Николаевна**,
Бондаренко* Галина Николаевна, **Колесниченко Наталья Васильевна**
и **Павлюк Юрий Витальевич**

Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН. Ленинский проспект, 29.
г. Москва, 119991, ГПС-1. Россия. Тел.: (495) 955-41-53. E-mail: ASRodionov@ips.ac.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *диметиловый эфир, цеолитный катализатор, механизмы превращения ДМЭ, ИК-Фурье спектроскопия.*

Аннотация

Методами высокотемпературной ИК-фурье спектроскопии диффузного отражения *in situ* и квантовой химии показано, что образование олефинов из диметилового эфира в зависимости от температуры может происходить по двум независимым механизмам: при пониженных температурах – по карбениевому механизму, при повышенных – по оксоний-илидному.

Тематический раздел: Квантово-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Композиционные материалы. *Регистрационный код публикации:* 13-35-7-30
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"Структура и динамика молекулярных систем". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 54-126, 544.122.4, 544.18. Поступила в редакцию 12 июля 2013 г.

Моделирование нелинейно-оптических материалов на основе композиционных полимеров с бинарными хромофорными группами

© Тухбатулина[+] Алина Ибрагимовна, Фоминых Ольга Дмитриевна и Балакина* Марина Юрьевна

Лаборатория химии углеродных наноматериалов. Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, КазНЦ РАН. Ул. ак. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 272-73-43. E-mail: april-90@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *нелинейно-оптическая активность, композиционные материалы, молекулярное моделирование, квантово-химические расчеты, олигомеры, хромофоры.*

Аннотация

С использованием методов молекулярного моделирования исследована структура композиционного материала нового типа, в котором хромофоры-гости содержат трицианоэтенильную электроноакцпторную группу, а полимерная матрица-хозяин моделируется эпоксиаминными олигомерами с мультихромофорными дендритными фрагментами. Электрические характеристики (дипольный момент μ и молекулярные поляризуемости α, β) исследуемых молекулярных систем рассчитаны квантово-химически на уровне TDHF//AM1. Показано, что введение дополнительных хромофоров-гостей приводит к пространственной организации хромофорных групп и увеличению квадратичной нелинейно-оптической (НЛО) активности исследуемых молекулярных систем. Определено оптимальное соотношение между количеством добавочных хромофоров, приходящихся на дендритный фрагмент.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Препаративная химия.
Регистрационный код публикации: 13-35-7-38 *Подраздел:* Композиционные материалы.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.64:547.1'28. Поступила в редакцию 14 июня 2013 г.

Олигодиметилсилоксаны с привитыми метоксикарбонилдецильными группами

**© Пряхина[1]* Татьяна Алексеевна, Бузин[1] Михаил Игоревич,
Стрелкова[1] Татьяна Васильевна, Зачернюк[2+] Александр Борисович
и Музафаров[1, 2] Азиз Мансурович**

[1] *Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова Российской академии наук. Ул. Вавилова, 28. г. Москва, 119991. Россия. Тел.: (499) 135-92-23. E-mail: kotov@ineos.ac.ru*

[2] *Институт синтетических полимерных материалов им. Н. С. Ениколопова Российской академии наук. Ул. Профсоюзная, 70, г. Москва, 117393. Россия. Тел.: (495) 335-90-00. E-mail: a_zacher@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *привитые полимеры, реакция гидридного присоединения, метиловый эфир ундециленовой кислоты, когезионная прочность.*

Аннотация

Получены модельные олигодиметилсилоксаны, модифицированные длинноцепными органическими заместителями, содержащими терминальные сложноэфирные группы. Строение синтезированных олигомеров подтверждено данными ЯМР ^{1}H и ^{29}Si. Методом ДСК установлены закономерности изменения теплофизических свойств в зависимости от содержания заместителей.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Композиционные материалы. *Регистрационный код публикации:* 13-35-7-45
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 20 мая 2013 г. УДК 544.236.

Синтез новых перспективных полимерных нанокомпозитных материалов для газоразделительных мембран на основе металлорганических каркасных соединений

© Алентьев[1+] Александр Юрьевич, **Исаева[2] Вера Ильинична**,
Баркова[2] Марина Ивановна и **Кустов[2] Леонид Модестович**
[1] *ИНХС РАН. Ленинский Проспект, 29. г. Москва, 119991. Россия. E-mail: Alentiev1963@mail.ru*
[2] *ИОХ РАН. Ленинский проспект, 47. г. Москва, 119991. Россия.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *газоразделительные мембраны, полимерные нанокомпозитные материалы, металлоорганические каркасные соединения.*

Аннотация

В работе впервые синтезированы методом *in situ* в растворах полимеров и охарактеризованы нанокомпозитные материалы на основе металлоорганических каркасных соединений и полимеров различной химической структуры. Эти материалы обладают высокой удельной поверхностью и хорошими пленкообразующими свойствами, что обусловливает их перспективность для мембранного газоразделения.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Препаративная химия.
Регистрационный код публикации: 13-35-7-50 *Подраздел:* Химия комплексных соединений.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.138+546.59+547.821. Поступила в редакцию 25 июня 2013 г.

Металлокомплексные поверхности на основе аурофильных терпиридинов и их координационных соединений с Rh(III) и Ru(II)

© Белоглазкина*[+] Елена Кимовна, **Мажуга* Александр Георгиевич**,
Манжелий* Евгений Александрович, **Моисеева Анна Анисимовна**
и **Зык Николай Васильевич**

Кафедра органической химии. Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова. Химический факультет. Ленинские горы, д. 1, стр. 3. г. Москва, 119991. Россия.
Тел.: (495) 939-40-20. E-mail: bel@org.chem.msu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

***Ключевые слова**: терпиридины, координационные соединения, адсорбция, золото, родий, рутений.*

Аннотация

Изучены реакции комплексообразования лигандов терпиридинового ряда, имеющих в составе аурофильный тиольный или сульфидный фрагмент, с $RuCl_3$ и $RhCl_3$. Показана возможность образования металлокомплексных поверхностей на основе полученных координационных соединений на поверхности золотых электродах. Установлен характер агрегации золотых наночастиц под действием растворов комплексных соединений аурофильных терпиридинов с Ru(II).

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Полимерная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-7-59
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 12 июля 2013 г. УДК 541.64, 544.032, 547-304.4, 54-126.

Синтез и нелинейно-оптические свойства полиэфирполиолов с азохромофорными группами различного строения

© Назмиева[1+] Гульшат Наиловна, Вахонина[1] Татьяна Анатольевна, Шарипова[1] Сирина Музагидановна, Иванова[1] Наталия Владимировна, Низамеев[1] Ирек Рашатович, Валитов[1] Мурад Искандерович, Смирнов[2] Николай Николаевич, Якиманский[2] Александр Вадимович и Балакина[1]* Марина Юрьевна

[1] *Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН. Ул. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Тел: (843) 272-73-43. E-mail: nazmievagn@iopc.ru.*

[2] *Институт высокомолекулярных соединений РАН. Большой проспект, 31. г. Санкт-Петербург, 199004. Россия. Тел: (812) 323-50-25. E-mail: yak@yahoo.com*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *нелинейно-оптические полимеры, электретирование, эпоксиаминные олигомеры, азохромофоры, хромофор дендритного типа.*

Аннотация

Работа посвящена синтезу и изучению нелинейно-оптических свойств реакционноспособных полиэфирполиолов на основе диглицидилового эфира бисфенола-А и *п*-аминобензойной кислоты с азохромофорами различного строения.

Введение азохромофоров в боковую цепь олигомера осуществлялось в ходе реакции этерификации двумя способами: двустадийным или одностадийным. В первом случае сначала получали анилинсодержащий олигомер, а затем проводили реакцию азосочетания, получая олигомер с азохромофором. Во втором случае функционализацию реакционноспособного олигомера проводили непосредственно гидроксилсодержащим азохромофором. Структура олигомеров подтверждена физико-химическими методами исследования. Наличие реакционноспособных гидроксильных групп в цепи синтезированного олигомера позволяет получить сетчатые полимеры, используя в качестве сшивающего агента диизоцианаты.

Методом наливки при вращении были изготовлены тонкие пленки, толщина которых составляет 200-300 нм. Для получения материала с квадратичной нелинейно-оптической активностью проведено электретирование пленок в поле коронного разряда. Методом генерации второй гармоники измерены нелинейно-оптические коэффициенты синтезированных материалов.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Препаративная химия.
Регистрационный код публикации: 13-35-7-68 *Подраздел:* Полимерная химия.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.64:542.954. Поступила в редакцию 29 апреля 2013 г.

Полимеризация метилиденфталида в твердой фазе

© **Бузин**[1]*+ **Михаил Игоревич**, **Никифорова**[1] **Галина Григорьевна**,
Корлюков[1] **Александр Александрович**, **Архипов**[1] **Дмитрий Евгеньевич**,
Здвижков[2] **Александр Тимурович**, **Тимофеева**[1] **Галина Ивановна**,
Салазкин[1] **Сергей Николаевич** и **Папков**[1] **Владимир Сергеевич**
[1] *Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН.*
Ул. Вавилова, 28. г. Москва, 119991. Россия. Тел.: (499) 135-60-50. E-mail: buzin@ineos.ac.ru
[2] *Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН. Ленинский проспект, 47.*
г. Москва, 119991. Россия.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *кардовые полимеры, твердофазная полимеризация, рентгеноструктурный анализ, дифференциальная сканирующая калориметрия.*

Аннотация

Методом рентгеноструктурного анализа установлены параметры кристаллической ячейки метилиденфталида при 100 и 298К. Показана принципиальная возможность протекания твердофазной полимеризации метилиденфталида вблизи его температуры плавления, приводящая к образованию высокомолекулярного полиметилиденфталида с высоким выходом.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Молекулярное моделирование. *Регистрационный код публикации:* 13-35-7-73
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 16 июля 2013 г. УДК 577.29.

Моделирование взаимодействия фосфолипидной мембраны с дефензинами растительного происхождения

© Хайрутдинов[+] Булат Имамутдинович, **Ермакова* Елена Андреевна**
и **Зуев Юрий Федорович**
Казанский институт биохимии и биофизики КазНЦ РАН. Ул. Лобачевского, 2/31. г. Казань, 420111. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 292-62-88. E-mail: khayrutdinov@yahoo.com

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *дефензин, фосфолипидные мембраны, молекулярный докинг.*

Аннотация

Метод молекулярного докинга применен для исследования взаимодействия растительных дефензинов с фосфолипидным бислоем. Сравнительный анализ взаимодействия шести дефензинов, отличающихся зарядом и распределением зарядов по поверхности белка, с поверхностью мембраны показал, что дефензины слабо взаимодействуют с поверхностью мембраны, основной вклад в энергию взаимодействия дает электростатическое взаимодействие, а также сольватационный и гидрофобный эффекты. Специфичность взаимодействия проявляется в различной ориентации белка относительно поверхности мембраны.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-7-80 *Подраздел:* Ферментативная активность.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 577.153. Поступила в редакцию 17 мая 2013 г.

Молекулярные механизмы регуляции алкилоксибензолами активности сериновых протеаз

© Валиуллина[+] Юлия Анатольевна, Ермакова Елена Андреевна,
Захарченко Наталья Леруновна и Зуев* Юрий Федорович
Казанский институт биохимии и биофизики КазНЦ РАН. Ул. Лобачевского, 2/31. г. Казань, 420111.
Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 292-62-88. E-mail: valiullina@mail.knc.ru

*Ведущий направление; [+] Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *сериновые протеазы, активность, алкилоксибензолы, механизм действия.*

Аннотация

Исследовано влияние алкилоксибензолов (АОБ) – синтетических аналогов низкомолекулярных ауторегуляторов анабиоза бактерий, на структуру и каталитическую активность сериновых протеаз – трипсина и α-химотрипсина. Показано, что гомологи АОБ (С7, С12, С18), различающиеся длиной алкильного радикала, ингибируют каталитическую активность обоих ферментов. Анализ спектров триптофановой флуоресценции белков показал, что добавление АОБ не приводит к существенным нарушениям белковой структуры. Методом молекулярного докинга показано, что молекулы АОБ блокируют различные участки поверхности белков, при этом наиболее энергетически выгодные комплексы с лигандом затрагивают активный центр ферментов.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Химия пептидов. *Регистрационный код публикации:* 13-35-7-87
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 22 мая 2013 г. УДК 577.32.

Синтез фрагментов пептида Prostatic Acid Phosphatase PAP(248-261), PAP(262-270), PAP(248-286) и их характеризация методом масс-спектрометрии

© Филиппов[1]*+ Андрей Васильевич, **Котенков[1] Сергей Александрович**, **Никулин[1] Станислав Геннадиевич**, **Герасимова[1] Елена Александровна**, **Валиева[1] Резеда Рашидовна**, **Анцуткин[2] Олег Николаевич** и **Афонин[3] Сергей**

[1] *Кафедра физики молекулярных систем. Физический институт. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-51-89. E-mail: Andrey.Filippov@ksu.ru*

[2] *Interface Chemistry. Luleå University of Technology. Regnbagsallen, 14. 97187, Luleå, Sweden. Tel.: +46920491839. E-mail: Oleg.Antzutkin@ltu.se*

[3] *Institute of Organic Chemistry. Karlsruhe University. Fritz-Haber-Weg 6, D-76131 Karlsruhe, Germany. Tel.: +49 721 608-42860. E-mail: Sergiy.Afonin@kit.edu*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *Prostatic Acid Phosphatase (PAP), синтез, экстракция эфиром, очистка HPLC, масс-спектрометрия.*

Аннотация

Описан синтез фрагментов пептида Prostatic Acid Phosphatase (PAP): PAP(248-261), PAP(262-270), PAP(248-286). Экспериментально изменены и рассчитаны массовые спектры этих пептидов. Расчеты хорошо воспроизводят эксперимент. Показано, что короткие фрагменты PAP(248-261) и PAP(262-270) не нуждаются в дополнительной очистке. Синтез полноразмерного пептида PAP(248-286) приводит к получению вещества, которое нуждается в последующей очистке. Для гидрофобного фрагмента PAP(262-270) часть молекул пептида связана с ионом натрия, а еще одна часть – с ионом хлора.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Краткое сообщение**
Подраздел: Химия пептидов. *Регистрационный код публикации:* 13-35-7-91
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 22 мая 2013 г. УДК 577.32.

Синтез фрагмента пептида Prostatic Acid Phosphatase PAP(248-286) и структура приготовленных из него фибрилл

© **Филиппов**[1]*+ **Андрей Васильевич**, **Рудакова**[1] **Майя Анатольевна**, **Анцуткин**[2] **Олег Николаевич** и **Almqvist**[2] **Nils**

[1] *Кафедра физики молекулярных систем. Физический институт. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-51-89. E-mail: andrey.filippov@ksu.ru*

[2] *Interface Chemistry. Luleå University of Technology. Regnbagsallen, 14. 97187, Luleå, Sweden. Tel.: +46920491839. E-mail: Oleg.Antzutkin@ltu.se*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *Prostatic Acid Phosphatase (PAP), синтез, фибриллярные агрегаты, зародыши агрегации, атомно-силовая микроскопия (АСМ).*

Аннотация

Описана технология приготовления фибриллярных агрегатов из синтезированных фрагментов пептида Prostatic Acid Phosphatase PAP(248-286). С использованием атомно-силовой микроскопии изучены структурные особенности этих агрегатов, которые представляют собой неупорядоченную сетку из прямых однородных по толщине (~15 нм) фибрилл различной длины от 100 нм до 1 мкм. На некоторых фибриллах видны почкообразные образования сферической формы. Тенденции к образованию из фибрилл агрегатов более высокой степени организации не наблюдалось.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-7-94 *Подраздел:* Состав растительного сырья.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем"*. Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей
интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
УДК 615.322+547.56:582.929.4. Поступила в редакцию 7 июня 2013 г.

Современные подходы к изучению химического состава лекарственного растительного сырья представителей рода *Origanum* L. и разработка методов его стандартизации

© Боков[1]*** Дмитрий Олегович**, **Морохина**[1+] **Светлана Львовна**,
Пятигорская[2] **Наталья Валерьевна** и **Попов**[2] **Дмитрий Матвеевич**

[1] *Кафедра фармакогнозии. Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова. ГСП-1. Ул. Трубецкая, 8. г. Москва, 119991. Россия.*
Тел.: (925) 358-84-27. E-mail: fmmsu@mail.ru

[2] *Научно-исследовательский институт фармации. Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова. Нахимовский проспект, 45. г. Москва, 117418. Россия.*
Тел.: (916) 123-33-94. E-mail: osipova-mma@list.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *динамика молекул неоднородных систем, душица обыкновенная* (*Origanum vulgare* L.)*, душица турецкая* (*Origanum onites* L.), *водные, водно-спиртовые экстракты из лекарственного растительного сырья, флавоноиды, лютеолин-7-гликозид, цинарозид, конденсированные полифенолы.*

Аннотация

В ходе исследования получены данные о составе фенольного комплекса некоторых представителей рода *Origanum* L. методами тонкослойной хроматографии, титрометрии и УФ-спектрофотометрии. Определён качественный и количественный состав анализируемой группы биологически активных соединений. На основании полученных данных были модифицированы существующие и разработан ряд новых унифицированных методик, позволяющих проводить качественный и количественный анализ соединений фенольной природы.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-7-102 *Подраздел:* Состав растительного сырья.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей
интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
УДК 544.354:543.48. Поступила в редакцию 28 июля 2013.

Изучение кислотно-основных свойств лигнина с использованием метода рК-спектроскопии

© Белый*[+] Владимир Александрович, **Садыков Раис Асхатович**,
Беляев Валерий Юрьевич и **Рязанов Михаил Анатольевич**
Институт химии Коми научного центра Уральского отделения РАН. Ул. Первомайская, 48.
г. Сыктывкар, 167982. Россия. Тел.: (8212) 21-99-47. E-mail: skeyling@yandex.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *рК-спектр, константы диссоциации, спектрофотометрическое титрование, лигнин, фенольные гидроксильные группы.*

Аннотация

Исследованы кислотно-основные свойства лигнинов родиолы розовой (*Rhodiola rosea* L.) и серпухи венценосной (*Serratula coronata* L.) с использованием метода рК-спектроскопии. Рассчитаны константы диссоциации кислых групп этих лигнинов. Показана возможность дифференцированного определения констант кислотности фенольных гидроксильных групп различных структурных фрагментов лигнина с использованием спектрофотометрического титрования.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия целлюлозы. *Регистрационный код публикации:* 13-35-7-109
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
Поступила в редакцию 28 июля 2013. УДК 54.052:543.08.

Особенности структуры и свойств новых тонкодисперсных материалов на основе биополимеров растительного происхождения

© Кувшинова[+] Лариса Александровна и **Фролова[*] Светлана Валерьевна**
Институт химии Коми НЦ УрО РАН. Ул. Первомайская, 48. г. Сыктывкар, 167982. Республика Коми. Россия. Тел.: (8212) 21-99-61. E-mail: fragl74@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *биополимерная композиция, тонкодисперсные порошковые материалы, целлюлоза, тетрахлорид титана, модифицированная титансодержащими соединениями поверхность, физико-химические свойства, адсорбция, степень полимеризации, степень кристалличности.*

Аннотация

На основе биополимерных композиций растительного происхождения получены тонкодисперсные порошковые материалы с модифицированной титансодержащими соединениями поверхностью. На примере хвойной небеленой целлюлозы изучена динамика адсорбции Ti(IV) из растворов кислоты Льюиса. Установлена возможность применения растворов тетрахлорида титана, позволяющих в одну стадию обработки за короткий промежуток времени получать титансодержащие порошковые материалы при сравнительно низких температурах и концентрациях кислоты Льюиса. Показано, что обработка хвойной целлюлозы растворами $TiCl_4$ в C_6H_{14} влияет на степень полимеризации, степень кристалличности и кристаллографические характеристики целлюлозной компоненты тонкодисперсных порошков.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия целлюлозы. *Регистрационный код публикации:* 13-35-7-119
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
Поступила в редакцию 28 июля 2013 г. УДК 547.458.8.

Наноструктурамикрофибрилл целлюлозы

© Грунин*+ Юрий Борисович, **Грунин Леонид Юрьевич**,
Таланцев Владимир Иванович, **Масас Дарья Сергеевна**,
Никольская Екатерина Александровна и **Аслан Осман Мехметович**
Поволжский государственный технологический университет. Пл. Ленина, 3. г. Йошкар-Ола, 424000. Россия. Тел.:(8362) 68-68-64. E-mail: GruninYB@volgatech.net

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *биосинтез, целлюлоза, микрофибрилла, водородная связь, ядерный магнитный резонанс.*

Аннотация

Проведен анализ современных представлений о структурной организации целлюлозы и характера формирования ее микрофибрилл в процессе биосинтеза. Предложена модель строения микрофибриллы целлюлозы, предусматривающая наличие щелевидных микропор в ее структуре. На основе экспериментальных исследований сорбционных процессов с применением протонной магнитной релаксации установлено, что при влагосодержании целлюлозы 8-10% происходит заполнение ее микропор, сопровождающееся возрастанием их поперечных размеров, увеличением удельной поверхности и уменьшением степени кристалличности образцов.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Исследование новых материалов.
Регистрационный код публикации: 13-35-7-128 *Подраздел:* Полимерная химия.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 677.494. Поступила в редакцию 27 апреля 2013 г.

Влияние малых добавок ионных жидкостей на процесс электроформования нетканых материалов из расплавов полипропилена с различным показателем текучести расплава

© Белоусов* Сергей Иванович, **Малахов*[+] Сергей Николаевич**,
Праздничный Андрей Михайлович и **Чвалун Сергей Николаевич**
Лаборатория полимерных материалов. Федеральное государственное унитарное предприятие «Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л.Я.Карпова». Пер. Обуха, д. 3-1/12, стр. 6. г. Москва, 105064. Россия. Тел.: (495) 917-43-30. E-mail: s.malakhov@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *нетканые материалы, полипропилен, расплавы полимеров, ионные жидкости, электроформование.*

Аннотация

В статье рассмотрено влияние введения ионных жидкостей на процесс электроформования расплава полипропилена при получении нетканых материалов. Из расплава ряда полипропиленов с различным показателем текучести расплава получен нетканый материал со средним диаметром волокон от 5 до 23 мкм. Показано, что при введении низкомолекулярной добавки и снижении молекулярной массы полимера уменьшается диаметр микроволокон, что достигается за счет увеличения электропроводности полимера.

Тематический раздел: Исследование новых технологий. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Полимерная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-7-137
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 12 июля 2013 г. УДК 547.917.04.

Электроформование ультратонких волокон из растворов аминосодержащих полимеров

© Симаненкова[+] Лина Михайловна и **Кильдеева Наталия Рустемовна**
Кафедра аналитической, физической и коллоидной химии. Московский государственный университет дизайна и технологии. Ул. Садовническая, 33, стр.1, г. Москва, 115035. Россия.
Тел.: (495) 955-33-77. E-mail: linasimanenkova@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *электроформование, аминосодержащие полимеры, Eudragit E, хитозан.*

Аннотация

Показана возможность получения ультратонких волокон методом электроформования из аминосодержащего сополиакрилметакрилата Eudragit E в органических растворителях и в водных растворах уксусной кислоты. Проведена оптимизация процесса электроформования на установке для бесфильерного формования Nanospider™. При формовании из растворов в смешанном растворителе этанол – хлороформ (60:40) получены волокна толщиной 0.5-1.0 мкм. Установлено, что использование водного раствора уксусной кислоты приводит к получению более тонких волокон. Наноразмерные волокна получены из 17-22% растворов Eudragit E в 70%-ной уксусной кислоте. Показана возможность формования хитозансодержащих волокон из смеси хитозана и Eudragit E.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Исследование новых материалов.
Регистрационный код публикации: 13-35-7-142 *Подраздел:* Композиционные материалы.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541-64. Поступила в редакцию 27 апреля 2013 г.

Материал на основе углеродных нанотрубок и полианилина для потенциометрического определения аскорбиновой кислоты в растворе

© **Милакин*[+] Константин Андреевич**, **Яременко Игорь Сергеевич**,
Кубарьков Алексей Владимирович, **Пышкина* Ольга Александровна**
и **Сергеев Владимир Глебович**

Кафедра высокомолекулярных соединений. Химический факультет. Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова. Ленинские горы, д. 1, стр. 40. г. Москва, 119992. Россия.
Тел.: (495) 939-38-77. E-mail: milakin777@yandex.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *полианилин, многостенные углеродные нанотрубки, композиционный материал, реакционная способность, аскорбиновая кислота.*

Аннотация

Синтезирован композиционный материал на основе полианилина (ПАНИ) и многостенных углеродных нанотрубок (МНТ). Показано, что введение МНТ в композит позволяет увеличить его реакционную способность в окислительно-восстановительном взаимодействии с аскорбиновой кислотой по сравнению с исходным ПАНИ. Установлено, что применение материала ПАНИ-МНТ позволяет на порядок повысить чувствительность потенциометрического определения аскорбиновой кислоты (до $1 \cdot 10^{-7}$ моль/л).

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Исследование новых материалов.
Регистрационный код публикации: 13-35-7-148 *Подраздел:* Композиционные материалы.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 544.72. Поступила в редакцию 31 июля 2013 г.

Синтез и свойства поверхности наномодифицированных подложек, полученных методом ионной имплантации

© Гончаров Виталий Викторович
Кафедра общей физики и технической механики. Институт химических технологий (г. Рубежное). ВНУ им. В. Даля. Ул. Ленина, 31. г. Рубежное, 93009. Луганская обл. Украина.
Тел.: (06453) 7-11-15. E-mail: gonch_vit@rambler.ru

Ключевые слова: *ионная имплантация, композит, подложка, нержавеющая сталь.*

Аннотация

Проведено исследование подложек на основе нержавеющей стали, полученных методом ионной имплантации. Синтезированные композиты изучены методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, сканирующей электронной микроскопии, атомной силовой микроскопии и рентгеноструктурного анализа. Установлено формирование наноразмерного слоя имплантата на поверхности носителя – нержавеющей стали. Проведен расчет глубины пробегов ионов в приповерхностном слое носителе. Свойства синтезированных образцов сопоставлены с данными для образца, полученого с применением плазмохимического метода и показана перспективность применения подложек, синтезированных с помощью ионной имплантации.

Тематический раздел: Исследование новых технологий. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Фотохимия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-7-155
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 5 июля 2013 г. УДК 544.478-03.

Синтез и изучение нанокомпозитных смешанно-оксидных фотокатализаторов получения водорода

© Фахрутдинова*[+] Елена Данияровна, **Шабалина Анастасия Валерьевна** и **Мокроусов Геннадий Михайлович**

Кафедра аналитической химии. Томский государственный университет. пр. Ленина, 36. г. Томск, 634050. Томская область. Россия. Тел.: (3822) 42-07-83. E-mail: elenli@sibmail.com

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

***Ключевые слова**: полупроводниковые фотокатализаторы, фотокаталитическое получение водорода.*

Аннотация

В данной работе были синтезированы полупроводниковые фотокатализаторы получения водорода разложением воды и водно-органических сред под действием видимого излучения. Для приготовления наноструктурированных смешанно-оксидных материалов на основе оксидов титана и цинка использовалось четыре метода: метод пропитки, метод сложноэфирных предшественников (в двух модификациях) и метод химического осаждения. Изучена структура и оптические свойства полученных материалов. Наибольшую активность в процессе выделения водорода из водно-метанольного раствора показал TiO_2, модифицированный введением меди методом пропитки – 2600 мкмоль/г ч.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-7-163
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения"*.http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 23 июля 2013. УДК 541.64.

Олигофениленсульфиды с концевыми тиольными группами

© Неделькин[1]* Владимир Иванович, **Зачернюк[1+] Борис Александрович**, **Андрианова[1] Ольга Борисовна**, **Соловьева[1] Екатерина Николаевна**, **Зачернюк[2] Александр Борисович** и **Чернова[1] Наталья Сергеевна**

[1] *Кафедра теоретической химии. Московский государственный университет технологий и управления им. К.Г. Разумовского. Ул. Земляной Вал, 73. г. Москва, 109044. Россия. Тел.: (495) 640-54-36. E-mail: zachern@rambler.ru*

[2] *Лаборатория элементоорганических полимеров. Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова. Ул. Профсоюзная, 70. г. Москва, 117393. Россия. Тел.: (495) 332-58-62. E-mail: a_zacher@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

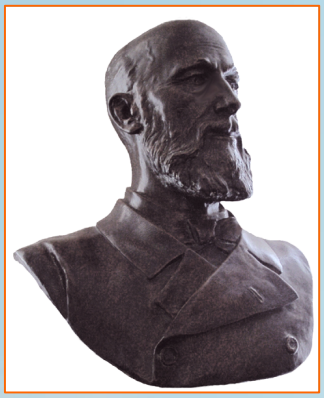
Ключевые слова: *олигофениленсульфиды, тиольные группы, полиариленсульфиды, поликонденсация, α, ω- олигофениленсульфиддитиолы, телехелевые олигомеры, олиго(фениленсульфид)-металлосульфиды.*

Аннотация

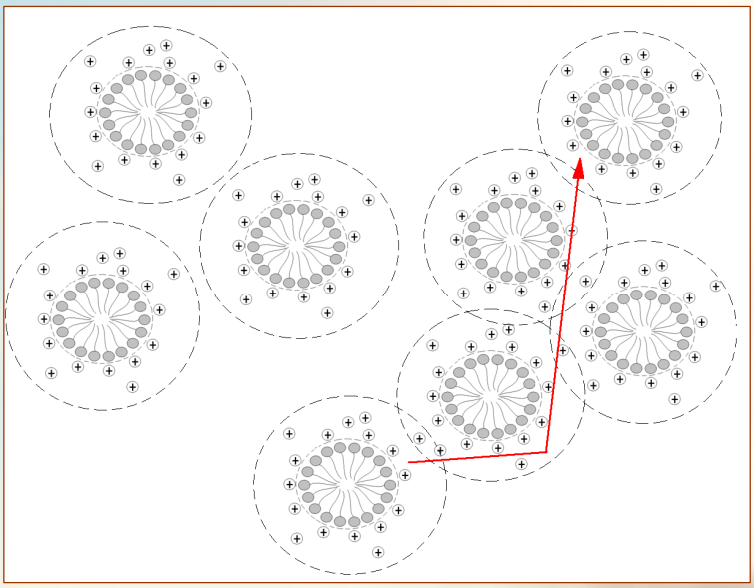
Проведена химическая модификация олигофениленсульфидов за счет введения в цепь реакционноспособных концевых тиольных групп. Взаимодействием изомерных олигофениленсульфидов с гидросульфидом натрия синтезированы телехелевые α,ω-олигофениленсульфиддитиолы. Исследо-вана реакционная способность тиольных групп α,ω-олигофениленсульфиддитиолов в реакциях с солями двухвалентных металлов. Поликонденсацией α,ω-олигофениленсульфиддитиолов с ацетатами свинца и кадмия получены термостойкие олиго(фениленсульфид)-металлосульфиды со связью металл–сера в основной цепи.

Butlerov Communications

No.8, Vol.35. 2013



ISSN 2074-0948



ISSN 2074-0212

National Edition in Russian:

Бутлеровские сообщения

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-8-1
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 4 мая 2013 г. УДК 539.194: 535.343:535.37.

Возбужденные электронные состояния и интеркомбинационная конверсия в филлохиноне

© Цеплина[+] Светлана Николаевна, **Цеплин* Евгений Евгеньевич**
и **Хвостенко Ольга Григорьевна**
Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук. Проспект Октября, 151. г. Уфа, 450075. Россия. Тел.: (347) 292-14-17. E-mail: sn_tseplina@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *синглет-триплетная интеркомбинационная конверсия, филлохинон, возбужденные спектроскопические состояния.*

Аннотация

Получены спектры оптического поглощения, люминесценции и возбуждения филлохинона (витамина К1). На основании расчетов TDDFT B3LYP/6-31+G(d,p) проведено отнесение полос поглощения к определенным синглетным переходам. Выявлено, что в филлохиноне регистрируется два разных спектра возбуждения, в зависимости от длины волны регистрации, один из которых связан с процессом флуоресценции, а другой – фосфоресценции, в согласии также с соответствующим отнесением полос люминесценции. На основе комплексного анализа спектров поглощения, люминесценции и возбуждения, а также применяя правило отбора показано, что интеркомбинационная конверсия в филлохиноне преимущественно происходит между состояниями S_1 и T_2.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-8-9
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции «Структура и динамика молекулярных систем». Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 13 мая 2013 г. УДК 539.2.

Квартетные состояния отрицательных молекулярных ионов тетрацианохинодиметана (TCNQ)

© **Хвостенко* Ольга Григорьевна**, **Хатымова[+] Ляйсан Зявдатовна**, **Лукин Владимир Гаврилович**, **Цеплин Евгений Евгеньевич** и **Туймедов Георгий Михайлович**

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук (ИФМК УНЦ РАН). Проспект Октября, 151. г. Уфа, 450075. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 292-14-17. E-mail: khv@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *резонансный захват электронов молекулами, долгоживущие отрицательные ионы, тетрацианохинодиметан.*

Аннотация

С помощью масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов молекулами зарегистрированы аномально долгоживущие (миллисекунды) отрицательные молекулярные ионы тетрацианохинодиметана (tetracyanoquinodimethane – TCNQ), образующиеся в нескольких резонансных состояниях системы «молекула + электрон» в результате присоединения к молекуле, находящейся в газовой фазе, электронов с энергиями выше нулевой. Показано, что аномально высокое время жизни ионов TCNQ обусловлено образованием ионов-квартетов из ионов-дублетов за счет интеркомбинационной конверсии. Полученные результаты могут иметь значение для понимания свойств TCNQ при его использовании в микроэлектронных устройствах на основе одиночной молекулы и эффекта отрицательного дифференциального сопротивления, управляющего, как известно, работой таких устройств.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-8-14 *Подраздел:* Жидкие кристаллы.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 532.783+544.25. Поступила в редакцию 18 июня 2013 г.

Влияние хирального допанта на особенности ориентационных переходов в каплях нематохолестерика

© Тимиров[+] Юлай Ильдарович, **Скалдин* Олег Алексеевич,**
Гареева Елена Рафаиловна и **Каюмов Ильдар Раилович**
Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук. пр. Октября, 151. г. Уфа, 450075. Россия. E-mail: scala@anrb.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *хиральный допант, нематохолестерические жидкие кристаллы, ориентационные структуры, дефекты.*

Аннотация

Изучены ориентационные квазистатические превращения в каплях нематохолестерического жидкого кристалла, находящихся в изотропном окружении при изменении концентрации холестерического допанта и под действием внешнего электрического поля. Рассмотрен случай, когда радиус капли (R) меньше или порядка равновесного шага спирали (P), индуцированного допантом. Показано, что существует критическая концентрация хирального допанта, выше которой граница раздела жидкий кристалл с изотропной фазой с уменьшением P инициирует рост деформационного поля с корреляционной длиной, зависящей P. В случае действия электрического поля показано, что процесс трансформации начальной гомеотропной ориентации молекул жидкого кристалла рассматриваемых капель носит беспороговый характер. Такое поведение границы жидкий кристалл – изотропная фаза связано с присутствием малых добавок холестерика, приводящих с увеличением напряжения к непрерывному росту эффективного размера деформационного поля от границы раздела жидкий кристалл – изотропная фаза.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-8-20 *Подраздел:* Нанохимия.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 544.032.13. Поступила в редакцию 6 мая 2013 г.

Особенности образования стабильных дисперсий многостенных углеродных нанотрубок в присутствии поликарбоновых кислот

© Пышкина*[+] Ольга Александровна, **Боева Жанна Александровна**,
Волосова Надежда Сергеевна и **Сергеев Владимир Глебович**
Кафедра высокомолекулярных соединений. Химический факультет. Московский государственный университет. Ул. Ленинские горы, д.1, стр. 40. г. Москва, 119992. Россия.
Тел.: (495) 939-38-77. E-mail: pyshkina@genebee.msu.su

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *многостенные углеродные нанотрубки, поликарбоновые кислоты, стабильные дисперсии.*

Аннотация

Показано, что диспергирование многостенных углеродных нанотрубок в водных растворах поликарбоновых кислот различных молекулярных масс приводит к разрушению их агрегатов и образованию стабильных дисперсий. Установлено, что увеличение молекулярной массы поликарбоновой кислоты приводит к увеличению количества перешедших в дисперсию многостенных углеродных нанотрубок. Предложен механизм солюбилизации многостенных углеродных нанотрубок поликислотами.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Неорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-7-25
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 29 апреля 2013 г. УДК 544.72.05.

Исследование суспензии восстановленной окиси графена и поведения её частиц на поверхности водной субфазы

© Миронов[1a+] Евгений Павлович, Баранов[1b] Анатолий Николаевич, Квачева[3] Лариса Дмитриевна, Салецкий[1c] Александр Михайлович, Плотников[1d] Геннадий Семенович, Червонобродов[4e] Семен Павлович и Букреева[2f]* Татьяна Владимировна

[1 a)] *Кафедра общей физики и молекулярной электроники.* [b)] *Кафедра общей физики. Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова. Ленинские горы, д.1 стр.2. г. Москва, 119991. Россия.* [a)] *Тел.: (499) 135-40-20. E-mail: qvantus@mail.ru.* [b)] *Тел.: (495) 939-26-36. E-mail: barnov@physics.msu.ru.* [c)] *Тел.: (495) 939-36-32. E-mail: salzky@rambler.ru.* [d)] *Тел.: (495) 939-30-27. E-mail: plot@vega.phys.msu.ru*

[2] *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН. Ленинский проспект, 59. г. Москва, 119333. Россия.* [f)] *Тел.: (499) 135-60-10. E-mail: bukreeva@ns.crys.ras.ru*

[3] *Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук. Ул. Вавилова, 28. г. Москва, 119991. Россия.*

[4] *ООО «Карбонлайт». Институтский переулок, 9. г. Долгопрудный, 141700. Россия. Московская область.* [e)] *Тел.: (905) 582-08-25. E-mail: chervon@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *восстановленная окись графена, ванна Ленгмюра-Блоджетт, корреляционная спектроскопия рассеянного света, атомно-силовая микроскопия.*

Аннотация

Частицы восстановленной окиси графена (ВОГ) были получены из природного и искусственного графита с использованием метода химического восстановления. Эти частицы были исследованы методом атомно-силовой микроскопии. Полученные суспензии частиц в четыреххлористом углероде изучали методом корреляционной спектроскопии рассеянного света, что позволило получить их распределение по размерам до и после ультразвукового воздействия. Получены изотермы сжатия слоев частиц ВОГ для разного количества вещества, нанесённого на поверхность водной субфазы в ванне Ленгмюра. Используя данные изотермы сжатия удалось перенести методом Ленгмюра–Блоджетт слой ВОГ на подложки из кремния.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Полимерная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-8-31
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 6 мая 2013 г. УДК 54.03.

Метод диэлектрической спектроскопии как метод исследования процессов отверждения композиций на основе эпоксидных олигомеров

© **Родин**[1+] **Дмитрий Львович**, **Солопченко Александр Викторович**, **Кепман Алексей Валерьевич**, **Стефанович Сергей Юрьевич** и **Яблокова**[2]*** Марина Юрьевна**

[1] *Кафедра технологии и новых материалов;* [2] *Кафедра технологии и новых материалов. Химический факультет. Московский государственный университет. Ленинские горы, д.1, стр.11. г. Москва, 119991. Россия. Тел.:* [1)] *(916) 461-17-68;* [2)] *(495) 939-33-16. E-mail:* [1)] *robinhood89@yandex.ru;* [2)] *marapfel@yandex.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *диэлектрическая спектроскопия, эпоксидный олигомер, полисульфон, степень конверсии.*

Аннотация

Методом диэлектрической спектроскопии исследованы релаксационные процессы, проводимость и проницаемость в отверждающихся композициях на основе эпоксидного олигомера, отвердителя и модификатора. Метод диэлектрической спектроскопии позволяет оценить степень конверсии, время гелирования и застекловывания, начало фазового разделения и ряд других параметров *in vivo* при различных режимах отверждения. Проведено соотнесение данных вискозиметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии с данными диэлектрической спектроскопии, оценены физико-химические характеристики и морфология системы.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-8-42 *Подраздел:* Полимерная химия.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.64:547.39:536.4. Поступила в редакцию 6 мая 2013 г.

Тематическое направление: Управление физико-химическими свойствами полимеров путем их направленного синтеза. Часть 1.

Влияние природы сомономера на термическое поведение сополимеров акрилонитрила

© Баскаков[1] Артем Александрович, Костина[1]*+ Юлия Вадимовна
и Черникова[2]* Елена Вячеславовна

[1] *Учреждение Российской академии наук Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН. Ленинский пр., 29. г. Москва, 119991. Россия. Тел.: (495) 955-41-35. E-mail: julia@ips.ac.ru*
[2] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова. Химический факультет. Ленинские горы. г. Москва, 119991. Россия. Тел.: (495) 939-54-09. E-mail: chernikova_elena@mail.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

***Ключевые слова**: полиакрилонитрил, полисопряженная система, псевдоживая радикальная полимеризация, ИК-спектроскопия, ИК-пиролиз.*

Аннотация

Изучены закономерности образования сополимеров акрилонитрила в присутствии малых добавок сомономеров – стирола и *трет*-бутилакрилата – в псевдоживой радикальной полимеризации под действием агентов обратимой передачи цепи. Установлено влияние природы сомономера на скорость образования и структуру полисопряженной системы при термическом воздействии на синтезированные сополимеры.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Композиционные материалы. *Регистрационный код публикации:* 13-35-8-51
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем"*. Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 1 июня 2013 г. УДК 544.52:621.039.

Формирование Fe-содержащих функциональных материалов и изучение их активности в процессе фотохимического выделения водорода

© Баталова[+] Валентина Николаевна, **Мокроусов* Геннадий Михайлович**, **Скворцова Лидия Николаевна** и **Наумова Людмила Борисовна**
Кафедра аналитической химии. Национальный исследовательский Томский государственный университет. Пр. Ленина,36. г. Томск, 634050. Томская область. Россия.
Тел.: (3822) 42-10-41. E-mail: batvn@sibmail.com

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова*: фотокатализ, деградация органических токсикантов, выделение водорода, нитрид кремния, нитрид бора, торф, цеолиты.*

Аннотация

В работе исследованы железосодержащие композиты на основе нитридов бора и кремния, цеолиты и торф, модифицированные ионами Fe(III) и Fe(II), в условиях совмещения процессов разрушения органических загрязнителей воды с получением водорода. Проведена оценка скорости выделения водорода (мл/ч) и производительность исследуемых композитов по выделению водорода (мкмоль/ч·г) из водных растворов муравьиной и щавелевой кислот, гидразина и фенольных соединений при облучении светом. Показана принципиальная возможность использования природных сорбентов - торфа и цеолитов, модифицированных железом, а также нитридов кремния и бора с фазой железа для одновременной очистки воды от органических токсикантов и получения водорода. Установлено, что генерация водорода наиболее эффективна в системах с нитридом бора, муравьиной кислотой и гидразином.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-8-59
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 2 июля 2013 г. УДК541.49:546.824'547.477.

Цитраты титана(IV) в водно-хлоридных растворах

© **Безрядин**[1]*+ **Сергей Геннадьевич**, **Чевела**[2]* **Владимир Всеволодович**, **Айсувакова**[1] **Ольга Павловна** и **Иванова**[2] **Валентина Юрьевна**
[1] *Кафедра химии. Оренбургский государственный аграрный университет. Ул. Челюскинцев, 18. г. Оренбург, 460014. Оренбургская область. Россия. Тел.:(3532) 77-95-06. E-mail: sergbezryadin@mail.ru*
[2] *Кафедра неорганической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова Казанского (Приволжского) федерального университета. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-54-16.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *цитраты титана(IV), комплексообразование, потенциометрическое титрование, математическое моделирование.*

Аннотация

Методом потенциометрического титрования в сочетании с математическим моделированием изучена система титан(IV) – лимонная кислота для соотношений металл:лиганд 1:1, 2:3, 1:2 и 1:3. Рассчитаны состав, устойчивость и доли накопления цитратов титана(IV) в водном растворе. Обнаружено, что при эквимолярном соотношении реагентов образуются ди-, три- и тетраядерные частицы, а для избытка лиганда характерно доминирование моноядерных комплексных форм $[Ti(H_{4-n}Cit)_3]^{4-3n}$ (n=2-4) при pH≤8 и $[Ti(OH)_2(Cit)_2]^{6-}$ при pH≥8.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-8-67
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 8 июля 2013 г. УДК 541.49:547.477'546.824'664.

Гетероядерные цитраты титана(IV) и диспрозия(III) в водных растворах

© **Безрядин**[1]*+ **Сергей Геннадьевич**, **Чевела**[2]* **Владимир Всеволодович**, **Айсувакова**[1] **Ольга Павловна** и **Иванова**[2] **Валентина Юрьевна**

[1] *Кафедра химии. Оренбургский государственный аграрный университет. Ул. Челюскинцев, 18. г. Оренбург, 460014. Оренбургская область. Россия. Тел.:(3532) 77-95-06. E-mail: sergbezryadin@mail.ru*

[2] *Кафедра неорганической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова Казанского (Приволжского) Федерального Университета. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-54-16.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *гетероядерные цитраты титана(IV) и диспрозия(III), комплексообразование, ядерная магнитная релаксация, математическое моделирование.*

Аннотация

Методом ядерной магнитной релаксации в сочетании с математическим моделированием изучена система титан(IV) – диспрозий(III) – лимонная кислота при мольном соотношении реагентов 1:1:4 и 1:1:6. Определены состав, устойчивость и доли накопления гетероядерных комплексов титана(IV) и диспрозия(III) с лимонной кислотой в водных растворах. Обнаружено образование форм состава 1:1:2, 1:1:3, 1:1:4, 2:2:8, 1:1:6.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-8-74 *Подраздел:* Физическая химия.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 577.543.42. Поступила в редакцию 12 июня 2013 г.

Структура и солюбилизационные свойства водных растворов додецилсульфатов лития и натрия

© **Богданова**[1+] **Лилия Рустемовна**, **Беневоленская**[2] **Надежда Николаевна**,
Боровская[2] **Анастасия Олеговна**, **Шарипова**[2] **Эллина Айратовна**,
Зуева[2] **Ольга Стефановна** и **Зуев**[1]* **Юрий Федорович**

[1] *Казанский институт биохимии и биофизики КазНЦ РАН. Ул. Лобачевского, 2/31.*
г. Казань, 420111. Республика Татарстан. Россия.
[2] *Казанский государственный энергетический университет. Ул. Красносельская, 51.*
г. Казань, 420066. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 292-62-88. E-mail: bogdanova.lilly@gmail.com

*Ведущий направление, [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *ПАВ, противоионы, мицеллы, структура, свойства.*

Аннотация

Методом кондуктометрии исследовано мицеллообразование додецилсульфатов лития (ДСЛ) и натрия (ДСН) в водных растворах. Показано, что помимо перегиба вблизи критической концентрации мицеллообразования (ККМ) на концентрационных зависимостях электропроводности существует еще один перегиб выше ККМ. Предложено феноменологическое объяснение этого явления, основанное на перекрытии диффузных областей двойных электрических слоев мицелл. Определены солюбилизационные свойства домицеллярных и мицеллярных растворов ДСН и ДСЛ.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-8-81
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции *"Структура и динамика молекулярных систем"*. Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 10 мая 2013 г. УДК 541.183:532.64.

Корреляции краевых углов жидкостей на поверхности полимерных пленок с транспортными свойствами аморфных полимеров

© Богданова*+ Юлия Геннадиевна и **Должикова Валентина Дмитриевна**
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова. Химический факультет. Ленинские горы, 1, стр. 3. г. Москва, 119991. Россия. Тел.: (495) 939-32-18. E-mail: yulibogd@yandex.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *смачивание, поверхностная энергия, пленки аморфных полимеров, свободный объем, газопроницаемость, нанофильтрация.*

Аннотация

Методом смачивания определена удельная свободная поверхностная энергия пленок аморфных полимеров различных классов. Продемонстрирована взаимосвязь величин дисперсионной составляющей поверхностной энергии со свободным объемом и газопроницаемостью полимеров. Показаны возможности использования изотерм смачивания для определения концентрации спирта, соответствующей началу его сорбции, при нанофильтрации водно-этанольных смесей через сплошные полимерные мембраны.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-8-88 *Подраздел:* Физическая химия.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 547.16, 544.252.23. Поступила в редакцию 3 июля 2013 г.

Поведение гребнеобразных жидкокристаллических стереорегулярных циклолинейных метилсилоксановых сополимеров с хиральными мезогенными группами на границе раздела фаз вода-воздух

© **Малахова**[1,2+] **Юлия Николаевна**, **Тальдрик**[3] **Андрей Владимирович**,
Макарова[3]* **Наталия Николаевна** и **Бузин**[1] **Александр Игоревич**

[1] *Лаборатория функциональных полимерных структур. Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Российской академии наук. Ул. Профсоюзная, 70. г. Москва, 117393. Россия. Тел.: (495) 332-58-20. E-mail: j.malakhova@mail.ru*

[2] *Лаборатория полимерных материалов. Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт». Пл. Академика Курчатова, 1. г. Москва, 123098. Россия.*

[3] *Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук. Ул. Вавилова, 28. г. Москва, 119334. Россия.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *жидкокристаллические сополимеры, ленгмюровский монослой.*

Аннотация

Исследованы изотермы поверхностного давления и поверхностного потенциала, а также морфология непосредственно на межфазной границе вода-воздух серии гребнеобразных жидкокристаллических стереорегулярных циклолинейных метилсилоксановых сополимеров с хиральными мезогенными группами двух типов. Оценено влияние химической структуры мезогенной группы, стереорегулярности сополимера, изменения температуры субфазы на термодинамические и электрофизические свойства поверхностного слоя.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-8-94 *Подраздел:* Физическая химия.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 544. Поступила в редакцию 17 мая 2013 г.

Исследование физико-химических свойств водной дисперсии энтеросорбента полисорба МП

© Шкляева* Алена Сергеевна, **Васильева[+] Оксана Валерьевна** и **Кучук Вера Ивановна**
Санкт-Петербургская химико-фармацевтическая академия. Ул. Профессора Попова, д.14, лит. А.
г. Санкт-Петербург, 197101. Россия. Тел.: 8-981-760-99-61.
E-mail: Oxana.Vasilieva@pharminnotech.com

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *Полисорб МП, адсорбция, фотоколориметр, вискозиметр, адсорбат.*

Аннотация

Исследован ряд физико-химических (вязкость, электрическая проводимость, электрическая подвижность, адсорбционная способность) характеристик энтеросорбента Полисорб МП. Показано, что адсорбционная активность данного препарата по отношению к ряду веществ органического и неорганического происхождения достаточно высокая. Оценено количество адсорбционных центров поверхности Полисорба, рассмотрен механизм процесса адсорбции.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-8-100 *Подраздел:* Физическая химия.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 538.955; 53.098. Поступила в редакцию 26 июня 2013 г.

Зависимость времени поперечной релаксации T_2 от скорости потока жидкости в пористой среде

© Лоскутов Валентин Валентинович
Кафедра теоретической физики и методики обучения физике.
Марийский государственный университет. пл. Ленина, 1. г. Йошкар-Ола, 424000. Россия.
Тел.: (8362) 41-22-50. E-mail: val_losk@rambler.ru

Ключевые слова: *ЯМР, пористые среды, релаксация, поток.*

Аннотация

Для изучения структуры различных пористых сред и процессов, протекающих в этих пористых средах. Широко используется метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Если к пористому образцу приложен внешний градиент давления, то в образце возникает движение заполняющей среду жидкости, что приводит к дополнительному вкладу в затухание сигнала ЯМР и изменение распределения времен релаксации T_2. В данной получено выражение, определяющее зависимость времени поперечной релаксации жидкости, заключенной в пористую среду, от скорости потока. Проведена экспериментальная проверка полученного выражения. Показано, что при малых скоростях потока скорость поперечной релаксации пропорциональная скорости потока жидкости.

Тематический раздел: Теоретические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-8-105
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения"*.http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 28 июля 2013. УДК 539.143.43:539.199.

Топологическая структура и самодиффузия в линейных гибкоцепных полимерах

© Кулагина Татьяна Павловна, **Карнаух*[+] Григорий Ефимович**, **Варакина Варвара Александровна**, **Смирнов Лев Петрович** и **Кузина Анастасия Николаевна**
Институт проблем химической физики РАН. Пр-т. Семенова, 1. г. Черноголовка, 142432. Московская обл. Россия. Тел.: (496) 522- 18-79. E-mail: tan@icp.ac.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова*: ядерный магнитный резонанс, линейные гибкоцепные полимеры спад свободной индукции, физическая сетка зацеплений, стимулированное эхо, самодиффузия.*

Аннотация

В работе развита теория спадов свободной индукции в линейных гибкоцепных полимерах с различной средней длиной полимерной цепи в широком температурном интервале. Показано, что с ростом средней молекулярной массы межузловых цепей M_w изменяется топологическая структура линейных полимеров, и при $M_w > 10^5$ образуется физическая сетка зацеплений. Получена корреляционная функция молекулярных движений, которая применена для расчета диффузионного затухания спиновых эхо.

Предложен общий подход к вычислению сигналов диффузионного затухания спиновых эхо и его применение к определению коэффициента самодиффузии в линейных полимерах с различной топологической структурой, который позволил объяснить наблюдаемую экспериментально аномальную диффузию.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-8-116 *Подраздел:* Физическая химия.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения"*.http://butlerov.com/readings/
УДК 541.49:547.477.1'546.666. Поступила в редакцию 27 июля 2013.

Изучение реакций комплексообразования в системе эрбий(III) – лимонная кислота в водном растворе

© Иванова[1]*+ Валентина Юрьевна, Чевела[1]* Владимир Всеволодович, Ефремова[1] Юлия Владимировна и Безрядин[2] Сергей Геннадьевич

[1] *Кафедра неорганической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-42-30. E-mail: Valja331@rambler.ru*

[2] *Кафедра химии. Оренбургский государственный аграрный университет. Ул. Челюскинцев, 18. г. Оренбург, 460014. Оренбургская область. Россия. E-mail: sergbezryadin@mail.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *моно- и полиядерные цитратные комплексы, эрбий(III); pH-метрическое титрование, ядерная магнитная релаксация, математическое моделирование; стехиометрия, устойчивость комплексных соединений.*

Аннотация

Методами математического моделирования результатов pH-метрического титрования и протонной магнитной релаксации изучены реакции комплексообразования в системе *эрбий(III) – лимонная кислота* в интервале pH 2-10 при температуре 25 °C. Определена стехиометрия образующихся цитратных комплексов эрбия(III), рассчитаны константы формализованных равновесий их образования. Для эрбия(III) характерны моноядерные и биядерные цитраты различной степени протонизации. Образование высокополиядерных цитратов эрбия(III) не обнаружено. При трёхкратном избытке лиганда биядерные комплексы практически не образуются, во всём диапазоне pH доминируют моноядерные формы состава 1:3.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-8-126 *Подраздел:* Физическая химия.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения"*.http://butlerov.com/readings/
УДК. 543.422.25. Поступила в редакцию 31 июля 2013.

Оценки констант сверхтонкого взаимодействия и распределение спиновой плотности в области ядер меди в кубаните

© Погорельцев[1]* Александр Ильич, **Матухин[1]* Вадим Леонидович**,
Корзун[2] Борис Васильевич и **Гавриленко[1+] Андрей Николаевич**

[1] *Кафедра физики. Казанский государственный энергетический университет. ул. Красносельская, 51. г. Казань, 420066. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (917) 930-42-46. E-mail: ang_2000@mail.ru*
[2] *ГНПО "Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению". ул. П. Бровки, 19. г. Минск, 220072. Республика Беларусь. E-mail: korzun@physics.by*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *резонансная спектроскопия, ЯМР во внутреннем магнитном поле, градиент электрического поля (ГЭП), квадрупольные параметры, ab initio расчеты электронной структуры, распределение электронной плотности, сверхтонкие взаимодействия, распределение спиновой плотности.*

Аннотация

Экспериментально изучены резонансные спектры ЯМР ^{63,65}Cu в локальном поле и с использованием кластерного подхода выполнены *ab initio* оценки градиента электрического поля на ядрах меди в кубаните $CuFe_2S_3$. Расчеты проведены в рамках самосогласованного ограниченного метода Хартри-Фока с открытыми оболочками (SCF-LCAO-ROHF). Наибольший кластер, для которого проводили расчеты, имел формулу $Cu_7Fe_{14}S_{29}^{n}$ (R ~ 6Å, 50 атомов), где n-заряд кластера. Наилучшее совпадение значений квадрупольных параметров (квадрупольной частоты ν_Q и параметра асимметрии тензора градиента электрического поля η), определенных экспериментально ($\nu_Q \approx 7.3$ МГц, $\eta = 0.82$) и расчетным путем ($\nu_Q \sim 7.38$ МГц и $\eta \sim 0.87$), получено для кластера $Cu_7Fe_{14}S_{29}^{10}$, для которого построены карты распределения электронной и спиновой плотности в области квадрупольного ядра меди и выполнены оценки констант сверхтонкого взаимодействия. На основе анализа полученного распределения электронной плотности предположено, что связь в кубаните не является ковалентной. Диаграмма энергетических уровней, рассчитанная в приближении ROHF, достаточно хорошо определяет кубанит как полупроводник с очень узкой щелью LUMO–HOMO и соответствует представлению о кубаните как полупроводнике.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-8-126 *Подраздел:* Физическая химия.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения"*.http://butlerov.com/readings/
УДК. 543.422.25. Поступила в редакцию 31 июля 2013.

Оценки констант сверхтонкого взаимодействия и распределение спиновой плотности в области ядер меди в кубаните

© Погорельцев[1*] Александр Ильич, **Матухин[1*] Вадим Леонидович**,
Корзун[2] Борис Васильевич и **Гавриленко[1+] Андрей Николаевич**

[1] *Кафедра физики. Казанский государственный энергетический университет. ул. Красносельская, 51. г. Казань, 420066. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (917) 930-42-46. E-mail: ang_2000@mail.ru*

[2] *ГНПО "Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению". ул. П. Бровки, 19. г. Минск, 220072. Республика Беларусь. E-mail: korzun@physics.by*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *резонансная спектроскопия, ЯМР во внутреннем магнитном поле, градиент электрического поля (ГЭП), квадрупольные параметры, ab initio расчеты электронной структуры, распределение электронной плотности, сверхтонкие взаимодействия, распределение спиновой плотности.*

Аннотация

Экспериментально изучены резонансные спектры ЯМР ^{63,65}Cu в локальном поле и с использованием кластерного подхода выполнены *ab initio* оценки градиента электрического поля на ядрах меди в кубаните $CuFe_2S_3$. Расчеты проведены в рамках самосогласованного ограниченного метода Хартри-Фока с открытыми оболочками (SCF-LCAO-ROHF). Наибольший кластер, для которого проводили расчеты, имел формулу $Cu_7Fe_{14}S_{29}^{n}$ (R ~ 6Å, 50 атомов), где n-заряд кластера. Наилучшее совпадение значений квадрупольных параметров (квадрупольной частоты ν_Q и параметра асимметрии тензора градиента электрического поля η), определенных экспериментально ($\nu_Q \approx 7.3$ МГц, $\eta = 0.82$) и расчетным путем ($\nu_Q \sim 7.38$ МГц и $\eta \sim 0.87$), получено для кластера $Cu_7Fe_{14}S_{29}^{10}$, для которого построены карты распределения электронной и спиновой плотности в области квадрупольного ядра меди и выполнены оценки констант сверхтонкого взаимодействия. На основе анализа полученного распределения электронной плотности предположено, что связь в кубаните не является ковалентной. Диаграмма энергетических уровней, рассчитанная в приближении ROHF, достаточно хорошо определяет кубанит как полупроводник с очень узкой щелью LUMO–HOMO и соответствует представлению о кубаните как полупроводнике.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Коллоидная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-8-133
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения"*.http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 21 июля 2013. УДК.541.49.183:546.562.'723:547.854.5.

Взаимодействие глицина с катионами железа(III) и никеля(II) в водных растворах и на поверхности их оксидов

© **Дмитриева* Ирина Борисовна**, **Чухно**[+] **Александр Сергеевич** и **Новичков Роман Владимирович**

Кафедра физической и коллоидной химии. Санкт-Петербургская государственная химико-фармацевтическая академия. http://www.spcpa.ru/ Ул. Профессора Попова, 14. г. Санкт-Петербург, 197376. Россия. Тел.: (812) 234-11-38. E-mail: irina@dmitriyev.ru, alex-chuhno@yandex.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *глицин, электрокинетические свойства, микроэлектрофорез, изоэлектрическая точка, адсорбция, оксиды железа(III) и никеля(II).*

Аннотация

Исследованы электроповерхностные свойства (электрокинетический потенциал, изоэлектрическая точка, адсорбция) оксидов NiO и Fe_2O_3 в водных растворах глицина в зависимости от его концентрации, pH растворов и времени адсорбции. Установлено, что глицин во всех системах адсорбируются специфически, причём на Fe_2O_3 определяющим специфическую адсорбцию является анион, а на NiO – катион. Показано, что специфическая адсорбция определяющего аниона происходит с образованием донорно-акцепторной связи по $-NH_2$ группе, а определяющего катиона по –COOH группе. Обнаружено, что глицин адсорбируется на NiO сильнее, чем на Fe_2O_3 вследствие более сильного взаимодействия катиона железа с OH^- ионами.

Краткое сообщение *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-8-138 *Подраздел:* Коллоидная химия.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"Структура и динамика молекулярных систем". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 547.233 : 661.185.23. Поступила в редакцию 31 мая 2013 г.

Мицеллообразование в водных растворах катионных ПАВ с бициклической головной группой. Данные ЯМР-ИГМП.

© Гайсин[1+] Наиль Кивамович, **Гнездилов[2] Олег Иванович**,
Баширов[1] Фэрид Исрафилович, **Жильцова[3] Елена Петровна**,
Захарова[3]* Люция Ярулловна, **Паширова[3] Татьяна Никандровна**
и **Лукашенко[3] Светлана Сергеевна**

[1] *Кафедра физики. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. E-mail: NailGaisin@yandex.ru*
[2] *Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского. ул. Сибирский тракт, 10/7. г. Казань, 420029. Россия.*
[3] *Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова. ул. Арбузова. г. Казань, 420088. Россия. E-mail: lucia@iopc.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *дикатионное поверхностно-активное вещество, мицеллообразование, радиус мицелл, число агрегации, ЯМР-спектроскопия.*

Аннотация

Методом ЯМР-ИГМП изучен процесс мицеллообразования дикатионного поверхностно-активного вещества с головной группой бициклического строения 4-этил-1-тетрадецил-1,4-диазониабицикло[2.2.2]октан дибромида в тяжелой воде. Определена критическая концентрация мицеллообразования, установлены радиусы мицелл и чисела их агрегации. Проведено сопоставление полученных данных с характеристиками мицеллообразования монокатионного 4-аза-1-тетрадецил-1-азониабицикло[2.2.2]октан бромида.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Фазовые равновесия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-8-141
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции "*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения"*.http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 7 августа 2013. УДК 544-974.

Фазовое равновесие и взаимодиффузия в системе полистирол-полисилоксан

© Потеряев[1+] Аркадий Анатольевич, **Чалых[1]* Анатолий Евгеньевич**, **Суровяткина[1] Екатерина Владимировна**, **Будылин[1] Никита Юрьевич**, **Копылов[2] Виктор Михайлович** и **Шрагин[3] Денис Игоревич**

[1] *Лаборатория структурно-морфологических исследований. Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук. Ленинский проспект, 31, корп. 4. г. Москва, 119071. Россия. Тел.: (495) 955-46-53. E-mail: budylin_nikita@mail.ru*

[2] *Кафедра химии и технологии элементоорганических соединений имени К.А. Андрианова. Государственный научно-исследовательский Институт химии и технологии элементоорганических соединений. ш. Энтузиастов, 38. г. Москва, 111123. Россия. Тел.: (495) 673-49-53.*

[3] *Лаборатория элементоорганических полимеров. Институт синтетических полимерных материалов им Н.С. Ениколопова РАН. Профсоюзная, 70. г. Москва, 117393. Россия. Тел.: +7 (495) 334-88-47.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова*: фазовые равновесия, диффузия, фазовые диаграммы, полистирол, полидиметилсилоксан.*

Аннотация

Методом оптической интерферометрии изучены диффузионные зоны, фазовые равновесия и трансляционная подвижность макромолекул в смесях полистирол-полиметилсилоксан в широком температурном, молекулярно массовом и концентрационном диапазонах. Построены диаграммы фазовых состояний, рассчитаны коэффициенты взаимодиффузии, энергии активации трансляционной подвижности и термодинамические параметры смешения компонентов.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Спектральные исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-8-150 *Подраздел:* Физическая химия.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения"*.http://butlerov.com/readings/
УДК 539.193/194. Поступила в редакцию 6 августа 2013.

Микроволновый спектр и заторможенное псевдовращение в тетрагидрофуране

© **Файзуллин[+] Марат Гаязович**, **Галеев Рустэм Вильевич** и **Мамлеев* Айрат Хабибович**
Лаборатория микроволновой спектроскопии. Институт физики молекул и кристаллов
Уфимского научного центра Российской академии наук (ИФМК УНЦ РАН).
Проспект Октября, 151. г. Уфа, 450075. Республика Башкортастан.
Тел.: (347) 235-95-22. E-mail: mwsm@anrb.ru , fayzullinmg@gmail.com

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова*: тетрагидрофуран, заторможенное псевдовращение, микроволновый спектр, колебательно-вращательные переходы.*

Аннотация

Идентифицированы псевдовращательно-вращательные переходы между псевдовращательными состояниями v = 4, 5 тетрагидрофурана в диапазоне частот 11-52 ГГц. Проведен совместный анализ наблюдаемых в настоящей работе и ранее идентифицированных псевдовращательно-вращательных и вращательных переходов трех состояний v = 4, 5, 6 заторможенного псевдовращения. Установлены типы симметрии состояний, определен энергетический интервал ΔE_{45} и уточнён интервал ΔE_{56}. По значениям ΔE_{45}, ΔE_{56}, ранее найденным значениям ΔE_{01}, ΔE_{02}, ΔE_{23}, ΔE_{78} и набору псевдовращательных переходов в дальней ИК-области определена потенциальная функция заторможенного псевдовращения молекулы.

Краткое сообщение *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-8-158 *Подраздел:* Физическая химия.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 544.72. Поступила в редакцию 31 июля 2013 г.

Сорбция ионов железа(III) на синтетических катионитах в водных растворах

© Смирнова* Лариса Георгиевна, **Смирнов[+] Александр Константинович**,
Аль Ансари Светлана Васильевна, **Стародубцева Екатерина Сергеевна**
и **Васильев Андрей Константинович**

Кафедра общей химии. Марийский государственный университет. Пл. Ленина, 1.
г. Йошкар-Ола, 424000. Республика Марий Эл. Россия. Тел.: (8362) 42-40-31. E-mail: aksmi@yandex.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *кинетика сорбции, температурные зависимости, энергия активации, константы сорбции.*

Аннотация

Исследованы процессы сорбции ионов железа(III) из водных растворов солей хлоридов на слабокислом катионите КБ-4 и на сильнокислых катионитах КУ-1, КУ-2, КУ-2-8. Изучена кинетика сорбции, определены температурные зависимости, вычислены энергии активации сорбционных процессов. Рассчитаны константы адсорбции ионов Fe(III), определены энергии Гиббса сорбционных процессов.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Краткое сообщение**
Подраздел: Физическая химия. Регистрационный код публикации: 13-35-8-161
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
"*Структура и динамика молекулярных систем*". Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 31 июля 2013 г. УДК 543.2.

Оптимизация фотометрического определения железа в воде

© Апакаева Анастасия Валериевна, **Аль Ансари* Светлана Васильевна**,
Смирнова Лариса Георгиевна и **Смирнов[+] Александр Константинович**
Кафедра общей химии. Марийский государственный университет. пл. Ленина, 1.
г. Йошкар-Ола, 424000. Республика Марий Эл. Россия. Тел.: (8362) 42-55-94. E-mail: aksmi@yandex.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

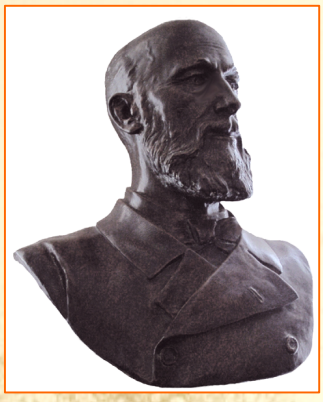
Ключевые слова: *анализ, экстракция, концентрирование.*

Аннотация

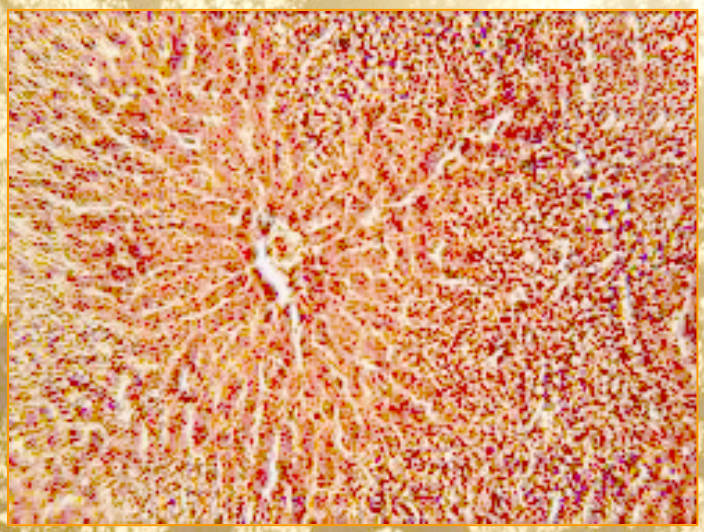
Результаты исследования показали, что ацетилацетон может быть рекомендован как фотореагент при определении железа в различных объектах, в том числе и в воде. Подобраны оптимальные условия количественного определения Fe(III) при использовании в качестве фотореагента ацетилацетона. Показано отсутствие мешающего влияния Cu(II) при использовании ацетилацетона как фотореагента. Выявлена более высокая чувствительность ацетилацетонатного метода определения Fe(III) по сравнению с регламентированным сульфосалицилатным методом.

Butlerov Communications

No.9, Vol.35. 2013



ISSN 2074-0948



ISSN 2074-0212

National Edition in Russian:

Бутлеровские сообщения

Тематический раздел: Квантово-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-9-1
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 5 июня 2013 г. УДК 544.43.

Тематическое направление: Кинетика и механизм реакций ацильного переноса. Часть 4.

Квантово-химическое моделирование механизма взаимодействия бензоилхлорида и бензолсульфонилхлорида с аминосоединениями разных классов

© Кочетова[1] Людмила Борисовна, **Пайкова[1] Мария Геннадьевна**,
Калинина[2] Наталья Владимировна и **Кустова[1]*+ Татьяна Петровна**

[1] *Кафедра органической и биологической химии. Ивановский государственный университет. Ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (84932) 37-37-03. E-mail: kustova_t@mail.ru*

[2] *Кафедра неорганической и аналитической химии. Ивановский государственный университет. Ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (84932) 37-37-03.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *ацилирование, аминосоединения, бензоилхлорид, бензолсульфонилхлорид, квантово-химические расчеты, механизм реакции, поверхность потенциальной энергии.*

Аннотация

Рассчитаны поверхности потенциальной энергии реакций аммиака и ряда аминосоединений с бензоилхлоридом и бензолсульфонилхлоридом в газовой фазе, а также взаимодействия аммиака с хлористым бензоилом в воде в рамках континуальной модели растворителя. Показано, что все реакции протекают по согласованному механизму, при этом бензоилирование идет по маршруту с фронтальной атакой нуклеофила, тогда как аренсульфонилирование – по пути с изменяющимся углом атаки. Неспецифическая сольватация водой снижает энергию активации ацилирования аммиака по сравнению с газофазной реакцией**.**

Тематический раздел: Исследование реакционной способности. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-9-9
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 8 июля 2013 г. УДК 541.64:544.162:544.169.

Влияние природы растворителя на механизм реакции макроинициаторов анионной природы с ароматическими изоцианатами

© Давлетбаев[1]* Руслан Сагитович, Ахметшина[2+] Алсу Исламовна, Гумеров[2] Асхат Мухаметзянович, Шарифуллин[3] Рафаэль Ривхатович и Давлетбаева[2] Ильсия Муллаяновна

[1] *Кафедра материаловедения, сварки и структурообразующих технологий. Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева – КАИ. Ул. К. Маркса, 10. г. Казань, 420111. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-00-27. E-mail: darus@rambler.ru*

[2] *Кафедра технологии синтетического каучука. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (927) 422 799. E-mail: aai-89@mail.ru*

[3] *Научно-техногогический центр ОАО «НКНХ». г. Нижнекамск, 423570. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (8555) 37-97-72. E-mail: Rafael_Sharif@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *макроинициаторы анионной природы, 2,4-толуилендиизоцианат, ИК-спектроскопия, полиизоцианаты, растворитель.*

Аннотация

Методом ИК-спектроскопии исследован механизм полиприсоединения 2,4-толуилендиизоцианата к макроинициатору анионной природы в среде растворителей различной химической природы. Продуктами взаимодействия являются как изоциануратные, так и полиизоцианатные блоки ацетальной природы. Природа растворителя оказывает значительное влияние на возможность протекания реакции в том или ином направлении.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Препаративная химия.
Регистрационный код публикации: 13-35-9-14 *Подраздел:* Химия комплексных соединений.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений”
http://butlerov.com/synthesys/
УДК 547 : 548.736 : 620.193.4. Поступила в редакцию 25 мая 2013 г.

Тиосемикарбазидогидроксиэтилидендифосфоновый комплекс и его ингибиторные свойства

© Ершов[1+] Михаил Аркадьевич, Камаев[1] Евгений Викторович и Скворцов[2]* Викентий Григорьевич

[1] *Кафедра химии. Чувашская государственная сельскохозяйственная академия. Ул. К. Маркса, 29. г. Чебоксары, 428003. Чувашская Республика. Россия. Тел.: (835) 262-02-26. E-mail: ema11@mail.ru*

[2] *Кафедра химии и биосинтеза. Чувашский государственный педагогический университет им. И.Я. Яковлева. Ул. К. Маркса, 38. г. Чебоксары, 428000. Чувашская Республика. Россия. Тел.: (835) 258-67-66.*

*Ведущий направление, [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *фосфор- и азоторганические комплексы, физико-химический, рентгенофазовый, рентгеноструктурный, ИК-спектроскопический анализ, гравиметрические, коррозионно-электрохимические исследования, усталостные, коррозионно-усталостные испытания.*

Аннотация

При изотермическом испарении (25 ^{o}C) водного раствора, содержащего 1-гидроксиэтан-1,1-дифосфоновую кислоту и тиосемикарбазид, получено новое комплексное соединение – моногидрат [1-гидроксиэтан-1,1-дифосфонато(2-)]дитиосемикарбазида (тиосемикарбазидогидроксиэтилендифосфоновый комплекс). Изучена его структура и ингибиторные свойства.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-9-21
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 6 мая 2013 г. УДК 547.361 + 547.394.

Стереоспецифический синтез феромонов насекомых *E*-алкенового ряда на основе изопропил 3*E*,8-нонадиеноата – продукта каталитической теломеризации бутадиена и окиси углерода

© Ишмуратов* Гумер Юсупович, **Выдрина Валентина Афанасиевна**, **Яковлева[+] Марина Петровна**, **Насибуллина Гульшат Варисовна,** **Муслухов Ринат Рафаисович** и **Ишмуратова Наиля Мавлетзяновна**
Институт органической химии. Уфимский научный центр РАН. Просп. Октября, 71. г. Уфа, 450054. Республика Башкортостан. Россия. Факс: (3472) 35-60-66. E-mail: insect@anrb.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *изопропил 3E,8-нонадиеноат, E-моноеновые феромоны, синтез.*

Аннотация

Осуществлен стереоспецифический синтез ряда *E*-моноолефиновых компонентов половых феромонов насекомых отряда *Lepidoptera* [6*E*-нонен-1-ола и его ацетата – феромонов средиземноморской плодовой мухи *Ceratitis capitata* и дынной бабочки *Dacus cucurbitae*, а также 11*E*-тетра-децен-1-ола и его ацетоксипроизводного – феромонов фруктовой листовёртки *Archips argyrospilus* и лугового мотылька *Loxostege sticticalis* соответственно] из доступного продукта катализируемой комплексными соединениями палладия содимеризации бутадиена и окиси углерода – изопропил 3*E*,8-нонадиеноата – с использованием на ключевых стадиях реакций гидридного восстановления сложноэфирных производных, термического гидроалюминирования – окисления и кросс-сочетания диалкиллитийкупратного реагента с *пара*-толуолсульфонатным производным.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-9-25
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 16 июля 2013 г. УДК 547.815.1.

Синтез новых производных 3-нитровинилхромонов-синтонов для получения дигидроксантонов

© Палев*[+] Никита Александрович, **Пляка Вячеслав Владимирович** и **Яковлев Игорь Павлович**

Кафедра органической химии. Санкт-Петербургская государственная химико-фармацевтическая академия. Ул. Профессора. Попова, 14. Санкт-Петербург, 197376. Россия.
Тел.: (812) 234-19-65. E-mail: npalev@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *реакция Дильса-Альдера, дигидроксантон, производные 3-винилхромонов, 3-нитровинилхромоны, енамин.*

Аннотация

При взаимодействии 3-формилхромонов с нитрометаном в среде уксусной кислоты в присутствии пиридина образуются новые, ранее неизвестные производные 3-нитровинилхромонов. Скорость реакции сильно зависит от природы заместителя в шестом положении хромона. Показано, что электроноакцепторные заместители ускоряют протекание реакции, электронодонорные – замедляют. 3-нитровинилхромоны взаимодействуют с енаминами с образованием ранее неизвестных производных дигидроксантонов.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-9-28
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 547.815.1. Поступила в редакцию 16 мая 2013 г.

Бензо-γ-пиронил-3-винилкарбоновые кислоты в реакции Дильса-Альдера

© **Палев*[+] Никита Александрович**, **Чернов Никита Максимович**,
Шутов Роман Вадимович, **Щёголев Александр Евгеньевич**
и **Яковлев Игорь Павлович**

Кафедра органической химии. Санкт-Петербургская государственная химико-фармацевтическая академия. Ул. Пр. Попова, 14. г. Санкт-Петербург, 197376. Россия. Тел.: (812) 234-19-65. E-mail: npalev@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *реакция Дильса-Альдера, дигидроксантон, производные 3-винилхромонов, енамин.*

Аннотация

Хромонил-3-акриловые кислоты взаимодействуют с енаминами с образованием ранее неизвестных производных дигидроксантонов. Скорость реакции зависит от электронной природы заместителя в шестом положении хромона. Установлено, что электроноакцепторные заместители ускоряют протекание реакции, электронодонорные – замедляют. Экспериментальные данные подтверждены квантово-химическими расчетами, реакцию можно классифицировать как орбитально-контролируемую.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-9-32 *Подраздел:* Физическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 536.468. Поступила в редакцию 12 июля 2013 г.

Экспериментальное исследование интегральных характеристик зажигания смеси воздуха с парами типичного жидкого топлива неподвижным разогретым металлическим стержнем

© Волков Роман Сергеевич, **Глушков[+] Дмитрий Олегович**,
Медведев Валерий Васильевич и **Стрижак* Павел Александрович**
*Национальный исследовательский Томский политехнический университет.пр. Ленина, 30.
г. Томск, 634050. Россия. Тел.: (3822) 70-17-77, доп. 1957. E-mail: dmitriyog@tpu.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *зажигание, тепломассоперенос, испарение, окисление, жидкое топливо, разогретый стержень, время задержки зажигания.*

Аннотация

Выполнено экспериментальное исследование процесса зажигания паров типичного жидкого топлива – бензина локальным источником нагрева. Рассмотрены условия взаимодействия продуктов испарения горючего вещества с разогретым до высоких температур неподвижным стальным стержнем при непосредственном контакте конденсированного вещества с источником энергии и при его расположении на некотором расстоянии от границы испарения. Определены значения основной интегральной характеристики процесса – времени задержки зажигания. Установлено значение предельной (минимальной) температуры локального источника, при которой в системе «металический стержень – горючая жидкость – парогазовая смесь» происходит зажигание. Получена зависимость времени задержки зажигания смеси воздуха с парами бензина от расстояния между стальным стержнем и поверхностью испаряющегося топлива. Проведено сопоставление экспериментальных результатов с известными следствиями численных исследований.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-9-38 *Подраздел:* Физическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 536.4. Поступила в редакцию 17 июня 2013 г.

Экспериментальное исследование закономерностей испарения тонкораспыленной воды при движении через высокотемпературные продукты сгорания

© Волков[+] Роман Сергеевич, **Высокоморная Ольга Валерьевна**,
Кузнецов Гений Владимирович и **Стрижак* Павел Александрович**
Национальный исследовательский Томский политехнический университет.
пр. Ленина, 30. г. Томск, 634050. Россия. Тел.: (3822) 70-17-77, доп. 1957. E-mail: romanvolkov@tpu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *испарение, тепломассоперенос, продукты сгорания, пламя, капли, тонкораспыленная вода, поля скоростей.*

Аннотация

Проведено экспериментальное исследование интегральных характеристик испарения тонкораспыленной воды при движении через высокотемпературные продукты сгорания. Определены масштабы изменения скорости, массы и характерных размеров водяных капель при прохождении через пламя фиксированной высоты. Установлены параметры распыления воды, при которых обеспечивается полнота ее испарения.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Аналитическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-9-47
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 29 мая 2013 г. УДК 543.423.1.

Оценка эффективности применения внутренней стандартизации при анализе железорудного сырья и шлаков методом атомной эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой

© Майорова* Анна Владимировна, **Печищева[+] Надежда Викторовна**, **Воронцова Ксения Александровна** и **Щепеткин Анатолий Алексеевич**
Лаборатория аналитической химии. Институт металлургии УрО РАН. Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Россия. Тел.: (343) 267-89-36. E-mail: pechischeva@gmail.com

*Ведущий направление, [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *термодинамическое моделирование, метод атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой, внутренняя стандартизация.*

Аннотация

С помощью термодинамического моделирования (программный комплекс «TERRA») показана эффективность использования внутренней стандартизации для коррекции аппаратурного дрейфа при определении массовой доли железа и оксидов алюминия, кремния, марганца, магния, кальция в железных рудах, концентратах, шлаках методом атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой (ИСП-АЭС). Последующая экспериментальная апробация показала уменьшение погрешности результатов анализа стандартных образцов состава, содержащих железо и оксиды алюминия, кремния, марганца, магния, кальция в диапазоне от 0.1 до 48 % масс., с применением скандия в качестве внутреннего стандарта.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Биохимия липидов. *Регистрационный код публикации:* 13-35-9-55
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 16 июля 2013 г. УДК 535.379:544.431.7:577.115.4.

Молекулярная хемилюминесценция липидов

© **Васильев Ростислав Федорович**, **Вепринцев Тимур Львович**,
Наумов Владимир Владимирович и **Трофимов*[+] Алексей Владиславович**
Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук.
Ул. Косыгина, 4. г. Москва, 119334. Россия. Тел.: (8495) 939-73-58. E-mail: avt_2003@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

***Ключевые слова**: антиоксиданты, хемилюминесценция, окисление, кинетика, липиды.*

Аннотация

Исследовали влияние липидных экстрактов из тканей морских рыб на кинетику хемилюминесценции в модельной системе инициированного свободнорадикального окисления этилбензола. Характер концентрационных зависимостей хемилюминесценции при введении липидов существенно отличается от такового в присутствии антиоксидантов, как индивидуальных веществ. Предложена достаточная для объяснения полученных различий кинетическая схема, включающая стадию безрадикальной (молекулярной) хемилюминесценции при термическом распаде окисленных продуктов, которые могут содержаться в липидах.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Аналитическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-9-61
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 3 июля 2013 г. УДК 340.67:543.51/.544.43:615.074.

Применение твердофазной экстракции для совместного извлечения золпидема и его метаболитов из мочи

© Крылова[1+] Елена Анатольевна, Катаев[1] Сергей Сергеевич, Дворская[2]* Оксана Николаевна и Хомов[3] Юрий Александрович

[1] *Судебно-химическое отделение. ГКУЗОТ «Пермское краевое бюро судебно-медицинской экспертизы». Ул. Старцева, 61. г. Пермь, 614077. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 210-67-83. E-mail: forenschemist@narod.ru*

[2] *Кафедра токсикологической химии. Пермская государственная фармацевтическая академия Министерства здравоохранения Российской Федерации. Ул. Полевая, 2. г. Пермь, 614990. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 282-58-64. E-mail: dvoksnik@gmail.ru*

[3] *Кафедра фармацевтической химии ФДПО и ФЗО. Пермская государственная фармацевтическая академия Министерства здравоохранения Российской Федерации. Ул. Полевая, 2. г. Пермь, 614990. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 233-51-10. E-mail: homov@pfa.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *золпидем, твердофазная экстракция, моделирование Бокса-Бенкена, газовая хроматография – масс-спектрометрия.*

Аннотация

Описано применение метода твердофазной экстракции (ТФЭ) для совместного извлечения из мочи золпидема и его метаболитов, различающихся по физико-химическим свойствам, с целью их дальнейшего определения методом газовой хроматографии – масс-спектрометрии (ГХ-МС). Проведена оптимизация этапов ТФЭ с помощью моделирования Бокса-Бенкена, при этом исследовано влияние на эффективность экстракции таких факторов как pH буферного раствора, растворов, применяемых для промывки сорбента, объема элюента и его состава. Использование оптимизированной методики позволяет извлечь из мочи гидрофильные метаболиты золпидема. Пределы обнаружения и количественного определения золпидема в моче составили 13.2 нг/мл и 40 нг/мл, соответственно. Доказана прецизионность методики по показателям повторяемости (коэффициент вариации составил 2.6-5.7%; $n = 9$) и промежуточной прецизионности (коэффициент вариации – 5.8-11.4%; $n = 15$) на трех уровнях концентраций золпидема – 50, 150 и 400 нг/мл. Выход золпидема из мочи составил 98.6-108.4%.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Биохимия культуры дрожжей. *Регистрационный код публикации:* 13-35-9-71
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
Поступила в редакцию 15 июля 2013 г. УДК 577.153.

Влияние состава питательной среды на липолитическую активность дрожжей *Yarrowia lipolytica*

© Гамаюрова* Валентина Семеновна, **Зиновьева*[+] Мария Евгеньевна**, **Чан Тхи Тху Хыонг** и **Васильева Анна Вячеславовна**
Кафедра пищевой биотехнологии. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-41-65. E-mail: gamaur@kstu.ru.

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *дрожжи Yarrowia lipolytica, источник азота, липолитическая активность, твин-20.*

Аннотация

Подобран состав питательной среды для культивирования дрожжей *Yarrowia lipolytica,* позволяющий повысить липолитическую активность культуры в 2.8 раз. Установлено, что неорганические источники азота не используются культурой для роста и выработки липазы. Определено, что хорошими источниками азота для данной культуры являются пептон, необезжиренная и обезжиренная соевая мука. Определены оптимальные концентрации исследуемых источников азота. Установлено, что введение твина-20 в состав питательной среды приводит к повышению липолитической активности культуры. Показано, что при культивировании дрожжей *Yarrowia lipolytica* наиболее высокая липолитическая активность наблюдается на среде следующего состава: оливковое масло – 1 % об., глюкоза – 5 г/л, дрожжевой автолизат – 5 мл/л, обезжиренная соевая мука – 40 г/л, твин-20 – 0.001 мг/мл при температуре культивирования 30 °С и продолжительности биосинтеза 24 часа.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-9-78 *Подраздел:* Агрохимия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
УДК 631.45:633.16:577.152.34. Поступила в редакцию 12 июля 2013 г.

Препарат-фиторегулятор «Новосил» и его влияние на белково-протеиназный комплекс пивоваренного ячменя

© **Карпиленко**[1] **Геннадий Петрович**, **Белопухов**[2]*+ **Сергей Леонидович**, **Витол**[1] **Ирина Сергеевна**, **Гаврилина**[1] **Ольга Владимировна**, **Шатилова**[3] **Татьяна Ивановна** и **Семко**[2] **Владимир Трофимович**

[1] *Кафедра «Органическая, пищевая и биохимия». Московский государственный университет пищевых производств. Волоколамское ш., 11. г. Москва, 123080. Россия. Тел.: (499) 158-71-33. E-mail: vitolis@yandex.ru*

[2] *Кафедра «Физической и органической химии». РГАУ – МСХА имени К.А. Тимирязева. Ул. Тимирязевская, 49. г. Москва, 127550. Россия. Тел.: (499) 976-32-16. E-mail: belopuhov@mail.ru*

[3] *Кафедра «Агрономической, биологической химии и радиологии». РГАУ – МСХА имени К.А. Тимирязева. Ул. Тимирязевская, 49. г. Москва, 127550. Россия. Тел.: (499) 976-29-71.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *ячмень, ячменный солод, регуляторы метаболизма (фиторегуляторы), белково-протеиназный комплекс.*

Аннотация

Исследовано влияние препарата «Новосил» на белково-протеиназный комплекс пивоваренного ячменя. Установлено, что обработка препаратом вегетирующих растений ячменя приводит к изменению фракционного состава белков ячменя и полученного из него солода, а также увеличивает активность нейтральных и кислых протеиназ. Методом гель-хроматографии показано, что обработка препаратом «Новосил» увеличивает степень и глубину гидролиза запасных белков при солодоращении и обеспечивает необходимую степень гидролиза белков эндосперма – важного показателя готового солода.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-9-84 *Подраздел:* Свойства природных соединений.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
УДК 57.014. Поступила в редакцию 8 июля 2013 г.

Гепатопротекторные свойства меланинов чаги

© Иванова[1+] Гузель Адгамовна, Сысоева[1]* Мария Александровна
и Зобов[2] Владимир Васильевич

[1] *Кафедра пищевой биотехнологии. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-41-73. E-mail: guziva@rambler.ru*

[2] *Отдел биологически-активных препаратов. Лаборатория химико-биологических исследований. Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, КазНЦ РАН. Ул. Ак. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843)273-93-64 E-mail: zobov@iopc.knc.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *меланин, чага, гиперразветвленный полимер, антиоксидантная активность, гепатопротекторная активность, четыреххлористый углерод.*

Аннотация

На модели острого токсического гепатита крыс, вызванного четыреххлористым углеродом, изучены гепатопротекторные свойства меланинов чаги. Анализ их гепатопротекторной активности проведен на основании показателей сыворотки крови подопытных животных, таких как аланинаминотрансфераза, аспартатаминотрансфераза, щелочная фосфатаза, общий белок, билирубин, холестерин, мочевина, а также срезов печени. Показана корреляция антиоксидантных свойств с гепатопротекторной активностью, проявляемых меланинами чаги.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-9-90 *Подраздел:* Физико-химическая обработка посевного материала.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
УДК 577.152.193. Поступила в редакцию 1 июня 2013 г.

Определение удельной активности пероксидазы ячменя обыкновенного (*Hordeum vulgare*) и проса обыкновенного (*Panicum miliaceum*) при воздействии озона и постоянного магнитного поля

© Пурыгин* Петр Петрович, **Цаплев Денис Алексеевич**,
Цаплева Екатерина Викторовна и **Зарубин[+] Юрий Павлович**
Кафедра органической, биоорганической и медицинской химии. Самарский государственный университет. Ул. Академика Павлова, 1. г. Самара, 443011. Самарская область. Россия.
Тел.: (846) 334-54-59. Факс: (846) 334-54-17. E-mail: puryginpp2002@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *пероксидаза, ячмень, просо, озонатор, магнитное поле.*

Аннотация

Предложен эффективный и экологически безопасный метод обработки сельскохозяйственных растений озоном и постоянным магнитным полем. При исследовании уровня пероксидазы опытных растений ячменя обыкновенного и проса обыкновенного при воздействии постоянного магнитного поля и озона, была установлена более высокая концентрация исследуемого фермента в сравнении с контролем. Данный способ обработки растений может быть применён в различных отраслях сельского хозяйства.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Химико-технологические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-9-94 *Подраздел:* Прикладная химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 661.872.222.3:666.291.1. Поступила в редакцию 5 июля 2013 г.

Переработка железосодержащих пылевидных отходов металлургического производства в пигмент для окраски строительных материалов

© Федосеев[1]* Виктор Борисович, Зорин[2] Аркадий Данилович,
Федосеева[2+] Елена Николаевна, Занозина[2]* Валентина Федоровна
и Жебряков[2] Евгений Владимирович

[1] *Кафедра материаловедения физического факультета. Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского. Пр. Гагарина, 23, корп.3. г. Нижний Новгород, 603950. Россия. Тел.: (831) 465-81-66. E-mail: vbfedoseev@yandex.ru*

[2] *Лаборатория прикладной химии и экологии. Научно-исследовательский институт химии. Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского. Пр. Гагарина, 23, корп.5. г. Нижний Новгород, 603950. Россия. Тел.: (831) 465-81-66. E-mail: enfedoseeva@front.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *железооксидный пигмент, железосодержащая пыль, силикатный кирпич, окрашивание*.

Аннотация

Проведен сравнительный анализ состава отходов металлургических производств Нижегородской области. Разработаны основы технологии изготовления железооксидного пигмента из отходов железосодержащих пылей, используемых в качестве сырья. Исследованы прочностные свойства силикатного кирпича, окрашенного полученным пигментом. Показано, что по прочностным характеристикам окрашенные кирпичи удовлетворяют требованиям стандартов на силикатные материалы.

Тематический раздел: Химико-технологические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Технологическое моделирование. *Регистрационный код публикации:* 13-35-9-103
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 31 мая 2013 г. УДК 66.011.

Моделирование процесса перемешивания в реакторе формирования объемного типа

© Пермяков Андрей Анатольевич, **Енейкина Татьяна Александровна**, **Гайнутдинов*+ Марсель Ильдусович**, **Хацринов Алексей Ильич** и **Михайлов Юрий Михайлович**

Федеральное казенное предприятие "Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов". ул. Светлая, 1. г. Казань, 420033. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 544-07-21.

*Ведущий направление, +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *моделирование, перемешивание, реактор, поток, мешалка.*

Аннотация

В работе представлены результаты расчета процесса перемешивания воды в реакторе объемного типа с двух- и трёхъярусной лопастной мешалкой по программе ANSYS. Получено, что при использовании двухъярусной мешалки окружные скорости потока у стенок реактора на 19-37% меньше, а скорость восходящего потока в 2 раза меньше по сравнению с трёхъярусной мешалкой. Рекомендована и установлена в 45 л реакторе третья лопастная мешалка.

Тематический раздел: Исследование новых материалов. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Хроматография. *Регистрационный код публикации:* 13-35-9-109
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 18 мая 2013 г. УДК 543.544.

Выявление возможностей применения высокофторированных полимеров в качестве модификаторов элюента в тонкослойной хроматографии

© **Найден**[1]*[+] **Святослав Владимирович**, **Карцова**[1] **Людмила Алексеевна**, **Дзема**[1] **Дарья Валерьевна** и **Емельянов**[2] **Геннадий Анатольевич**
[1] *Химический факультет. Санкт-Петербургский государственный университет. Университетский пр., 26, Петродворец. г. Санкт-Петербург, 198504. Тел.: (812) 428-67-33. Email: sv.nayden@gmail.com*
[2] *ФГУП «НИИСК». Ул. Гапсальская, 1. г. Санкт-Петербург, 198035. Тел.: (812) 251-40-28*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *тонкослойная хроматография, фторполимер, модификатор элюента, витамины группы В, аминокислоты.*

Аннотация

Синтезировано два водорастворимых высокофторированных полимера (ФС-141м и АЭ ФС-101м) и исследована возможность их применения в качестве модификаторов элюента в условиях тонкослойной хроматографии с видеоденситометрическим детектированием. Показано, что использование обоих полимеров способствует росту эффективности при определении аминокислот (лизин, глутаминовая кислота, триптофан, глицин) и витаминов группы В (B_1 (тиамин), B_6 (пиридоксин), B_{12} (цианокорбаламин)).

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Исследование новых материалов.
Регистрационный код публикации: 13-35-9-116 *Подраздел:* Прикладная химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.183, 535. Поступила в редакцию 6 мая 2013 г.

Воздействие лазерного излучения на полиэлектролитные микрокапсулы, модифицированные флуоресцеином изотиоцианатом

© Марченко[1,2] Ирина Валерьевна, Плотников[3] Геннадий Семенович, Баранов[3] Анатолий Николаевич, Салецкий[3] Александр Михайлович и Букреева[1,2] Татьяна Владимировна

[1] *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН. Ленинский проспект, д.59. г. Москва, 119333. Россия. E-mail: iramarchenko85@mail.ru*
[2] *НИЦ «Курчатовский институт». пл. Академика Курчатова, д. 1. г. Москва, 123182. Россия.*
[3] *Физический факультет Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова. Ленинские горы, д.1, стр.2. г. Москва, 119991. Россия.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *полиэлектролитные микрокапсулы, красители, лазерное излучение*

Аннотация

Полиэлектролитные капсулы стали перспективным технологическим объектом благодаря их монодисперсности при широком диапазоне вариации размеров, простоте регулирования проницаемости, легкости изменения и возможности широкого выбора материала оболочек. Для создания систем адресной доставки лекарственных препаратов необходимо осуществлять дистанционное управление проницаемостью их оболочек. Одним из способов разрушения оболочки может служить воздействие лазерного излучения. В данной работе были получены полиэлектролитные капсулы с включенными в оболочку молекулами флуоресцеина изотиоцианата. Включение в оболочку капсул молекул красителя обеспечивает возможность фотосенсибилизированного разрушения таких структур. Была исследована также зависимость размеров капсул от температуры. При нагревании суспензий капсул наблюдалось необратимое уменьшение среднего радиуса капсул.

Тематический раздел: Исследование новых материалов. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Препаративная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-9-121
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 9 июля 2013 г. УДК 66.095.261.2, 661.718.5, 66-963.

Органо-неорганические гели на основе термодинамически несовместимых олигомеров

© **Давлетбаев**[1] **Руслан Сагитович**, **Гумерова**[2] **Олеся Рустамовна**
и **Давлетбаева**[3]*[+] **Ильсия Муллаяновна**

[1] *Кафедра материаловедения, сварки и структурообразующих технологий;* [2] *Кафедра технологии полиграфических процессов и кинофотоматериалов. Казанский национальный исследовательский технический университет». Ул. К. Маркса, 10. г. Казань, 420111. Республика Татарстан. Россия. Тел.:* [1)] *(843) 238-44-10,* [2)] *(843) 231-41-68,* [3)] *(843) 231-95-88. E-mail:* [1)] *Darus@rambler.ru ,* [2)] *olese4ka85@mail.ru ,* [3)] *davletbaeva09@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *органо-неорганический гель, золь-гель метод, кремнезем, структурная модификация полимеров.*

Аннотация

На основе тетраэтоксисилана и термодинамически несовместимых олигомеров, в качестве которых были использованы олигооксиэтиленгликоль и олигодиметилсилоксан получены органо-неорганические гели. Показано, что в результате гидролиза тетраэтоксисилана и последующего процесса поликонденсации в объеме олигомерной матрицы происходит формирование кластеров кремнезема, образующих ассоциаты калий-силоксанолятных групп на границе раздела фаз термодинамически несовместимых олигомеров. Благодаря лабильности ассоциативных связей органо-неорганический гель проявляет способность к растворению в расплавах полимеров или в реакционно-способных олигомерах.

Тематический раздел: Исследование новых материалов. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Прикладная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-9-125
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 3 июня 2013 г. УДК 547-311.

Разработка новых адгезивных композиций для металлических изделий на основе наполненных полимеров

© Пестов[1]* Александр Викторович, Пузырев[1+] Игорь Сергеевич, Мехаев[1] Александр Владимирович, Горбунова[1] Татьяна Ивановна, Запевалов[1] Александр Яковлевич, Бажин[1] Денис Назарович, Вичужанин[2] Виктор Иванович и Смирнов[2] Сергей Витальевич

[1] *Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения РАН. Ул. С. Ковалевской, 22. г. Екатеринбург, 620990. Россия. Тел.: (343) 362-34-39. E-mail: pestov@ios.uran.ru*

[2] *Институт машиноведения Уральского отделения РАН. Ул. Комсомольская, 34. г. Екатеринбург, 620990. Россия. Тел.: (343) 362-34-39. E-mail: ges@imach.uran.ru*

*Ведущий направление, [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *адгезивы для металлов, наполненные полимеры.*

Аннотация

Адгезивные композиции на основе полимеров, наполненных неорганическими и органическими соединениями, характеризовали степенью набухания, пределом прочности клеевого соединения при сдвиге в отвержденном состоянии и на модельных поверхностях, подвергшихся коррозии, оценивали влияние состава композиции на скорость равномерной коррозии металла. В качестве конструкционных металлов использовали черновые и хромсодержащие стали и сплавы на основе алюминия. Адгезия покрытия с использованием разработанных композиций в значительной мере зависит как от обрабатываемого металла, так и от вида наполнителя. Скорость равномерной коррозии восстановленной металлической поверхности в присутствии разработанных ранее фторсодержащих четвертичных аммониевых солей в большинстве случаев практически не изменяется.

Тематический раздел: Исследование новых материалов. **Письмо в редакцию**
Подраздел: Прикладная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-9-129
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 25 мая 2013 г. УДК 667.657.2 (088.8).

Покрытие для защиты металлов от коррозии

© Тюменцева* Светлана Ивановна и **Парфёнова[+] Светлана Николаевна**
Кафедра общей и неорганической химии. Самарский государственный технический университет. Ул. Молодогвардейская, 244. г. Самара. 443100. Самарская область. Россия. Тел.: (846) 278-44-77. E-mail: parfy-svetlana@yandex.ru

*Ведущий направление, [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *съемные покрытия, временные покрытия, адгезия, сила когезии, композиция, состав.*

Аннотация

Для межоперационной защиты деталей из черных и цветных металлов, а также защиты готовых изделий от коррозии, механических повреждений при складировании и транспортировании широко используются временные съемные покрытия. Этот способ защиты металлов основан на изоляции от внешней среды с помощью тонких пленочных покрытий, которые в случае проникновения агрессивных реагентов к металлу препятствуют развитию коррозионного процесса.

Снимаемые пленочные покрытия – это вид защитных материалов, у которых силы когезии значительно выше сил адгезии пленки к подложке, что делает возможным их механическое удаление – сдирание «чулком».

В работе представлен состав на основе перхлорвиниловой смолы с добавлением к ней ионола.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Токсикологическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-35-9-131
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 23 июля 2013 г. УДК 340.67:543.51/.544.43:615.074.

Идентификация метаболитов каннабимиметика AB-PINACA в моче методом ГХ-МС

© Катаев[1+] Сергей Сергеевич, **Зеленина[1] Надежда Борисовна**
и **Дворская[2]* Оксана Николаевна**

[1] *Судебно-химическое отделение. ГКУЗОТ «Пермское краевое бюро судебно-медицинской экспертизы». Ул. Старцева, 61. г. Пермь, 614077. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 210-67-83. E-mail: forenschemist@narod.ru*

[2] *Кафедра токсикологической химии. ГБОУ ВПО Пермская государственная фармацевтическая академия Министерства здравоохранения Российской Федерации. Ул. Полевая, 2. г. Пермь, 614990. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 282-58-64. E-mail: kaftox@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *каннабимиметики, метаболизм, ферментативный гидролиз, твердофазная экстракция, газовая хроматография – масс-спектрометрия.*

Аннотация

Приведены данные, позволяющие установить факт употребления каннабимиметика N-[1-(аминокарбонил)-2-метилпропил]-1-пентил-1*H*-индазол-3-карбоксамида (AB-PINACA) в процедуре скрининга мочи с применением методов твердофазной экстракции и газовой хроматографии с масс-спектрометрией. Выполнена идентификация метаболитов AB-PINACA в моче потребителей курительных смесей. Получены газохроматографические и масс-спектрометрические характеристики некоторых производных метаболитов AB-PINACA, которые могут быть использованы в практике судебно-химического и химико-токсикологического анализа.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия радикалов. *Регистрационный код публикации:* 13-35-9-139
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 24 июля 2013 г. УДК 541.515+541.571.

Энергия напряжения цикла и ее влияние на прочность С–Н-связей в циклоалканах, циклоалкенах, циклоалкилароматических соединениях и О–Н-связей в циклокарбоновых кислотах

© **Туманов[+] Владимир Евгеньевич** и **Денисов* Евгений Тимофеевич**
Институт проблем химической физики РАН. г. Черноголовка, 142432.
Московская обл. Россия. Факс: (496) 522-35-07. E-mail: tve@icp.ac.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *энергия диссоциации связи, энергия напряжения цикла, циклоалканы, циклоалкены, циклоалкилароматические соединения, циклокарбоновые кислоты, электроотрицательность, линейная корреляция.*

Аннотация

Проведено эмпирическое исследование влияния энергии напряжения цикла (E_{rsc}) на прочность С–Н-связи ($D_{C–H}$) в циклоалканах, циклоалкенах и циклоароматических углеводородах (индан, тетралин). Показано, что для всех циклических соединений, кроме циклопропана, выполняется простое соотношение: $D_{C–H} = D_{C–H}(\Delta E_{rsc} = 0) + \Delta E_{rsc}$, где ΔE_{rsc} представляет собой разность энергий напряжения цикла образующегося радикала и исходной молекулы. Значения $D_{C–H}(\Delta E_{rsc} = 0)$ близки к $D_{C–H}$ линейных углеводородов (парафинов, олефинов). Для циклокарбоновых кислот установлена линейная корреляция между прочностью О–Н-связи и её электроотрицательностью.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-9-144 *Подраздел:* Физико-химия взрывчатых веществ.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 629.7. Поступила в редакцию 28 июля 2013 г.

Влияние процессов сокристаллизации на реологические и механические характеристики смесей на основе гексанитрогексаазаизовюрцитана (HNIW)

© Попок*[+] Владимир Николаевич, **Десятых Виктор Иванович**
и **Попок Николай Иванович**
Открытое акционерное общество «Федеральный научно-производственный центр «Алтай».
Ул. Социалистическая, 1. г. Бийск, 659322. Алтайский край. Россия.
Тел.: (3854) 30-19-37. E-mail: vnpopok@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

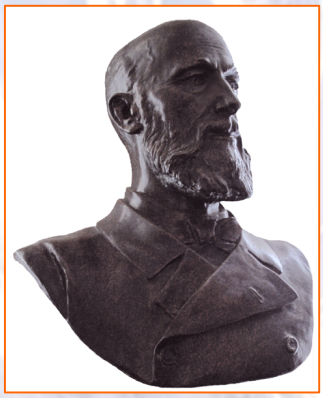
Ключевые слова: *сокристаллизаты, пластификаторы, полимеры, смесевые энергетические материалы, физико-механические характеристики, растекаемость.*

Аннотация

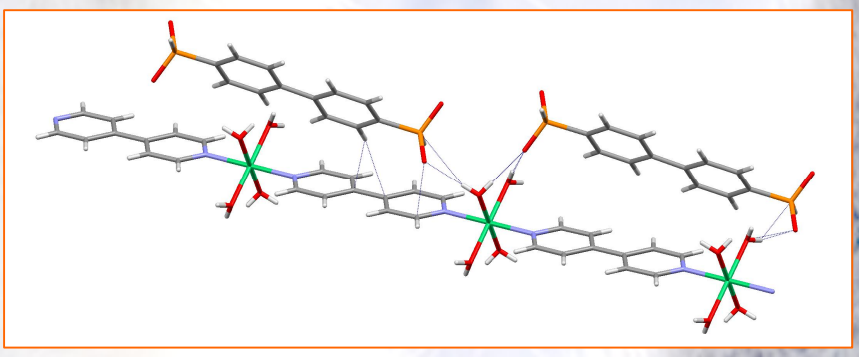
В статье представлены результаты исследований физико-механических и реологических характеристик смесей гексанитрогексаазаизовюрцитана с пластификаторами и горючими-связующими. Исследовано влияние процессов образования сокристаллизатов на уровень этих характеристик, оценено влияние дополнительного перемешивания и термообработки. Показана возможность протекания в смесях процессов сокристаллизации гексанитрогексаазаизовюрцитана с компонентами пластификаторов без присутствия вспомогательных удаляемых растворителей.

Butlerov Communications

No.10, Vol.36. 2013



ISSN 2074-0948



ISSN 2074-0212

National Edition in Russian:

Бутлеровские сообщения

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Элементоорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-1
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений"
http://butlerov.com/synthesys/
Поступила в редакцию 2 сентября 2013 г. УДК 579.695; 546.85; 502.55; 661.63.

Новое подтверждение биодеградации белого фосфора

© Миндубаев[1]*+ Антон Зуфарович, **Алимова[2] Фарида Кашифовна**,
Ахоссийенагбе[2] Серж Коджо, **Минзанова[1] Салима Тахиятулловна**,
Миронова[1] Любовь Геннадьевна и **Яхваров[1]* Дмитрий Григорьевич**

[1] *Учреждение РАН Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН. Ул. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. E-mail: mindubaev@iopc.ru*

[2] *Кафедра биохимии. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Университетская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *детоксикация, белый фосфор, осадки сточных вод, анаэробные условия, кинетика выделения газа, газовая хроматомасс-спектрометрия.*

Аннотация

В предыдущих работах нами впервые была показана деградация белого фосфора (опасного промышленного загрязнителя) осадком сточных вод из очистных сооружений. Это открытие может стать основой создания новых, более эффективных методов предотвращения проникновения этого вещества в окружающую среду. Изначально предполагалось, что имеет место биодеградация – в процессе разложения P_4 принимает участие популяция микроорганизмов, населяющая городские стоки. Однако прямых свидетельств биодеградации не было – будучи химически активным, белый фосфор может трансформироваться и под влиянием абиотических факторов. В представленной работе представлены результаты эксперимента, в трех параллельных повторах которого микрофлора активировалась неодновременно. Метод ГХМС показал, что скорость снижения концентрации P_4 в средах обратно пропорциональна продолжительности лаг-фазы роста микрофлоры. Это указывает на наличие биодеградации белого фосфора.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия аллергенов. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-13
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
Поступила в редакцию 9 сентября 2013 г. УДК 006:615.218.3: 615.322: 543.544.5: 582.632.1.

Актуальные аспекты и специфика стандартизации полного аллергенного экстракта пыльцы берёзы

© Смирнов[1]*+ Валерий Валерьевич, **Боков[1] Дмитрий Олегович**,
Морохина[2] Светлана Львовна и **Луферов[3] Александр Николаевич**

[1] *Кафедра фармацевтической и токсикологической химии. Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова. Никитинский бульвар, 13. г. Москва, 119019. Россия. Тел.: (925) 358-84-27. E-mail: fmmsu@mail.ru.*

[2] *Кафедра фармакогнозии. Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова. Нахимовский пр., 45. г. Москва, 117418. Россия. Тел.: (916) 150-60-58. E-mail: morohinas@mail.ru*

[3] *Кафедра ботаники. Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова. Измайловский бульвар, д.8, стр. 1. г. Москва, 105043. Россия. Тел.: (499) 367-17-36. E-mail: luferovc@mail.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *стандартизация, аллергенные экстракты, пыльца, берёза повислая, Betula pendula Roth., Betv1, ВЭЖХ-МС.*

Аннотация

В работе представлены результаты исследования белковой фракции полного экстракта пыльцы берёзы повислой (*Betula pendula* Roth.), рода *Betula* L., (сем. Берёзовые – *Betulaceace* S.F. Gray). Проведённые исследования позволили разработать методику определения мажорного белка Betv1 в экстракте с использованием высокоэффективной жидкостной хроматографии с хромато-масс-спектрометрическим детектированием. Определены показатели фрагментации основного иона мажорного белка Betv1: *m/z* = 876.1. Проведён анализ нативного сырья – пыльцы берёзы – по показателям подлинности и доброкачественности, идентифицированы основные анатомо-диагностические характеристики. Комплексный анализ, как сырья, так и полученного экстракта позволяют рекомендовать полученные данные при создании проекта фармакопейной статьи на аллергенный экстракт пыльцы березы, применяющийся при проведении аллерген-специфической иммунотерапии.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физиогенные биоминералы. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-21
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 6 августа 2013 г. УДК 548.512, 546.05.

Кристаллизация фосфатов кальция из прототипов биологических жидкостей на костных образцах

© Маловская[1+] Екатерина Александровна, Голованова[1]* Ольга Александровна, Панова[2] Татьяна Викторовна, Герк[1] Светлана Александровна и Осинцев[2] Василий Алексеевич

[1] *Кафедра неорганической химии. Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского. Пр. Мира, 55а. г. Омск, 644077. Омская область. Россия. Тел.: (3812) 64-27-00. E-mail: katovi@mail.ru*

[2] *Кафедра прикладной и медицинской физики. Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского. Пр. Мира, 55а. г. Омск, 644077. Омская область. Россия. Тел.: (3812) 64-27-00. E-mail: golovanoa2000@mail.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *кристаллизация, костная ткань, гидроксилапатит, октакальцийфосфат, коксартроз, биожидкости.*

Аннотация

В связи с ростом числа костных заболеваний уделяется большое внимание созданию биокомпозитных материалов. Большие перспективы экспериментального и клинического применения имеют синтетические материалы на основе фосфатов кальция, которые обладают высокой биосовместимостью по отношению к костной ткани человека и способны в силу своей инертности выполнять функцию матрицы, вдоль которой происходит новообразование костных структур. Важным направлением является изучение процесса кристаллизации из прототипов биологических жидкостей. В работе определен состав костной ткани: основной кристаллической фазой является плохоокристаллизованный карбонатсодержащий гидроксилапатит. Показано, что кристаллизация фосфатов кальция на костных образцах из прототипов биожидкостей возможна, при этом в межклеточной жидкости образуется карбонатсодержащий гидроксилапатит, а в синовиальной – гидроксилапатит и октакальцийфосфат.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Аналитическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-29
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 30 сентября 2013 г. УДК 340.67:543.51/.544.43:615.074.

Идентификация метаболитов каннабимиметика PB-22 в моче

© Катаев[1+] Сергей Сергеевич, **Мелентьев[2] Алексей Борисович**
и **Дворская[3]* Оксана Николаевна**

[1] *Судебно-химическое отделение. ГКУЗОТ «Пермское краевое бюро судебно-медицинской экспертизы». Ул. Старцева, 61. г. Пермь, 614077. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 210-67-83. E-mail: forenschemist@narod.ru*

[2] *Судебно-химическое отделение. ГБУЗ «Челябинское областное бюро судебно-медицинской экспертизы». Ул. Варненская, 4б. г. Челябинск, 454076. Челябинская область. Россия. Тел.: (351) 232-80-58. E-mail: amelentyev@sme74.ru*

[3] *Кафедра токсикологической химии. ГБОУ ВПО Пермская государственная фармацевтическая академия Министерства здравоохранения Российской Федерации. Ул. Полевая, 2. г. Пермь, 614990. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 282-58-64. E-mail: kaftox@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *каннабимиметики, метаболизм, ферментативный гидролиз, твердофазная экстракция, газовая хроматография – масс-спектрометрия.*

Аннотация

Рассмотрен метаболизм каннабимиметика хинолин-8-ил-1-пентил-1*H*-индол-3-карбоксилат (PB-22). Выполнена идентификация метаболитов PB-22 в моче потребителей курительных смесей. Описаны газохроматографические и масс-спектрометрические характеристики некоторых производных метаболитов PB-22. Сделан вывод об аналитической значимости наиболее выраженных метаболитов PB-22, имеющих значение в экспертной практике.

Введение

Одним из компонентов курительных смесей, имевших распространение в 2012 – 2013 годах, является синтетический каннабимиметик хинолин-8-ил-1-пентил-1*H*-индол-3-карбоксилат (синонимы PB-22, QCBL-018, QUPIC), CAS № 1400742-17-7.

Постановлением правительства РФ от 10.07.2013 №580 хинолин-8-ил-1-пентил-1*H*-индол-3-карбоксилат и его производные внесены в список I наркотических средств, психотропных веществ и их прекурсоров, оборот которых в Российской Федерации запрещен [1].

Основным путем метаболизма изученных синтетических каннабимиметиков, производных алкилиндола, является гидроксилирование с последующим образованием конъюгатов с глюкуроновой кислотой [2]. Также отмечено, что наиболее ценными для токсикологического анализа являются однозамещенные метаболиты.

В отличие от описанных ранее производных алкилиндола (JWH-018, JWH-250, JWH-203 и другие), каннабимиметики PB-22 и PB-22F, содержащие в своей структуре сложноэфирную связь, подвергаются биотрансформации, главным образом, путем гидролиза эфирной связи с образованием карбоксильных метаболитов. Последние предложены в качестве маркеров для целей выявления случаев употребления каннабимиметиков PB-22 и PB-22F [3].

Фармакология каннабимиметика PB-22 является неисследованной. В связи с этим изучение метаболизма нового каннабимиметика представляется весьма актуальной задачей для практики химико-токсикологических и судебно-химических лабораторий.

Цель нашей работы – идентификация метаболитов синтетического каннабимиметика PB-22 в моче потребителей курительных смесей с применением твердофазной экстракции (ТФЭ) и газовой хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием (ГХ-МС).

Экспериментальная часть

Оборудование. Газовый хроматограф *Agilent 7820*, масс-селективный детектор *Agilent 5975 Agilent*, США, колонка капиллярная *HP-5MS*, внутренний диаметр 0.25 мм, длина 30 м, толщина

пленки 0.25 мкм. Для твердофазной экстракции применяли систему с вакуумной камерой на 12 позиций *Supelco*, насос низкого вакуума *AIR CADET*, США. Термоблок *ПЭ-4030*, одноканальный испаритель *ПЭ-2300*, микровстряхиватель *ПЭ-2* (*ОАО «Экрос»*, Россия). Полуавтоматические пипетки-дозаторы, позволяющие отбирать объемы жидкостей 4-40, 40-200 мкл и 0.2-1, 1-5 мл. В качестве источника микроволнового излучения применяли бытовую микроволновую печь *Rolsen MS1770SA* Россия.

Материалы. В исследовании применялись патроны для ТФЭ *SampliQ EVIDEX* – 200 мг-3 мл *Agilent*, США. Бис-триметилсилил-трифторацетамид BSTFA, содержащий 1% триметилхлорсилана; β-глюкуронидаза, *Type HP-2, From Helix Pomatia*, 101400 ЕД/мл *Sigma-ALDRICH CHEMI*, Германия. Все используемые растворители и реактивы градации «х.ч.». Пробы мочи до исследования хранились при + 4 ^{o}C.

Подготовка проб. К пробам мочи объемом по 0.5 мл прибавляли по 50 мкл спиртовых растворов внутренних стандартов: этилморфина гидрохлорида (0.02 мг/мл), *N*-этилбензиламина (0.01 мг/мл) и гексенала (0.2 мг/мл). Далее проводили предварительную подготовку образцов с применением ферментативного гидролиза. К пробе мочи прибавляли 250 мкл 1/15М фосфатного буфера pH 6 и 25 мкл β-глюкуронидазы, флакон укупоривали и выдерживали при 45 ^{o}C в течение 2 часов.

К образцам мочи без гидролиза и после гидролиза прибавляли 2 мл 1/15 М фосфатного буфера (pH 4.8). Содержимое флаконов центрифугировали при 3000 об/мин в течение 10 минут, центрифугат отделяли от осадка.

Для экстракции использовали патроны для ТФЭ *SampliQ EVIDEX* (200 мг/3 мл) со смешанной фазой. Кондиционирование сорбента осуществляли путем последовательного пропускания через картридж 2 мл 95% этанола и 2 мл 1/15 М фосфатного буфера (pH 4.8). Далее загружали образец со скоростью 1 мл/мин. Промывку проводили последовательно: 1 мл 1/15 М фосфатного буфера (pH 4.8) и 1 мл 10% этанола. Сушку патрона производили под вакуумом в течение 10-15 минут. Элюат I получали двукратным пропусканием через патрон смеси *н*-гексан–этилацетат (3:1) по 2 мл. Элюат II - двукратным пропусканием через патрон смеси дихлорметан-*изо*-пропанол – 25% аммиак (4:1:0.1) по 2 мл. Элюаты I и II испаряли в токе азота при 40 ^{o}C.

Получение производных проводили по одному из вариантов, указанных ниже.

- *Метилирование.* К сухому остатку элюата I прибавляли 500 мкл безводного ацетона, 40 мкл йодистого метила и 20-25 мг безводного карбоната калия, герметично закрывали и нагревали при 60 ^{o}C в течение 60 минут в термоблоке. Флакон охлаждали, отбирали жидкую фракцию реакционной смеси, переносили в чистую виалу и испаряли в токе азота при 40 ^{o}C. Сухой остаток растворяли в 100 мкл безводного этилацетата и 1 мкл вводили в испаритель ХМС.
- *Ацетилирование.* К сухому остатку элюата II прибавляли 40 мкл безводного пиридина и 60 мкл уксусного ангидрида (замывая стенки виалы), виалу плотно укупоривали и обрабатывали микроволновым излучением в СВЧ – печи с мощностью 560 Вт в течение 5 минут. После охлаждения флакон вскрывали и выпаривали избыток реагентов в токе азота (не выше 40 ^{o}C). Сухой остаток растворяли в 100 мкл безводного этилацетата и 1 мкл вводили в испаритель ХМС.
- *Получение триметилсилиловых эфиров.* К сухому остатку элюата I или II прибавляли 100 мкл BSTFA, содержащего 1% триметилхлорсилана, герметично закрывали, перемешивали на микровстряхивателе и нагревали при 80 ^{o}C в течение 60 минут в термоблоке. Виалу охлаждали и 2 мкл вводили в инжектор хромато-масс-спектрометра.

Режим работы газового хроматографа с масс-селективным детектором. Скорость потока газа-носителя (гелий) через колонку 1.5 мл/мин, режим работы split/splitless (деление потока 15:1, с задержкой включения 1 мин после ввода пробы). Температура испарителя хроматографа и интерфейса детектора задавалась 250 и 280 ^{o}C. Температура колонки: начальная 70 ^{o}C в течение 2 мин и прогрев до 280 ^{o}C со скоростью программирования 20 град/мин, выдержка при конечной температуре 8 мин.

Напряжение на умножителе масс-селективного детектора устанавливали равной величине автоматической настройки детектора. Регистрация масс-спектров для ацетильных и метильных производных в режиме полного сканирования ионов в интервале масс 42-450 а.е. Регистрация масс-спектров триметилсилильных производных в режиме полного сканирования ионов в интервале масс 100-700 а.е.

Обработку хроматограмм с целью идентификации компонентов проб проводили с использованием программ *ChemStation G1701DA* и *AMDIS* (The Automatic Mass Spectral Deconvolution and Identification System, NIST). Степень конъюгирования метаболитов РВ-22 определяли для их метиловых эфиров по отношению площади пиков иона с величиной: для М1 – М3 и М5 – m/z 188, М4 и М6 m/z 218 и площади пика иона m/z 235 для *N*-метилгексенала (внутренний стандарт) в элюате I мочи без гидролиза и с гидролизом.

Результаты расчетов физико-химических констант (LogP, K_{OC}) получены с использованием пакета программ ACD/Labs v6.0 (Advanced Chemistry Development Inc., Toronto, Canada).

Результаты и их обсуждение

Общая химическая структура метаболитов каннабимиметика PB-22, идентифицированных при исследовании образцов мочи лиц, употреблявших курительные смеси, представлена на рис. 1.

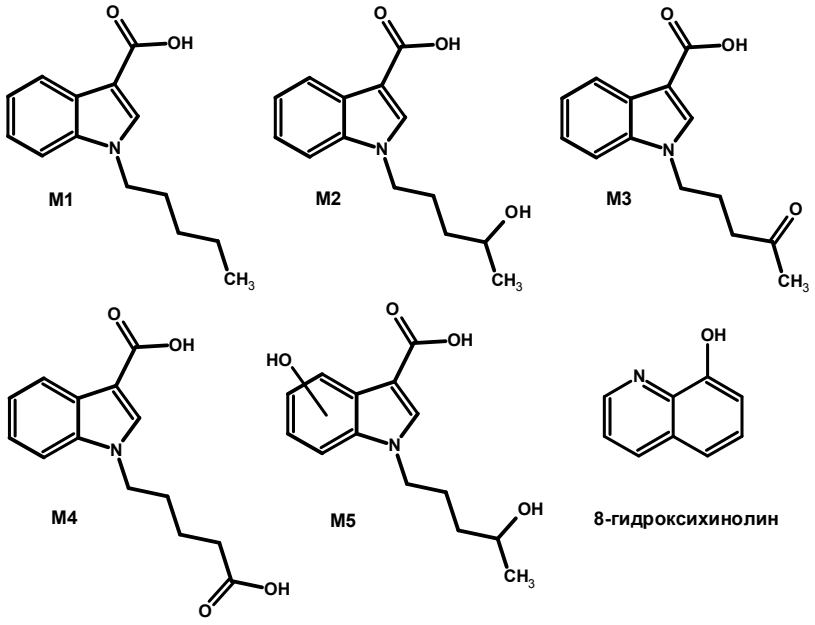


Рис. 1. Химическая структура идентифицированных метаболитов каннабимиметика PB-22

Структуры метаболитов определяли на основании масс-фрагментации выявленных пиков на хроматограммах, полученных при исследовании проб мочи. При анализе учитывали известные сведения о пути метаболизма синтетических каннабимиметиков алкилиндольного ряда [2].

Для установления свойств функциональных групп применяли различные виды дериватизации, а также последовательное их сочетание.

На рис. 2-12 приведены структуры и масс-спектры некоторых производных метаболитов PB-22.

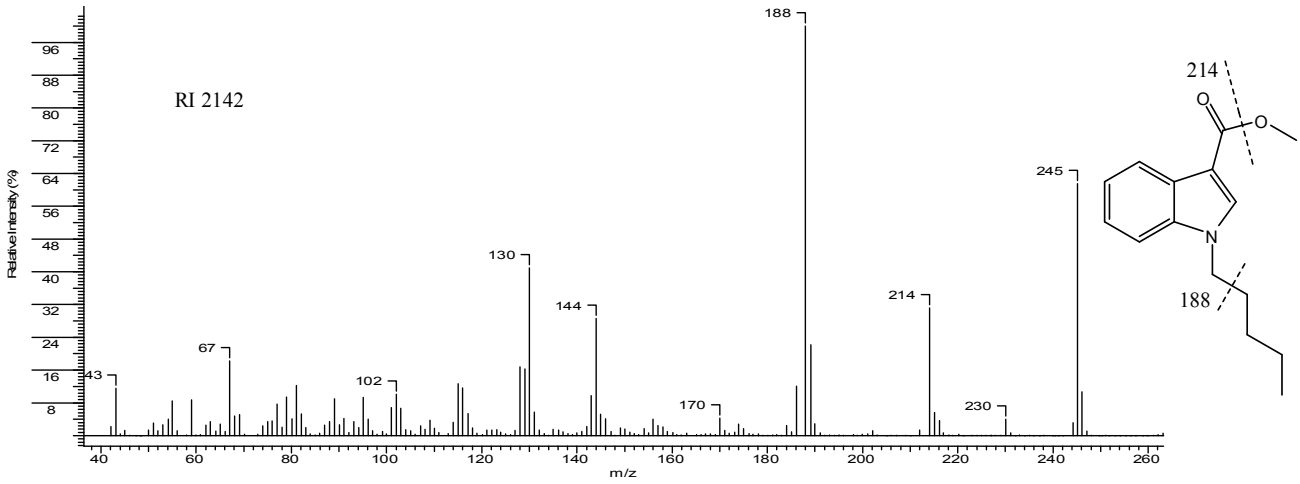


Рис. 2. Масс-спектр, индекс удерживания и структура метилового эфира метаболита M1

Для всех приведенных соединений в масс-спектрах наблюдается молекулярный ион-радикал, соответствующий молекулярной массе соединения.

Имеются общие направления фрагментации, характерные для эфиров, образованных карбоксильной группой метаболитов: для метиловых эфиров такие как $[M-31]^+$, для триметилсилильных дериватов – $[M-89]^+$.

А так же ионы, обусловленные расщеплением алкильного радикала в положении 1 индольного цикла для метаболитов M1 – M4 с величиной m/z 188, а для M5 – с m/z 218.

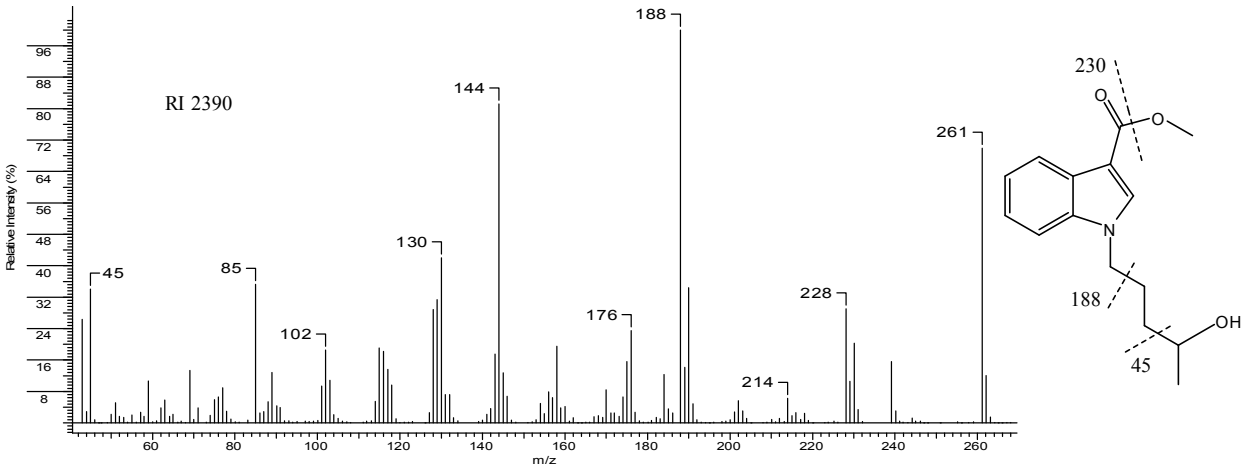


Рис. 3. Масс-спектр, индекс удерживания и структура метилового эфира метаболита М2

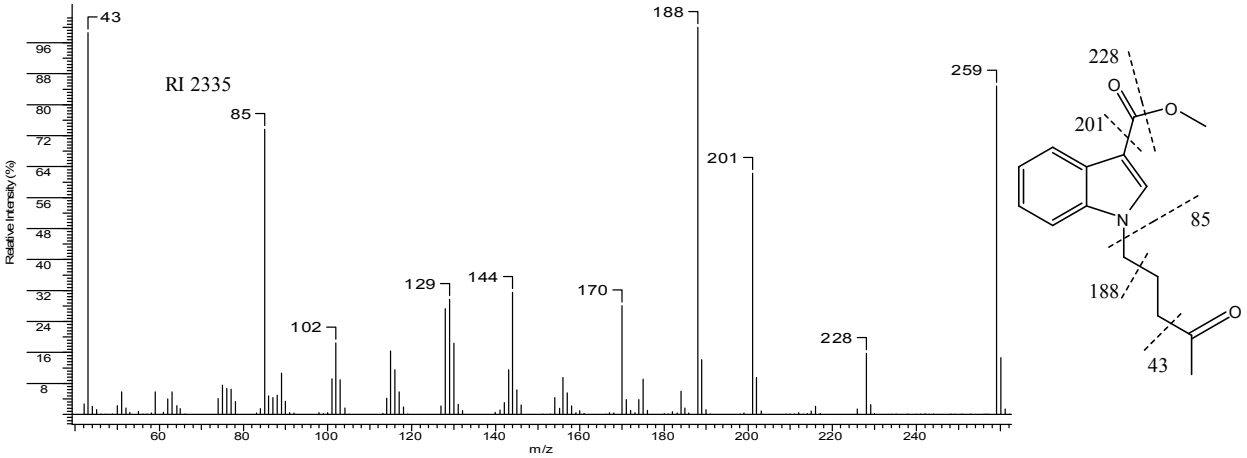


Рис. 4. Масс-спектр, индекс удерживания и структура метилового эфира метаболита М3

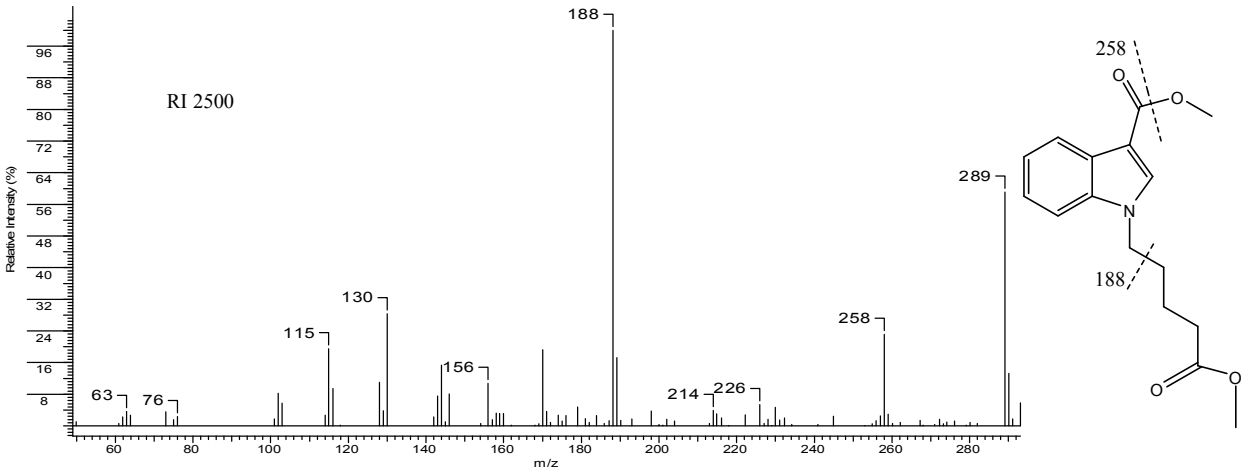


Рис. 5. Масс-спектр, индекс удерживания и структура диметилового эфира метаболита М4

Положение гидроксильной группы в алкильной цепи метаболитов М2 и М5 определяется наличием в масс-спектрах соединений интенсивного иона $[CH_3CH=OH]^+$ спиртовой группы с величиной m/z 45.

В масс-спектре метаболита М3 наблюдается интенсивный ион $[CH_3C=O]^+$ с величиной m/z 43. Таким образом, метаболит М2 образуется путем гидроксилирования алкильной цепи в положении 4, а М3 является следствием дальнейшего окисления гидроксильной группы.

Общие характеристические ионы для метаболитов представлены на рис. 13. Для метаболитов М1 – М4 в спектрах, как правило, имеются ионы с величинами m/z 144, 130 и 116. Для метилированного производного метаболита М5 наблюдаются выраженные ионы с величиной m/z 174 и 160.

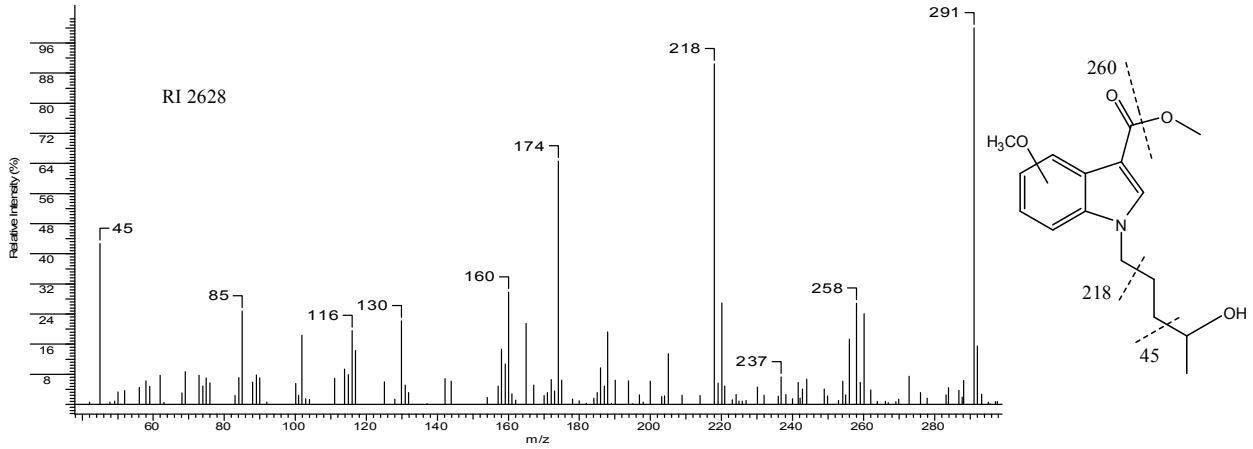


Рис. 6. Масс-спектр, индекс удерживания и структура диметилового эфира метаболита M5

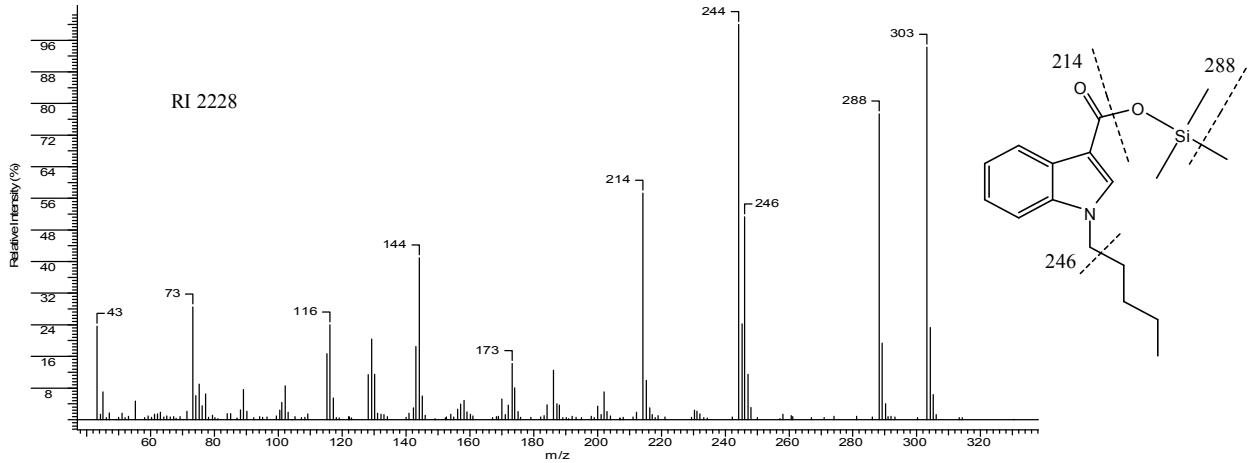


Рис. 7. Масс-спектр, индекс удерживания и структура триметилсилилового эфира метаболита M1

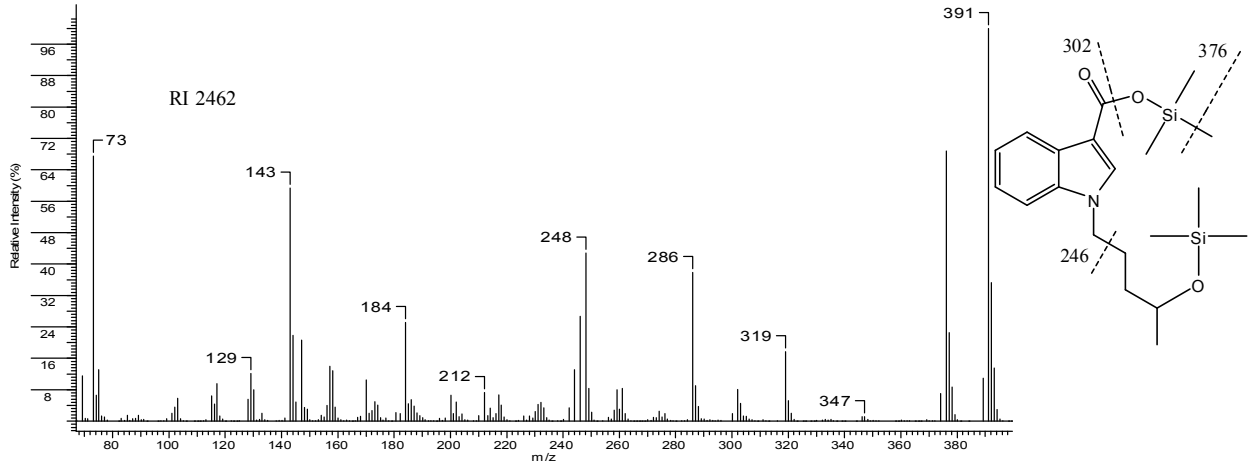


Рис. 8. Масс-спектр, индекс удерживания и структура бис-триметилсилилового эфира метаболита M2

Использование при пробоподготовке ТФЭ позволило провести фракционирование веществ на вещества кислотного и основного характера. Идентифицированные метаболиты M1 – M5 каннабимиметика PB-22 были обнаружены в элюате I.

В элюате II выявлялся 8-гидроксихинолин. Применение ферментативного гидролиза является преимущественным в сравнении с кислотным и щелочным при подготовке образцов мочи с целью выявления метаболитов PB-22 [3].

Расчеты физико-химических констант логарифма коэффициента распределения октанол-вода (LogP) и коэффициента адсорбции (K_{OC}) показывают, что каннабимиметик PB-22 и его основные метаболиты M1–M5 обладают различными свойствами с точки зрения липофильности.

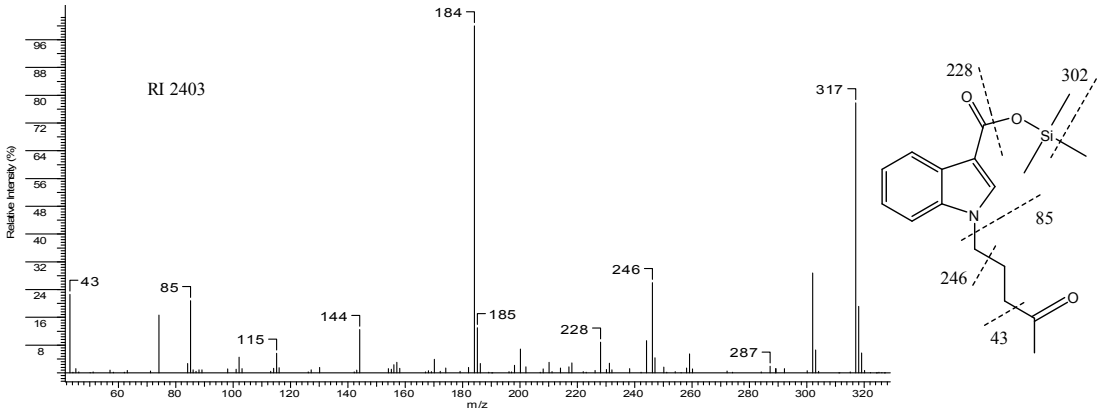


Рис. 9. Масс-спектр, индекс удерживания и структура триметилсилилового эфира метаболита М3

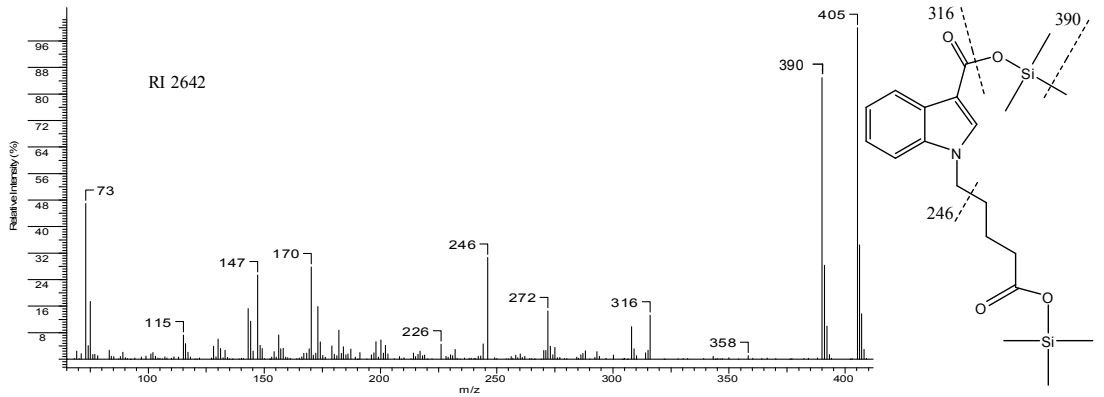


Рис. 10. Масс-спектр, индекс удерживания и структура бис-триметилсилилового эфира метаболита М4

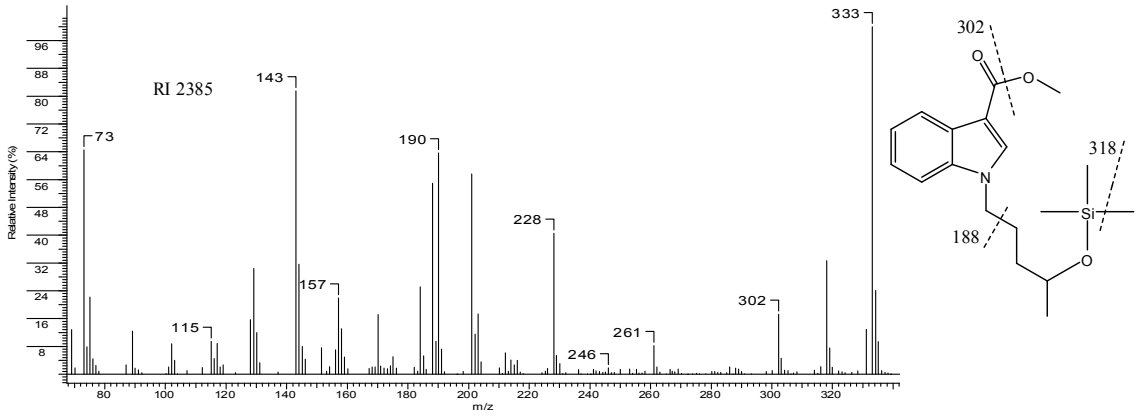


Рис. 11. Масс-спектр, индекс удерживания и структура смешанного метилового и триметилсилилового эфира метаболита М2

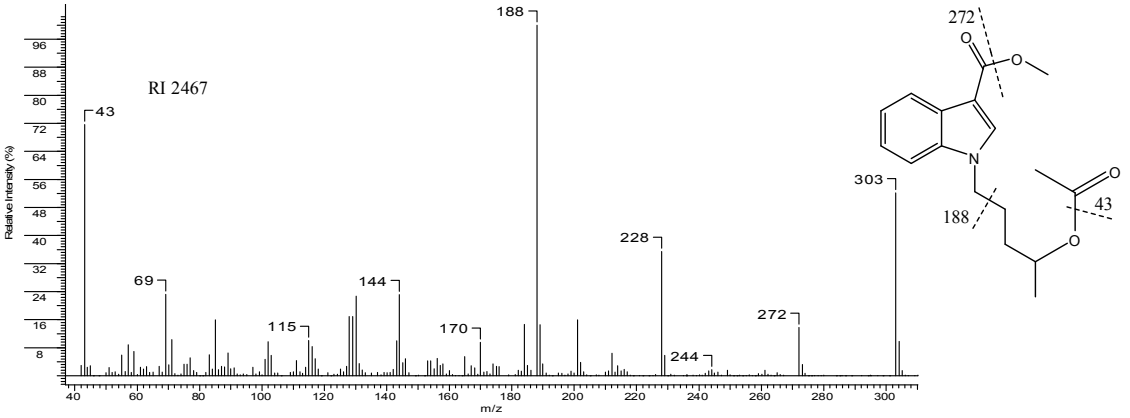


Рис. 12. Масс-спектр, индекс удерживания и структура метилового эфира метаболита М2 после ацетилирования

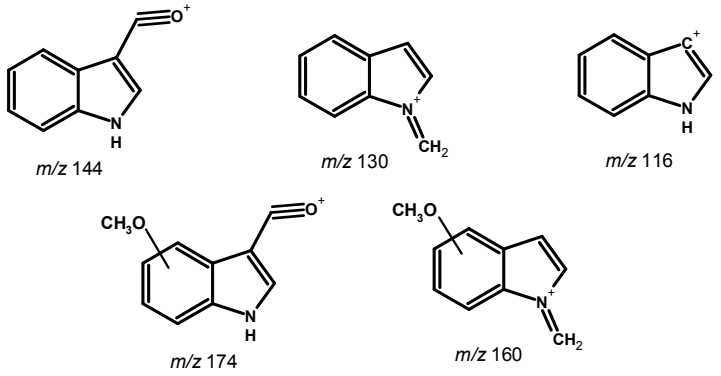


Рис. 13. Характеристические ионы, свойственные для масс-фрагментации метаболитов PB-22

Нативный PB-22 и метаболит M1 являются высоколипофильными, метаболиты M2, M3, M5 и 8-гидроксихинолин (8-OX) – низколипофильными веществами.

Результаты расчетов и полученных нами данных представлены в таблице.

Таблица. Характеристика каннабимиметика PB-22 и его основных метаболитов

Соединение	Log *P*	K_{oc} (pH=4.8)	n	Конъюгирование, % (медиана, %)	Относительное содержание*, % (медиана, %)
PB-22	5.74	31586.6	4	н.д.	н.д.
M1	4.34	1030.5	4	81-100 (98)	100
M2	2.40	86.3	4	99.8-100 (100)	17-84 (58)
M3	2.27	71.1	4	90-100 (98)	34-84 (68)
M4	2.49	49.3	1	100	4.44
M5	1.66	40.6	1	100	2.16
8-OX	1.87	1.83	4	50.8-100 (97)	н.о.

* Содержание M1 принято за 100%, значение прочих метаболитов рассчитывали по соотношению площади пиков характеристических ионов, имеющих интенсивность 100% в масс-спектре метаболитов. Н.д. – не детектируется, н.о. – не определяли.

Следствием значительной липофильности метаболитов PB-22 является высокий процент их конъюгирования в организме человека.

Исследование четырех образцов мочи потребителей каннабимиметика PB-22 показало, что основные метаболиты выводятся в конъюгированном виде: M1 и M3 на 98%, M2, M4, M5 на 100%, 8-гидоксихинолин на 97%.

При этом метаболиты M4 и M5 в описанных условиях исследования были обнаружены лишь в одном образце и в незначительных количествах. Нативный каннабимиметик PB-22 в исследованных образцах мочи обнаружен не был.

Из относительного содержания метаболитов в образцах мочи следует, что соединение M1 превалирует в процессе элиминации метаболитов PB-22 из организма человека, так же в значительных количествах определяются метаболиты M2 и M3.

Таким образом, основными метаболитами каннабимиметика PB-22, определяющимися в моче, являются 1-пентил-1*H*-индол-3-карбоновая кислота и ее гидрокси- и кето-производные M1 – M3 и 8-гидроксихинолин.

В силу выраженного характера метаболита M1 в сочетании с 8-гидроксихинолином в исследованных объектах, они могут использоваться в качестве маркеров употребления каннабимиметика PB-22 у потребителей курительных смесей.

Выводы

1. Описаны метаболиты синтетического каннабимиметика хинолин-8-ил-1-пентил-1*H*-индол-3-карбоксилата (PB-22), идентифицированные в моче лиц употреблявших курительные смеси.

2. Приведены газохроматографические и масс-спектрометрические характеристики некоторых производных основных метаболитов PB-22, которые могут быть использованы для целей судебно-химического и химико-токсикологического анализа.

3. Установлено, что идентифицированные метаболиты PB-22, выводятся из организма человека с мочой в конъюгированном виде. Для гидролиза конъюгатов преимущественным является ферментативный гидролиз.

4. Показана возможность выявления основных метаболитов синтетического каннабимиметика PB-22 в процедуре скрининга мочи с применением методов твердофазной экстракции и газовой хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием.

Литература

[1] О внесении изменений в некоторые акты правительства Российской Федерации в связи с совершенствованием контроля за оборотом наркотических средств, прекурсоров наркотических средств и психотропных веществ [Электронный ресурс]: Постановление Правительства РФ №580 от 10.07.2013. *Консультант Плюс: Правовые акты по здравоохранению*. [**2013**]. (Технология проф).

[2] Савчук С.А., Григорьев А.М. Хромато-масс-спектрометрический анализ в наркологической и токсикологической практике. *М.: ЛЕНАНД.* **2013**. 224с.

[3] Катаев С.С., Зеленина Н.Б., Дворская О.Н. Идентификация маркеров каннабимиметиков PB-22 и PB-22F в моче методом ГХ-МС. *Бутлеровские сообщения*. **2013**. Т.34. №4. С.116-122.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Аналитическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-29
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 30 сентября 2013 г. УДК 340.67:543.51/.544.43:615.074.

Идентификация метаболитов каннабимиметика PB-22 в моче

© Катаев[1+] Сергей Сергеевич, **Мелентьев[2] Алексей Борисович**
и **Дворская[3]* Оксана Николаевна**

[1] *Судебно-химическое отделение. ГКУЗОТ «Пермское краевое бюро судебно-медицинской экспертизы». Ул. Старцева, 61. г. Пермь, 614077. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 210-67-83. E-mail: forenschemist@narod.ru*

[2] *Судебно-химическое отделение. ГБУЗ «Челябинское областное бюро судебно-медицинской экспертизы». Ул. Варненская, 4б. г. Челябинск, 454076. Челябинская область. Россия. Тел.: (351) 232-80-58. E-mail: amelentyev@sme74.ru*

[3] *Кафедра токсикологической химии. ГБОУ ВПО Пермская государственная фармацевтическая академия Министерства здравоохранения Российской Федерации. Ул. Полевая, 2. г. Пермь, 614990. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 282-58-64. E-mail: kaftox@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *каннабимиметики, метаболизм, ферментативный гидролиз, твердофазная экстракция, газовая хроматография – масс-спектрометрия.*

Аннотация

Рассмотрен метаболизм каннабимиметика хинолин-8-ил-1-пентил-1*H*-индол-3-карбоксилат (PB-22). Выполнена идентификация метаболитов PB-22 в моче потребителей курительных смесей. Описаны газохроматографические и масс-спектрометрические характеристики некоторых производных метаболитов PB-22. Сделан вывод об аналитической значимости наиболее выраженных метаболитов PB-22, имеющих значение в экспертной практике.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Супрамолекулярная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-37
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 16 сентября 2013 г. УДК 547.639.5.

Синтез поликарбоксилированных дендримеров на основе *п-трет*-бутилтиакаликс[4]арена в конформации *1,3-альтернат*

© Галухин[1] **Андрей Владимирович**, **Носов**[1] **Роман Валериевич**,
Мостовая[1] **Ольга Александровна** и **Стойков**[1,2]*+ **Иван Иванович**

[1] *Кафедра органической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 233-74-62. E-mail: ivan.stoikov@mail.ru*

[2] *Казанский институт биохимии и биофизики КНЦ РАН. Ул. Лобачевского, 2/31. г. Казань, 420111. Республика Татарстан. Россия.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *тиакаликсарен, дендримеры, контрастные агенты, МРТ.*

Аннотация

Синтезирована серия поликарбоксилированных производных *п-трет*-бутилтиакаликс[4]арена в конформации *1,3-альтернат*, являющихся потенциальными контрастными агентами для магнитно-резонансной томографии. Структура синтезированных соединений охарактеризована комплексом физических методов. Показано, что реакция Михаэля является более предпочтительной для получения дендримеров высших генераций по сравнению с реакцией Габриэля.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Элементоорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-43
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений”
http://butlerov.com/synthesys/
Поступила в редакцию 1 октября 2013 г. УДК 547.31’18.

Синтез и структура координационного полимера на основе бифенилен-4,4’-дифосфонистой кислоты

© Краюшкина Анна Вячеславовна, **Шекуров Руслан Петрович**, **Туфатуллин Артем Игоревич**, **Метлушка Кирилл Евгеньевич**, **Никитина Кристина Александровна**, **Сайфина Диана Фуатовна**, **Катаева*+ Ольга Николаевна**, **Альфонсов Владимир Алексеевич**, **Милюков Василий Анатольевич** и **Синяшин Олег Герольдович**

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова Казанского научного центра Российской академии наук. Ул. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 273-93-44. E-mail: olga-kataeva@yandex.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова*: фосфонистая кислота, координационные полимеры, ионы никеля, синтез, структура.*

Аннотация

Синтезирован и структурно охарактеризован координационный полимер на основе бифенилен-4,4'-дифосфонистой кислоты. На основании данных рентгеноструктурного анализа установлено, что элементарное звено координационного полимера состоит из катионной части, представленной ионами никеля, сольватированных четырьмя молекулами воды, и связанными молекулами 4,4'-бипиридила, и анионной части, содержащей ион бифенилен-4,4'-дифосфонистой кислоты.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Препаративная химия.
Регистрационный код публикации: 13-36-10-48 *Подраздел:* Элементоорганическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений”
http://butlerov.com/synthesys/
УДК 678.01:54+678.84. Поступила в редакцию 3 сентября 2013 г.

Синтез полимагнийфенилсилоксанов с различным соотношением магния к кремнию

© Шапкин[1]* Николай Павлович, **Леонтьев[2] Лев Борисович**, **Алексейко[1] Леонид Николаевич**, **Побожев[1] Константин Викторович** и **Гардионов[1] Сергей Владиславович**

[1] *Кафедра общей, неорганической и элементоорганической химии.* [2] *Кафедра сварочного производства. Дальневосточный федеральный университет. Ул. Суханова, 8. г. Владивосток, 690600. Россия. Тел.: (423) 245-76-69. E-mail: irasvist@gmail.com*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова*: полимагнийорганилсилоксаны, фенилсилантриол, модификация вермикулита, геомодификаторы пар трения.*

Аннотация

Проведено исследование взаимодействия солей магния с натриевыми солями фенилсилантриола. Изучен состав полученных полимеров методами ИК-, РФА-спектроскопии, элементного анализа. Исследована возможность использования полученных полимеров, как модификаторов вермикулита.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Препаративная химия.
Регистрационный код публикации: 13-36-10-52 *Подраздел:* Элементоорганическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений”
http://butlerov.com/synthesys/
УДК 547.243+ 548.737. Поступила в редакцию 27 августа 2013 г.

Синтез и строение *μ*-оксо-*бис*[трифенил(2,6-дихлорфеноксо)сурьмы] и *μ*-оксо-*бис*[трифенил(2,6-дибром-4-нитрофеноксо)сурьмы]

© Шарутин*[+] Владимир Викторович, **Шарутина Ольга Константиновна**, **Сенчурин Владислав Станиславович** и **Шепелева Ольга Владимировна**
Кафедра органической химии. Химический факультет. Южно-Уральский государственный университет. Пр. Ленина, 76. г. Челябинск, 454080. Россия. Тел.: (351) 267-95-70. E-mail: vvsharutin@rambler.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *синтез, строение, соединения, $(Ph_3SbOAr)_2O$.*

Аннотация

Взаимодействием трифенилсурьмы с 2,6-дихлорфенолом и 2,6-дибром-4-нитрофенолом в присутствии пероксида водорода в водно-эфирном растворе получены с выходом до 92% *μ*-оксо-*бис*[трифенил(2,6-дихлорфеноксо)сурьма] (**I**) и *μ*-оксо-*бис*[трифенил(2,6-дибром-4-нитрофеноксо)-сурьма] (**II**). В **I** и **II** углы SbOSb составляют 142.7(6)° и 147.6(6)°. Атомы сурьмы имеют искаженную тригонально-бипирамидальную координацию. Связи атома сурьмы с мостиковым атомом кислорода [1.969(2), 1.973(2) Å (**I**) и 1.950(10), 1.968(9) Å (**II**)] короче, чем с атомами кислорода арокси-групп [2.135(2), 2.156(2) Å (**I**) и 2.204(11), 2.223(12) Å (**II**)].

Тематический раздел: Препаративная химия. **Краткое сообщение**
Подраздел: Элементоорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-57
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений”
http://butlerov.com/synthesys/
Поступила в редакцию 19 сентября 2013 г. УДК 543.546.287.

Метанолиз бис(герматран-1-ил)оксана

© **Ле Ньят**[1] **Тхюи Занг**, **Барышок**[1+] **Виктор Петрович** и **Воронков**[2]*** Михаил Григорьевич**
[1] *Кафедра химической технологии. Иркутский государственный технический университет. Ул. Лермонтова, 83. г. Иркутск, 664074. Россия. Тел.: (3952) 40-55-13. E-mail: baryvik@yandex.ru*
[2] *Лаборатория элементоорганических соединений. Иркутский институт химии имени А.Е. Фаворского Сибирского отделения Российской академии наук. Ул. Академика Фаворского, 1. г. Иркутск, 664033. Россия. Тел./факс: (3952) 42-64-00.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *реакции расщепления, 1-метоксигерматран, бис(герматран-1ил)оксан, кислотный катализ.*

Аннотация

Метанолиз бис(герматран-1ил)оксана в среде ксилола за счёт последовательных превращений приводит к 1-метоксигерматрану с выходом 83.9%. В присутствии *п*-толуолсульфокислоты эти превращения ускоряются и выход 1-метоксигерматрана возрастает до 90.2%.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Препаративная химия.
Регистрационный код публикации: 13-36-10-60 *Подраздел:* Органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. http://butlerov.com/readings/
УДК 547.564+678.01. Поступила в редакцию 3 сентября 2013 г.

Синтез 2,6-ди(3,3’,5,5’-ди-*трет*-бутил-4,4’-оксибензил)-циклогексан-1-она и его стабилизирующая эффективность в ПВХ

© Сайгитбаталова[1+] Светлана Шириповна, **Черезова[1]* Елена Николаевна**, **Балабанова[1] Фаина Борисовна**, **Лиакумович[1] Александр Григорьевич**, **Ахметханов[2] Ринат Маснавиевич** и **Салимгареева[2] Динара Салаватовна**

[1] *Кафедра технологии синтетического каучука. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 72. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-42-14. E-mail: saygitbatalova@mail.ru*

[2] *Кафедра высокомолекулярных соединений и общей химической технологии. Башкирский государственный университет. Ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450076. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 229-97-07. E-mail: rimasufa@rambler.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *стабилизаторы, пространственно-затрудненные фенолы, антиоксидантные свойства, поливинилхлорид.*

Аннотация

Взаимодействием 3,5-ди-*трет*-бутил-4-окси-*N,N*-диметилбензиламина и циклогексанона синтезирован 2,6-ди(3,3',5,5'-ди-*трет*-бутил-4,4'-оксибензил)-циклогексан-1-он. Исследована его эффективность в качестве стабилизатора поливинилхлорида.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-65
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 9 августа 2013 г. УДК 547-759.

Кислотно-катализируемая циклоконденсация хромон-3-карбальдегидов с индолом: удобный синтез хромон-содержащих индоло[3,2-*b*]карбазолов

© Тесленко[1] Антон Юрьевич, **Слепухин[1] Павел Александрович**, **Иргашев[1]*[+] Роман Ахметович**, **Русинов[1,2] Геннадий Леонидович** и **Чарушин[1,2] Валерий Николаевич**

[1] *Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения Российской академии наук. Ул. С. Ковалевской, 22/Академическая, 20. г. Екатеринбург, 620990. Россия. Тел./факс: (343) 374-11-89. E-mail: irgashev@ios.uran.ru*

[2] *Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Россия.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *индол, индоло[3,2-b]карбазолы, хромоны, хромон-3-карбальдегиды, циклоконденсация, трифторметансульфоновая кислота.*

Аннотация

Было изучено взаимодействие хромон-3-карбальдегидов с индолом при катализе сильными кислотами. Было показано, что данная реакция протекает за короткое время и в мягких условиях приводя к образованию 3,3'-(5,6,11,12-тетрагидроиндоло[3,2-*b*]карбазол-6,12-диил)бис(4*H*-хромен-4-онов). Наилучшие выходы данных индоло[3,2-*b*]карбазолов получены при использовании трифторметансульфоновой кислоты в качестве катализатора.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-69
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 16 сентября 2013 г. УДК 547.596.4 + 542.943.5.

(*R*)-4-Ментен-3-он в синтезе (*S*)-(+)-гидропрена

© Ишмуратов[1,2]*+ Гумер Юсупович, **Тухватшин[2+] Вадим Салаватович**
и **Талипов[2] Рифкат Фаатович**

[1] *Лаборатория биорегуляторов насекомых. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии Уфимского научного центра РАН. Проспект Октября, 71. г. Уфа, 450054. Россия. E-mail: insect@anrb.ru*

[2] *Кафедра органической и биоорганической химии. Федеральное государственное бюджетное учреждение высшего профессионального образования Башкирский государственный университет. Ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450074. Россия. E-mail: vadimtukhvatshin@yandex.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *(R)-4-ментен-3-он, метил (3S)-3,7-диметил-5-оксооктаноат, (3S)-3,7-диметилоктановая кислота, (3S)-3,7-диметилоктаналь, (S)-(+)-гидропрен.*

Аннотация

Разработана новая схема синтеза оптически чистого (*S*)-(+)-гидропрена (аналога ювенильного гормона насекомых с неполным циклом превращения) из (*R*)-4-ментен-3-она. (2*E*,4*E*)-Изомер (*S*)-(+)-гидропрена выделен в индивидуальном виде.

Тематический раздел: Исследование реакционной способности. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-73
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 30 августа 2013 г. УДК 541.64:539(199+3).

Сравнение реакционной способности фтор- и хлорзамещенных этилена по отношению к озону

© **Мамин**[2]*+ **Эльдар Алиевич**, **Крисюк**[1,3]* **Борис Эдуардович**
и **Майоров**[2]* **Алексей Владимирович**

[1] *Лаборатория кинетики гетерофазных процессов. Институт проблем химической физики РАН. пр-т Академика Семенова, 1. г. Черноголовка, 142432. Московская область. Россия.*
[3] *Кафедра химии и физики. Российский экономический университет им. Г.В. Плеханова. Стремянный пер., 36. г. Москва, 117997. Россия. Тел.: 8 905 503 6933. E-mail: bkris@mail.ru*
[2] *Лаборатория физико-химии композиций синтетических и природных полимеров. Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН. Ул. Косыгина, 4. г. Москва, 119334. Россия. Тел.: (915) 0180 571, (910) 455 8931. E-mail: yeldar443@mail.ru , hruk@list.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *квантово-химический расчет, озон, галогензамещенные этилена, энергия активации, константа скорости.*

Аннотация

В работе выполнены квантово-химические расчеты реакции озонолиза монофтор-, монохлор-этилена, 1,1-дифтор- и 1,1-дихлорэтилена. Расчеты проводились в базисном наборе aug-cc-pVDZ, следующими методами: дважды гибридным методом B2PLYP с использованием теории возмущения Моллера-Плессе, многоконфигурационным *ab initio* методом CASSCF с поправками MRMP2 и методом связанного кластера CCSD. Исследовали механизмы согласованного (Криге) и несогласованного (ДеМура) присоединения. Показано, что метод CCSD более точно моделирует данные реакции. В методе MRMP2 из-за неполной оптимизации геометрии имеет место общее занижении константы скорости реакции. Однако в целом относительная зависимость константы скорости реакции от ведения разных заместителей практически такая же, как и в двух других методах: при наличии полярных заместителей роль реакции по каналу несогласованного присоединения возрастает и достигает 50% для 1,1-дифторэтилена и 98% для 1,1-дихлорэтилена.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-81
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 19 сентября 2013 г. УДК 544.034.

Влияние дисперсных твёрдофазных частиц с модифицированной поверхностью на интенсивность массопереноса кислорода в системе газ-жидкость

© **Казаков[+] Дмитрий Александрович**, **Вольхин* Владимир Васильевич**, **Боровкова Ирина Сергеевна** и **Попова Наталья Петровна**
Кафедра химии и биотехнологии. Пермский национальный исследовательский политехнический университет. Комсомольский пр., 29. г. Пермь, 614990. Пермский край. Россия.
Тел./Факс: (342) 239-15-11. E-mail: kazakovbiotech@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *система газ-жидкость, активаторы межфазного транспорта, дисперсные твёрдофазные частицы, модифицирование поверхности, массоперенос, кислород.*

Аннотация

Получены модифицированные тонкими плёнками полимеров (поливинилхлорид, полистирол, полиметилметакрилат) тонкодисперсные частицы на основе кварца и диоксида титана. Изучено их влияние на интенсивность массопереноса O_2 в системе газ (воздух) – жидкость (вода). Показано, что способность модифицированных полимерами частиц усиливать массоперенос O_2 повышается по мере снижения смачиваемости их поверхности, размера и плотности. Установлено, что максимальный коэффициент усиления массопереноса O_2 наблюдается в присутствии частиц кварца, покрытых поливинилхлоридом (SiO_2/ПВХ). Изучено влияние концентрации частиц SiO_2/ПВХ на массоперенос O_2. Определены гидродинамические условия, при которых частицы SiO_2/ПВХ проявляют максимальный эффект в отношении массопереноса O_2.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-10-90 *Подраздел:* Физическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. http://butlerov.com/readings/
УДК 544.013. Поступила в редакцию 19 сентября 2013 г.

Влияние стеариновой кислоты на фазовое равновесие в системе триацилглицериды – этанол – стеариновая кислота

© **Пермякова[+] Ирина Александровна**, **Вольхин* Владимир Васильевич**,
Сухоплечева Елизавета Алексеевна, **Зоричев Иван Юрьевич**,
Воронина Наталья Сергеевна и **Казаков Дмитрий Александрович**
Кафедра химии и биотехнологии. Пермский национальный исследовательский политехнический университет. Комсомольский пр., 29. г. Пермь, 614990. Пермский край. Россия.
Тел.:/Факс: (342) 239-15-11. E-mail: vvv@purec.pstu.ac.ru, zernina88@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *триацилглицериды, некондиционное подсолнечное масло, стеариновая кислота, олеиновая кислота, этанол, фазовая диаграмма, фазовое равновесие, биодизель.*

Аннотация

Приведены результаты исследования фазового состава двухкомпонентных систем TAG – StA и EtOH – StA при температурах от 30 до 72 ºС и фазового состава трехкомпонентной системы TAG – StA – EtOH при температурах от 50 до 70 ºС, где TAG – триацилглицериды (подсолнечное масло), OlA – олеиновая кислота, EtOH – этанол, StA – стеариновая кислота. Проанализирована роль StA как гомогенизатора смеси TAG – EtOH. Определена относительная способность StA и OlA проявлять эффект гомогенизации. Для области расслаивания системы TAG – StA – EtOH при 70 ºС построены ноды, установлена критическая точка системы, определены коэффициенты распределения StA между фазами TAG и EtOH при 70 ºС и разных составах системы. Способность StA и OlA вызывать гомогенизацию смеси TAG иEtOH проанализирована с позиций модели GSP на основе межмолекулярных взаимодействий компонентов систем с участием функциональных групп, входящих в состав их молекул.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-10-98 *Подраздел:* Неорганическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 546.623-31:541.18.02:541.12.036. Поступила в редакцию 11 сентября 2013 г.

Тематическое направление: Физико-химические исследования гидроксидов алюминия. Часть 1.

Влияние фазовых переходов гидраргиллита на механические свойства флокул

© Егорова*[+] Светлана Робертовна, **Бекмухамедов Гияз Эдуардович**
и **Ламберов Александр Адольфович**
Кафедра физической химии. Казанский (Приволжский) федеральный университет.
Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 231-53-46. E-mail: Segorova@rambler.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *гидраргиллит, бемит, оксид алюминия, флоккула, фазовый переход.*

Аннотация

Исследованы факторы, обуславливающие снижение механической прочности флокул гидраргиллита при нагревании от 250 до 500 ºС в атмосфере воздуха. Установлено формирование двух фракций бемита, отличающихся размерами кристаллитов. Превращение гидраргиллита в бемит и χ-Al_2O_3 способствует минимальному снижению прочности флокул. Дегидратация бемита в γ-Al_2O_3 сопровождается значительным снижением механической прочности флокул вследствие их усадки в результате смещения микроблоков γ-Al_2O_3 в объеме кристалла.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Фазовые равновесия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-107
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 9 августа 2013 г. УДК 544.03.

Растворимость, взаимодиффузия и отверждение в системе эпоксидный олигомер – диаминодифенилсульфон

© Будылин[+] Никита Юрьевич, **Шапагин Алексей Викторович**,
Хасбиуллин Рамиль Равилевич и **Чалых* Анатолий Евгеньевич**
Лаборатория структурно-морфологических исследований. Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук. Ленинский проспект, 31, корп. 4. г. Москва, 119071. Россия. Тел.: (495) 955-46-53. E-mail: budylin_nikita@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова*: эпоксидная смола, диаминодифенилсульфон, фазовые равновесия, диффузия.*

Аннотация

Впервые проведено исследование кинетики растворения частиц диаминодифенилсульфона в эпоксидном олигомере. Определен температурный диапазон диффузионной стадии растворения без протекания химической реакции и исследовано изменение структуры диффузионной зоны при реакции отверждения. По диффузионной части определены диффузионные константы и их изменения, рассчитаны кажущиеся энергии активации взаимодиффузии. Показано, что при температуре, ниже определенной, возможно приготовление раствора реактопласт – отвердитель, не учитывая химическое взаимодействие компонентов.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Краткое сообщение**
Подраздел: Металлорганические соединения. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-111
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений”
http://butlerov.com/synthesys/
Поступила в редакцию 18 сентября 2013 г. УДК 547.243.

Особенности строения триарильных соединений висмута

© Шарутин*[+] Владимир Викторович и **Шарутина Ольга Константиновна**
Кафедра органической химии. Национальный исследовательский Южно-Уральский государственный университет. Проспект им. В.И. Ленина, 76. г. Челябинск, 454080. Россия. Тел.: (351) 267-95-70. E-mail: vvsharutin@rambler.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *арильные соединения висмута, трис(3-метилфенил)висмут, строение.*

Аннотация

По данным рентгеноструктурного анализа, атомы висмута в молекулах *трис*(3-метилфенил)висмута имеют тетрагональную координацию с атомами углерода арильных заместителей и неподеленной электронной парой в вершинах тетраэдра. Длины связей Bi-C и величины углов CBiC равны 2.216(8), 2.222(8), 2.293(9) Å и 93.8(3)°, 95.3(3)°, 96.7(3)° соответственно. Проанализированы геометрические характеристики молекул триарильных соединения висмута, выявлены факторы, влияющие на значения длин связей Bi-C и валентных углов CBiC.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Исследование свойств соединений.
Регистрационный код публикации: 13-36-10-114 *Подраздел:* Проблема коррозии.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. http://butlerov.com/readings/
УДК 547 : 548.736 : 620.193.4. Поступила в редакцию 12 августа 2013 г.

Сравнительное изучение антикоррозионных свойств аминоборатов

© Скворцов[1]* Викентий Григорьевич, **Ершов[2+] Михаил Аркадьевич**,
Камаев[2] Евгений Викторович и **Цыпленкова[1] Анна Юрьевна**

[1] *Кафедра химии и биосинтеза. ФГБОУ ВПО «Чувашский государственный педагогический университет им. И.Я. Яковлева». Ул. К. Маркса, 38. г. Чебоксары, 428000. Чувашская Республика. Россия. Тел.: (835) 258-67-66; (835) 258-68-45.*

[2] *Кафедра химии. ФГБОУ ВПО «Чувашская государственная сельскохозяйственная академия». Ул. К. Маркса, 29. г. Чебоксары, 428003. Чувашская Республика. Россия. Тел.: (835) 262-02-26. E-mail: ema11@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *алифатические амины, аминоспирты, ортоборная кислота, аминоборатные комплексы, гравиметрические, коррозионно-электрохимические исследования, усталостные, коррозионно-усталостные испытания.*

Аннотация

Методом гравиметрии, коррозионно-электрохимическими, коррозионно-усталостными испытаниями исследованы ингибиторные свойства новых комплексных соединений на основе ортоборной кислоты, алифатических аминов и аминоспиртов. Выявлено, что аминоборатные комплексы обладают большей ингибирующей способностью, чем соответствующие алифатические амины. Увеличение ингибирующей способности коррозии стали Ст.10 аминоборатных комплексов объясняется формированием на поверхности металла более лучшей защитной феррогидроксоаминоборатной пленки, образуемой посредством донорно-акцепторной связи с неподеленными парами электронов атомов азота, ОН-групп и хемосорбции борат-ионов.

Тематический раздел: Термодинамические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия изотопов. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-123
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 12 августа 2013 г. УДК 550.42+539.192.

Кинетические и термодинамические причины фракционирования изотопов хлора в процессе осаждения галита

© Бочкарев[1] Андрей Владимирович, **Белопухов[2]*+ Сергей Леонидович**,
Жевнеров[1] Алексей Валерьевич и **Овод[3] Артем Артурович**
Российский государственный аграрный университет – МСХА имени К.А.Тимирязева.
[1] Кафедра «Неорганической и аналитической химии». [2] Кафедра «Физической и органической химии».
[3] Лаборатории агроэкологического мониторинга, моделирования и прогнозирования экосистем (ЛАМП). Ул. Тимирязевская, 49. г. Москва, 127550. Россия.
Тел.: [1)] (499) 976-16-28, [2)] (499) 976-32-16, [3)] (499) 977-04-86. E-mail: belopuhov@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *изотопы хлора, разделение изотопов, каменная соль, галит.*

Аннотация

Полученные ранее с использованием неэмпирических квантово-химических методов данные по отношению приведенных статсумм по состояниям изотопных форм (β-факторам) для гидратированного хлорид-иона и кристаллического галита использованы для теоретического моделирования разделения изотопов хлора в процессе осаждения NaCl из насыщенного раствора. Было показано, что при осаждении галита в процессе испарения водоема может происходить заметное разделение изотопов, причем доминирует термодинамическая составляющая изотопного эффекта.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Термодинамические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-10-134 *Подраздел:* Фазовые равновесия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. http://butlerov.com/readings/
УДК 536.71. Поступила в редакцию 9 сентября 2013 г.

Влияние флуктуаций температуры зародыша на скорость зародышеобразования новой фазы

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович
Лаборатория моделирования, Институт теплофизики СО РАН. Пр. Лаврентьева, 1. г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

***Ключевые слова**: фазовый переход первого рода, флуктуации температуры, кинетическое уравнение, зародыш новой фазы, капля, кластер.*

Аннотация

Получена формула для стационарной скорости зародышеобразования (нуклеации) с учетом флуктуаций температуры зародышей новой фазы.

Показано, что учет флуктуации температуры зародыша приводит к уменьшению скорости зародышеобразования на несколько порядков и поэтому должны быть учтены при вычислении скорости зародышеобразования.

Тематический раздел: Исследование новых материалов. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Неорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-141
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 26 сентября 2013 г. УДК 549.514.5.
Посвящается памяти Юрия Григорьевича Ятлука

Темплатный синтез и сорбция паров воды пористыми силикагелями с высокой удельной площадью поверхности

© Пузырев[1]*+ Игорь Сергеевич, Собина[2] Егор Павлович
и Медведевских Сергей Викторович[2]
[1] *Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения РАН. Ул. С. Ковалевской, 22. г. Екатеринбург, 620990. Россия. Тел.: (343) 362-34-39. E-mail: igor.puzyrev@mail.ru*
[2] *Уральский научно-исследовательский институт метрологии. Ул. Красноармейская, 4. г. Екатеринбург, 620000. Россия. Тел.: (343) 350-26-18. E-mail: sobina_egor@uniim.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *силикагели, микропоры, мезопоры, адсорбция воды.*

Аннотация

Синтезированы микро- и мезопористые силикагели в основной среде с использованием смеси первичных дистиллированных алкиламинов в качестве структурообразующего агента. Методом низкотемпературной адсорбции азота изучены характеристики пористости силикагелей. Удельная площадь поверхности микропористых силикагелей в зависимости от режима обжига ксерогелей составляет 1055 либо 1392 $м^2$/г, мезопористого силикагеля – 887 $м^2$/г, объем пор составляет, соответственно, 0.82, 0.68 и 0.81 $см^3$/г. Сканирующая электронная микроскопия показывает, что микропористый силикагель образован пластинчатыми частицами, а мезопористый – частицами формы, близкой к сферической. Получены изотермы адсорбции паров воды на силикагелях. Большая удельная площадь микропористого силикагеля обеспечивает большую величину адсорбции.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Исследование новых технологий.
Регистрационный код публикации: 13-36-10-146 *Подраздел:* Полимерная химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. http://butlerov.com/readings/
УДК 678.01:579.66. Поступила в редакцию 2 августа 2013 г.

Повышение совместимости в смеси полиэтилена низкой плотности с полиамидом-6

© **Минь**[1] **Тхи Тхао**, **Спиридонова**[1+] **Регина Романовна**, **Доан**[2]*** Тхи Тху Лоан**, **Шереметьева**[1] **Анна Владимировна** и **Кочнев**[1] **Александр Михайлович**

[1] *Кафедра ТСК. Казанский национальный исследовательский технологический университет. ул. К. Маркса, 72. г. Казань, 420015. E-mail: minhthao1985t@yahoo.com.*

[2] *Кафедра химии и материаловедения. Данангский технологический университет. г. Дананг. Вьетнам. E-mail: dttloan2001@yahoo.com*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *полиэтилен низкой плотности, полиамид-6, сополимер этилена с винилацетатом, модификация.*

Аннотация

Исследовано влияние сополимера этилена с винилацетатом на эксплуатационные свойства полиэтилена низкой плотности и его смесей с полиамидом-6. Показано, что введение сополимера этилена с винилацетатом повышает физико-механические свойств и значения показателя текучести расплава композиций.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Теоретические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-10-150 *Подраздел:* Экология.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 536.253. Поступила в редакцию 9 августа 2013 г.

Влияние времени года на процесс образования седиментационных кислотных осадков в районе расположения тепловых электрических станций

© **Гвоздяков*[+] Дмитрий Васильевич** и **Губин Владимир Евгеньевич**
Национальный исследовательский Томский политехнический университет. пр. Ленина, 30. г. Томск, 634050. Россия. Тел.: (3822) 701-777, доп. 1626. E-mail: dim2003@tpu.ru

*Ведущий направления; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *математическое моделирование, тепловая электрическая станция, дымовые газы, загрязнение, серный ангидрид, конденсация, частица, серная кислота, время года.*

Аннотация

Представлены результаты численного моделирования процесса формирования капель серной кислоты в воздушном пространстве для различных времен года и соответствующих типичных параметров работы тепловой электрической станции. Рассмотрены временные интервалы, характерные для выполнения условий рассеивания антропогенных веществ в воздушном пространстве, прилегающем к источнику. Определены геометрические параметры ядер конденсации, на поверхности которых формируются капли кислоты, способные выпадать на поверхность Земли в процессе седиментации.

Тематический раздел: Препаративная химия. **Краткое сообщение**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-157
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 3 октября 2013 г. УДК 547.233.1; 233.2; 304.2.

Имины в реакциях с 1,3-диоксоланом

© Юнникова Лидия Петровна, **Яганова Надежда Николаевна**,
Якимова Ирина Дмитриевна
Кафедра общей химии. ФГБОУ ВПО «Пермская ГСХА» им. академика Д.Н. Прянишникова.
Ул. Петропавловская, 23. Пермь, 614000. Россия. Тел.: (3422) 12-95-68. E-mail: yunnikova@yahoo.com

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

***Ключевые слова*:** *имины, 1,3-диоксолан; 4,4[1]-бис(арилметиленимино)дифенилметаны.*

Аннотация

Взаимодействие 1,3-диоксолана с *N*-бензилиден-4-нитроанилином в присутствии хлорида цинка и концентрированной соляной кислоты сопровождается образованием *N*-бензил-4-нитроанилина, но для *пара*-замещенных *N*-арилметиленанилинов 1,3-диоксолан в среде трифторуксусной кислоты и бензола является конденсирующим агентом, в результате реакции образуются 4,4[1]-бис(арилметиленимино)дифенилметаны.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Исследование препаративных методов.
Регистрационный код публикации: 13-36-10-160 *Подраздел:* Полимерная химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". http://butlerov.com/readings/
УДК 547.562.4+547.631.2+547.26. Поступила в редакцию 20 октября 2013 г.

Исследование взаимодействия этиленкарбоната и *n-трет*-бутилфенола в условиях микроволнового облучения

© Клешнина[1]* Софья Рушатовна, **Нгуен[2] Фи Лонг**,
Соловьева[1+] Светлана Евгеньевна и **Антипин[1,2]* Игорь Сергеевич**
[1] *Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, КазНЦ РАН.*
Ул. Ак. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 272-73-94. E-mail: skleshni@iopc.ru
[2] *Кафедра органической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия.*
Тел.: (843) 233-74-62. E-mail: igor.antipin@ksu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

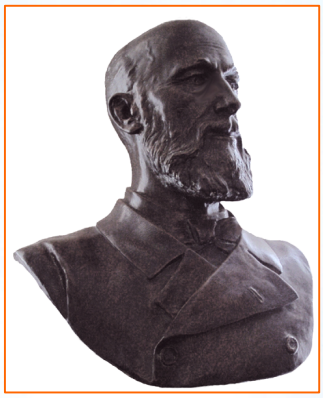
***Ключевые слова**: n-трет-бутилфенол, этиленкарбонат, олигомеризация, основный катализатор.*

Аннотация

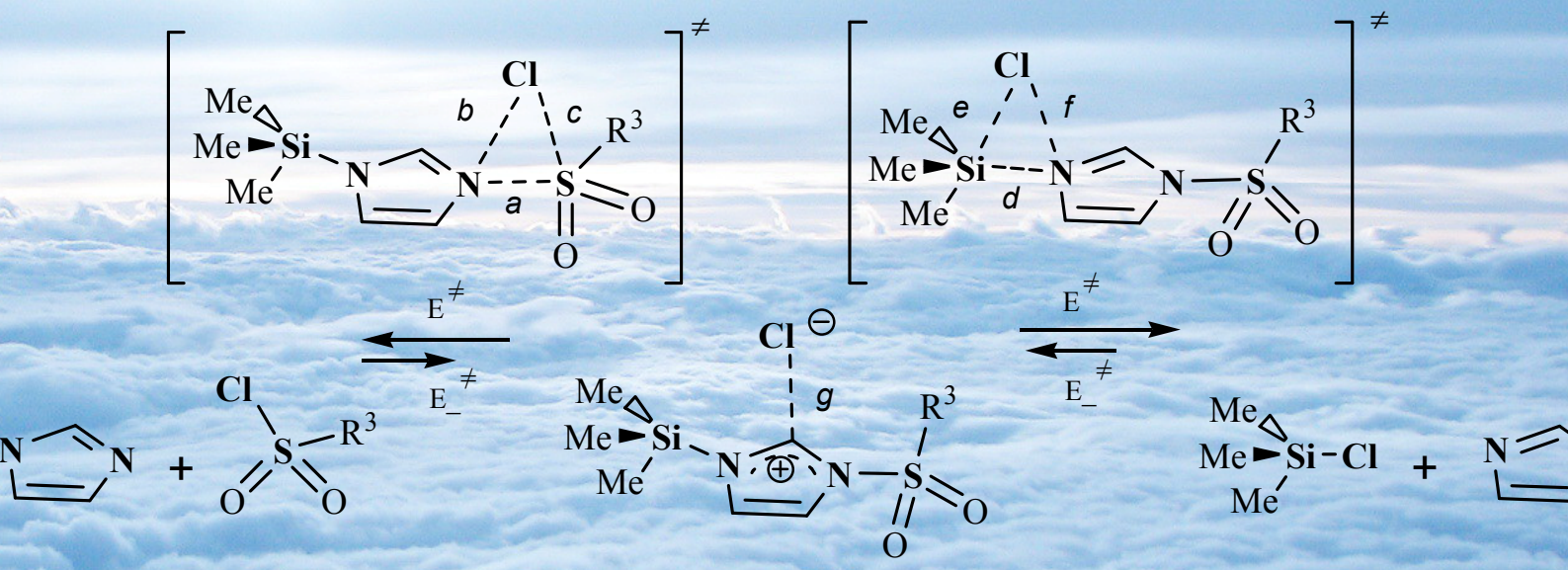
Получены олигоэфиры на основе реакции взаимодействия *n-трет*-бутилфенола с этиленкарбонатом в присутствии карбонатов калия и цезия в условиях микроволнового облучения. Установлено, что при проведении реакции *n-трет*-бутилфенола с этиленкарбонатом в условиях микроволнового облучения образуются продукты с большей степенью олигомеризации, чем при проведении реакции в условиях обычного нагревания, реакция протекает за более короткое время, а в продуктах реакции, наряду с этиленоксидными, появляются также этиленкарбонатные фрагменты.

Butlerov Communications

No.11, Vol.36. 2013



ISSN 2074-0948



ISSN 2074-0212

National Edition in Russian:

Бутлеровские сообщения

Тематический раздел: Препаративные исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-11-1
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 10 ноября 2013 г. УДК 547.74+547.72+539.26.

3,4-Ди[(4-метилфенил)сульфанил]-5-метокси-2(5*H*)-фуранон в реакциях с азотсодержащими нуклеофилами

© **Косолапова**[1] **Лилия Сергеевна**, **Курбангалиева**[1]*+ **Альмира Рафаэловна**, **Козяков**[1] **Денис Александрович**, **Лодочникова**[2] **Ольга Александровна**, **Бердников**[1] **Евгений Александрович** и **Чмутова**[1] **Галина Алексеевна**

[1] *Кафедра органической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 233-74-62. E-mail: Almira.Kurbangalieva@ksu.ru*

[2] *Лаборатория дифракционных методов исследования. Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, КазНЦ РАН. Ул. Ак. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-91-68. E-mail: olga@iopc.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *гетероциклы, 1,5-дигидро-2Н-пиррол-2-оны, 3-пирролин-2-оны, 2(5Н)-фураноны, тиоэфиры, азотсодержащие нуклеофилы, рентгеноструктурный анализ.*

Аннотация

Охарактеризовано поведение 3,4-ди[(4-метилфенил)сульфанил]-5-метокси-2(5*H*)-фуранона в реакциях с азотсодержащими нуклеофильными реагентами. В зависимости от природы реагента и условий эксперимента атака нуклеофила возможна как по карбонильному атому, так и по атому углерода C^4 лактонного цикла. При взаимодействии 3,4-ди[(4-метилфенил)сульфанил]-5-метокси-2(5*H*)-фуранона с аммиаком, бензиламином и гидразином получены новые сернистые производные ряда 3-пирролин-2-она, 2(5*H*)-фуранона и 3(2*H*)-пиридазинона. Строение всех синтезированных соединений доказано методами спектроскопии ИК, ЯМР ^{1}H и ^{13}C, молекулярная и кристаллическая структура трех новых гетероциклов охарактеризована методом рентгеноструктурного анализа.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Квантово-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-11-12 *Подраздел:* Органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 547.1-32-304.2+547-327. Поступила в редакцию 12 октября 2013 г.

Квантово-химическое изучение элементарных актов реакций 2-фталимидоэтансульфонилгалогенидов с *N*-триметилсилилимидазолом

© **Курдюков**[1]*+ **Александр Иванович**, **Юдахина**[2+] **Татьяна Сергеевна**,
Зарубин[2] **Юрий Павлович**, **Пурыгин**[2]* **Петр Петрович** и **Офицеров**[3] **Евгений Николаевич**
[1] *Центр новых информационных технологий. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-42-30. E-mail: butlerov@mail.ru*
[2] *Кафедра органической, биоорганической и медицинской химии. Самарский государственный университет. Ул. Акад. Павлова, д.1. г. Самара, 443011. Россия. Тел.: (846) 334-54-59. E-mail: utschem-2007@mail.ru*
[3] *Кафедра химии и технологии биомедицинских препаратов. Факультет технологии органических веществ и химико-фармацевтических средств. Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева. Миусская пл., 9. г. Москва, 125047. Россия. Тел.: (495) 978-32-61. E-mail: ofitser@mail.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *2-аминоэтансульфоновая кислота, таурин, 2-фталимидоэтансульфоновая кислота, имидазолиды, синтез, механизм реакции, элементарные акты, квантово-химическое моделирование, метод DFT.*

Аннотация

Квантово-химическим методом DFT с функционалом плотности PBE в базисе 3z (аналогичном базисному набору cc-pVTZ) в газофазном и супермолекулярном приближении исследованы реакции 2-фталимидоэтансульфонилгалогенидов с *N*-триметилсилилимидазолом, где Hal = F, Cl. Детально рассмотрена специфика реакционных систем в их геометрическом и энергетическом контексте в зависимости от природы галогенида и специфической сольватации хлороформом.

Показано, что для изученных реакционных систем не реализуются различные синхронные одностадийные механизмы реакции, а имеет место двухстадийный механизм. Первой стадией которого является нуклеофильная атака незамещенным азотным центром *N*-триметилсилилимидазола атома серы соответствующего сульфонилгалогенида с одновременным разрывом связи S-Cl и формированием промежуточного интермедиата, представляющего собой тесную ионную пару галогенаниона и катион-делокализованного дизамещенного имидазольного гетероцикла с сохранившейся N-Si связью и вновь образованной ковалентной связью N-S. Второй стадией реакции является миграция галогенаниона с позиции в тесной ионной паре на кремниевый центр с одновременным разрывом связи N-Si (что можно классифицировать как ипсо-замещение) и формированием целевых продуктов реакции – триметилсилилгалогенида и имидазолида 2-фталимидоэтансульфоновой кислоты.

Сделан вывод о необходимости дальнейшего уточнения механизма реакции посредством использования более высокоточных квантово-химических методов и моделирования различных промоторных эффектов, способствующих снижению активационного барьера прямого направления первой стадии реакции.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Квантово-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-11-22 *Подраздел:* Неорганическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.1+530.145. Поступила в редакцию 22 ноября 2013 г.

Анализ взаимодействия четырехатомного кластера серебра с поверхностью диоксида кремния методами теории функционала плотности

© **Изаак**[1]*** Татьяна Ивановна**, **Мартынова**[1] **Дарья Олеговна** и **Полещук**[2+] **Олег Хемович**
[1] *Национально-исследовательский Томский государственный университет. Пр. Ленина, 36. г. Томск, 634050. Россия. Тел.: 909 546 6306. E-mail: taina_i@mail.ru*
[2] *Национально-исследовательский Томский политехнический университет. Пр. Ленина, 30. г. Томск, 634050. Россия. Тел.: 913 829 1454. E-mail: poleshch@tspu.edu.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *теория функционала плотности, DGDZVP, диоксид кремния, металлическое серебро, натуральные орбитали связи.*

Аннотация

Проведены расчеты некоторых серебро- и кремний содержащих молекул в газовой фазе методом функционала плотности с использованием полноэлектронного базисного набора DGDZVP в программном пакете GAUSSIAN'03 и TZ2P+ в программе Амстердамский функ-ционал плотности. Показано, что диоксид кремния с большой вероятностью может взаимо-действовать с кластером серебра. Рассчитанные рентгеноэлектронные уровни натуральные орбитали связи указывают на существенное взаимодействие между разрыхляющими орбита-лями атомов серебра.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-11-30 *Подраздел:* Коллоидная химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.182644.001.5. Поступила в редакцию 10 ноября 2013 г.

Новые принципы исследования несовершенных кристаллографичеких форм коллоиднохимических кластеров

© Сухарев*[+] Юрий Иванович, **Марков Борис Анатольевич**
и **Шанина Оксана Михайловна**
Кафедра химии твердого тела и нанопроцессов. Челябинский государственный университет.
Ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454000. Россия. Тел.: 963 460 2775.
E-mail: Yuri_Sucharev@mail.ru.

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *лагранжевы отображения, оксигидратные гелевые системы, коллоидные кластеры, самопроизвольный пульсационный поток, спайковый выплеск, диффузный двойной электрический слой, бичастичные взаимодействия, топологический континиум, диссоциативно-диспропорциональное разрушение макромолекул, теория Уитни, геометрия каустик.*

Аннотация

Исследования нелинейных свойств гелевых оксигидратных систем обнаружили следующие особенности: колебательную дилатантность, колебательную (пульсационную) электрическую проводимость, самопроизвольный электроток гелевой самоорганизации на фоне поляризационных явлений, окрашенность гелевых систем, колебательные оптические и сорбционные свойства и многое другое, с чем можно познакомиться на нашем сайте (http://oxyhydrate-gel.ru/), а также в наших крупных работах.

Мы считаем эти свойства гелей связанными с симметриями коллоидной системы и колебательным их изменением во времени. В настоящей работе мы обосновываем этот тезис, исходя из экспериментальных данных – токовых диаграмм и их обработки.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Исследование новых технологий.
Регистрационный код публикации: 13-36-11-44 *Подраздел:* Нанохимия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 544.478.02. Поступила в редакцию 3 октября 2013 г.

Очистка, модифицирование и применение углеродных нанотрубок в процессе низкотемпературного окисления кумола

© Орлов[1] Алексей Сергеевич, Коботаева[1] Наталья Станиславовна, Полещук[2] Олег Хемович, Скороходова[1] Татьяна Сергеевна, Афанасьев[2] Дмитрий Александрович и Жерлицын[3] Алексей Григорьевич

[1] *Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук. пр. Академический, 4. г. Томск, 634021. Россия. Тел.: (9234) 20-71-39. E-mail: orlov_alex1984@mail.ru*

[2] *Национальный исследовательский Томский политехнический университет. пр. Ленина, 30. г. Томск, 634050. Россия.*

[3] *Физико-технический институт Национального исследовательского Томского политехнического университета. Пр. Ленина, 2а. г. Томск, 634000. Россия.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *углеродные нанотрубки, аморфный углерод, катализ, кумол, гидропероксид кумола.*

Аннотация

В работе рассмотрены две различные методики очистки углеродных нанотрубок от аморфного углерода. После очистки образцы исследовались методами РФА, ИК-спектроскопии, ТГА, ЭПР, а также тестировалась их каталитическая активность в реакции окисления кумола в гидропероксид кумола, при температуре 60 °С. В процессе реакции была достигнута конверсия по кумолу равная 8.9% и селективность по гидроперекиси кумола равная 90.3%.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Технологические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-11-50 *Подраздел:* Промышленная химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 621.522.3. Поступила в редакцию 7 ноября 2013 г.

Реконструкция системы создания вакуума ректификационной колонны К-3 ТПП «Когалымнефтегаз» (ОАО Лукойл – Западная Сибирь)

© Осипов[1+] Эдуард Владиславович, Шоипов[2] Ханпаша Султанович и Теляков[1]* Эдуард Шархиевич

[1] *Кафедра «Машины и аппараты химических производств». Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-42-41. E-mail: mahp_kstu@mail.ru*

[2] *ООО «Лукойл-НижегородНИИнефтепроект». Ул. Максима Горького, 147а. г. Нижний Новгород, 603006. Нижегородская область. Россия. Тел.: (831) 421-05-11. E-mail: nnp@nnp.lukoil.com*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *вакуумсоздающие системы, вакуумная ректификация мазута, жидкостно-кольцевой вакуумный насос.*

Аннотация

В статье описывается технологическое обследование вакуумной колонны разделения мазута К-3 (установка *ЭЛОУ-АВТ ТПП «Когалымнефтегаз»*), которое было проведено в августе 2013 года. Данные обследования были интегрированы в расчётные модели. По результатам расчёта были разработаны рекомендации по реконструкции вакуумсоздающей системы колонны и произведён подбор жидкостно-кольцевого вакуумного насоса.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-11-58 *Подраздел:* Физико-химия взрывчатых веществ.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 9 октября 2013 г. УДК 629.7.

Исследование горения перхлоратных металлизированных композиций, содержащих соли динитрамида

© Попок*[+] Владимир Николаевич, **Вандель Александр Павлович**
и **Колесников Алексей Юрьевич**
Открытое акционерное общество «Федеральный научно-производственный центр «Алтай».
Ул. Социалистическая, 1. г. Бийск, 659322. Алтайский край. Россия.
Тел.: (3854) 30-19-37. E-mail: vnpopok@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *соли динитрамида, горючие-связующие, скорость горения, термическое разложение.*

Аннотация

В статье представлены результаты анализа влияния на скорость горения содержания гуанилмочевинной и гуанидиниевой солей динитрамида в металлизированных композициях на основе инертных горючих-связующих и перхлората аммония. Показано, что использование этих солей позволяет в широких пределах регулировать уровень скорости горения композиций при относительно низких значениях показателя степени в законе скорости горения (~0.5), минимизировать содержание неблагоприятных продуктов горения при незначительном снижении энергомассовых характеристик в сравнении с базовыми композициями.

Тематический раздел: Теоретические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия высоких температур. *Регистрационный код публикации:* 13-36-11-67
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 26 октября 2013 г. УДК 544.341.

Расчет концентрации автокомплексов в галогенидных расплавах двухвалентных металлов

© Пешкина[1] Ксения Георгиевна, Ткачев[1+] Николай Константинович и Фишман[2] Анатолий Яковлевич

[1] *Лаборатория межфазных явлений. Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН. Ул. С. Ковалевской, 22. г. Екатеринбург, 620219. Россия. Тел.: (343) 362-31-35. E-mail: n.tkachev@ihte.uran.ru*

[2] *Лаборатория статики и кинетики процессов. Институт металлургии УрО РАН. Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Россия. Тел.: (343) 267-94-72. E-mail: fishman@uran.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *химическое равновесие в неидеальных системах, диссоциация комплексов в ионных жидкостях.*

Аннотация

Представлен модельный расчет химического равновесия реакции $M^{2+} + 4X^- = (MX_4)^{2-}$ в галогенидных расплавах двухвалентных металлов. Найдено, что концентрация автокомплексных анионов сильно редуцирована эффектами электростатического экранированного взаимодействия ионов в реагирующей смеси. Показано, что сдвиг химического равновесия от состояния с максимально возможным количеством автокомплексов к полной их диссоциации имеет место в достаточно узком интервале температур и сопровождает максимумом атомной плотности.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Краткое сообщение**
Подраздел: Фазовые равновесия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-11-73
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 12 октября 2013 г. УДК 544.344.

Исследование фазовых равновесий в системе Ga–InBi

© **Филиппов**[1,2+] **Владимир Викторович**, **Быков**[1] **Виктор Анатольевич**, **Шуняев**[1]* **Константин Юрьевич** и **Шубин**[1] **Алексей Борисович**
[1] *Институт металлургии УрО РАН. Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Свердловская область. Россия. Тел.: (8343) 232-91-69. E-mail: vvfilippov@mail.ru*
[2] *Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Свердловская область. Россия.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *система Ga–InBi, фазовые равновесия, ДСК метод, метод сканирующей электронной микроскопии.*

Аннотация

Фазовые равновесия в системе Ga–InBi исследованы методами ДСК и сканирующей электронной микроскопии. Установлено, что сечение Ga–InBi на диаграмме состояния Ga–In–Bi является неквазибинарным. В данном сечении обнаружены два нонвариантных равновесия: эвтектическое $L \leftrightarrow$ (Ga) + (Bi) + InBi при 24.3 ± 0.5 °C и монотектическое $L'' \leftrightarrow L'$ + (Bi) + InBi при 98.4 ± 0.5 °C. Уточнено положение границы области расслаивания в системе Ga-InBi.

Письмо в редакцию *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-11-76 *Подраздел:* Фазовые равновесия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 543.226:541.123.2 Поступила в редакцию 12 октября 2013 г.

Исследование двухкомпонентной системы K//Br, CrO_4

© **Сальникова**[+] **Ирина Игоревна** и **Кондратюк* Игорь Мирославович**
Кафедра общей и неорганической химии. Самарский государственный технический университет.
Ул. Молодогвардейская, 244. г. Самара, 443100. Россия.
Тел.: (846) 278-44-77. E-mail: isechka24@yandex.ru, kondratuk2@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *дифференциально-термический анализ, фазовые равновесия, эвтектика.*

Аннотация

Методом дифференциального термического анализа исследована двухкомпонентная система K// Br, CrO_4, представлена Т-Х диаграмма, определены температура плавления и состав эвтектической точки. Исходя из изученной диаграммы состояния, можно сделать вывод об отсутствии протекания окислительно-восстановительной реакции в расплаве этих солей до 900 ^oC.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Препаративные исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-11-78 *Подраздел:* Химия комплекстных соединений.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений"
http://butlerov.com/synthesys/
УДК 544-72. 546.185 +546.492+547.53.024+548.312.4. Поступила в редакцию 9 ноября 2013 г.

Синтез и строение комплексов висмута $[Bu_4P]^+_2[Bi_2I_8 \cdot 2Me_2S{=}O]^{2-}$, $[(Me_2S{=}O)_8Bi]^{3+}[Bi_2I_9]^{3-}$

© Шарутин*[+] Владимир Викторович, **Шарутина Ольга Константиновна**, **Сенчурин Владислав Станиславович** и **Хисамов Радмир Мухаметович**
Кафедра органической химии. Химический факультет. Южно-Уральский государственный университет. Пр. Ленина, 76. г. Челябинск, 454080. Россия. Тел.: (351) 267-95-70. E-mail: vvsharutin@rambler.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *синтез, строение, комплекс, висмут, иод.*

Аннотация

Взаимодействием иодида тетрабутилфосфония с трииодидом висмута (2:1, 1:1, 1:2 мольн.) в диметилсульфоксиде синтезирован комплекс $[Bu_4P]^+_2[Bi_2I_8(Me_2S{=}O)_2]^{2-}$ (**I**). Вторым продуктом реакции иодида тетрабутилфосфония с трииодидом висмута (1:2 мольн.) в диметилсульфоксиде является комплекс $[(Me_2S{=}O)_8Bi]^{3+}[Bi_2I_9]^{3-}$ (**II**). В катионах комплекса **I** атомы P имеют искаженную тетраэдрическую координацию (углы CPC 104.1(1)°-112.6(1)°). В биядерных центросимметричных анионах структуры **I** гексакоординированные атомы висмута связаны двумя мостиковыми (м) атомами иода (Bi-$I_м$ 3.260(1) и 3.315(1) Å), концевые (к) атомы иода образуют с атомом висмута более прочные связи (Bi-$I_к$ 2.926(1)-3.031(1) Å), длина связи Bi-O 2.436(1) Å. В катионе $[(Me_2S{=}O)_8Bi]^{3+}$ комплекса **II** восемь молекул диметилсульфоксида координируются на атом висмута через атомы кислорода (углы OBiO 69.9(2)°-98.9(3)°, длины связей Bi-O составляют 2.381(4)-2.476(4) Å). В анионе $[Bi_2I_9]^{3-}$ комплекса II атомы Bi имеют октаэдрическую координацию; группировки BiI_3 связаны друг с другом через три мостиковых атома атома иода (Bi-$I_м$ 3.156(1)-3.343(1) Å, Bi-$I_к$ 2.910(1)-3.021(1) Å.

Тематический раздел: Препаративные исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Элементоорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-11-83
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений"
http://butlerov.com/synthesys/
Поступила в редакцию 26 октября 2013 г. УДК 546.12+546.865+547.491.4+547.53.024+548.312.5.

Синтез и строение *μ*-оксо*бис*[(трифторацетато)-(три-*м*-толил)сурьмы][$(C_6H_4Me\text{-}3)_3SbOC(O)CF_3$]$_2$O

© **Шарутин*[+] Владимир Викторович**, **Шарутина Ольга Константиновна** и **Сенчурин Владислав Станиславович**
Кафедра органической химии. Химический факультет. Южно-Уральский государственный университет. Пр. Ленина, 76. г. Челябинск, 454080. Россия. Тел.: (351) 267-95-70.
E-mail: vvsharutin@rambler.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *синтез, строение, [$(C_6H_4Me\text{-}3)_3SbOC(O)CF_3$]$_2$O.*

Аннотация

Взаимодействием три(*мета*-толил)сурьмы с трифторуксусной кислотой в присутствии пероксида водорода в водно-эфирном растворе получена с выходом 91% *μ*-оксо-*бис*[(трифторацетато)(три-*м*-толил)сурьма] (**I**). В биядерной молекуле **I** угол SbOSb составляет 146.0(5)°. Атомы сурьмы имеют искаженную тригонально-бипирамидальную координацию. Расстояния Sb-C изменяются в интервале 2.086(7)-2.118(7) Å. Связи атома сурьмы с мостиковым атомом кислорода [1.962(6), 1.957(6) Å] короче, чем с атомами кислорода трифторацетатных групп [2.209(5), 2.209(5) Å].

Тематический раздел: Препаративные исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Элементоорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-11-87
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений"
http://butlerov.com/synthesys/
Поступила в редакцию 30 октября 2013 г. УДК 547.243+ 548.737.

Синтез и строение *2*-бром-4-формилфенокситетрафенилсурьмы

© **Шарутин*[+] Владимир Викторович**, **Шарутина Ольга Константиновна**, **Сенчурин Владислав Станиславович** и **Щелоков Артем Олегович**
Кафедра органической химии. Химический факультет. Южно-Уральский государственный университет. Пр. Ленина, 76. г. Челябинск, 454080. Россия. Тел.: (351) 267-95-70. E-mail: vvsharutin@rambler.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *синтез, строение, ароксид, тетрафенилсурьма.*

Аннотация

Взаимодействием пентафенилсурьмы с 2-бром-4-формилфенолом в толуоле при нагревании получены 2-бром-4-метоксифенокситетрафенилсурьма и 2-бром-4-формилфенокситетрафенилсурьма с выходом до 97%. По данным рентгеноструктурного анализа атом сурьмы в молекуле 2-бром-4-формилфенокситетрафенилсурьмы обладает конфигурацией искаженной тригональной бипирамиды; длины связей Sb-O и Sb-C равны 2.257(3) и 2.166(4), 2.113(4), 2.127(4), 2.122(4) Å соответственно, аксиальный угол OSbC и экваториальные углы CSbC составляют 176.8(1)° и 116.0(1)°, 118.7(1)°, 121.1(1)°.

Тематический раздел: Препаративные исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Элементоорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-11-91
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 19 октября 2013 г. УДК 546.865+547.243+547.558.

Синтез и строение *бис*(салицилальдоксимата) трифенилсурьмы

© Шарутин*[+] Владимир Викторович, **Шарутина Ольга Константиновна**
и **Сенчурин Владислав Станиславович**
Кафедра органической химии. Химический факультет. Южно-Уральский государственный университет. Пр. Ленина, 76. г. Челябинск, 454080. Россия. Тел.: (351) 267-95-70.
E-mail: vvsharutin@rambler.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *синтез, строение, бис(салицилальдоксимат) трифенилсурьмы.*

Аннотация

Взаимодействием трифенилсурьмы, гидропероксида *трет*бутила и салицилальдоксима (1:2:1 мольн.) в гептане получен *бис*(салицилальдоксимат) трифенилсурьмы (**I**), строение которого установлено методом РСА. Атомы Sb в центросимметричной молекуле **I** (центр инверсии – атом сурьмы) имеют искаженную тригонально-бипирамидальную координацию с оксимными группами в аксиальных положениях. Длины связей Sb-C и Sb-O равны 2.103(3), 2.103(3), 2.112(2) и 2.073(2) Å, внутримолекулярные контакты Sb···N составляют 2.884(2) Å.

Тематический раздел: Препаративные исследования. **Краткое сообщение**
Подраздел: Металлоорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-11-95
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений”
http://butlerov.com/synthesys/
Поступила в редакцию 21 октября 2013 г. УДК 546.87+547.53.024+548.312.5.

Синтез и строение 4-метилбензолсульфоната тетрафенилвисмута

© **Шарутин*[+] Владимир Викторович** и **Шарутина Ольга Константиновна**
Кафедра органической химии. Химический факультет. Южно-Уральский государственный университет. Пр. Ленина, 76. г. Челябинск, 454080. Россия. Тел.: (351) 267-95-70.
E-mail: vvsharutin@rambler.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *синтез, строение, $Ph_4BiOC_6H_4Me$-4.*

Аннотация

Взаимодействием пентафенилвисмута с 4-метилбензолсульфонатом дифенилсурьмы получен 4-метилбензолсульфонат тетрафенилвисмута, строение которого установлено методом РСА. Атом Bi в соединении имеет искаженную тригонально-бипирамидальную координацию с тозилатным заместителем в аксиальном положении. Длины связей Bi-C равны равны 2.192(2)-2.225(2) Å, расстояние Bi-O и величина аксиального угла CBiO составляют 2.759(2) Å и 171.6(1)° соответственно.

Письмо в редакцию *Тематический раздел:* Препаративные исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-11-98 *Подраздел:* Органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 547.243. Поступила в редакцию 22 октября 2013 г.

Взаимодействие дифенилацетилена с дииодидом платины в растворе диметилсульфоксида в присутствии кислорода воздуха

© Шарутин*[+] Владимир Викторович, **Шарутина Ольга Константиновна**
и **Сенчурин Владислав Станиславович**
Кафедра органической химии. Национальный исследовательский Южно-Уральский государственный университет. Проспект им. В.И. Ленина, 76. г. Челябинск, 454080. Россия.
Тел.: (351) 267-95-70. E-mail: vvsharutin@rambler.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *окисление, дифенилацетилен, дииодид платины, диметилсульфоксид, дифенилэтандион-1,2.*

Аннотация

Дифенилацетилен в растворе диметилсульфоксида в атмосфере воздуха в присутствии дииодида платины окисляется до дифенилэтандиона-1,2 с выходом 91%. В отсутствие дииодида платины в реакционной смеси образование дифенилэтандиона-1,2 не имело места.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-11-100 *Подраздел:* Химия полимеров.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 542.06: 678. Поступила в редакцию 10 октября 2013 г.

Изучение влияния состава сополимеров на основе гликолевой и молочной кислот на их растворимость

© Кучина Ольга Константиновна, Бабкина* Ольга Владимировна, Алексеенко[+] Кира Викторовна и Немойкина Анна Леонидовна
Томский региональный центр коллективного пользования. Томский государственный университет. пр. Ленина, 36. г. Томск, 634050. Россия. Тел.: (3822) 53-48-45. E-mail: ckp@mail.tsu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *биополимеры, гликолид, лактид, полигликолидлактид.*

Аннотация

В работе исследовано влияние состава и молекулярной массы на растворимость полимеров на основе гликолевой и молочной кислот в таких органических растворителях как диметилсульфоксид, тетрагидрофуран, метиленхлорид, хлороформ и гексафторизопропанол. Данные по растворимости использованы для постановки методики изучения молекулярной массы методом гель-проникающей хроматографии и для отработки методики нанесения антимикробного покрытия на поверхности биоразлагаемых нитей из сополимера гликолевой и молочной кислот.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-11-104 *Подраздел:* Физиогенные биоминералы.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 544.03. Поступила в редакцию 7 ноября 2013 г.

Кристаллизация фосфатов кальция из растворов, моделирующих состав плазмы крови человека

© **Голованова* Ольга Александровна** и **Солодянкина[+] Анна Андреевна**
Кафедра неорганической химии. Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского.
Проспект Мира, 55-А. г. Омск, 644077. Россия. Тел.: (3812) 26-81-99.
E-mail: golovanoa2000@mail.ru, solodyankina.a@gmail.com

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *кристаллизация, пересыщение, фосфат кальция, плазма крови, кинетика.*

Аннотация

В данной работе представлены результаты исследований кинетики нуклеации и процесса роста кристаллов в растворах, моделирующих состав плазмы крови человека. Приведены результаты рентгено-фазового анализа и оптической микроскопии. Установлено, что при изменении пересыщения изменяется состав осадка – октофосфат кальция переходит в гидроксиапатит. Показано влияние некоторых неорганических (ионов магния) и органических (аланина и глюкозы) добавок на кинетику кристаллизации.

Введение

Процессы кристаллизации малорастворимых соединений всегда привлекали внимание исследователей [1, 2]. Интерес вызван тем, что данные соединения входят в состав патогенных минералов и являются болезнями организма человека, например, артериосклероз – заболевание, связанное с отложением солей кальция в сосудах. Это заболевание – второе по распространенности среди всех склеротических поражений артериальных сосудов после атеросклероза. Кроме того, изучение данных соединений вызывает интерес при синтезе перспективных биоматериалов [3]. Сведения о кристаллизации патогенных и физиогенных малорастворимых соединений из биологических жидкостей весьма малочисленны [4].

Основной сложностью при изучении таких систем является их состав. Биологические жидкости состоят из множества компонентов, как неорганических, так и органических [5].

Например, плазма крови служит связующим звеном между всеми, находящимися вне кровеносных сосудов жидкостями, именно поэтому она была выбрана в качестве модельной среды. Кровь – жидкая ткань, осуществляющая в организме транспорт химических веществ. Кроме того, кровь выполняет защитную, регуляторную, терморегуляторную и другие функции.

На долю плазмы приходится 55-60% от объема крови. Плазма содержит 90-91% воды и 9-10% сухого вещества. Среди растворенных в плазме веществ – низкомолекулярные органические соединения (мочевина, мочевая кислота, аминокислоты и так далее); большие и очень сложные по структуре молекулы белков; частично ионизированные неорганические соли [5].

За последние годы увеличился процент патогенного минералообразования в кровеносных сосудах, сердечных клапанах. Это связано с целым рядом факторов как экзогенного характера, так и эндогенного [1, 6]. Поэтому, изучение процессов кристаллизации малорастворимых соединений образующихся в организме человека с целью профилактики и предотвращения заболеваний является перспективным направлением исследований.

В данной работе приведены результаты исследования характера кристаллизации малорастворимых соединений из растворов, моделирующих состав плазмы крови человека, в условиях, близких к физиологическим.

Экспериментальная часть

Для изучения кристаллизации раствора, моделирующего состав плазмы крови (табл. 1), были приготовлены растворы, содержащие ионы, совместное присутствие которых не дает малораство-

римых соединений. Корректировку pH до физиологического значения проводили путем добавления 30 %-ного раствора NaOH или HCl (конц.).

После сливания эквивалентных объемов растворов (рис. 1) определяли следующие показатели: периоды индукции, оптическую плотность, электропроводность, остаточную концентрацию кальция.

На основании данных, полученных при определении периодов индукции, для кинетических исследований были выбраны следующие пересыщения: 5, 10, 20, 30, 40.

В ходе последующих экспериментов варьировали pH от 7.0 до 8.0 с шагом в 0.1.

Кинетику кристаллизации исследовали кондуктометрическим и фотометрическим методами [7]. Потенциометрическим методом определяли остаточную концентрацию ионов кальция.

Для определения периодов индукции был использован визуальный метод. Он представляет собой визуальное наблюдение за процессом кристаллизации, и фиксирование времени, в течение которого не наблюдается выпадение осадка из раствора. Все опыты проводили при одинаковой температуре, в отсутствии перемешивания. Полученные данные обрабатывали с помощью уравнения (1).

$$\lg t = \lg k - n \cdot \lg S \qquad (1)$$

где t – время индукции,
S – пересыщение,
n – порядок реакции.

Табл. 1. Неорганический состав плазмы крови человека [5]

Компонент	Минимальная концентрация (ммоль/л)	Максимальная концентрация (ммоль/л)	Среднее значение концентрации (ммоль/л)
Кальций	2.1	2.6	2.35
Натрий	130	156	143
Калий	3.4	5.3	4.35
Магний	0.7	1.2	0.95
Аммиак	0.02	0.06	0.04
Хлориды	97	108	103
Сульфаты	0.3	0.6	0.45
Карбонаты	24	28	26
Фосфаты	1.1	1.5	1.3

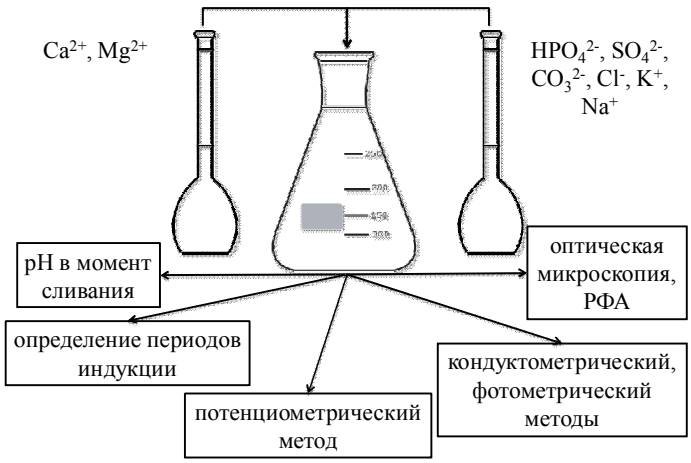


Рис. 1. Схема эксперимента

Зависимость периода индукции от пересыщения дает возможность экспериментального определения свободной поверхностной энергии образующихся зародышей. Значение σ находили по уравнению (2):

$$\sigma = \left[\frac{3(RT)^3(\ln\tau_1 - \ln\tau_2)\ln^2 S_1 \ln^2 S_2}{16\pi\sigma^3 V_M^2(\ln^2 S_1 - \ln^2 S_2)}\right]^{1/3} \qquad (2)$$

Используя полученные при изучении кинетики данные, графическим методом определили порядок реакции роста кристаллов (уравнения 3-5)

$$\ln C = \ln C_0 - kt \qquad (3)$$

$$1/C = kt - 1/C_0 \qquad (4)$$

$$1/C^2 = kt - 1/C_0^2 \qquad (5)$$

Известно, что неорганические и органические добавки влияют на процесс кристаллизации [6]. Для изучения их влияния использовали растворы с пересыщением 10. В колбы во время приготовления растворов вводили добавки ионов магния, аланина или глюкозы. Концентрации используемых веществ в эксперименте приведены в табл. 2.

Табл. 2. Концентрации используемых добавок, ммоль/л

Магний-ионы			Аланин			Глюкоза		
$C_{физ.}$*2	$C_{физ.}$*4	$C_{физ.}$*6	$C_{физ.}$	$C_{физ.}$*50	$C_{физ.}$*100	$C_{физ.}$	$C_{физ.}$*50	$C_{физ.}$*100
1.90	3.80	5.70	0.49	24.50	49.00	5.16	258	516

По окончании времени эксперимента твердые фазы отфильтровывали, высушивали и анализировали рентгенофазовым анализом (РФА) – качественный и количественный фазовый анализ. РФА

был выполнен на порошковом рентгеновском дифрактометре *D8 Advance, Bruker* (Германия) в монохроматизированном Cu-k_α излучении. Морфологию осадков изучали с помощью микроскопа МБР-1.

Результаты и их обсуждение

1. Кинетика нуклеации

В результате исследования выявили, что по мере увеличения степени пересыщения модельного раствора время индукции уменьшается (рис. 2).

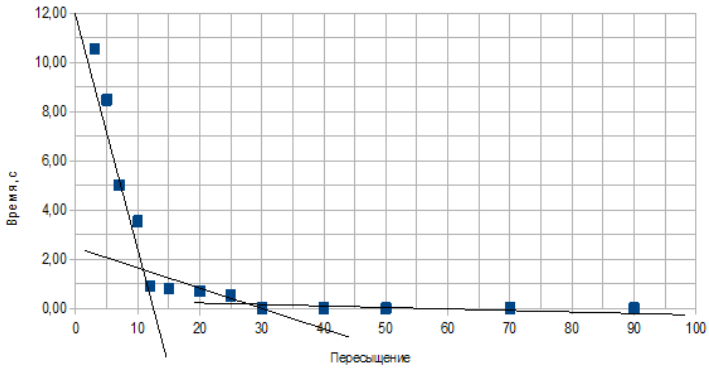
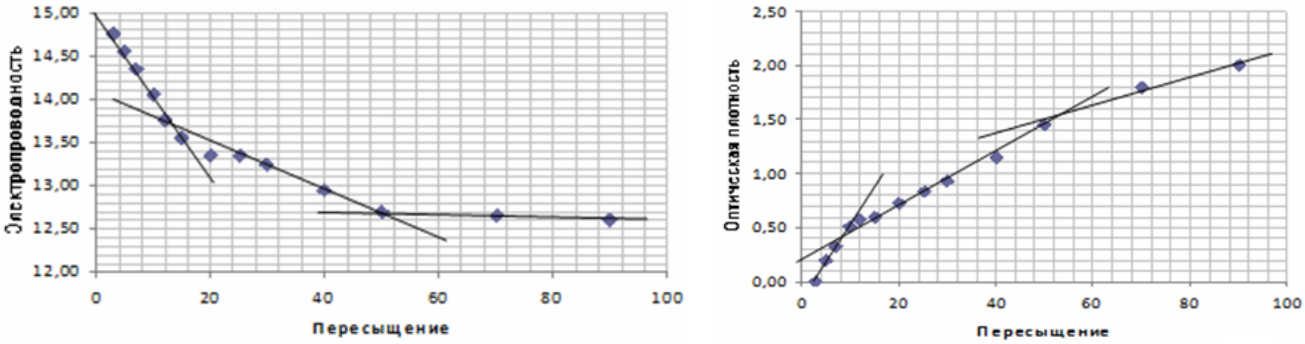


Рис. 2. Зависимость времени индукции от степени пересыщения системы

На полученных экспериментальных кривых можно выделить три участка, для которых характерна разная скорость изменения времени индукции: пересыщения 3-15, пересыщения 15-30 и пересыщения 30-90. На первом участке время индукции меняется довольно быстро. На третьем участке время индукции уже не зависит от степени пересыщения системы и практически не изменяется.

Аналогичные закономерности получены при изучении влияния пересыщения на исследуемые растворы кондуктометрическим и фотометрическим методом (рис. 3а,б).



а) б)

Рис. 3. Зависимость электропроводности (а) и оптической плотности (б) от степени пересыщения системы

По полученным значениям периодов индукции (табл. 3) рассчитали общий порядок реакции (урав. 1).

Рассчитанный общий порядок реакции оказался дробным и равным 1.6. Установленное значение константы скорости составило 88.61. Известно, что значение порядка указывает на количество частиц, входящих в состав зародыша, а значение константы характеризует общее количество образовавшихся частиц [6].

На основании данных зависимости периодов нуклеации от пересыщения рассчитали удельную поверхностную энергию по теории Гиббса-Фольмера по уравнению (2). Получено, что с увеличением пересыщения растет значение поверхностной энергии (табл. 3).

Это говорит о том, что с ростом пересыщения наблюдается переход от гетерогенного механизма образования зародышей к гомогенному, что хорошо согласуется с раннее полученными данными [6].

Влияние используемых добавок на скорость зародышеобразования представлено в табл. 4.

Из полученных данных видно, что ионы магния промотируют процесс нуклеации, причем данный эффект снижается при увеличении концентрации добавки. По нашему мнению, это связано с образованием малорастворимых фосфатов магния (рПР ($Mg_3(PO_4)_2$) = 13).

В свою очередь, аланин и глюкоза достаточно сильно ингибируют скорость стадии зародышеобразования (в ≈ 50 раз).

Табл. 3. Зависимость удельной поверхностной энергии от пересыщения

S	Время индукции, с	σ, Дж/м^2
3	устойчивая система	
5	10.56	
10	8.48	9.44
15	5.02	
20	3.54	
30	0.92	12.37
40	0.80	
50	0.70	
60	0.52	17.68
70	0.10	
90	0.06	

Табл. 4. Величина периодов индукции при различных концентрациях добавок (S = 10, pH = 7.4)

Вещество	Концентрация	Время индукции, с
Без добавок	-	8.48
Ионы магния	$C_{физ.}$*2	4.56
	$C_{физ.}$*4	5.78
	$C_{физ.}$*6	6.87
Аланин	$C_{физ.}$	384.41
	$C_{физ.}$*50	626.39
	$C_{физ.}$*100	925.58
Глюкоза	$C_{физ.}$	375.48
	$C_{физ.}$*50	461.94
	$C_{физ.}$*100	737.21

Причем, рост концентрации данных добавок увеличивает значение периода индукции, при этом во всех случаях зависимость времени индукции от пересыщения носит линейный характер. Такое поведение изучаемой системы в присутствии аланина и глюкозы можно объяснить процессами комплексообразования с ионами кальция и адсорбцией данных соединений на поверхности образующихся зародышей [8-10].

2. Кинетика кристаллизации

Для пяти выбранных пересыщений (5, 10, 20, 30, 40) был снят ряд кинетических кривых при варьировании pH раствора (рис. 4).

Полученные кинетические кривые были обработаны и, графическим методом определен порядок реакции роста кристаллитов. Наиболее адекватно описывает кинетику роста в изучаемой системе, уравнение для реакции второго порядка (урав. 4). Исходя, из этого были, рассчитали константы скорости (табл. 5).

Отмечена зависимость константы от pH, и величины пересыщения, но при этом порядок значений констант отличается не значительно.

По нашему мнению зависимость констант от pH связана с формой нахождения фосфат-ионов в растворе [11]. В диапазоне pH от 7 до 8 присутствуют гидрофосфат- и дигидрофосфат-ионы, поэтому в данном диапазоне pH могут кристаллизоваться октофосфат кальция (pH = 5.5-7.0), кальций дефицитный гидрокси-апатит (pH = 6.5-9.5) и аморфный фосфат кальция (pH = 5-12), что подтверждает сложность протекающих процессов.

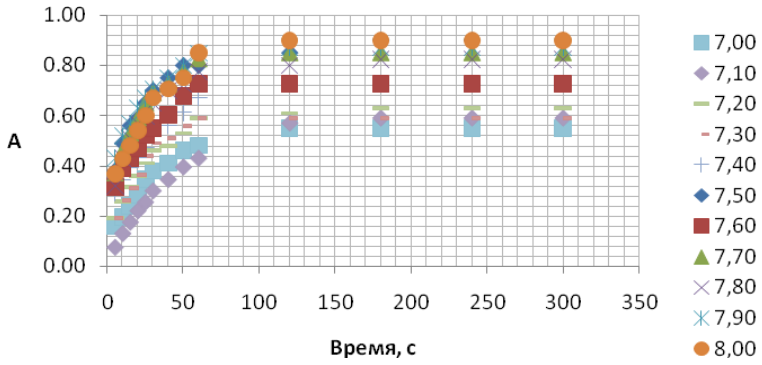


Рис. 4. Пример кинетической кривой для пересыщения 20

Табл. 5. Константы скорости реакции роста кристаллов в зависимости от пересыщения и pH

Пересыщение	5	10	20	30	40
pH	k, 1/c				
7.0	3.33E+05	3.33E+05	2.00E+05	1.67E+05	2.50E+05
7.1	2.50E+05	2.50E+05	2.00E+05	2.50E+05	2.00E+05
7.2	1.67E+04	1.00E+06	2.00E+05	2.50E+05	1.67E+05
7.3	3.33E+05	1.43E+05	2.00E+05	3.33E+05	2.00E+05
7.4	2.00E+05	1.00E+06	5.00E+05	3.33E+05	1.43E+05
7.5	1.67E+05	1.67E+05	2.50E+05	5.00E+05	1.67E+05
7.6	1.00E+06	2.00E+05	2.00E+05	5.00E+05	1.43E+05
7.7	1.00E+06	5.00E+05	2.00E+05	2.50E+05	2.50E+05
7.8	2.50E+05	1.67E+05	2.00E+05	1.00E+06	2.50E+05
7.9	2.00E+05	2.00E+05	1.67E+05	2.00E+05	2.00E+05
8.0	3.33E+05	2.00E+05	2.50E+05	1.67E+05	2.50E+05

3. Кинетика кристаллизации в присутствии добавок

По аналогии с процессом нуклеации, для изучаемых добавок были получены кинетические кривые (рис. 5).

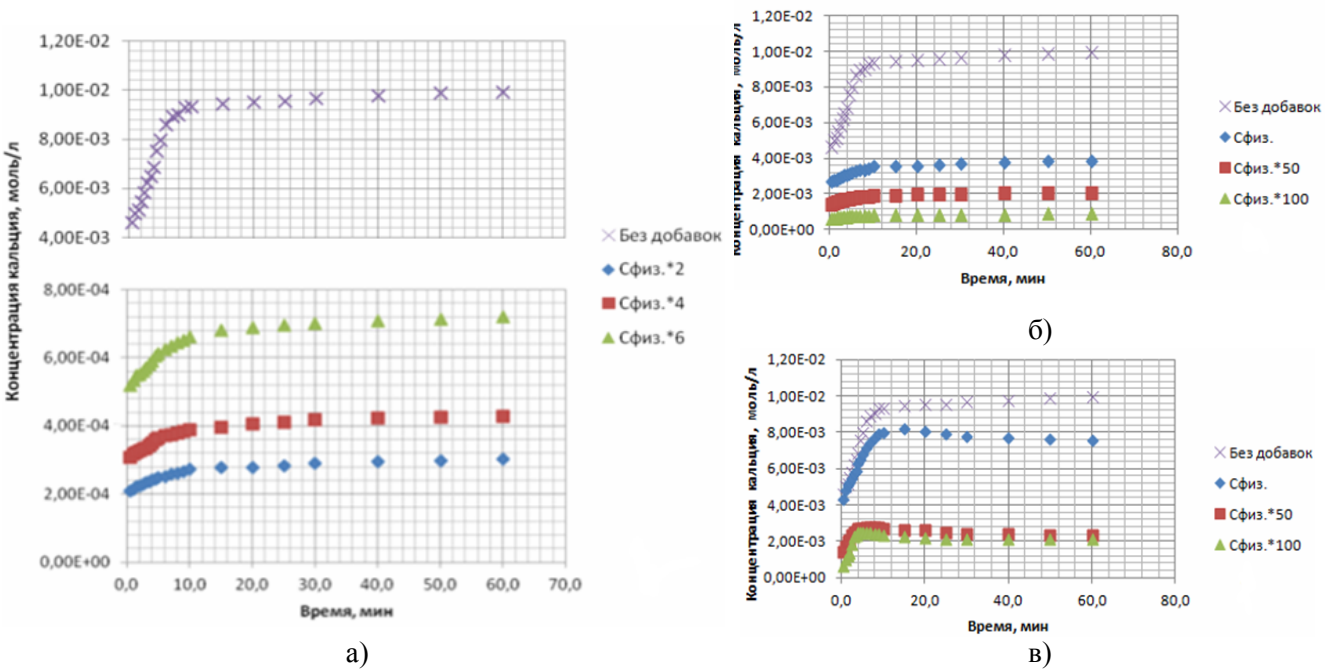


Рис. 5. Кинетические кривые для растворов с добавками ионов магния (а), аланина (б) и глюкозы (в), при (S = 10, pH = 7.4)

Как видно, все добавки уменьшают концентрацию ионов кальция в исходном растворе. В случае ионов магния (рис. 5а) видно, что при увеличении концентрации ионов магния в растворе увеличивается остаточная концентрация кальция.

Это связано с тем, что ионы магния могут изоморфно встраиваться в кристаллиты образующихся фосфатов кальция, тем самым увеличивая концентрацию ионов кальция в растворе, кроме того часть фосфат-ионов расходуется на образование нерастворимого фосфата магния, а не кристаллизацию фосфатов кальция.

Для аланина и глюкозы (рис. 5б,в) обратная зависимость: чем больше концентрация аланина и глюкозы в растворе, тем меньше остаточная концентрация ионов кальция. Для аланина характер зависимости концентрации кальция от времени такой же, как для магния (постепенное увеличение).

Табл. 6. Константы скорости роста кристаллов в присутствии добавок

Вещество	Концентрация	Константа скорости, 1/с
Без добавок	-	3.78E+05
Магний	$C_{физ.}$ *2	5.00E+03
	$C_{физ.}$ *4	5.00E+03
	$C_{физ.}$ *6	5.00E+03
Аланин	$C_{физ.}$	2.50E+03
	$C_{физ.}$ *50	3.33E+03
	$C_{физ.}$ *100	5.00E+03
Глюкоза	$C_{физ.}$	1.67E+03
	$C_{физ.}$ *50	3.33E+03
	$C_{физ.}$ *100	1.67E+04

В случае глюкозы видно, что через некоторый промежуток времени концентрация ионов кальция начинает уменьшаться. Это, возможно, происходит из-за образования комплексных соединений кальция с глюкозой [3].

По полученным кинетическим кривым графическим методом определили порядок реакции и константы скорости. Наиболее адекватно описывает кинетику роста в изучаемой системе, уравнение для реакции второго порядка (урав. 4). Исходя из этого, рассчитали константы скорости (табл. 6).

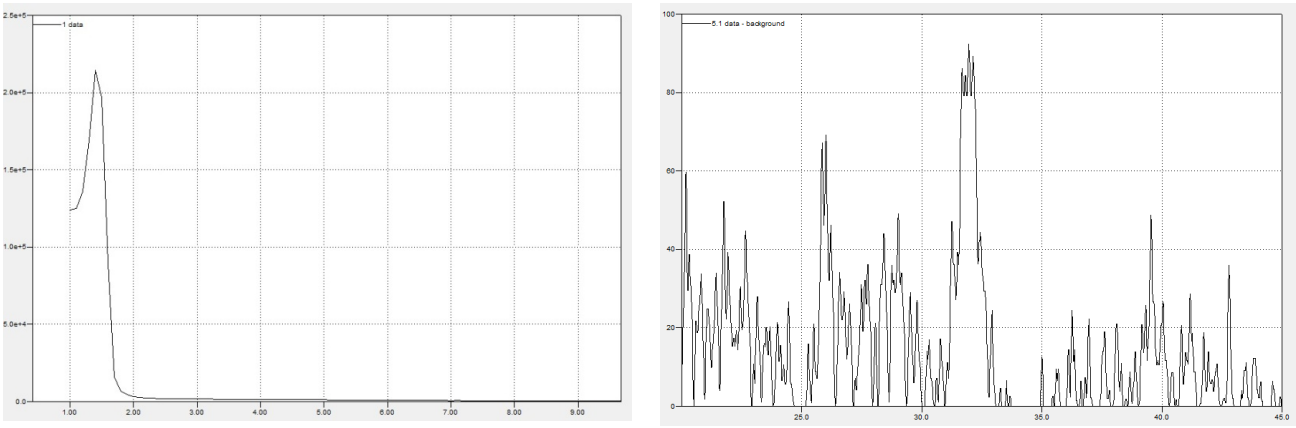
Сравнение констант скорости роста кристаллов с участием добавок и без них, подтверж-дает их ингибирующее действие на стадию роста кристаллитов. При этом для ионов магния константы скорости не изменяются с увеличением концентрации добавки. В случае аланина и глюкозы зависимость одинаковая: с увеличением концентрации добавки незначительно воз-растает константа скорости реакции роста кристаллов.

Причем у глюкозы увеличение концентрации в 100 раз приводит к увеличению константы скорости на порядок. Вероятно частицы ионов кальция с аланином и глюкозой образовав-

шиеся на стадии нуклеации (за счет процессов комплексообразования) способны выступать в качестве зародышей для дальнейшего роста на их поверхности кристаллов фосфатов кальция.

4. Результаты РФА и оптической микроскопии

Рентгенофазовый анализ полученных твердых фаз (рис. 6а,б) показал, что в полученных осадках при небольших пересыщениях (3-20) кристаллизуется октофосфат кальция, а при больших пересыщениях (20-50) – октофосфат кальция с примесями гидроксиапатита. Известно, что октофосфат кальция может образовываться как промежуточное метастабильное соединение во время осаждения термодинамически более устойчивых ортофосфатов кальция в водных растворах [12].



а б

Рис. 6. Результаты рентгено-фазового анализа осадков с пересыщением 5 (а) и 30 (б)

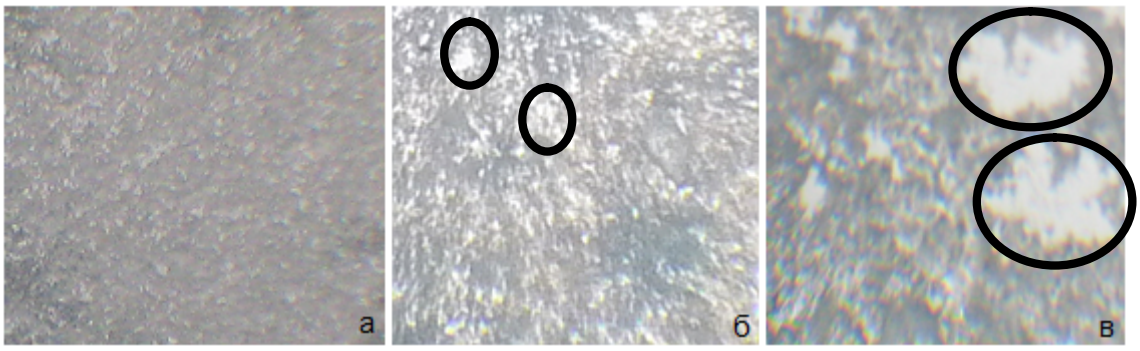


Рис. 7. Результаты оптической микроскопии для пересыщения 5(а), 20 (б), 40 (в)

Полученные результаты подтверждаются данными оптической микроскопии исследуемых растворов. При большом пересыщении на снимках хорошо наблюдаются вкрапления агрегатов гидроксиапатита (рис. 7).

Заключение

Таким образом, процессы кристаллизации, имеющие место в прототипах биологических жидкостей: слюны [13] и плазмы крови, несомненно, разные, поэтому попытки авторов [14] заменить определение основных показателей крови на анализ слюны являются необоснованными.

Выводы

1. По данным оптической плотности, электропроводности и pH выявлены интервалы изменения свойств системы, моделирующей состав плазмы крови, в зависимости от пересыщения: 3-15, 15-30, 30-90.

2. Определен порядок и константа нуклеации (n = 1.6; k = 88.61) фосфатов кальция образующихся в модельном растворе плазмы крови.

3. Определены порядок и константы процесса роста кристаллов фосфатов кальция, образующихся в модельном растворе плазмы крови. Порядок равен двум. Значения констант варьируются в зависимости от pH и пересыщения, но не сильно отличают друг от друга по величине ($k \approx 4.4E-06$).

4. Проведено сравнение типов кристаллизации модельных растворов плазмы крови для систем с различным исходным пересыщением и в составе осадка обнаружено присутствие октокальцийфосфата и кальций-дефицитного гидроксиапатита.

5. Было изучено влияние добавок на процесс кристаллизации модельных растворов плазмы крови, показано, что:
   - введение добавок магния, глюкозы, аланина не влияет на величину порядка реакции роста кристаллов ($n = 2$);
   - константы скорости исследуемых систем при введении добавок разных концентраций магния не изменяются ($k = 0.2E-03$), а с увеличением концентрации аланина и глюкозы возрастают.

Литература

[1] Баринов С.М. Тенденции в разработке керамических и композиционных материалов на основе фосфатов кальция. *Российский химический журнал.* **2009**. LIII. №2. С.123-130.
[2] Герк С.А., Голованова О.А., Клушин В.А. Фазовый, элементный, аминокислотный и структурный состав физиогенных минералов. *Бутлеровские сообщения.* **2012**. Т.32. №12. С.80-89.
[3] Голованова О.А. Биоминеральные композиты из организма человека: теория, практика, перспективы. *Бутлеровские сообщения.* **2011**. Т.24. №3. С.113-122.
[4] Голованова О.А. Особенности патогенного минералообразования. *Вестник Томского государственного университета.* **2008**. №313. С.215-224.
[5] Биохимия. Под ред. Е.С. Северина. *М.: ГЭОТАР Мед.* **2003**. 356с.
[6] Биосовместимые материалы. Под ред. Севостьянова В.И. *Физика и химия обработки материалов.* **2011**. №3. С.87.
[7] Голованова О.А. Патогенные минералы в организме человека. *Омск.* **2007**. 396с.
[8] Голованова О.А., Пунин Ю.О., Высоцкий А.С., Ханнанов В.Р. Влияние неорганических и органических примесей на нуклеацию одноводного оксалата кальция. *Химия в интересах устойчивого развития.* **2011**. №19. С.501-508.
[9] Голованова О.А., Ачкасова Е.Ю., Пунин Ю.О., Желяев Е.В. Основные закономерности кристаллизации оксалата кальция в присутствии аминокислот. *Кристаллография.* **2006**. Т.51. №2. С.376-382.
[10] Фролов Ю.Г. Курс коллоидной химии. Поверхностные явления и дисперсные системы. *М.: Химия.* **1989**. 464с.
[11] Васильев В.П. Аналитическая химия. Книга 1. Титриметрические и гравиметрические методы анализа. *М.: Дрофа*. **2003**. 368с.
[12] Орловский В.П., Ежова Ж.А., Родичева Г.В., Суханова Г.Е., Тезикова Л.А. Изучение условий образования гидроксилапатита в системе $CaCl_2 – (NH_4)_2HPO_4 – NH_4OH – H_2O$ (25 °C). *Журнал неорганической химии.* **1992**. Т.37. №4. С.881-883.
[13] Голованова О.А., Чиканова Е.С. Особенности кристаллизации прототипов биожидкостей по данным клиновидной дегидратации. Материалы II Межд. конф. Процессы самоорганизации в высыхающих каплях многокомпонентных жидкостей: эксперименты, теории, приложения. *Астрахань.* **2012**. С.35-40.
[14] Бельская Л.В., Коршунов А.С., Ивасенко П.И. Сравнительная оценка показателей крови и смешанной слюны пациентов на фоне обострения паренхиматозного паротита. *Бутлеровские сообщения.* **2013**. Т.33. №3. С.122-125.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-11-104 *Подраздел:* Физиогенные биоминералы.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 544.03. Поступила в редакцию 7 ноября 2013 г.

Кристаллизация фосфатов кальция из растворов, моделирующих состав плазмы крови человека

© **Голованова* Ольга Александровна** и **Солодянкина[+] Анна Андреевна**
Кафедра неорганической химии. Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского.
Проспект Мира, 55-А. г. Омск, 644077. Россия. Тел.: (3812) 26-81-99.
E-mail: golovanoa2000@mail.ru, solodyankina.a@gmail.com

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *кристаллизация, пересыщение, фосфат кальция, плазма крови, кинетика.*

Аннотация

В данной работе представлены результаты исследований кинетики нуклеации и процесса роста кристаллов в растворах, моделирующих состав плазмы крови человека. Приведены результаты рентгено-фазового анализа и оптической микроскопии. Установлено, что при изменении пересыщения изменяется состав осадка – октофосфат кальция переходит в гидроксиапатит. Показано влияние некоторых неорганических (ионов магния) и органических (аланина и глюкозы) добавок на кинетику кристаллизации.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Аналитическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-11-111
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 30 октября 2013 г. УДК 340.67:543.51/.544.43:615.074.

Идентификация маркеров каннабимиметика AB-FUBINACA в моче методом ГХ-МС

© Мелентьев[1+] Алексей Борисович, Катаев[2] Сергей Сергеевич, Дворская[3]* Оксана Николаевна и Лабутин[4] Андрей Валерьевич

[1] *Судебно-химическое отделение. ГБУЗ «Челябинское областное бюро судебно-медицинской экспертизы». Ул. Варненская, 4б. г. Челябинск, 454076. Челябинская область. Россия. Тел: (351) 232-80-58. E-mail: amelentyev@sme74.ru*

[2] *Судебно-химическое отделение. ГКУЗОТ «Пермское краевое бюро судебно-медицинской экспертизы». Ул. Старцева, 61. г. Пермь, 614077. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 210-67-83. E-mail: forenschemist@narod.ru*

[3] *Кафедра токсикологической химии. ГБОУ ВПО Пермская государственная фармацевтическая академия Министерства здравоохранения Российской Федерации. Ул. Полевая, 2. г. Пермь, 614990. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 282-58-64. E-mail: kaftox@mail.ru*

[4] *Экспертно-криминалистический центр УМВД России по Томской области. Ул. Елизаровых 48/10. г. Томск, 634012. Томская область. Россия.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *AB-FUBINACA, каннабимиметики, метаболизм, ферментативный гидролиз, твердофазная экстракция, газовая хроматография – масс-спектрометрия.*

Аннотация

Описаны маркеры, позволяющие установить факт употребления каннабимиметика AB-FUBINACA в процедуре скрининга мочи на наркотические и лекарственные вещества с применением методов твердофазной экстракции и газовой хроматографии с масс-спектрометрией. Выполнена идеентификация основных метаболитов AB-FUBINACA в моче потребителей курительных смесей. Установлено, что метаболизм AB-FUBINACA проходит, в основном, через гидролиз амидных связей, основные метаболиты выводятся с мочой в конъюгированном виде. Получены газохроматографические и масс-спектрометрические характеристики производных основных метаболитов, которые могут быть полезны в практике судебно-химического и химико-токсикологического анализа.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Состав растений. *Регистрационный код публикации:* 13-36-11-119
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
Поступила в редакцию 1 ноября 2013 г. УДК 615.32:634.17.

Весовые показатели плодов боярышника и содержание в них микроэлементов

© **Мухаметова**[1]*+ **Светлана Валерьевна** и **Таланцев**[2]*+ **Владимир Иванович**
[1] *Ботанический сад-институт. Поволжский государственный технологический университет.*
Ул. Мира, 2Б. г. Йошкар-Ола, 424030. Республика Марий Эл. Россия.
Тел.: (8362) 64-75-60. E-mail: MuhametovaSV@volgatech.net.
[2] *Кафедра химии. Поволжский государственный технологический университет.*
Пл. Ленина, 3. г. Йошкар-Ола, 424000. Республика Марий Эл. Россия.
Тел.: (8362) 68-68-04. E-mail: TalancevVI@volgatech.net

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *боярышник, Crataegus, лекарственные растения, плоды, масса, влажность, зольность, микроэлементы.*

Аннотация

Приведены результаты изучения весовых показателей плодов 13 таксонов боярышника коллекции Ботанического сада-института ПГТУ: масса 100 шт., влажность, зольность, процентный выход сухого сырья. Изученные таксоны разделены на мелко- и крупноплодные. Проведен анализ содержания 8 микроэлементов в плодах, выявлены таксоны с высоким, средним и низким содержанием металлов. Обнаружены корреляционные связи между накоплением определенных элементов.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-11-128 *Подраздел:* Состав растений.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
УДК 577.123.:612.014.43. Поступила в редакцию 3 октября 2013 г.

Биоэлементный состав некоторых штаммов лекарственных растений семейства Аралиевых (*Araliaceae*)

© Слепян[1]* Лариса Ивановна, **Кириллова[1+] Надежда Васильевна**, **Каухова[1] Ирина Евгеньевна**, **Марчено[1] Алексей Леонидовия**, **Громова[1] Олеся Николаевна**, **Власенко[3] Мария Александровна**, **Яковлева[2] Мария Владимировна** и **Шантырь[2] Игорь Игнатьевич**

[1] *Кафедры промышленной технологии лекарств и биохимии. Санкт-Петербургская государственная химико-фармацевтическая академия. Ул. проф. Попова, 14. г. Санкт-Петербург, 1977376. Россия. Тел.: (812) 234-90-33. Факс: 234-60-44. E-mail: larisa.slepyan@pharminnotech.com, nadezhda.kirillova@mail.ru*

[2] *Всероссийский центр экстренной и радиационный медицины им. А.М. Никифолрова МЧС России. г. Санкт-Петербург. Россия.*

[3] *Кафедра биофизики. Санкт-Петербургский Государственный Университет. Биолого-почвенный факультет. г. Санкт-Петербург. Россия.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *культура тканей лекарственных растений, макроэлементы, микроэлементы.*

Аннотация

Методом масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой (ИСП-МС) проведено изучение макро- и микроэлементного состава в различных штаммов культур тканей семейства *Araliaceae* (*Panax ginseng C.A.Mey, Panax quinquefolius L.* и *Polyscias filicifolia (Moore ex Fournier) Bailey* и установлено наличие всех жизненноважных элементов в исследованных объектах. Анализ полученных данных показал, что, не смотря на одинаковый состав питательной среды, используемой для выращивания биомассы, в культивируемых клетках исследованных штаммов наблюдали большие различия в содержании макро- и микроэлементов.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-11-134 *Подраздел:* Состав растений.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
УДК 615.32/.31. Поступила в редакцию 10 ноября 2013 г.

Определение алкалоидов в траве чистотела большого и листьях маклеи сердцевидной методом ВЭЖХ

© Моисеев Дмитрий Владимирович
Кафедра стандартизации лекарственных средств с курсом факультета повышения квалификации и переподготовки кадров. Витебский государственный медицинский университет. Пр. Фрунзе, 27. г. Витебск, 210023. Республика Беларусь. Тел.: +375 (212) 370-006. E-mail: ussr80@yandex.ru

Ключевые слова: *алкалоиды, ВЭЖХ, чистотел большой, маклея сердцевидная.*

Аннотация

Предложена универсальная хроматографическая система для идентификации алкалоидов в растительном сырье. В качестве подвижной фазы предлагается использовать 0.005М раствор додоцилсульфата натрия и ацетонитрил в соотношении 60:40 (по объему) при температуре колонки 30 °С. Рассчитаны коэффициенты емкости для 14 алкалоидов на хроматографических колонках 250·4.6 мм с сорбентами Phenyl, С-18, С-8, размер частиц 5 мкм. Полученная база данных использовалась при идентификации алкалоидов в листьях маклеи сердцевидной и траве чистотела большого, заготовленных в условиях умеренно-континентального климата Республики Беларусь.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Агрохимия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-11-139
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
Поступила в редакцию 8 октября 2013 г. УДК 631.4.

Исследование свойств лабильного органического вещества, образующегося при проведении биологической рекультивации на угольном отвале

© **Наумова**[1]*** Людмила Борисовна**, **Алексеева**[2] **Татьяна Петровна**, **Трунова**[2] **Нина Максимовна**, **Егорова**[1] **Лидия Александровна** и **Зарубин**[1+] **Алексей Геннадьевич**

[1] *Химический факультет. Томский государственный университет. Пр. Ленина, 36. г. Томск, 634050. Россия. Тел.: (3822) 42-10-41. E-mail: zagtsuru@gmail.com, NaumovaLB@mail.ru*

[2] *Лаборатория физико-химических исследований. ГНУ СибНИИ сельского хозяйства и торфа СО Россельхозакадемии. Ул. Гагарина, 3 (а/я 1668). г. Томск, 634050. Россия. Тел.: (3822) 53-33-90.*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *рекультивация почв, лабильное органическое вещество, торф.*

Аннотация

Исследовано влияние биологически активных добавок, полученных на основе торфа, на рекультивацию нарушенных горными работами земель Кемеровской области методами потенциометрии, фотоколориметрии, ИК-спектрометрии и синхронного термического анализа. Показано, что введение торфяных препаратов способствует формированию на поверхности деградированных почв лабильного органического вещества, обеспечивающего ускорение почвообразовательного процесса и создание устойчивых фитоценозов.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-11-156 *Подраздел:*.Металлургия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 544.032, 543.621, 546.56. Поступила в редакцию 27 декабря 2013 г.

Изучение влияния парциального давления кислорода на температуру плавления ультрадисперсного медного порошка

© Козин Владислав Михайлович, **Ведмидь Лариса Борисовна**
и **Фёдорова Ольга Михайловна**

Лаборатория статики и кинетики процессов. Институт металлургии УрО РАН. Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Свердловская область. Россия. Тел.: (343) 267-91-86.
E-mail: vlad.kozin@mail.ru

* Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

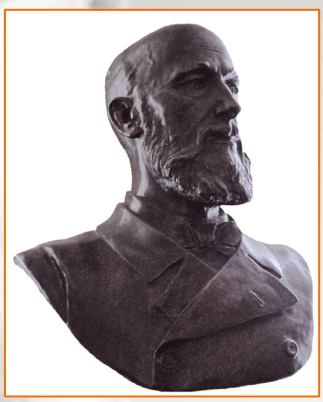
Ключевые слова: *медь, порошок, нано, температура плавления, парциальное давление кислорода.*

Аннотация

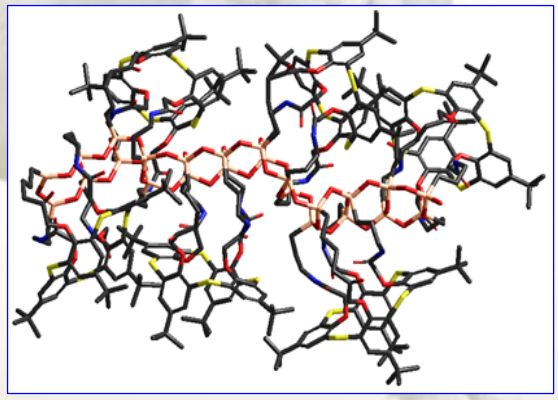
Изучены размерные характеристики медного порошка, полученного методом электровзрыва проводника. Установлено содержание в нём кислорода. Изучены температуры плавления порошка при различных парциальных давлениях кислорода. Установлено, что при уменьшении парциального давления кислорода температура плавления медного нанопорошка увеличивается и при значении $lgPo_2$ = -19.5 равняется в пределах ошибки эксперимента температуре плавления монолитной меди (1083.6 ºС).

Butlerov Communications

No.12, Vol.36. 2013



ISSN 2074-0948



ISSN 2074-0212

National Edition in Russian:

Бутлеровские сообщения

Тематический раздел: Исследование реакционной способности. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физическая органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-12-1
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 21 ноября 2013 г. УДК 541.127: 547.466.23

Тематическое направление: Кинетика и механизм реакций ацильного переноса. Часть 5.

Реакционная способность дипептидов и аминокислот в процессах образования сульфамидной связи

© **Кочетова**[1] **Людмила Борисовна**, **Калинина**[2] **Наталья Владимировна**, **Кустова**[1]*+ **Татьяна Петровна** и **Курицын**[2] **Лев Викторович**

[1] *Кафедра органической и физической химии. Ивановский государственный университет. Ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (84932) 37-37-03. E-mail: kustova_t@mail.ru*

[2] *Кафедра неорганической и аналитической химии. Ивановский государственный университет. Ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (84932)37-37-03.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *кинетика, аренсульфонилирование, алифатические аминокислоты, дипептиды, вода – 1,4-диоксан, основность аминогрупп*.

Аннотация

Изучена кинетика реакций *α*- и β-аланина, дипептидов на их основе, глицил-глицина, *L*-пролина и *L*-аспарагина с хлорангидридами бензолсульфоновой, 3-нитробезолсульфоновой и 4-метилбензолсульфоновой кислот в растворителе вода (40 % масс.) – 1,4-диоксан. Установлены корреляции между константами скорости аренсульфонилирования аминокислот и дипептидов и константами скорости их взаимодействия с карбонильными соединениями: бензоилхлоридом и пикрилбензоатом, указывающие на основность аминогрупп аминокислот и дипептидов, как главный фактор, определяющей их нуклеофильную реакционную способность.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-12-8 *Подраздел:* Физическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 615.076.7+ 615.012.6+621.371. Поступила в редакцию 30 ноября 2013 г.

Исследование реакции бактериальной люминесценции под воздействием электромагнитного излучения миллиметрового и инфракрасного диапазонов

© **Кузнецов**[1]*+ **Денис Бахтиерович**, **Одегова**[1]* **Татьяна Федоровна**, **Несчисляев**[2]* **Валерий Александрович**, **Гейн**[1] **Владимир Леонидович**, **Лунегов**[3] **Игорь Владимирович** и **Вольхин Игорь Львович**[3]

[1] *ГБОУ ВПО Пермская государственная фармацевтическая академия Минздрава России. Ул. Полевая, 2. г. Пермь, 614990. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 233-55-01. E-mail:denis.pfa@gmail.com*

[2] *Филиал ФГУП «НПО «Микроген» Минздрава России «Пермское НПО «Биомед». Ул. Братская, 177. г. Пермь, 614089. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 262-32-14. E-mail: neschislayew@gmail.com*

[3] *ГБОУ ВПО Пермский государственный национальный исследовательский университет. Ул. Букирева, 15, г. Пермь, 614068. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 239-65-15.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *биолюминесценция, СВЧ-излучение, ИК-излучение, многослойная адсорбция, вода.*

Аннотация

Показано, что воздействие электромагнитным излучением миллиметрового и инфракрасного диапазонов вызывает как стимулирующий, так и ингибирующий эффект в отношении биолюминесценции штамма *Escherichia coli lum*$^+$. Проведено сравнительное изучение различных режимов воздействия электромагнитного излучения на реакции бактериального свечения. Выявлена высокая чувствительность биосенсора к излучениям. Установлены варианты оптимальных режимов излучения для активации биолюминесценции тест-штамма.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Аналитическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-12-15
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 24 ноября 2013 г. УДК 340.67:543.51/.544.43:615.074.

Идентификация метаболитов каннабимиметика FUB-PB-22 в моче

© Катаев[1+] Сергей Сергеевич и **Дворская[2]* Оксана Николаевна**
[1] *Судебно-химическое отделение. ГКУЗОТ «Пермское краевое бюро судебно-медицинской экспертизы». Ул. Старцева, 61. г. Пермь, 614077. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 210-67-83. E-mail: forenschemist@narod.ru*
[2] *Кафедра токсикологической химии. ГБОУ ВПО Пермская государственная фармацевтическая академия Министерства здравоохранения Российской Федерации. Ул. Полевая, 2. г. Пермь, 614990. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 282-58-64. E-mail: kaftox@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *FUB-PB-22, каннабимиметики, метаболизм, ферментативный гидролиз, твердофазная экстракция, газовая хроматография – масс-спектрометрия.*

Аннотация

Рассмотрен метаболизм каннабимиметика хинолин-8-ил-1-[(4-фторфенил)метил]-1*H*-индол-3-карбоксилат (FUB-PB-22). Выполнена идентификация метаболитов FUB-PB-22 в моче потребителей курительных смесей. Описаны газохроматографические и масс-спектрометрические характеристики некоторых производных метаболитов FUB-PB-22. Сделан вывод об аналитической значимости метаболитов FUB-PB-22, имеющих значение в экспертной практике.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Препаративные исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-12-22 *Подраздел:* Органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 547.89. Поступила в редакцию 29 ноября 2013 г.

Бестемплатное получение 5,7,7,12,14,14-гексаметил-1,4,8,11-тетраазациклотетрадека-4,11-диена и его аналогов

© **Анисимова Надежда Александровна**, **Гомзякова Екатерина Николаевна**,
Кондратьева Роза Рузалитовна и **Тришин*[+] Юрий Георгиевич**
Санкт-Петербургский государственный технологический университет растительных полимеров.
Ул. Ивана Черных, 4. г. Санкт-Петербург, 198095. Россия.
Факс: (812) 786-66-57. E-mail: trish@YT4470.spb.edu

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *этилендиамин, ацетон, этилметилкетон, замещенные 1,4,8,11-тетраазациклотетрадека-4,11-диены, азотсодержащие макроциклы, комплексы меди(II) и никеля(II).*

Аннотация

5,7,7,12,14,14-Гексаметил-1,4,8,11-тетраазациклотетрадека-4,11-диен и его 5,7,12,14-тетраэтильный аналог впервые получены бестемплатным методом в результате конденсации этилендиамина с ацетоном и этилметилкетоном соответственно. Синтезированные азотсодержащие макроциклические соединения предназначены для использования в качестве молекул-«хозяев» при создании супрамолекулярных систем.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Аналитическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-12-27
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 11 декабря 2013 г. УДК 340.67:543.51/.544.43:615.074.

Идентификация метаболитов каннабимиметика AB-CHMINACA в моче методом ГХ-МС

© Катаев[1+] Сергей Сергеевич и **Дворская[2]* Оксана Николаевна**
[1] *Судебно-химическое отделение. ГКУЗОТ «Пермское краевое бюро судебно-медицинской экспертизы». Ул. Старцева, 61. г. Пермь, 614077. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 210-67-83. E-mail: forenschemist@narod.ru*
[2] *Кафедра токсикологической химии. ГБОУ ВПО Пермская государственная фармацевтическая академия Министерства здравоохранения Российской Федерации. Ул. Полевая, 2. г. Пермь, 614990. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 282-58-64. E-mail: kaftox@mail.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *AB-CHMINACA, каннабимиметики, метаболизм, ферментативный гидролиз, твердофазная экстракция, газовая хроматография – масс-спектрометрия.*

Аннотация

Описаны метаболиты, позволяющие установить факт употребления каннабимиметика AB-CHMINACA в процедуре скрининга мочи на наркотические и лекарственные вещества с применением методов твердофазной экстракции и газовой хроматографии с масс-спектрометрией. Выполнена идентификация основных метаболитов AB-CHMINACA в моче потребителей курительных смесей. Установлено, что метаболизм AB-CHMINACA проходит, в основном, через гидролиз амидных связей, основные метаболиты выводятся с мочой в конъюгированном виде. Получены газохроматографические и масс-спектрометрические характеристики производных основных метаболитов, которые могут быть полезны в практике судебно-химического и химико-токсикологического анализа.

Аналитический обзор *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-12-34 *Подраздел:* Закономерности метаболизма.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений”
http://butlerov.com/synthesys/
УДК 579.695; 546.85; 502.55; 661.63. Поступила в редакцию 16 декабря 2013 г.

Микробный метаболизм белого фосфора

© **Миндубаев**[1]*+ **Антон Зуфарович**, **Алимова**[2] **Фарида Кашифовна**, **Ахоссийенагбе**[2] **Серж Коджо**, **Болормаа**[2] **Чулуун**, **Волошина**[1] **Александра Дмитриевна**, **Кулик**[1] **Наталья Владимировна**, **Минзанова**[1] **Салима Тахиятулловна**, **Миронова**[1] **Любовь Геннадьевна** и **Яхваров**[1]* **Дмитрий Григорьевич**

[1] *Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН. Ул. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. E-mail: mindubaev@iopc.ru*

[2] *Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *детоксикация, белый фосфор, осадки сточных вод, анаэробные условия, метаболический путь, ядерный магнитный резонанс.*

Аннотация

Биодеградация предполагает метаболический путь вещества, который в случае белого фосфора неизвестен. В представленной аналитической работе, наряду с детальным литературным обзором по этому вопросу, описано исследование авторов, посвященное поиску метаболитов белого фосфора, а также впервые составлен предполагаемый путь его метаболизма. В работе уделяется значительное внимание литературным источникам, посвященным окислительно-восстановительному метаболизму фосфора и служащих подтверждением гипотезы авторов о ранее неописанном метаболическом пути белого фосфора.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Биохимия клеточных культур. *Регистрационный код публикации:* 13-36-12-53
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 22 декабря 2013 г. УДК 615.076.7+615.012.6+621.371.

Исследование изменений на поверхности клеток *E. coli lum*$^+$ под влиянием СВЧ-излучения миллиметрового диапазона

© Кузнецов[1]*+ **Денис Бахтиерович**, **Лунегов**[2] **Игорь Владимирович**, **Вольхин**[2] **Игорь Львович**, **Гейн**[1] **Владимир Леонидович**, **Несчисляев**[1] **Валерий Александрович** и **Широких**[1] **Анна Андреевна**

[1] *ГБОУ ВПО Пермская государственная фармацевтическая академия Минздрава России. Ул. Полевая, 2. г. Пермь, 614990. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 233-55-01. E-mail:denis.pfa@gmail.com*

[2] *ГБОУ ВПО Пермский государственный национальный исследовательский университет. Ул. Букирева, 15. г. Пермь, 614068. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 239-65-15.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *атомно-силовая микроскопия, СВЧ-излучение, адгезия, многослойная адсорбция, вода, клетка.*

Аннотация

Показано, что сила адгезии на поверхности бактериальных клеток зависит от времени облучения электромагнитным излучением миллиметрового диапазона. Величина силы адгезии показывает, как изменяется толщина адсорбированных слоев молекул воды на поверхности бактериальной клетки. Рассмотрена правомерность использования современной фазовой теории при интерпретации экспериментальных данных, полученных в исследованиях изменения свойств микроорганизмов, подвергшихся облучению миллиметровым СВЧ-излучением.

Тематический раздел: Биохимические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-12-59
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 22 ноября 2013 г. УДК 577.125.5, 577.125.33, 581.198.

Дивиниловые эфиры – биологически-активные продукты метаболизма линолевой кислоты

© **Мухитова* Фаимя Киямовна**, **Огородникова*[+] Анна Владимировна**
и **Гречкин* Александр Николаевич**
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Казанский институт биохимии и биофизики Казанского научного центра Российской академии наук.
Ул. Лобачевского, 2/31. г. Казань, 420111. А/я 30. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 231-90-40. E-mail: anyuta_ogorodnik@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *линолевая кислота, оксилипины, дивинилэфирсинтаза (ДЭС), дивиниловые эфиры, колнелевая кислота, этеролевая кислота.*

Аннотация

Обнаружена дивинилэфирсинтазная активность в нефотосинтезирующих тканях некоторых растений порядка *Asparagales*: ирис (*Iris germanika* L.*)*, гладиолус (*Gladiolus comunis* L.), крокус (*Crocus vernus* L.) и гиацинт (*Hyacinthus orientalis* L.). Выделены и охарактеризованы дивиниловые эфиры – продукты метаболизма линолевой кислоты. Экзогенно внесенная линолевая кислота утилизировалась преимущественно в колнелевую и этеролевую кислоты и их изомеры. Идентификация оксилипинов подтверждена данными ГХ-МС и ВЭЖХ. Тестирование этеролевой кислоты на биологическую активность при исследовании её воздействия *in vitro* на клетки тромбоцитов показало высокую антиагрегационную активность.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Биохимические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-12-66 *Подраздел:* Органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов*".
http://butlerov.com/natural_resources/
УДК 582.71:547.918. Поступила в редакцию 24 декабря 2013 г.

Количественный анализ фенольных соединений в цветках календулы лекарственной (*Calendula officinalis* L.) методом микроколоночной ВЭЖХ

© Кащенко Нина Игоревна и **Оленников*[+] Даниил Николаевич**
Лаборатория медико-биологических исследований. Отдел биологически активных веществ. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт общей и экспериментальной биологии. Сибирское отделение РАН. Ул. Сахьяновой, 6. г. Улан-Удэ, 670047. Россия. Тел.: (3012) 43-47-43. E-mail: oldaniil@rambler.ru. Факс: +7 (3012) 43-47-43

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *Calendula officinalis, Asteraceae, фенилпропаноиды, флавоноиды, микроколоночная ВЭЖХ.*

Аннотация

Разработана методика количественного анализа 14 фенольных соединений методом микроколоночной обращенно-фазовой ВЭЖХ с двухволновым детектированием (330 и 360 нм) с применением колонки *ProntoSIL-120-5-C18* (2×75 мм) и градиентной элюентной системы [0.2 М $LiClO_4$ в 0.006 М $HClO_4$ – 0.01 М додецилсульфат натрия в воде (1:1)]-ацетонитрил. Методика была применена для анализа цветков календулы лекарственной (*Calendula officinalis* L.) и некоторых препаратов (настойка, экстракты, жидкий и сухой настой, отвар). Проведено сравнительное исследование количественных показателей указанных лекарственных форм.

Тематический раздел: Препаративные исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Супрамолекулярная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-12-75
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 6 декабря 2013 г. УДК 547.639.5.

Синтез полисилсесквиоксанов на основе *п-трет*-бутилтиакаликс[4]арена в конфигурации *конус* в условиях основного катализа

© Якимова[1] Людмила Сергеевна, Зиатдинова[1] Рамиля Василевна, Горбачук[1] Владимир Валерьевич, Вавилова[1] Алёна Артёмовна и Стойков[1,2]*+ Иван Иванович

[1] *Кафедра органической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Реапублика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 233-74-62. E-mail: ivan.stoikov@mail.ru*

[2] *Казанский институт биохимии и биофизики КНЦ РАН. Ул. Лобачевского, 2/31. г. Казань, 420111. Россия.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *тиакаликсарены, коллоидные частицы, силсесквиоксаны, ИК-спектроскопия.*

Аннотация

В условиях основного катализа синтезированы коллоидные частицы на основе тетразамещённого по нижнему ободу кремнийорганического производного *п-трет*-бутилтиакаликс[4]арена в конфигурации *конус*. Синтезированные коллоидные частицы охарактеризованы методами ЯМР ^{1}H, ИК спектроскопии и динамического светорассеяния. В результате поликонденсации получены частицы с размером порядка 2.2 мкм. Анализ характеристических ассиметричных полос поглощения Si-O-Si в ИК-спектрах показал, что в процессе поликонденсации образуется лестничная структура, содержащая более пяти циклотетрасилоксановых фрагментов.

Краткое сообщение *Тематический раздел:* Препаративные исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-12-82 *Подраздел:* Неорганическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 541.64:541.1.128. Поступила в редакцию 16 декабря 2013 г.

Синтез и исследование полихромфенилсилоксанов, содержащих атомы хрома в степени окисления +6

© Красицкая[+] Светлана Георгиевна, **Аликовский* Александр Владимирович**,
Моронцев Александр Алексеевич, **Баланов Михаил Иванович**
и **Васильева Виктория Викторовна**

Кафедра общей, неорганической и элементоорганической химии. Школа естественных наук. Дальневосточный федеральный университет. Ул. Суханова, 8. г. Владивосток, 690950. Россия. Тел.: (423) 248-83-80. E-mail: krasitskayasg@gmail.com

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *синтез, гетеросилоксаны, полихромфенилсилоксан, силоксановая связь.*

Аннотация

Показана возможность синтеза полихромфенилсилоксанов, содержащих атомы хрома в высшей степени окисления взаимодействием фенилтрихлорсилана с хроматом калия. Регулировать состав образующихся соединений в сторону увеличения соотношения кремния к хрому можно путем изменения стехиометрического соотношения исходных реагентов. Для получения положительного результата необходимо введение в реакционную систему карбоната калия в количестве, значительно превышающем стехиометрическое. Полученные полимеры охарактеризованы методом элементного анализа, ИК спектроскопии, рентгенофазового анализа. Отмечено увеличение межплоскостных расстояний у полихромфенилсилоксанов с высоким содержанием хрома по сравнению с полифенилсесквиоксаном.

Тематический раздел: Препаративные исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Металлоорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-12-85
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений"
http://butlerov.com/synthesys/
Поступила в редакцию 10 декабря 2013 г. УДК 547.26`118.

Синтез и внутрисферное гидрофосфорилирование (η^2-C,C),(η^2-C,N)-*N*-бензил-*N*-[1,3-диметилбут-2-енилиден]-аминмонокарбонил[трис(пиррол-α-метил)аминмолибдена(0)]

© **Курамшин*[+] Аркадий Искандерович**, **Колпакова Елена Владимировна**, **Черкасов Рафаэль Асхатович** и **Галкин Владимир Иванович**
Кафедра высокомолекулярных и элементоорганических соединений. Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский федеральный (Приволжский) университет.
Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Россия. Тел.: (843) 231-54-16. E-mail: fea_naro@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *металлоорганические соединения, трис(пиррол-α-метил)амин, внутрисферное гидрофосфорилирование, аминофосфонат-амидофосфатная перегруппировка.*

Аннотация

Получено металлорганическое производное сопряженного азадиена с трис(пиррол-α-метил)-аминкарбонолмолибденовым остовом, координация азадиенового лиганда в котором реализуется через кратную связь углерод–углерод и π-систему связи углерод–азот. Изучено взаимодействие диэтилфосфита с трис(пиррол-α-метил)амином и его трикарбонильным молибденовым производным, показано, что как трис(пиррол-α-метил)амин, так и комплекс на его основе не вступают в химическое взаимодействие с диалкилфосфитом, происходит лишь водородное связывание протонов пиррольных колец с кислородом фосфорильной группы фосфита. Продемонстрировано, что внутрисферное гидрофосфорилирование азадиена протекает по двойной связи углерод азот, продуктом взаимодействия являются аминофосфонат и продукт его внутрисферной перегруппировки – амидофосфат, оба фосфорорганических соединения остаются в координационной сфере комплекса молибдена.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Препаративные исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-12-92 *Подраздел:* Органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 543:541.1., 547.518. Поступила в редакцию 17 декабря 2013 г.

Синтез замещенных *N*-(1-адамантанкарбоксамидо)- и *N*-(1-адамантилацетамидо)бензотиазолов

© **Ермохин*[+] Владимир Анатольевич** и **Макарова Мария Валерьевна**
Кафедра органической, биоорганической и медицинской химии. Самарский государственный университет. Ул. Академика Павлова, 1. г. Самара, 443011. Россия.
Тел.: (846) 334-54-59. E-mail: ermochin@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *адамантанкарбоновые кислоты, 2-аминобензотиазол, 2-амино-4-фенилтиазол, рилузол.*

Аннотация

Синтезированы соединения – аналоги лекарственного средства рилузола. 1-Адамантанкарбоксамидо- и 1-адамантилацетамидопроизводные гетероциклов: 2-аминобензотиазола, 2-амино-6-метилбензотиазола, 2-амино-6-нитробензотиазола, 2-амино-6-метоксибензотиазола, 2-амино-4-фенилтиазола были получены с выходом целевых продуктов от 54 до 72%. Синтез осуществляли взаимодействием хлорангидридов адамантилсодержащих кислот с гетероциклами в среде абсолютного бензола. Структура и чистота синтезированных соединений подтверждена методами ТСХ, ИК и ЯМР ^{1}H спектроскопии.

Тематический раздел: Квантово-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-12-97
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 4 декабря 2013 г. УДК 544.43.

Тематическое направление: Кинетика и механизм реакций ацильного переноса. Часть 6.

Квантово-химическая интерпретация реакционной способности дипептидов и аминокислот в процессах образования амидов и сульфамидов кислот

© Кочетова[1] Людмила Борисовна, **Калинина[2] Наталья Владимировна**, **Кустова[1]*+ Татьяна Петровна** и **Курицын[2] Лев Викторович**

[1] *Кафедра органической и физической химии. Ивановский государственный университет. Ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (84932) 37-37-03. E-mail: kustova_t@mail.ru*

[2] *Кафедра неорганической и аналитической химии. Ивановский государственный университет. Ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (84932) 37-37-03.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *ацилирование, аминокислоты, дипептиды, бензоилхлорид, сульфонилхлориды, эфиры бензойной кислоты, квантово-химические расчеты, механизм реакции, поверхность потенциальной энергии.*

Аннотация

Неэмпирическими методами проведено квантово-химическое моделирование анионов аминокислот и дипептидов, а также хлорангидридов бензойной, сульфобензойной, 3-нитро-, 4-метилсульфобензойных кислот и нитрозамещенных фениловых эфиров бензойной кислоты. Установлено, что индексами реакционной способности нуклеофилов в *N*-ацилировании могут служить величины зарядов на атомах азота; реакционная способность ацилирующих агентов связана с энергиями НСМО их молекул. Рассчитана ППЭ реакции глицина с 4-метилбензолсульфонилхлоридом в газовой фазе, показано, что реакция протекает по S_N2 механизму.

Тематический раздел: Исследование реакционной способности. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Супрамолекулярная химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-12-105
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 6 декабря 2013 г. УДК 541.183.

Тематическое направление: Твердофазный нанореактор. Часть IV.

Гидрирование эфиров *п*-нитробензойной кислоты в нанореакторах на основе сульфированных сетчатых полимеров

© **Альтшулер* Генрих Наумович**, **Шкуренко[+] Галина Юрьевна**
и **Горлов Алексей Александрович**
Институт углехимии и химического материаловедения СО РАН. пр. Советский, 18. г. Кемерово, 650000. Россия. Тел.: (384-2) 36-80-22. E-mail: Altshulerh@gmail.com

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *нанореактор, сетчатые полимеры, эфиры п-нитробензойной кислоты, гидрирование.*

Аннотация

Исследовано гидрирование ароматических нитросоединений в нанореакторах на основе сульфированных сетчатых полимеров, содержащих нанодисперсный палладий. Рассчитаны кинетические характеристики реакции гидрирования нитробензола, *п*-нитробензойной кислоты, метилового, этилового и пропилового эфиров *п*-нитробензойной кислоты.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Исследование реакционной способности.
Регистрационный код публикации: 13-36-12-110 *Подраздел:* Химия комплексных соединений.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 543.544.6. Поступила в редакцию 19 декабря 2013 г.

Ионы оксованадия(IV) в реакциях образования гетерометаллического *dtpa*-комплекса с катионами хрома(III)

© Попова[1]* Татьяна Владимировна, **Щеглова[2] Наталья Валерьевна**,
Смотрина[3+] Татьяна Валерьевна и **Мотовилова[2] Екатерина Витальевна**

[1] *Кафедра фармакологии и фармацевтических дисциплин. Московский государственный областной гуманитарный институт. Ул. Зеленая, 22. г. Орехово-Зуево, 142611. Московская область. Россия. Тел.: (965) 328-23-58. E-mail: tvpopova45@yandex.ru*

[2] *Кафедра химии. Марийский государственный университет. Пл. Ленина, 1. г. Йошкар-Ола, 424000. Республика Марий Эл. Россия. Тел.: (8362) 42-55-94. E-mail: ecoanalit@marsu.ru*

[3] *Кафедра физики. Поволжский государственный технологический университет. Пл. Ленина, 3. г. Йошкар-Ола, 424000. Республика Марий Эл. Россия. Тел.: (8362) 68-68-04. E-mail: tatyana-smotrina@yandex.ru*

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *спектрофотометрический метод, диэтилентриаминпентауксусная кислота, гетеробиядерные комплексы оксованадия(IV) с катионами хрома(III).*

Аннотация

Спектрофотометрическим методом изучены реакции образования гетерометаллических диэтилентриаминпентаацетатов оксованадия(IV) с катионами хрома(III) в водном растворе. Показано лабилизирующее влияние катионов оксованадия(IV) на процесс координации катионов хрома(III) анионами карбоксилатного лиганда в гетерометаллическом комплексе.

Тематический раздел: Исследование свойств веществ. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Химия красителей. *Регистрационный код публикации:* 13-36-12-115
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 20 ноября 2013 г. УДК 547.97:547.7:547.8.

Оценка влияния строения гетероциклического радикала на свойства гетарилазокрасителей

© Рындин[1] Александр Игоревич, Кузнецов[1]*+ Дмитрий Николаевич, Кобраков[1] Константин Иванович, Ковальчукова[2] Ольга Владимировна и Дмитриева[3] Мария Борисовна

[1] *Кафедра органической химии. Московский государственный университет дизайна и технологии. Ул. Садовническая, 33. г. Москва, 117997. Россия. Тел.: (495) 955-35-58. E-mail: occd@mail.ru*
[2] *Кафедра общей химии. Российский университет дружбы народов. Ул. Миклухо-Маклая, 6. г. Москва, 117198. Россия. Тел.: (495) 955-08-60. E-mail: okovalchukova@mail.ru*
[3] *Центр биологического контроля лаборатории микрофильмирования и реставрации документов. Российский государственный архив научно-технической документации. Ул. Профсоюзная, 82. г. Москва, 117393. Россия. Тел.: (495) 335-00-95. E-mail: biorest.maria@gmail.com*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *гетероцикл, гетарилазосоединения, крашение полиамидной ткани, фунгицидная активность, анализ зависимости «структура-свойства».*

Аннотация

При анализе влияния природы гетероциклического радикала на спектральные, эксплуатационные и биоцидные свойства красителей на массиве, включающем 25 арил(гетарил)азосоединений установлено, что введение гетероциклического фрагмента в молекулу азосоединения взамен карбоциклического приводит к изменению его спектральных характеристик, причем может происходить, как батохромный, так и гипсохромный сдвиг максимума полосы поглощения.

Замена карбоциклического радикала на гетероциклический не оказывает влияния на устойчивость окраски образцов ткани к действию физико-химических факторов, однако, как правило, повышает биоцидные свойства азосоединений.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Исследование модификаций материалов.
Регистрационный код публикации: 13-36-12-124 *Подраздел:* Неорганическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 537:54-11:538.931. Поступила в редакцию 27 ноября 2013 г.

Превращения на поверхности арсенида индия в азотной кислоте

© Зарубина[+] Оксана Николаевна, **Малий Любовь Викторовна**
и **Мокроусов* Геннадий Михайлович**
Химический факультет. Томский государственный университет. пр. Ленина, д. 36. г. Томск, 634050. Россия. Тел.: (3822) 42-07-83. E-mail: zaron@ngs.ru , mgm@xf.tsu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *арсенид индия, межфазные превращения, поверхность, травление, диаграмма потенциал – pH.*

Аннотация

Найдены условия формирования плотного фазового слоя, состоящего преимущественно из мышьяка и небольшого количества его оксида, на поверхности *n*-InAs в концентрированной азотной кислоте. С использованием термодинамических представлений (диаграмма потенциал InAs – pH) обсужден возможный механизм превращений на межфазной границе и образования здесь фазы мышьяка. Фазовый и элементный состав, морфология сформированной поверхности исследованы методами КР-спектроскопии, твердофазной вольтамперометрии, растровой электронной микроскопии, рентгенофазового и EDX анализа.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Технологические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-12-128 *Подраздел:* Нефтехимия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 665.63-404; 665.637.64. Поступила в редакцию 12 ноября 2013 г.

Влияние условий активации высокомодульных силикатных систем и объемной скорости подачи сырья на превращения *н*-гексана

© **Кузьмина Раиса Ивановна**, **Игнатьев Сергей Владимирович**
и **Пилипенко Антон Юрьевич**

Кафедра нефтехимии и техногенной безопасности. Институт химии. Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского. Ул. Астраханская, 83, корп.1. г. Саратов, 410012. Россия.
Тел.: (8452) 52-50-07. E-mail: kuzminaraisa@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

***Ключевые слова**: н-гексан, цеолит, ZSM-5, воздух, водород, крекинг, изомеризация, ароматизация.*

Аннотация

Проведено исследование превращения *н*-гексана в интервале температур 250-500 °С. Установлено, что процесс превращения *н*-гексана включает в себя реакции крекинга, изомеризации и ароматизации. Направление химических превращений зависит от параметров активации и условий протекания процесса.

Введение

Современный этап развития общества характеризуется неуклонным ростом потребления продуктов нефтепереработки, повышением требований к их эксплуатационным и экологическим характеристикам. В связи с этим, приоритетными направлениями развития отечественной химической науки являются: установление основных закономерностей и путей контролируемой активации С-Н связей в молекулах. Цеолиты типа ZSM-5 находят широкое применение в качестве катализаторов различных нефтехимических процессов и их исследование является перспективным направлением нефтепереработки [1-5].

Тематический раздел: Технологические исследования. **Краткое сообщение**
Подраздел: Композиционные материалы. *Регистрационный код публикации:* 13-36-10-137
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 12 ноября 2013 г. УДК 665.6.035.

Создание композиционных материалов для строительства автомобильных дорог на основе нефтяных и буровых шламов

© Мендалиева[2] Дина Кенжебековна, **Кунашева[2] Зарипа Хайроллиевна**, **Якупова[2] Джамиля Болатовна**, **Кузьмина[1]*+ Раиса Ивановна** и **Широков[1] Илья Петрович**
[1] *Кафедра нефтехимии и техногенной безопасности. Институт химии. Саратовский государственный университет. Ул. Астраханская, 83. г. Саратов, 410012. Россия. Тел.: (8452) 52-50-07. E-mail: kuzminaraisa@mail.ru, shirokov_ip@mail.ru*
[2] *Кафедра химии. Западно-Казахстанский государственный университет. Пр. Достык, 162. г. Уральск, 090006. Казахстан.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *битум, буровой шлам, композиционный материал, нефтешлам.*

Аннотация

Определены фазовый и элементный состав твердого остатка бурового шлама и оценены физико-механические параметры нефтешлама. Созданы серии тестовых образцов композиционных материалов и исследованы их физико-химические характеристики. Показано, что физико-химические характеристики полученного материала соответствуют требованиям и могут быть использованы при строительстве автомобильных дорог.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Исследование новых технологий.
Регистрационный код публикации: 13-36-13-140 *Подраздел:* Физико-химия взрывчатых веществ.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 652.352. Поступила в редакцию 19 декабря 2013 г.

Исследования по определению оптимального диспергирующего компонента при получении пороха дискообразной формы

© Игнатьева*[+] Айгуль Равилевна, **Староверова Елена Ивановна**,
Абдулкаюмова Суфия Махмутовна, **Арутюнян Андрей Саркисович**,
Гатина Роза Фатыховна, **Хацринов Алексей Ильич**
и **Михайлов Юрий Михайлович**
ФКП «Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов».
Ул. Светлая, 1. г. Казань, 420033. Россия. E-mail: aigul-malek@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *диспергирующий компонент, ПАВ, водно-дисперсионная технология, эмульсия, диспергирование, седиментационная устойчивость, порох дискообразной формы.*

Аннотация

Представлены результаты экспериментальных исследований по выбору диспергирующего компонента (ПАВ) при изготовлении пороха дискообразной формы. Показана возможность получения пороховых гранул дискообразного пороха за счет изменения гидродинамических параметров диспергирования и использования в технологическом процессе диспергирующего компонента с вязкостью более 7 ^{o}Э.

Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физико-химия взрывчатых веществ. *Регистрационный код публикации:* 13-36-12-147
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 18 ноября 2013 г. УДК 629.7.

Исследование горения смесевых композиций на основе нитрата аммония, содержащих соли динитрамида

© Попок*[+] Владимир Николаевич, **Логинова Валентина Сергеевна**
и **Колесников Алексей Юрьевич**
Открытое акционерное общество «Федеральный научно-производственный центр «Алтай».
Ул. Социалистическая, 1. г. Бийск, 659322. Алтайский край, Россия.
Тел.: (3854) 30-19-37. E-mail: vnpopok@mail.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *соли динитрамида, нитрат аммония, порошки алюминия, горючие-связующие, скорость горения, термическое разложение.*

Аннотация

В статье представлены результаты исследований влияния гуанилмочевинной и гуанидиниевой солей динитрамида на параметры горения и термического разложения смесевых композиций на основе нитрата аммония и горючего-связующего с нитрамино-нитротриазольным пластификатором. Рассмотрены металлизированные и безметальные композиции. Для сравнения приводятся результаты для смесевых композиций, содержащих октоген и гексанитрогексаазаизовюрцитан. Показано, что при введении рассматриваемых солей динитрамида в состав композиций реализуемый уровень скорости горения соответствует уровню для систем с нитраминами, при этом резко снижается температура горения.

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-36-12-156 *Подраздел:* Физико-химия целлюлозы.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 544.23.022. Поступила в редакцию 29 ноября 2013 г.

Влияние дейтерообмена на процессы протонной магнитной релаксации в полисахаридах

© Смотрина*+ Татьяна Валерьевна и **Грунин Леонид Юрьевич**
Кафедра физики. Поволжский государственный технологический университет.
Пл. Ленина, 3. г. Йошкар-Ола, 424000. Республика Марий Эл. Россия. Тел.: (8362) 68-68-04.
E-mail: tatyana-smotrina@yandex.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *целлюлоза, хитозан, дейтерообмен, ядерный магнитный резонанс.*

Аннотация

Методом релаксационной спектроскопии протонного магнитного резонанса с применением методики дейтерообмена проанализирована форма линии сигнала спада свободной индукции в сухих и увлажненных полисахаридах. Проведена аппроксимация сигнала свободной индукции в полисахаридах на примере целлюлозы и хитозана суммой трех экспоненциальных функций, каждая из которых описывает затухание намагниченности в областях с различной степенью упорядоченности. Обнаружено, что в реакции изотопного обмена, проводимой в избытке жидкой D_2O, участвуют протоны не только аморфных, но и некоторой части упорядоченных областей. Показано, что под влиянием пластифицирующего действия молекул сорбата происходит увеличение подвижности каждого из компонентов системы, сопровождающееся изменением протонной плотности в областях с различной степенью упорядоченности.

Тематический раздел: Термодинамические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Неорганическая химия. *Регистрационный код публикации:* 13-36-12-163
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 11 декабря 2013 г. УДК.546.284:541.536.

Фазовые равновесия с участием оксидно-фторидных расплавов натрия и алюминия

© **Працкова[+] Светлана Евгеньевна** и **Тюрин* Александр Георгиевич**
Кафедра аналитической и физической химии. Челябинский государственный университет.
Ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454136. Россия.
Тел.: (351) 99-70-69. E-mail:se_pratskova@mail.ru.

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *оксидно-фторидные расплавы, обобщённая модель «регулярных» ионных растворов, активности компонентов, энергетические параметры теории, квазибинары.*

Аннотация

В работе в рамках обобщённой модели «регулярных» ионных растворов описаны термодинамические свойства оксидно-фторидных расплавов системы NaF – Na_2O – Al_2O_3 – AlF_3 в интервале температур 1270-2300 К. Рассчитаны стандартные энергии Гиббса реакций образования промежуточных соединений из фторидов и оксидов натрия и алюминия. Построены квазибинары исследуемой системы. Термодинамические свойства согласованы с термодинамическими характеристиками плавления чистых оксидов и фторидов, энергией Гиббса обменной реакции и фазовыми диаграммами состояния.