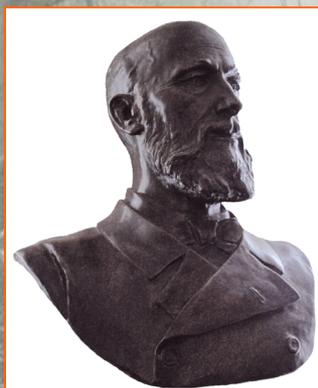
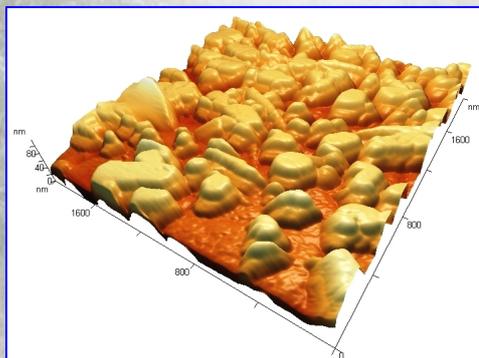


Бутлеровские сообщения

№1, том 41. 2015



ISSN 2074-0212



International Edition in English:
Butlerov Communications

ISSN 2074-0948



Selective oxidation of CO in H₂ stream on nano Au catalyst supported on CuO-CeO₂

© Der-Shing Lee, and Yu-Wen Chen*⁺

Department of Chemical Engineering, National central University,
Jhong-Li, 32001, Taiwan. Phone: +886 3 4227151. E-mail: ywchen@ncu.edu.tw

*Supervising author; ⁺Corresponding author

Keywords: selective oxidation, carbon monoxide, hydrogen stream, catalysts, deposition-precipitation method.

Abstract

Nanoscaled gold particle supported on CeO₂ and modified by CuO was used for selective oxidation of carbon monoxide in hydrogen stream (PROX). CuO-modified CeO₂ support was prepared by co-precipitation method. Gold was loaded on the support by deposition-precipitation method. These catalysts were characterized by X-ray diffraction, N₂-sorption, TEM, HR-TEM, and XPS to gain the structural information. The PROX reaction was carried out in a fixed bed continuous flow reactor with a feed of CO: O₂: H₂: He = 1.33: 1.33: 65.33: 32.01 in volume ratios. CO/O₂ ratio was fixed at 1. The reaction was carried out between ambient temperature and 100 °C with GHSV of 30.000 h⁻¹. The particle size of gold was around 2-5 nm and Au particles were dispersed well on the support. The results showed that the catalyst with specific Cu content and calcination temperature could reach 100% of CO conversion at the PEM fuel cells operating temperature (65 °C-100 °C) even as the gold content was reduced from 1 wt. % to 0.5 wt. %. The incorporation of copper ion into ceria lattice promoted the oxygen storage capacity of ceria support and enhanced the activity of catalysts. The higher calcinations temperature for the support resulted higher crystallinity of CeO₂, leading to the higher activity. The CO selectivity increased with increasing copper content. The catalyst with CuO content of 20% demonstrated the highest activity and selectivity for CO oxidation and suppress H₂ oxidation at 100 °C.

Тематическое направление: Гидрохимический синтез пленок халькогенидов металлов. Часть 25.

Особенности гидрохимического осаждения пленок сульфидов и селенидов металлов

© Марков^{1,2*} Вячеслав Филиппович, Маскаева^{1,2+} Лариса Николаевна
и Алексеева¹ Татьяна Анатольевна

¹ Кафедра физической и коллоидной химии. 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 E-mail: v.f.markov@urfu.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: гидрохимическое осаждение, тонкие пленки, сульфиды металлов, селениды металлов, фрактальность.

Аннотация

Рассмотрены особенности гидрохимического синтеза пленок сульфидов и селенидов металлов, связанные с природой используемого халькогенизатора, составом реакционного раствора, температурной предысторией компонентов. Предложено расширить представление об активации халькогенизатора за счет координации с ним различных по силе нуклеофилов, роль которых играют анионы и катионы реакционной смеси. Показана роль анионной компоненты соли кадмия в формировании состава твердых растворов $Cd_xPb_{1-x}S$. Установлено влияние катионов щелочных металлов на морфологию, текстуру и свойства пленок PbS. Обнаружено также неоднозначное влияние на архитектуру, состав и фотоэлектрические свойства пленок сульфида свинца и твердых растворов $Cd_xPb_{1-x}S$ температурной предыстории компонентов реакционной смеси. По результатам расчета фрактальных размерностей осажденных пленок сульфидов и селенидов металлов сделан вывод, что в основе гидрохимического осаждения лежит кластер-кластерная агрегация частиц в форме эволюции структурных уровней с возрастанием масштабно-структурной иерархии.

Тематическое направление: Гидрохимический синтез пленок халькогенидов металлов. Часть 26.

Влияние комплексообразующего агента на морфологические особенности формирования пленок CdS гидрохимическим осаждением

© **Форостяная¹⁺ Наталья Александровна, Маскаева^{1,2} Лариса Николаевна, Марков^{1,2*} Вячеслав Филиппович, Леонтьев³ Данила Вадимович и Шайдаров¹ Лев Викторович**

¹ Кафедра физической и коллоидной химии. Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002.

Свердловская область. Россия. Тел.: (343) 375-93-67. E-mail: natal-ku8@yandex.ru

² Уральский институт ГПС МЧС России. Ул. С. Мира, 22. г. Екатеринбург, 620062. Россия.

Тел.: (343) 378-38-75. E-mail: mln@ural.ru

³ Кафедра иммунохимии. Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002.

Свердловская область. Россия. E-mail: Donshinigami1@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: гидрохимическое осаждение, комплексообразующие агенты, степень пересыщения, тонкие пленки, сульфид кадмия, морфология поверхности, растровая электронная микроскопия, атомно-силовая микроскопия.

Аннотация

Исследованы ионные равновесия в водных щелочных растворах « $\text{Cd}^{2+} - L - \text{N}_2\text{H}_4\text{CS}$ », где $L - \text{NH}_3, \text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2, \text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7^{3-}, (\text{NH}_3 + \text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7^{3-})$, и определены преобладающие в растворе комплексные соединения кадмия в области значений pH, потенциально пригодных для гидрохимического осаждения пленок сульфида кадмия. Методами растровой электронной и атомно-силовой микроскопии продемонстрирована определяющее влияние лиганда на морфологию пленок CdS.

Теоретическая и экспериментальная оценка эффективности отделения вольфрама и железа для дальнейшего определения мышьяка и сурьмы в ферровольфраме методом ИСП-АЭС

© Майорова^{1*} Анна Владимировна, Белозерова¹ Анастасия Анатольевна,
Печищева¹ Надежда Викторовна, Боярникова² Наталья Геннадьевна
и Шуняев¹ Константин Юрьевич

¹Лаборатория аналитической химии. Институт металлургии УрО РАН. Ул. Амундсена, 101.
г. Екатеринбург, 620016. Россия. Тел.: (343) 267-89-36. E-mail: imeturoan@mail.ru

²Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина.
Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Россия.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: ферровольфрам, определение содержания мышьяка, сурьмы, термодинамическое моделирование, атомно-эмиссионная спектроскопия с индуктивно связанной плазмой.

Аннотация

С помощью термодинамического моделирования (программный комплекс «HSC») выбран состав смеси реактивов для спекания проб ферровольфрама перед определением содержания мышьяка и сурьмы методом атомной эмиссии с индуктивно связанной плазмой - смесь $\text{Na}_2\text{CO}_3:\text{K}_2\text{CO}_3:\text{S}$. Способ позволяет отделить аналиты от основной части вольфрамсодержащей матрицы, мешающей определению. Недостающие для моделирования данные – термодинамические свойства некоторых антимонатов и антимонатов натрия, калия, а также тиосолей вольфрама, мышьяка, сурьмы – рассчитаны с помощью метода групповых составляющих. Дальнейшие экспериментальные исследования показали, что выщелачивание спека в присутствии $\text{Ba}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ позволяет дополнительно отделить матричные компоненты от аналитов и улучшить результаты анализа. Анализ государственных стандартных образцов ферровольфрама показал эффективность предложенного метода пробоподготовки.

Кинетика совместного восстановления никеля и водорода в диффузионном режиме

© Патрушев* Андрей Владимирович, Останина Татьяна Николаевна,
Рудой⁺ Валентин Михайлович и Даринцева Анна Борисовна

*Кафедра технологии электрохимических производств. Химико-технологический институт.
Уральский федеральный университет. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Свердловская область.
Россия. Тел.: (343) 375-44-63. E-mail: patrushev.xs666@mail.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: восстановление, ионы никеля, водород, кинетические параметры, диффузионный режим.

Аннотация

На основе поляризационных измерений определены кинетические параметры разряда ионов никеля и водорода. Разряд водорода не оказывает существенного влияния на кинетику восстановления ионов никеля, однако влияет на диффузионные параметры вследствие перемешивания приэлектродного пространства пузырьками газа. С учетом выхода по току и реальной площади поверхности электрода проведена оценка парциальных токов восстановления никеля и водорода в условиях высоких диффузионных ограничений по доставке ионов металла к межфазной границе и кристаллизации дендритного осадка. Показано, что кажущаяся гетерогенная константа скорости разряда водорода при совместном восстановлении с ионами никеля существенно меньше, чем в растворе фона.

Изучение возможности разделения соединений кобальта и молибдена в отработанных катализаторах

© Хацринова¹ Юлия Алексеевна, Хацринов² Алексей Ильич
и Сулейманова³ Алсу Зулькарнаевна

¹ Кафедра технологии неорганических веществ и материалов. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. Сибирский тракт, 12. корп. Е. г. Казань, 420029. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-40-13. Email: Khatsrinova12@mail.ru

² Кафедра технологии неорганических веществ и материалов. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. Сибирский тракт, 12. корп. Е. г. Казань, 420029. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-40-13.

³ Кафедра технологии неорганических веществ и материалов. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. Сибирский тракт, 12. корп. Е. г. Казань, 420029. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-40-13.

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: молибден, кобальт, катализатор, утилизация, сплав, метод экстракции.

Аннотация

Статья посвящена научной проблеме разделения соединений кобальта и молибдена в отработанных катализаторах. Это обеспечит утилизацию и переработку. Предлагается технология разделения на основе сплавления отработанного катализатора с гидроксидом натрия. Предложена принципиальная схема разделения соединений кобальта и молибдена для отработанных кобальтмолибденовых катализаторов.

Исследование возможности утилизации молибденсодержащих катализаторов

© Хацринова¹ Юлия Алексеевна, Хацринов² Алексей Ильич
и Сулейманова³ Алсу Зулькарнаевна

¹Кафедра технологии неорганических веществ и материалов. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. Сибирский тракт, 12. корп. Е. г. Казань, 420029. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-40-13. Email: Khatsrinova12@mail.ru

²Кафедра технологии неорганических веществ и материалов. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. Сибирский тракт, 12. корп. Е. г. Казань, 420029. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-40-13.

³Кафедра технологии неорганических веществ и материалов. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. Сибирский тракт, 12. корп. Е. г. Казань, 420029. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-40-13.

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: утилизация, молибденсодержащие катализаторы, технология разделения.

Аннотация

Статья посвящена разработке методики разделения кобальта и молибдена в кобальтмолибденовых катализаторах. Был использован метод сплавления отработанного катализатора с гидроксидом натрия. Для совместной экстракции был предложен ацетон. Это позволит снизить количество отходов и улучшить экологию промышленных районов.

Теплофизические основы безкаталитической и каталитической трансэтерификации рапсового масла в среде этанола в сверхкритических флюидных условиях

© Мазанов^{1*} Сергей Валерьевич, Усманов¹ Рустем Айтуганович,
Габитов¹ Ильгиз Радифович, Гумеров¹ Фарид Мухамедович,
Зарипов¹ Зуфар Ибрагимович и Мусин² Рашид Загитович

¹ Кафедра теоретических основ теплотехники. Казанский Национальный Исследовательский Технологический Университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 231-42-11. E-mail: serg989@yandex.ru

² Лаборатория физико-химического анализа. Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН. Ул. Ак. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (917) 289-31-75. E-mail: musin@iopc.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: трансэтерификация, биодизельное топливо, гетерогенный катализ, этиловые эфиры жирных кислот, термическое разложение, теплоемкость.

Аннотация

Экспериментально исследована безкаталитическая и каталитическая реакция трансэтерификации рапсового масла в среде этанола в сверхкритических флюидных условиях при ультразвуковом воздействии на реагирующую среду в диапазоне температур от 623 до 653 К, давлении 30 МПа и молярных соотношениях «этиловый спирт – рапсовое масло» 6:1-20:1, где в качестве катализаторов использовались гетерогенные катализаторы (Al_2O_3 , ZnO/Al_2O_3 , MgO/Al_2O_3 , SrO/Al_2O_3). Получены новые данные по изобарной теплоемкости тройной системы «этанол – рапсовое масло – катализатор» при молярных соотношениях смеси 6:1-30:1 в температурном интервале 303-563 К и давлениях 9.8-29.4 МПа.

Влияние кислородсодержащих поверхностных функциональных групп углеродных электродов на саморазряд суперконденсаторов

© Стаханова⁺ Светлана Владленовна, Астахов* Михаил Васильевич,
Климент Анастасия Александровна, Кречетов Илья Сергеевич,
Калашник Анатолий Трофимович, Галимзянов Руслан Равильевич,
Зайцева Олеся Владимировна и Свириденкова Наталья Васильевна

Кафедра физической химии. Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС». Ленинский проспект, 4. г. Москва, 119049. Россия. Тел.: (495) 638-46-64.

E-mail: svtadlen@rambler.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: углеродные материалы, суперконденсаторы, борогидрид натрия.

Аннотация

Предложен механизм саморазряда суперконденсаторов на кислотных электролитах за счет окислительно-восстановительных реакций с участием кислородсодержащих функциональных групп, находящихся на поверхности углеродного электродного материала. Показано, что восстановительная обработка углеродного материала борогидридом натрия или модификация аммиаком позволяет существенно снизить саморазряд без потери или с некоторым увеличением ёмкостных характеристик.

Химическая модификация вермикулита и исследование его физико-химических свойств

© Хальченко⁺ Ирина Григорьевна, Шапкин* Николай Павлович,
Свистунова Ирина Валентиновна и Токарь Эдуард Анатольевич

*Кафедра общей, неорганической и элементоорганической химии Школы естественных наук.
Дальневосточный федеральный университет. Ул. Октябрьская, 27. г. Владивосток, 690000. Россия.
Тел.: (8423) 245-76-69. E-mail: npshapkin@gmail.com*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: модифицированный вермикулит, хитозан, состав и структура модифицированного силиката, адсорбционные характеристики, удельная площадь поверхности, внутренний объем пор.

Аннотация

Вермикулит Ковдорского (Карелия) месторождения, модифицированный кислотой, хитозаном, был исследован с помощью позитронно-аннигиляционной спектроскопии, измерением плотности, адсорбции красителей, адсорбции азота по БЭТ и порометрии.

Показано, что плотность вермикулита после кислотной обработки изменяется по сравнению с плотностью исходных образцов в зависимости от концентрации кислоты. Плотность возрастает с увеличением концентрации кислоты. Внутренний объем микропор и величина максимальной сорбции бриллиантового зеленого изменяются прямо пропорционально плотности модифицированного вермикулита.

Влияние аспарагина на электрокинетические и адсорбционные свойства оксидов железа(III) и никеля(II)

© Дмитриева* Ирина Борисовна, Чухно⁺ Александр Сергеевич
и Родионова Екатерина 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: irina@dmitriyev.ru, alex-chuhno@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: аспарагин, электрокинетические свойства, микроэлектрофорез, изоэлектрическая точка, адсорбция, оксид железа(III), оксид никеля(II).

Аннотация

Исследованы электрокинетические и адсорбционные свойства оксидов NiO и Fe₂O₃ в водных растворах аспарагина в зависимости от его концентрации, pH растворов и времени адсорбции. Установлено, что аспарагин адсорбируется на поверхности Fe₂O₃ и NiO специфически. Показано, что на Fe₂O₃ преобладает адсорбция анионных форм аспарагина, а NiO – катионных.

Влияние бензозамещения в порфириновом макроцикле на его способность к аксиальной координации дополнительных лигандов

© Мамардашвили*⁺ Галина Михайловна, Мальцева Ольга Валентиновна
и Чижова Наталья Васильевна

*Институт химии растворов РАН им. Г.А. Крестова. Ул. Академическая, 1.
г. Иваново, 153045. Россия. Тел.: (4932) 33-69-90. E-mail: gmm@isc-ras.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: тетрабензопорфиринат цинка, аксиальные лиганды, нитрозамещение, спектрофотометрическое титрование.

Аннотация

Методом спектрофотометрического титрования и компьютерного моделирования изучены процессы аксиальной координации дополнительных лигандов (пиридина и 1-метилимидазола) на Zn-тетрабензопорфирине и его тетранитрозамещённом аналоге в толуоле. Установлено, что расширение ароматической π -системы за счёт введения дополнительных циклов приводит к увеличению связывающей способности порфириновым макроциклом аксиальных лигандов по сравнению с арил- и алкилпорфиринатами цинка, при этом сам процесс координации сопровождается меньшими батохромными сдвигами полос поглощения в UV-vis-спектрах. Показано, что влияние нитрозамещения в тетрабензопорфириновом макроцикле на процессы аксиальной координации более нивелировано, чем влияние аналогичного замещения в октаэтилпорфиринате.

Изучение процесса вспенивания эпоксидной смолы в присутствии новых полиаминоалкилфенолов, выполняющих функции отвердителя и вспенивающего агента

© Медведева⁺ Ксения Александровна, Милославский⁺ Дмитрий Геннадьевич,
Черезова* Елена Николаевна и Готлиб* Елена Михайловна

*Кафедра Технологии синтетического каучука. Институт полимеров. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. Карла Маркса, 72. г. Казань, 420015.
Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-42-14. E-mail: ksmedvedeva@rambler.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: пеноэпоксиды, полиаминоалкилфенолы, вспенивающий агент, поверхностно-активные вещества.

Аннотация

Изучен процесс вспенивания эпоксидной смолы ЭД-20 в присутствии новых полиаминоалкилфенолов (ПАФ), полученных путем взаимодействия фенола (Ф), этиленбисамина (ЭБА) и параформа (П) при разном порядке ввода ингредиентов и их соотношении. Показано, что на эффективность ПАФ в роли газообразователя оказывает влияние технология его приготовления, а именно порядок ввода реагентов. Для дальнейшего развития работы предлагается использовать ПАФ-1, полученный при 45 °С по варианту 1 и соотношении Ф:П:ЭБА = 1:2:2.

Модификация резин на основе каучука СКМС-30 АРКМ-15 лигниноцеллюлозными добавками

© Черезова^{1*+} Елена Николаевна, Удоратина² Елена Васильевна,
Шахматов² Евгений Геннадьевич и Карасева¹⁺ Юлия Сергеевна

¹ Кафедра технологии синтетического каучука. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: (843) 231-41-55. E-mail: cherezove@rambler.ru

² Институт химии Коми НЦ УрО РАН. Ул. Первомайская, 48.

Сыктывкар, 167982. Республика Коми. Россия. Тел.: +7 (8212) 21-99-16.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: лигноцеллюлозные порошки, модификатор, резина.

Аннотация

Путем термомеханической обработки древесной массы и ее дальнейшей модификации с использованием серной кислоты и обработки микрокристаллической целлюлозы органическими аминами были получены лигноцеллюлозные добавки-модификаторы для резин. Исследовано влияние полученных соединений на вулканизационные свойства резиновых смесей и комплекс физико-механических свойств резин на основе бутадиен-стирольного каучука СКМС-30 АРКМ-15.

Генерация аэрозоля серы пиротехническими составами

© Стрелкова¹ Анастасия Владимировна, Пыжов^{1*} Александр Михайлович,
Рекшинский¹ Владимир Андреевич, Кукушкин¹ Иван Куприянович
и Пурыгин² Петр Петрович

¹ Кафедра химии и технологии органических соединений азота. Самарский государственный технический университет. Ул. Молодогвардейская, 244. г. Самара, 443100. Самарская область. Россия. Тел.: (846) 337-08-89. E-mail: argel33@mail.ru

² 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: puruginpp2002@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: аэрозоль серы, пиротехнический состав, аммиачная селитра, активный уголь, генератор аэрозоля серы, система воспламенения, промышленные испытания.

Аннотация

В данной статье представлены результаты исследований по разработке пиротехнического состава и устройства для генерации аэрозоля серы в режиме горения. Основные задачи, которые при этом решались, заключались в повышении безопасности изготовления и применения генератора аэрозоля серы, упрощении и удешевлении процесса его изготовления с одновременным сохранением высокой эффективности его применения, а также в разработке системы воспламенения его пиротехнического состава. Основное отличие пиротехнического состава для генерации аэрозоля серы, разработанного авторами от существующих в настоящее время в России и за рубежом состоит в том, что разработанный состав не содержит нитроцеллюлозу и продуктов её переработки – дефицитных и чувствительных к внешним воздействиям компонентов. В качестве окислителя, как одного из компонентов термической основы аэрозолеобразующего состава, была использована аммиачная селитра, а в качестве горючего – активный уголь. Было показано, что только в этом случае можно было достичь устойчивого низкотемпературного процесса горения состава, содержащего около 40% действующего вещества – серы. В результате длительных исследований была разработана конструкция генератора аэрозоля серы и система его воспламенения, обладающие повышенной безопасностью изготовления и применения, простотой и низкой стоимостью и имеющие высокую эффективность применения.

Совместная переработка отходов хлорорганического и тротилового производств

© **Пыжов^{1*} Александр Михайлович, Кукушкин¹ Иван Куприянович, Яковлев¹ Ярослав Андреевич и Пурыгин² Петр Петрович**

¹ Кафедра химии и технологии органических соединений азота. Самарский государственный технический университет. Ул. Молодогвардейская, 244. г. Самара, 443100. Самарская область. Россия. Тел.: (846) 337-08-89. E-mail: argel33@mail.ru

² 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: puryginpp2002@mail.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: промышленные отходы, хлорорганическое производство, хлоризвестковые шламы, тротиловое производство, сульфитный щелок, сульфатсодержащая зола, совместная переработка, гипс, отбеливающие композиции, силикатное стекло.

Аннотация

В данной статье представлены результаты исследований по разработке эффективного способа утилизации и переработки совместных отходов хлорорганического и тротилового производств при изготовлении силикатного стекла и отбеливающей композиции типа «Белизна». Существовавшие способы совместной переработки отходов данных производств имели недостатки, которые заключались или в невысоком качестве получаемого целевого продукта, или в необходимости использования до 80% дефицитного природного сырья. Предложенный способ утилизации отходов хлорорганического и тротилового производств основан на замене природных кальцийсодержащего и сульфатсодержащего компонентов исходной стекольной шихты на отходы упомянутых производств при изготовлении силикатного стекла. Показано, что качество получаемых силикатного стекла и отбеливающей композиции соответствует качеству промышленных материалов.

Оценка возможности утилизации отходов производства тротила различных сроков хранения

© Пыжов^{1*} Александр Михайлович, Кукушкин¹ Иван Куприянович,
Ромашин¹ Евгений Евгеньевич и Пурыгин² Петр Петрович

¹ Кафедра химии и технологии органических соединений азота. Самарский государственный технический университет. Ул. Молодогвардейская, 244. г. Самара, 443100. Самарская область. Россия. Тел.: (846) 337-08-89. E-mail: argel33@mail.ru

² 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: puryginpp2002@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: отходы производства тротила, сульфитный щелок, сульфатсодержащая зола, текущие отходы, отходы десятилетнего срока хранения, химический анализ, способ утилизации, силикатное стекло, оценка возможности.

Аннотация

В данной статье представлены результаты исследований по оценке возможности использования сульфатсодержащих отходов производства тротила десятилетнего срока хранения при изготовлении силикатного стекла. В связи с этим, были проанализированы составы текущих промышленных отходов производства тротила и отходов десятилетнего срока хранения. Было показано, что хранение отходов под открытым небом не приводит к повышению содержания нитропроизводных толуола. Содержание тротила в них остается на уровне следового. Ожидаемое значительное относительное увеличение содержание тротила и органических соединений – взрывчатых производных тротила в золе не подтвердилось. Было обнаружено, что с течением времени происходит относительное снижение содержания водорастворимых компонентов отходов. Однако, содержание основного компонента отходов – сульфата натрия с течением времени увеличилось, хоть и осталось в пределах нормы в соответствии с ТУ 3.75 10103-13-90. Относительное содержание таких компонентов, как карбоната натрия, снизилось в 4 раза, хлорида натрия – в 28 раз, сульфида натрия – в 6 раз, а содержание нерастворимого в воде осадка – увеличилось почти в 2 раза. Как оказалось, качество образцов стекломассы, изготовленных на основе стекольной шихты с применением десятилетних отходов незначительно отличается от образцов, изготовленных на основе стекольной шихты из текущих отходов.

Поликомпозиционные хроматричные покрытия

© **Водопьянова⁺ Светлана Витальевна, Сайфуллин* Ренат Саяхович
и Фахрутдинова Анастасия Сергеевна**

*Кафедра технологии неорганических веществ и материалов. Казанский национальный
исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015.
Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843)231-40-64. E-mail: vod-sveta@yandex.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: композиционные электрохимические покрытия (КЭП), хром, дисперсная фаза (ДФ), оксид алюминия, оксид кремния, электролит-суспензия, вязкость, плотность, толщина, выход хрома по току, рентгенофазовый анализ, термообработка, прочность, пластичность и микротвердость поликомпозиционных покрытий.

Аннотация

Рассмотрены некоторые особенности формирования поликомпозиционных хроматричных покрытий с дисперсной фазой из наночастиц оксида алюминия и оксида кремния. Изучено влияние наночастиц на свойства суспензий, процесс электроосаждения хрома и некоторые эксплуатационные свойства покрытий. Полученные поликомпозиционные покрытия Cr–Al₂O₃–SiO₂ обладают улучшенными свойствами, в сравнении с контрольными и монокомпозиционными покрытиями. Для оценки толщины покрытий и химического состава использовался рентгенофазовый анализ. Исследовано влияние термообработки на свойства хроматричных покрытий.

Содержащие полианилин композиты на основе пористых волокнистых углеродных материалов для электродных структур суперконденсаторов

© Стаханова⁺ Светлана Владленовна, Астахов* Михаил Васильевич,
Климент Анастасия Александровна, Кречетов Илья Сергеевич,
Калашник Анатолий Трофимович, Галимзянов Руслан Равильевич
и Семушин Кирилл Алексеевич

*Кафедра физической химии. ФГАОУ ВПО «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС». Ленинский проспект, 4. г. Москва, 119049. Россия. Тел.: (495) 638-46-64.
E-mail: svladlen@rambler.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: проводящие полимеры, полианилин, углеродные материалы, суперконденсаторы, композиционные материалы.

Аннотация

Получены и электрохимически охарактеризованы содержащие полианилин (ПАНИ) композиты на основе промышленно выпускаемых углеродных тканей и войлоков, волокна которых обладают собственной пористостью. Композиты углеродный материал/полианилин, полученные методом химической полимеризации анилина в присутствии углеродной ткани, обладают уникальной морфологией, характеризующейся значительной долей свободной от ПАНИ поверхности углеродного материала. Такие морфологические особенности позволяют не только достичь двухкратного увеличения ёмкостных характеристик полученных композитов по сравнению с исходными углеродными материалами за счет сочетания ёмкости двойного электрического слоя и псевдоёмкости ПАНИ (до 250 Ф/г и 7.5 Ф/см²), но и обеспечить высокие значения электропроводности и КПД электродных структур на их основе. Разработанные композиты представляются особенно перспективными для формирования электродных структур при создании симметричных суперконденсаторов с высокой энергоёмкостью.

Создание высокопрочных композиционных материалов биodeградируемых в условиях депонирования

© Даутова⁺ Алсу Нуретдиновна, Янов Владислав Владимирович,
Зенитова* Любовь Андреевна и Николаева Ольга Алексеевна

*Кафедра технологии синтетического каучука. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан, Россия.
Тел.: (843) 231-42-51. E-mail: alsu_5572@mail.ru, zenit@kstu.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: полимерные композиции, полиамид, натуральный каучук, биологическое разложение.

Аннотация

В работе представлены исследования полимерных композиций на основе полиамида, наполненные стекловолокном (СВ) в количестве 30 и 50 % масс. марок ПА6-210КС и ПА СВ 50-1 соответственно. В качестве биodeградируемого компонента использовался неочищенный натуральный каучук (НК-Н) и подвергшийся очистке натуральный каучук (НК-О), вводимый в полимерную композицию в количестве 5 и 10 % масс.

Оценены результаты физико-механических испытаний образцов полимерных композиций. Определено, что с ростом количества введенного НК независимо от степени его очистки прочностные показатели падают. При этом с увеличением количества введенного НК-Н показатели снижаются в большей степени: для образцов с НК-О от 6 до 34%, НК-Н от 9 до 37%.

При испытаниях на аэробное биоразложение в почве в течение 6 месяцев наибольшей деградации подверглись образцы с содержанием НК-Н. Наивысшую потерю массы – 5.8% показал образец с содержанием НК-Н 10 % масс.

Композиционные никелевые слои с углеродной фазой

© Хайбиева⁺ Венера Шавкатовна, Фомина Раиса Евгеньевна
и Мингазова Гульфия Гайнутдиновна

Кафедра технологии неорганических веществ и материалов. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. Карла Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-41-31. E-mail: 3_venerka_3@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: КЭП с матрицей из никеля, аммиачный электролит никелирования, дисперсная фаза, углерод технический, коррозионная стойкость, поляризационные кривые, микротвердость.

Аннотация

Получены композиционные электрохимические покрытия (КЭП) с матрицей из никеля, содержащие частицы углеродной фазы. Исследовано влияние концентрации частиц углерода на составы КЭП и растворимой добавки NaF на качество покрытий. Показано, что частицы углеродной фазы ускоряют разряд ионов основного металла. Установлено повышение коррозионной стойкости КЭП никель-углерод по сравнению с контрольным никелевым покрытием. Изучена морфология поверхности никелевых покрытий и их микротвердость.

Влияние наполнителей на процесс формирования и структуру полиуретановых покрытий на основе простых полиэфиров

© Кияненко*⁺ Елена Анатольевна, Зенитова Любовь Андреевна,
Мингалеев Наиль Зямаевич и Николаева Ольга Алексеевна

Кафедра синтетического каучука. ФГБОУ ВПО Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. Карла Маркса, 72. г. Казань, 420015. Республика Татарстан.
Россия. E-mail: kijanenko.lena@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: простые полиэферы, полиуретан, наполнители.

Аннотация

Синтезированы полиуретановые покрытия на основе простых полиэфиров с наполнением природным минералом шунгитом, а также неорганическими твердыми измельченными отходами химических производств – отработанных и некондиционных осушителей: оксидом алюминия, силикагелем, цеолитом. Исследовано влияние наполнителей на процесс формирования и структуру полиуретановых покрытий методом ИК-спектроскопии. Показано, что количество наполнителей оказывает влияние на скорость отверждения полиуретановых покрытий. Оптимальные количества наполнения для композиций с силикагелем и оксидом алюминия составляют 30 % масс., с цеолитом 40 % масс., шунгитом 50 % масс.

Кислотно-основные свойства поверхности люминесцентных соединений сульфидов кальция и стронция

© Селезнев^{1,2} Сергей Анатольевич, Голота¹ Анатолий Федорович
и Пивнева¹ Светлана Петровна

¹ ФГАОУ ВПО «Северо-Кавказский федеральный университет». Ул. Пушкина 1.

г. Ставрополь, 355009. Ставропольский край. Россия. Тел.: (8652) 95-68-08. E-mail: info@ncfu.ru

² ЗАО «НПФ «Люминофор». Пр. Кулакова, 8. г. Ставрополь, 355044. Ставропольский край. Россия.
Тел.: (8652) 56-02-70. E-mail: lumin@mail.stv.ru

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: сульфиды ЩЗМ, люминофор, гидролиз, кислотно-основные индикаторы, рН-метрия, ИК-спектр.

Аннотация

Проведены исследования по выявлению кинетики протекания гидролитических процессов на поверхности кристаллов сульфидов щелочноземельных металлов. Установлено влияние добавки редкоземельных элементов на устойчивость Sr(Ca)S к гидролизным процессам. Доказан эффект повышения устойчивости синтезируемых люминофоров при активации последних редкоземельными элементами, за счет образования фазы «сложных» двойных сульфидов состава $(\text{Sr}_{0,95}\text{Sm}_{0,05})\text{S}_{0,983}$ и EuSrS_2 .

Влияние введения триалкоксисилановых добавок в процессе синтеза мезопористых материалов 0.1NiO-1SiO₂ на их магнитные характеристики

© Кондрашова^{1*} Наталья Борисовна, Вальцифер¹ Виктор Александрович,
Стрельников¹ Владимир Николаевич, Митрофанов² Валентин Яковлевич
и Упоров² Сергей Александрович

¹ Учреждение Российской академии наук Институт технической химии УрО РАН.

Ул. Ак. Королёва, 3. г. Пермь, 614013. Россия. Тел: (342) 237-82-72. E-mail: itch-ura-ran@yandex.ru

² Учреждение Российской академии наук Институт металлургии УрО РАН. Ул. Амундсена, 101.
г. Екатеринбург, 620016. Россия. Тел: (343) 267-91-24. E-mail: imet.uran@gmail.com

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: темплатный гидротермальный синтез, органо замещённые триалкоксисиланы, намагничённость насыщения, температура блокировки.

Аннотация

Мезопористые силикатные композиции 0.1NiO–1SiO₂ были получены методом соконденсации оксидов в присутствии темплата – цетилтриметиламмония бромид и органо замещённых триалкоксисиланов – (2-цианоэтил)триэтоксисилана и трис(триметилсилокси)силана в условиях гидротермального синтеза. Исследованы магнитные свойства этих материалов. Показано, что образцы демонстрирует типичное суперпарамагнитное поведение с максимумом, соответствующим температуре блокировки T_б = 15 К. Присутствие органо замещённых триалкоксисиланов сказывается наиболее существенным образом на значениях и изменении (разнонаправленном) коэрцитивной силы с ростом температуры.

Новые технологии и аппараты для решения экологических проблем производства энергонасыщенных материалов

© Махоткин* Алексей Фиофилактович, Петров⁺ Владимир Иванович, Халитов Рифкат Абдрахманович и Махоткин Игорь Алексеевич

Кафедра «Оборудование химических заводов». Инженерный химико-технологический институт. Казанский национальный исследовательский технологический университет (КНИТУ). Ул. К.Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 231-40-98. E-mail: oxzkstu@rambler.ru.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

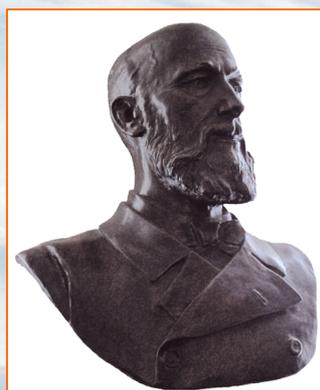
Ключевые слова: очистка отходящих газов, абсорбция, энергонасыщенные материалы, вихревые аппараты, концентрирование серной кислоты, катализ.

Аннотация

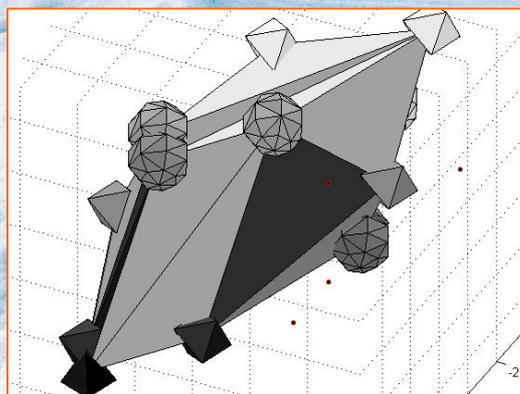
В настоящей работе представлены результаты исследований и внедрения в производство новых вихревых аппаратов для интенсификации массообменных процессов в производстве энергонасыщенных материалов. Представлено сравнение эффективности новых вихревых абсорберов с известными аппаратами для очистки отходящих газов от паров и тумана азотной кислоты и оксидов азота. Разработана и внедрена установка каталитической очистки отходящих газов от оксидов азота. Разработана и внедрена новая вихревая ферросилидовая колонна концентрирования отработанной серной кислоты, позволяющая сократить материалоемкость технологии в 50 раз по сравнению с известными технологиями.

Бутлеровские сообщения

№2, том 41. 2015



ISSN 2074-0212



International Edition in English:
Butlerov Communications

ISSN 2074-0948



Фундаментальные основы строения вещества

© **Потапов Алексей Алексеевич**

г. Иркутск. Россия. Тел.: (395) 246-30-09. E-mail: aleksey.potapov.icc@gmail.com

Ключевые слова: вещество, атом, молекула, модель, ковалентная связь, надмолекулярная структура, кристаллы, межмолекулярные взаимодействия.

Аннотация

Предложен новый подход к построению прогностической теории вещества в логико-генетической связи иерархических уровней в цепи: атом – молекула – вещество. Принципиальным отличием предлагаемого подхода является теория электронного строения атома, в основе которой лежит так называемая диполь-оболочечная модель многоэлектронных атомов, в рамках которой установлена природа и механизм формирования электронной структуры атомов. Понимание электронного строения атомов предопределило понимание природы и механизма формирования молекул как структурных элементов вещества. Основой формирования молекул является ковалентная связь, количественное описание которой нашло в универсальной модели кольца на оси молекулы.

Молекулярно-броуновские моторы или стохастический транспорт в рэтчет-потенциале, формирующем структурные особенности оксигидратных кластеров

© 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.: (351) 799-70-63. 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, диссоциативно-диспропорциональное разрушение макромолекул, теория Уитни, геометрия каустик.

Аннотация

Чёткое понимание процессов формирования структурирующих элементов оксигидратных гелей тяжёлых металлов в неравновесных условиях позволяет надеяться на получение сорбентов на основе оксигидратных гелей с заданными сорбционными характеристиками. 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.

Гигантские кластеры дистиллированной воды в рэтчет формирующем Кокстеровском пространстве

© Сухарев Юрий Иванович, Апаликова Инна Юрьевна
и Шамина Оксана Михайловна

*Кафедра химии твердого тела и нанопроцессов. ФГБОУ ВПО «Челябинский государственный университет». Ул. Бр. Кашириных, 129, г. Челябинск, 454000. Россия.
Тел.: (351) 799-70-63. E-mail: Yuri_Sucharev@mail.ru*

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: лагранжевы отображения, электроглобулы, фуллероиды, мультиполи, оксигидратные гелевые системы, коллоидные кластеры, самопроизвольный пульсационный поток, диффузный двойной электрический слой, топологический континуум, диссоциативно-диспропорциональный механизм, теория Уитни, геометрия каустик.

Аннотация

Если движущийся кластер, например, молекул воды, находится в ячейке с помехой или помехами, то осуществляется взаимодействие, нуждающееся в этих помехах, то есть формируются точечно-рефлексные отображения этих взаимодействующих фрагментов. Эти отображения представляют собой кокстеровские многогранники, включающие отдельные каустики. На полученных графических результатах можно различить следующие гигантские кластеры воды: прослеживаются фуллероидообразные многовершинники гигантских кластеров воды (семнадцативершинники и более), а также обнаруживаются пирамидальные десятивершинники и шестивершинные октаэдры.

Статья публикуется по материалам доклада на Международном научном форуме "Бутлеровское наследие-2015". <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 547.68+541.124/128. Поступила в редакцию 15 марта 2015 г.

Тематическое направление: Численная характеристика структуры органической молекулы.
Часть 18.

К вопросу о движении молекул неэлектролитов

© Урядов Владимир Георгиевич

Кафедра органической химии. Казанский государственный технологический университет.
Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Россия. Тел.: (8432) 63-87-95. E-mail: uryadov@kstu.ru

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: топологический индекс, вращательное движение, сила тяготения, теплоемкость, вязкость.

Аннотация

Рассмотрены некоторые формы движения молекул неэлектролитов, а также роль силы Земного тяготения в природе межмолекулярных взаимодействий. На основании уравнения состояния идеального газа и выражения закона всемирного тяготения получена формула линейной взаимосвязи температуры ансамбля молекул и молярной массы молекул, его составляющих. Фактическая зависимость экспериментальных значений температуры кипения ряда алканов нормального строения от молярной массы задается плавной выпуклой кривой. На основании анализа зависимостей температуры кипения спиртов, циклоалканов, полигалогеналканов, включающие атомы водорода в состав молекулы, и пергалогеналканов высказано предположение, что основу взаимодействия молекул в жидкой фазе, воспринимаемого как дисперсионное – составляет равновесие между силой притяжения к Земле и отталкиванием электронных оболочек молекул. На основании изложенных представлений о проявлении межмолекулярных взаимодействий построены уравнения регрессии, определяющие температуру кипения алканов нормального строения как функцию молярной массы и, введенного ранее нами энерго-структурного параметра, а также как функцию молярной массы, энерго-структурного параметра и величины J_w , – параметра, введенного нами, с позиций вращательного движения молекул, для описания физико-химических свойств жидкостей. Наряду с вращательным движением рассмотрено движение молекул в жидкости по замкнутым траекториям, предельным случаем которых является окружность. Для ряда алканов нормального строения определены значения радиуса окружности на основании данных по плотности при различных температурах. Установлено наличие взаимосвязи квадрата радиуса с теплоемкостью рассматриваемых алканов. Построенные графические зависимости включают два выраженных участка. Один практически параллельный оси абсцисс, указывающий на отсутствие зависимости теплоемкости от радиуса. Другой участок представляет собой линейную зависимость теплоемкости от квадрата радиуса. Первый участок графических зависимостей соотносится с квазикристаллической жидкостью. Второй участок рассматривается как газоподобная жидкость. Также получены зависимости обратной вязкости алканов от куба радиуса. Данные зависимости рассматриваются как указание на интенсификацию массопереноса в жидкости с ростом температуры. На основании полученных зависимостей высказано предположение об особенностях природы жидкой фазы.

Полная исследовательская публикация

Регистрационный код публикации: 15-41-2-76

Тематический раздел: Теоретические исследования.

Подраздел: Компьютерное моделирование газоочистки.

Статья публикуется по материалам доклада на Международном научном форуме "Бутлеровское наследие-2015". <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 541.49+54.061. Поступила в редакцию 10 марта 2015 г.

Моделирование процесса газоочистки в фильтре проточного типа с нерегулярной насадкой

© Пермяков⁺* Андрей Анатольевич, Енейкина⁺* Татьяна Александровна,
Омаров Залимхан Курбанович и Гатина Роза Фатыховна

Федеральное казенное предприятие "Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов". Ул. Светлая, 1. г. Казань, 420033. Россия. Тел.: (843) 544-07-21. E-mail: giihp@bancorp.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: сорбент, сероводород, газоочистка, моделирование.

Аннотация

По программе Ansys проведено компьютерное моделирование процесса распределения газа по объему фильтра при его очистке от сероводорода. Выполнен анализ распределения газовых потоков в зависимости от диаметра входного сопла фильтра для оценки равномерности расхода адсорбента в процессе газоочистки.

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Квантово-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 15-41-2-82 Подраздел: Органическая химия.
Статья публикуется по материалам доклада на Международном научном
форуме "Бутлеровское наследие-2015". <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 541.1 + 530.145. Поступила в редакцию 25 февраля 2015 г.

Исследование химической связи в комплексах интергалогенов на основании теории функционала плотности

© Поleshchuk^{1*} Олег Хемович, Яркова² Анна Геннадьевна,
Фатеев² Александр Владимирович, Ермаханов³ Мырзабек Нысанбекулы
и Саидахметов³ Пулат Абилгаевич

¹ Национальный исследовательский Томский политехнический университет.
пр. Ленина, 30. г. Томск, 634050. Россия.

² Томский государственный педагогический университет. ул. Киевская, 60. г. Томск, 634061. Россия.

³ Южно-Казахстанский государственный университет им. М. Ауэзова. пр. Тауке хана, 5. г. Шымкент.
Республика Казахстан. E-mail: poleshch@tspu.edu.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: микроволновая спектроскопия, теория функционала плотности, химическая связь, квадрупольное взаимодействие, молекулярные орбитали.

Аннотация

На основании расчета методом теории функционала плотности проведен анализ ряда комплексов ХYL, образованных между молекулами I₂, ICl, IBr и пиридином. Геометрические параметры, ИК-спектры и константы ядерного квадрупольного взаимодействия йода, полученные из этих расчетов, согласуются с данными микроволновой спектроскопии и ядерного квадрупольного резонанса. Хорошие корреляции между экспериментальными и рассчитанными энергиями связи внутренних электронов атомов углерода, хлора, йода и азота обнаружены при расчете как с Гауссовыми, так и со Слетеровскими функциями. Сравнение экспериментального и рассчитанного изменения электронной плотности на атомах при комплексообразовании позволило выбрать схемы расчета эффективного заряда на атомах, которые позволяют интерпретировать экспериментальные спектры. Показано, что использование обоих расчетных схем позволяет рассчитывать энтальпию комплексообразования, близкую к экспериментальным значениям. Из энергетического анализа следует, что в комплексах электростатическое связывание преобладает над ковалентным.

Новый взгляд на перегруппировку Боултона-Катрицкого

© **Рыбин⁺ Тимофей Владимирович и Белик^{*+} Александр Васильевич**

*Кафедра химической технологии и вычислительной химии. Челябинский Государственный Университет. Ул. Братьев Кашириных, 129. г. Челябинск, 454001. Челябинская Область. Россия.
Тел.: (351) 799-70-66. E-mail: rybintv@csu.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: гетероциклы, фуроксаны, перегруппировка Боултона-Катрицкого, расчёты DFT.

Аннотация

В работе произведён анализ поведения зарядов атомов в ходе молекулярных колебаний в соединениях, участвующих в перегруппировке Боултона-Катрицкого. Установлена зависимость между направлением перегруппировки и поведением зарядов определённых атомов в исходных и конечных соединениях в ходе колебаний. Предложено использовать данный метод для определения направления протекания перегруппировки.

Решение спектральной задачи для молекулы 4-нитробензофуроксана в координатах X_8^0

© 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: 4-нитробензофуроксан, обобщенные силовые коэффициенты, координаты X_8^0 , расчеты DFT, частоты нормальных колебаний.

Аннотация

В рамках метода функционала плотности с гибридным потенциалом B3LYP 6-311++G(3df,3pd) впервые получено силовое поле молекулы 4-нитробензофуроксана в координатах X_8^0 . Найдены обобщенные силовые коэффициенты, вычислены частоты нормальных колебаний и проведено их отнесение к определенным видам колебаний.

Кинетика и механизм присоединения озона к 1,3-бутадиену по данным квантово-химических расчетов

© Вязовая^{1*†} Анастасия Александровна, Крисюк^{2,3*†} Борис Эдуардович,
Майоров^{1,4*} Алексей Владимирович и Попов^{1,3} Анатолий Анатолиевич

¹ Лаборатория физико-химии композиций синтетических и природных полимеров.

Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН. Ул. Косыгина, 4. г. Москва, 119334. Россия.

² Лаборатория кинетики термических превращений. Институт проблем химической физики РАН. пр-т Академика Семенова, 1. г. Черноголовка, 142432. Московская область.

Российская Федерация. Тел.: (905) 503-69-33. E-mail: bkris@mail.ru

³ Кафедра химии и физики. Российский экономический университет им. Г.В. Плеханова.

Стремянный пер., 36. г. Москва, 117997. Российская Федерация.

⁴ Biomolecular Measurement Division, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, USA.

Phone: +7 (301) 975-40-12. E-mail: hruk78@gmail.com, alexey.mayorov@nist.gov

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: квантово-химический расчет, озон, бутадиен, энергия активации, константа скорости.

Аннотация

Механизм начальной стадии озонолиза 1,3-бутадиена в транс-конфигурации был изучен с помощью метода теории функционала плотности (DFT) B3LYP, дважды гибридного метода B2PLYP на основе DFT и приближения MP2 и метода связанных кластеров CCSD. Было изучено два возможных озонолиза бутадиена: согласованное 1,3-циклоприсоединение, которое приводит к образованию первичного озонида (механизм Криге); и ступенчатый механизм присоединения озона через бирадикальное переходное состояние (механизм Демура). Были получены: предварительная геометрия промежуточных комплексов и переходных состояний, энергия элементарных стадий и активационного барьера. Геометрические структуры стационарных состояний, определяющих константу скорости реакции, были полностью оптимизированы с применением упомянутых методов в базисе aug-cc-pVDZ. Были посчитаны константы скорости реакции по обоим каналам. Степень конкуренции составила приблизительно 1:6 в пользу механизма Криге. Согласно B2PLYP/aug-cc-pvdz суммарная (с учетом обоих каналов реакции) константа скорости составила $3664 \text{ л} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$, в то время как расчет CCSD/aug-cc-pvdz дал $2848 \text{ л} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$. Эти результаты согласуются с данными эксперимента ($k = 3 \cdot 10^3$) и предыдущими результатами расчетов.

Механизм изомеризации радикальных аддуктов присоединения тиофенильного радикала к хинонмоноимину

© Крисюк^{1,3*} Борис Эдуардович и Варламов^{2*+} Владимир Трофимович

¹Лаборатория кинетики гетерофазных процессов. ²Лаборатория радикальных жидкофазных
реакций. Институт проблем химической физики РАН. пр-т Академика Семенова, 1.
г. Черноголовка, 142432. Россия. E-mail: bkris@mail.ru, varlamov@icp.ac.ru

³Кафедра химии и физики. Российский экономический университет им. Г.В. Плеханова.
Стремянный пер., 36. 117997, г. Москва. Россия.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: хинонимины, тиольные радикалы, радикальный аддукт, изомеризация,
участие тиофенола, переходное состояние, квантово-химические расчеты.

Аннотация

На примере аддуктов, образующихся при присоединении тиофенильного радикала к циклогексадиеновому кольцу хинонимина, методами квантовой химии рассмотрены возможные механизмы изомеризации указанных интермедиатов в соответствующие феноксильные и ароматические аминильные радикалы. Показано, что по своей величине энергия активации внутримолекулярного переноса атома Н от связи С–Н в месте присоединения радикала PhS[•] настолько большая, что может равняться или даже превышать прочность разрываемой С–Н-связи. Вследствие этого внутримолекулярная перегруппировка радикальных аддуктов представляется маловероятной. Рассмотрен альтернативный бимолекулярный механизм передачи атомов Н с участием дополнительной молекулы тиола, который выполняет роль катализатора реакции вследствие образования шестичленного переходного состояния и высокой экзотермичности реакции. Полученные данные свидетельствуют о том, что такой механизм может обеспечить быстрый перенос атома Н.

Реакция ароматического гидродехлорирования: квантово-химическая диагностика механизма

© Груздев¹ Матвей Сергеевич, Вирзум²⁺ Людмила Викторовна
и Крылов^{3*} Евгений Николаевич

¹ Институт химии растворов РАН. Ул. Академическая, 1. г. Иваново, 153045.

² Кафедра химии. Ивановская государственная сельскохозяйственная академия имени академика Д.К. Беляева. Ул. Советская, д.45. г. Иваново, 153012. Россия. E-mail: virzum@ivgsxa.ru

³ Кафедра физической и органической химии. Ивановский государственный университет. Ул. Ермака, д.39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (84932) 37-37-03. E-mail: enk2000S@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: гидродехлорирование, арилгалогениды, электрофильность, функция Фукуи, жесткие и мягкие кислоты и основания Пирсона.

Аннотация

Процесс дегидрохлорирования арил- и гетероарилгалогенидов описан на основе теории жестких и мягких кислот и оснований Пирсона. Обнаружен электрофильный характер стадии, лимитирующей скорость, что определяется корреляцией между логарифмами констант скоростей каталитического гидродехлорирования и локальной электрофильностью реакционного центра. Функция Фукуи и локальная электрофильность как показатель электронодонорной способности реакционного центра представляется надежным дескриптором реакционной способности арилгалогенидов в процессе дегидрохлорирования.

Квантово-химическое моделирование взаимодействия 1,2-дифенилциклопропена с *N*-бензилиденанилином

© Эсенбаева¹ Виктория Викторовна, Васянин² Александр Николаевич,
Шуров²⁺ Сергей Николаевич и Юнникова^{1*+} Лидия Петровна

¹ Пермская государственная сельскохозяйственная академия им. академика Д.Н. Прянишникова.
Ул. Петропавловская, 23. г. Пермь, 614000. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 212-95-68.

E-mail: yunnikova@yahoo.com.

² Пермский государственный национальный исследовательский университет. Ул. Букирева, 15.
г. Пермь, 614990. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 239-64-35. E-mail: seshurov@yandex.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *N*-бензилиденанилин, 1,2-дифенилциклопропен, 1*a*,2,7*b*-трифенил-1*a*,2,3,7*b*-тетрагидро-1*H*-циклопропа[с]хинолин, квантово-химические расчеты.

Аннотация

Предложен механизм образования 1*a*,2,7*b*-трифенил-1*a*,2,3,7*b*-тетрагидро-1*H*-циклопропа[с]хинолина в реакции 1,2-дифенилциклопропена с *N*-бензилиденанилином в присутствии хлорида цинка.

Введение

Ранее было показано, что в результате реакции 1,2-дифенилциклопропена с *N*-бензилиденанилином в присутствии хлорида цинка в тетрагидрофуране получен 1*a*,2,7*b*-трифенил-1*a*,2,3,7*b*-тетрагидро-1*H*-циклопропа[с]хинолин [1]. Образование циклопропа[с]хинолина может быть следствием реакции (4+2)циклоприсоединения, в которой *N*-бензилиденанилин ведет себя как диен за счет фрагмента $-\text{Ph}-\text{N}=\text{CH}-\text{C}=\text{C}$, а 1,2-дифенилциклопропен – как диенофил. В 1*a*,2,7*b*-трифенил-1*a*,2,3,7*b*-тетрагидро-1*H*-циклопропа[с]хинолине имеется три хиральных центра – атомы углерода C_{1a}, C₂ и C_{7a}. Однако проведенное исследование не ответило на вопрос о пространственном строении первого.

Целью настоящей работы является определение возможного пространственного строения 1*a*,2,7*b*-трифенил-1*a*,2,3,7*b*-тетрагидро-1*H*-циклопропа[с]хинолина, хиральные центры в этом соединении могут иметь конфигурации 1*a*(S)2(R)7*b*(S)/1*a*(R)2(S)7*b*(R) или 1*a*(R)2(R)7*b*(R)/1*a*(S)2(S)7*b*(S), а также механизма его образования (в газовой фазе) методами квантовой химии.

Синглетные и триплетные переходы в УФ-спектрах оптического поглощения пирена

© Хатымова⁺ Ляйсан Зявдатовна, Хвостенко* Ольга Григорьевна
и Хатымов Рустем Владиславович

Лаборатория масс-спектрометрии отрицательных ионов и спектроскопии молекул. Институт
физики молекул и кристаллов УНЦ РАН. Пр. Октября, 151. г. Уфа, 450075. Республика
Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 231-91-68. E-mail: lesya0706@ya.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: конденсированные ароматические соединения, пирен, электронное строение, синглетные электронно-возбужденные состояния, триплетные состояния, УФ-спектроскопия оптического поглощения, фотоэлектронная спектроскопия.

Аннотация

Записаны УФ-спектры оптического поглощения пирена. «Обзорный» УФ спектр, показывающий картину переходов молекулы в синглетные электронно-возбужденные состояния в области 1-6 эВ, получен в циклогексане. Спектр оптического поглощения, демонстрирующий прямые вертикальные переходы молекулы в триплетные состояния, зарегистрирован в кювете с большой длиной оптического пути в бромпропане. Установлена экспериментальная энергия первого вертикального триплетного перехода в пирене как 2.75 эВ, что на 0.6 эВ выше первого адиабатического триплетного перехода, полученного ранее другими авторами методами флуоресценции. Отнесение полос полученных УФ спектров выполнено на основе квантово-химических расчетов TD B3LYP/6-311G. Электронное строение молекулы основного состояния, включая информацию о занятых и вакантных молекулярных орбиталях, задействованных в рассматриваемых электронных переходах, установлено на основе фотоэлектронного спектра пирена, взятого из литературы. В настоящей работе полосы фотоионизации указанного фотоэлектронного спектра отнесены к определенным занятым молекулярным орбиталям на основе расчетов B3LYP/6-311G. Определены симметрии и электронные конфигурации изученных синглетных и триплетных электронно-возбужденных состояний молекулы пирена.

Строение и ИК спектры эндофуллеренов Me@C₆₀ (Me = Cu, Ag, Au, Sc, Y, La) по данным квантово-химических расчётов

© Мачнев Дмитрий Александрович, Нечаев⁺ Игорь Владимирович
и Введенский* Александр Викторович

Кафедра физической химии. Воронежский государственный университет. Университетская пл. 1.
г. Воронеж, 394006. Россия. Тел.: (473) 220-85-46. E-mail: nechaev_iv@chem.vsu.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: эндофуллерены, ИК спектры, квантово-химическое моделирование.

Аннотация

Представлены результаты DFT-моделирования эндофуллеренов Me@C₆₀ металлов Ib- и IIIb- групп. Установлено, что металлы подгруппы меди располагаются в центре углеродного каркаса, не образуя химических связей с атомами углерода, тогда как металлы подгруппы скандия связаны с атомами шестичленного кольца, образуя структуру с симметрией C_s. При внедрении в C₆₀ атомов Cu, Ag и Au, ИК спектр эндофуллерена состоит из четырёх линий, также характерных для чистого C₆₀. Спектр эндофуллеренов металлов подгруппы скандия включает линии, запрещённые по симметрии для чистого фуллерена, что делает возможным их экспериментальное определение методом ИК спектроскопии в смеси с C₆₀.

Квантово-химическое моделирование газофазной адсорбции гидроксид-иона на кластерах IV-металлов Me_n ($n = 2-8$)

© Дорошенко⁺ Александр Александрович, Нечаев Игорь Владимирович
и Введенский* Александр Викторович

Кафедра физической химии. Воронежский государственный университет.

Университетская пл. 1. Воронеж, 394006. Россия.

Тел.: (473) 220-85-46. E-mail: doroshenko@chem.vsu.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование, кластеры IV-металлов, гидроксид-ион, хемосорбция, ИК спектры.

Аннотация

В рамках теории функционала плотности осуществлено моделирование газофазной адсорбции гидроксид-иона на малых кластерах IV-металлов. Рассчитаны энтальпия и энергия Гиббса взаимодействия адсорбата с металлическими кластерами. Выявлено сходство структурных и зарядовых состояний ОН-радикала и ОН-аниона в адсорбированном состоянии. Проведён анализ колебательных спектров адсорбционных комплексов. Установлено, что гидроксид-ион хемосорбируется на малых кластерах IV-металлов в положение *on top* или *bridge*. Показано, что при адсорбции гидроксид-иона частота валентных колебаний связи О-Н увеличивается относительно соответствующих значений в изолированном состоянии, в то время, как интенсивность колебаний значительно снижается.

Квантово-химическое моделирование процесса синтеза сульфидов железа и цинка из их хлоридов

© Бараева¹⁺ Линара Рифатовна, Сабахова² Гузеля Игоревна
и Ахметова^{1,3*} Резида Тимерхановна

¹ Кафедра технологии неорганических веществ и материалов. Институт нефти, химии и нанотехнологий. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: (843) 238-56-94. E-mail: office@kstu.ru, baraeva.linara@yandex.ru

² Отдел увеличения нефтеотдачи пластов. Татарский научно-исследовательский и проектный институт нефти ОАО «Татнефть». Ул. М. Джалиля, 32. г. Бугульма, 423230. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (855) 947-85-55. E-mail: sabahova.guzel@yandex.ru

³ Кафедра химии и инженерной экологии в строительстве. Институт строительных технологий и инженерно-экологических систем. Казанский государственный архитектурно-строительный университет. Ул. Зеленая, 1, корпус 1. г. Казань, 420043. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 510-47-42. E-mail: info@ksaba.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: сульфид железа, сульфид цинка, кислоты Льюиса, квантово-химическая программа Priroda 6.

Аннотация

Квантово-химические расчеты выполнены с использованием программы Priroda 6 посредством гибридного метода функционала плотности dft functional=PBE с базисом basis 4.in. Высокая температура синтеза сульфидов является условием протекания химических взаимодействий между компонентами, поскольку устойчивые циклические серные молекулы переходят в радикалы. Однако известен и другой путь радикальных превращений серы и связан он с активацией серы под действием электрофильных компонентов. Расчетами доказано, что в процессе синтеза сульфидов железа и цинка из их хлоридов и серы образуются сложные сульфидные комплексы, содержащие S_n ($n = 1, 2, 4, 6, 8$). Установлено активирующее действие хлоридов на серу, заключающееся в дестабилизации и раскрытии циклических молекул.

Изучение роли неионогенных поверхностно-активных веществ в формировании пористой структуры активного оксида алюминия

© Лебедева⁺ Ирина Игоревна, Кисельков Дмитрий Михайлович
и Вальцифер* Виктор Александрович

Институт технической химии УрО РАН. Ул. Ак. Королева, 3.

г. Пермь, 614013. Пермский край. Россия. Тел.: (342) 237-82-81. E-mail: irene.i.lebedeva@gmail.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: оксид алюминия, пористая структура, неионогенное поверхностно-активное вещество, бимодальное распределение пор по размерам.

Аннотация

В данной работе установлены закономерности формирования пористой структуры активного оксида алюминия в условиях гидротермального (ГТ) синтеза в присутствии неионогенных поверхностно-активных веществ (нПАВ) – блоксополимеров поли(этиленоксид)-поли(пропиленоксид)-поли(этиленоксид) (Pluronic). Показано, что ключевым моментом ГТ синтеза активного оксида алюминия с бимодальной пористой структурой является формирование органо-неорганического гель-прекурсора на основе нПАВ и гидроксоформ оксида алюминия (формы-предшественники оксида алюминия), образующихся при осаждении из растворов солей алюминия. Установлено, что пространственная организация органо-неорганического гель-прекурсора определяется взаимодействием частиц форм-предшественников оксида алюминия с нПАВ, что, в свою очередь, определяется их фазовым составом. Предложен механизм формирования органо-неорганического гель-прекурсора на основе нПАВ и гидроксоформ оксида алюминия. Показано, что с увеличением гидрофильно-липофильного баланса нПАВ структура оксида алюминия изменяется от однородно пористой, характеризующейся порами конической формы, к структуре с бимодальным распределением пор по размерам.

Кристаллизация теллурида кадмия на охлажденной жидким азотом монокристаллической подложке

© Беляев^{1*+} Алексей Петрович, Рубец² Владимир Павлович
и Беляева² Светлана Александровна

¹ Кафедра физической и коллоидной химии. Санкт-Петербургская государственная химико-фармацевтическая академия. Ул. Проф. Попова, д.14, лит.А. г. Санкт-Петербург, 197376.
Россия. Тел.: (820) 234-19-28. E-mail: Alexei.Belyaev@pharminnotech.com.

² Кафедра аналитической химии. Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет). Московский пр-т, 26. г. Санкт-Петербург, 190013. Россия.
Тел.: (812) 494-93-71. E-mail: vladimir@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: гетроэпитаксия, сверхнизкие температуры, тонкие пленки, синтез из паровой фазы, структурные исследования, соединения А2В6.

Аннотация

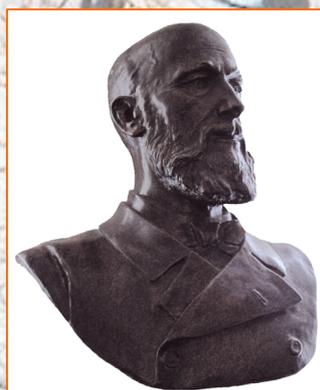
Сообщается о гетроэпитаксии при сверхнизких температурах. Эффект образования упорядоченного монокристаллического состояния наблюдается при конденсации полупроводниковых пленок из паровой фазы на кристаллическую подложку, охлаждаемую жидким азотом. Продемонстрирована возможность целенаправленного воздействия на кристаллический тип и кристаллическое совершенство синтезируемых объектов.

Представлены результаты технологических экспериментов и структурных исследований пленок соединений А2В6, формируемых на подложке из слюды и кремния.

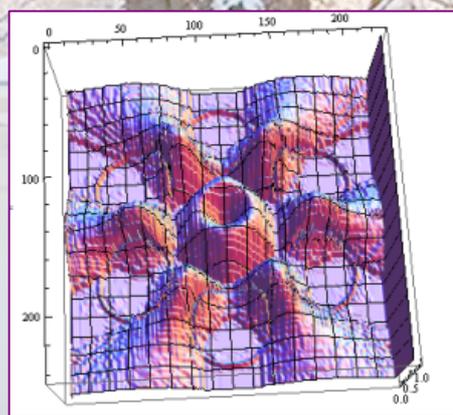
Приводятся диаграммы конденсации, микрофотографии, спектры дифракции электронов и рентгеновских лучей.

Бутлеровские сообщения

№3, том 41. 2015



ISSN 2074-0212



International Edition in English:
Butlerov Communications

ISSN 2074-0948



Ионообменные свойства гидратированных фосфатов титана(IV)

© Иваненко*⁺ Владимир Иванович, Корнейков Роман Иванович,
Аксенова Светлана Владимировна и Локшин Эфроим Пинхусович

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В.Тананаева Кольского научного центра Российской Академии наук (ИХТРЭМС КНЦ РАН). Академгородок 26а. г. Апатиты, Мурманская область, 184209. Россия. Тел.: (8155) 57-92-40. E-mail: ivanenko@chemy.kolasc.net.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: фосфаты титана(IV), неорганические сорбенты, катионы токсичных металлов, ионный обмен.

Аннотация

На основе изучения процессов комплексообразования определены условия существования гидратированных акваоксогидрофосфатов Ti(IV) в водных средах. Поляризация ацидолиганда в поле атома титана приводит к повышению подвижности протона в гидрофосфате Ti(IV) и способности к катионному обмену. Изучено влияние природы катионов сорбируемых металлов на процесс замещения протонов гидрофосфата Ti(IV). Значения константы катионного замещения зависят от степени гидратации катионов металла. В высоко гидратированных образцах возможно достижение статической обменной емкости, близкой к теоретической и равной содержанию НРО₄-групп в сорбенте. Разработаны способы модификации титано-фосфатного сорбента катионами Fe(III), Zr(IV) и Nb(V). Модифицирование основано на образовании гетерополиядерных ассоциатов при взаимодействии оксогидроксиацидокомплексов переходных металлов, имеющих различие в кислотно-основных свойствах. Легирование увеличивает константу сорбции, что позволяет использовать сорбенты для извлечения катионных примесей из более кислых растворов. Термическая обработка отработанных сорбентов обеспечивает надежную иммобилизацию сорбированных катионов в виде нерастворимых в водной среде кристаллических соединений. Разработанные сорбенты могут быть эффективно использованы для очистки от радионуклидов жидких радиоактивных отходов с высоким содержанием солей нерадиоактивных элементов, а также для извлечения из технологических стоков катионов токсичных металлов. Гидрофосфат титанила TiОНРО₄·aq может быть использован в качестве прекурсора при синтезе соединений группы титанилфосфата калия в водных растворах.

Минерализация 4-нитрофенола под действием озона в присутствии магнитосепарируемого композиционного катализатора на основе диоксида титана и магнетита

© Казаков⁺ Дмитрий Александрович, Вольхин* Владимир Васильевич,
Гуленова Юлия Олеговна, Обирина Марина Николаевна
и Рожина Дарья Андреевна

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: 4-нитрофенол, минерализация, озон, магнитосепарируемый композиционный катализатор, диоксид титана, магнетит.

Аннотация

Приведены результаты изучения процесса минерализации 4-нитрофенола при озонировании в присутствии образцов диоксида титана с различной структурой. Установлено, что наиболее высокая скорость минерализации 4-нитрофенола наблюдается в присутствии аморфного диоксида титана. Показано, что магнетит не влияет на скорость минерализации 4-нитрофенола. Предложена методика синтеза магнитосепарируемого композиционного катализатора, включающего фазу магнетита и аморфного диоксида титана. Определена зависимость каталитической активности композиционного катализатора при минерализации 4-нитрофенола в ходе озонирования от содержания в нём магнетита. Установлено, что при введении в фазу аморфного диоксида титана фазы магнетита до 30 % масс. каталитическая активность полученных образцов композиционного катализатора повышается, при дальнейшем увеличении доли магнетита в составе катализатора до 50 % масс. происходит снижение его активности. Более высокая каталитическая активность композиционного катализатора по сравнению с аморфным диоксидом титана объяснена более высокой удельной поверхностью и развитым объёмом пор полученного композита. Обнаружено, что в образце композиционного катализатора, содержащем 30 % масс. магнетита и проявившем наиболее высокую каталитическую активность, неактивная фаза магнетита находится внутри частиц, а каталитически активная фаза диоксида титана – на их поверхности.

Синтез полиалюмо- и полигаллийфенилсилоксанов в условиях механохимической активации

© **Либанов Виталий Викторович, Капустина⁺ Алевтина Анатольевна,
Шапкин* Николай Павлович и Касприк Анна Эдуардовна**

Кафедра общей, неорганической и элементоорганической химии. Дальневосточный федеральный университет. Ул. Октябрьская, 27. г. Владивосток, 690090. Россия.

Тел.: (8423) 245-76-09. E-mail: kapustina.aa@dvfu.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: полиалюмофенилсилоксан, полигаллийфенилсилоксан, полифенилсилсесквиоксан, механохимическая активация.

Аннотация

Изучено взаимодействие полифенилсилоксана с оксидами алюминия и галлия в условиях механохимической активации. Получены растворимые полиалюмофенилсилоксаны (ПАФС) с выходом от 68.2% до 69.3%. Показано, что получаемое в ПАФС соотношение Si/Al не зависит от его исходной величины. Показано, что расщепление силоксановой связи под действием оксида галлия при проведении взаимодействия в планетарной мельнице не происходит. Состав полученных продуктов исследован методами элементного, рентгенофазового анализов, ИК-спектроскопии и гель-хроматографии.

Научные основы получения новых кристаллов и фотонных ИК-световодов на их основе

© Корсаков Александр Сергеевич и Жукова*⁺ Лия Васильевна

Кафедра физической и коллоидной химии. Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Россия.

Тел.: (343) 375-44-45. E-mail: l.v.zhukova@urfu.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: исследование диаграмм; фотостойкие кристаллы, твердые растворы галогенидов серебра и таллия, моделирование структуры, фотонные ИК-световоды.

Аннотация

Разработаны фотостойкие и прозрачные в спектральном диапазоне от 0.4 до 45.0 мкм новые кристаллы $Ag_{1-x}Tl_xBr_{1-x}I_x$; $Ag_{1-x}Tl_xBr_{1-0.54x}I_{0.54x}$. Усовершенствована технология их получения, включающая нетрадиционный синтез многокомпонентной (однофазной) шихты и выращивание кристаллов на новых установках КПЧ-01 и КПЧ-02. Методом ДТА исследованы диаграммы фазовых равновесий систем AgBr – TlI и AgBr – (TlBr_{0.46}I_{0.54}) и установлены области существования гомогенных твердых растворов. Для первой системы максимальное содержание TlI в твердом растворе составляет 25 % масс.; для второй системы содержание TlBr_{0.46}I_{0.54} в твердом растворе составляет 50 % масс. Фотонные ИК-световоды нанокристаллической структуры получают методом экструзии из новых кристаллов. Размер зерен в ИК-световоде – от 60 до 90 нм.

Моноаминоксидазные биосенсоры на основе наночастиц серебра и оксида графена для определения лекарственных веществ с антидепрессивным действием

© Медянцева^{1*} Эльвина Павловна, Брусницын¹ Даниил Владимирович, Варламова¹ Регина Марковна, Максимов¹ Александр Александрович, Коновалова² Ольга Анатольевна и Будников¹ Герман Константинович

¹ Кафедра аналитической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова; ² Кафедра оптики и нанофотоники. Институт физики. Казанский (Приволжский) федеральный университет
Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 233-77-93.
E-mail: Elvina.Medyantseva@kpfu.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: биосенсор, моноаминоксидаза, углеродные нанотрубки, наночастицы серебра, оксид графена, антидепрессанты.

Аннотация

Разработаны амперометрические моноаминоксидазные биосенсоры на основе графитовых печатных электродов, модифицированных многостенными углеродными нанотрубками, наночастицами серебра или оксидом графена для определения лекарственных веществ имипрамина, афобазола и моклобемида. Показана возможность использования биосенсоров для контроля качества лекарственных веществ при определении основного лекарственного вещества в лекарственных формах. Нижняя граница определяемых содержаний при использовании в качестве субстрата адреналина для моклобемида, имипрамина и афобазола $2 \cdot 10^{-9}$, $6 \cdot 10^{-9}$, $8 \cdot 10^{-9}$ моль/л соответственно.

Особенности получения микротрубок хитозана межфазной реакцией полимераналогичного превращения

© Гегель^{1*} Наталья Олеговна, Бабичева^{1,2} Татьяна Сергеевна
и Шиповская^{1,2} Анна Борисовна

¹ Образовательно-научный институт Наноструктур и биосистем. Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского. Ул. Астраханская, 83. г. Саратов, 410012. Россия.

Тел.: (8452) 21-07-59. E-mail: GegelNO@yandex.ru

² Базовая кафедра полимеров. Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского. Ул. Астраханская, 83. г. Саратов, 410012. Россия. Тел.: (8452) 51-69-57.

E-mail: ShipovskayaAB@rambler.ru

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: хитозан, микротрубки, формование, полимераналогичные превращения, высаливатель, биодegradируемые протезы кровеносных сосудов.

Аннотация

Описан процесс получения и свойства новых материалов на основе хитозана в форме полых бесшовных структур (микротрубок) межфазной реакцией полимераналогичного превращения полимера из растворимой формы полисоли в нерастворимую в воде форму полиоснования или ПАВ-полиэлектролитного комплекса. Проведена оценка влияния химической природы высаливателя на механизм химической реакции. Оценены морфология, физико-механические характеристики, упруго-деформационные и биохимические свойства микротрубок хитозана. Выявлена высокая адгезия и пролиферирующая активность культуры эпителиоподобных клеток МА-104 на поверхности микро-трубчатых субстратов в модельных опытах *in vitro*.

Включение белого фосфора в природный круговорот веществ. Культивирование устойчивой микрофлоры.

© Миндубаев^{1*} Антон Зуфарович, Волошина¹ Александра Дмитриевна,
Горбачук² Елена Валерьевна, Кулик¹ Наталья Владимировна, Алимova² Фарида
Кашифовна, Минзанова¹ Салима Тахиятулловна, Миронова¹ Любовь Геннадьевна,
Сапармырадов² Керемли Ашырмухаммедович, Хаяров² Хасан Рафаэлевич
и Яхваров^{1*} Дмитрий Григорьевич

¹ Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова Казанского научного центра
Российской академии наук. Ул. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия.

E-mail: mindubaev@iopc.ru

² 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, метаболический путь, метаболиты, ядерный магнитный резонанс, *Bacillus*, *Streptomyces sp.*, *Aspergillus niger*, *Trichoderma asperellum F-1087*, культуральные среды, химическое равновесие, селекция.

Аннотация

Впервые произведены посеы микроорганизмов различных таксономических групп (грибов, стрептомицетов и бактерий) на синтетические культуральные среды, содержащие белый фосфор в качестве единственного источника фосфора. На данных средах микроорганизмы росли и не испытывали фосфорное голодание. Это первый в мире пример включения белого фосфора в биосферный круговорот элемента фосфора. Показано, что устойчивость культур микроорганизмов к белому фосфору зависит от их таксономической принадлежности – грибы из рода *Trichoderma* адаптируются к нему лучше, чем аспергиллы, аспергиллы лучше чем стрептомицеты, а стрептомицеты лучше, чем бактерии рода *Pseudomonas*. Сравнивая две культуры стрептомицетов, мы показали, что устойчивость к белому фосфору – признак, который может усиливаться или ослабляться в зависимости от условий культивирования. По всей видимости, микроорганизмы потребляют растворенные продукты окисления белого фосфора (фосфат, фосфит и гипофосфит) и, тем самым, смещают химическое равновесие в сторону его дальнейшего окисления. Это заметно ускоряет процесс детоксикации белого фосфора. Характер и состав продуктов окисления белого фосфора исследовался нами методом ³¹P ЯМР. Самая высокая концентрация соответствует превышению ПДК белого фосфора в сточных водах в 5000 раз, а в питьевой воде – в 100000000 раз!

Новые антимикробные препараты на основе комплексной соли хитозана с хиральным органическим лигандом

© Шиповская^{1,2,*+} Анна Борисовна, Зудина² Ирина Витальевна,
Фомина² Валентина Ивановна и Малинкина^{1,2} Ольга Николаевна

¹ Базовая кафедра полимеров. Институт химии. Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского. Ул. Астраханская, 83. г. Саратов, 410012. Россия. Тел.: (8452) 51-69-57.

E-mail: ShipovskayaAB@rambler.ru

² Отдел высокомолекулярных соединений. Образовательно-научный институт наноструктур и биосистем. Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского.

Ул. Астраханская, 83. г. Саратов, 410012. Россия. Тел.: (8452) 21-07-59.

E-mail: Olga-Malinkina@yandex.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: хитозан, комплексная соль, неорганический и хиральный органический лиганд, гидрогель, антимикробный препарат, пародонтит, цитокины.

Аннотация

Методами элементного анализа, потенциометрического титрования, спектрополяриметрии, ИК- и ЯМР-спектроскопии исследованы процессы соле- и гелеобразования в системе гидрохлорид хитозана+аскорбиновая кислота+вода. Установлено, что взаимодействие данных компонентов в водной среде сопровождается образованием гидрогеля комплексной соли хитозана с неорганическим (хлорид) и хиральным органическим лигандом (аскорбат). Изучены вискозиметрические и реологические свойства водных растворов гидрохлорид-аскорбат хитозана. В разбавленных растворах макромолекулы полисоли проявляют полиэлектролитный эффект, в концентрированных – реализуется типичный для неньютоновских жидкостей характер течения. Отмечено существенное влияние на эти свойства энантиомерной формы аскорбиновой кислоты, температуры и времени хранения растворов. На основании проведённых исследований высказано предположение, что узлы сетки гидрогеля бинарной соли хитозана образованы системой сложных ион-ионных и водородных контактов между макромолекулами полимера и молекулами органической кислоты. Методами *in vitro* и *in vivo* установлена способность гидрогелей гидрохлорид-аскорбат хитозана оказывать антибактериальное действие в отношении условно-патогенных бактерий. Изучена динамика изменения содержания цитокинов ФНО- α и ИЛ-1 β в жидкости зубодесневых карманов у пациентов с воспалительными заболеваниями тканей пародонта на фоне обработки десны гидрогелем комплексной соли хитозана. Установлено, что препарат проявляет ярко выраженную противовоспалительную активность, по всей видимости, за счет регуляции уровня цитокинов в очаге воспаления. Выявленные закономерности показывают, что лечебный эффект гидрогелей обусловлен не только пролонгированной санацией зубодесневых карманов, но и иммуотропным действием на эффекторы врожденного иммунитета. Механизм воздействия комплексной соли хитозана с хиральным органическим лигандом на живые клетки, по всей видимости, тот же, что и у поликатионных антимикробных белков, прежде всего, дефензинов β .

Качественное и количественное определение углеводов в сырье и настойках матричных гомеопатических подснежника Воронова, белоснежного методами тонкослойной хроматографии и УФ-спектрофотометрии

© Боков^{1*+} Дмитрий Олегович, Самылина¹ Ирина Александровна
и Попов² 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.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: углеводы, подснежник Воронова (*Galanthus woronowii* Losinsk), подснежник белоснежный (*Galanthus nivalis* L.), настойка матричная гомеопатическая, глюкоза, фруктоза.

Аннотация

Изучен качественный состав и количественное содержание углеводов в гомеопатическом лекарственном растительном сырье и настойках матричных гомеопатических подснежника Воронова и подснежника белоснежного. Подобраны оптимальные условия проведения ТСХ-анализа, экстракции сырья, разработаны спектрофотометрические методики определения количественного содержания углеводов в пересчете на фруктозу и на глюкозу.

Оценка содержания фитоменадиона в надземной части растений семейства гречишные флоры Сибири

© Лукша^{1*+} Елена Александровна, Погодин¹ Илья Сергеевич
и Иванова^{2*} Евгения Викторовна

¹ Кафедра фармацевтической, аналитической и токсикологической химии. ² Кафедра фармацевтической технологии с курсом биотехнологии. ГБОУ ВПО «Омский государственный медицинский университет» Минздрава РФ. Ул. Ленина, 12. г. Омск, 644099. Омская область. Россия.
Тел.: (381-2) 370-360. E-mail: chem68@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *Polygonaceae*, фитоменадион, филлохинон, витамин К₁, рабочий стандартный образец, ВЭЖХ.

Аннотация

В статье приведены результаты определения содержания фитоменадиона (витамина К₁) в надземной части некоторых растений семейства гречишные сибирской флоры. Показано, что фитоменадион не обнаруживается в растениях семейства после двух лет хранения сырья. Установлено, что фитоменадион присутствует во всех 15 исследуемых образцах, срок хранения которых составляет менее двух лет. Наибольшее содержание фитоменадиона отмечено для представителей рода *Persicaria* (горец), *Polygonum* (спорыш), *Rumex* (щавель). Полученные результаты позволяют сформулировать рекомендации по хранению и оптимальному использованию растительного сырья на основе представителей семейства гречишные в качестве источника витамина К₁. Количественная оценка содержания фитоменадиона в растениях семейства гречишные флоры Сибири проведена впервые.

Особенности биосинтеза оксилипинов в плаунке семейства *Selaginellaceae*

© Огородникова*⁺ Анна Владимировна, Мухитова* Фаимья Киямовна
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: *Selaginella martensii* Spring, липоксигеназный путь, оксилипины, дивиниловые эфиры, 12-оксофитодиеновая кислота.

Аннотация

Изучен профиль оксилипинов в зеленых тканях плаунка *Selaginella martensii* Spring. Большинство из них является продуктами метаболизма ненасыщенных жирных кислот (линолевой и α -линоленовой), опосредованного действием ферментов 13-липоксигеназы и дивинилэфирсинтазы (ДЭС) или алленоксидсинтазы (АОС). Алленоксидсинтазные продукты представлены изомерами 12-оксофитодиеновой кислоты (12-оксоФДК), среди которых преобладает 12-охо-9(13), 15-ФДК. Это соединение нехарактерно для цветковых растений. Дивиниловые эфиры обнаружены у нецветковых наземных растений впервые. Впервые описан липоксигеназный метаболизм жирных кислот в плаунках (Lycopodiophyta).

Новые подходы к стандартизации травы душицы

© Хазиев^{1+*} Рамиль Шамилович, Петрова¹ Диляра Наильевна
и Ситенков² Александр Юрьевич

¹Кафедра фармакологии фармацевтического факультета с курсами фармакогнозии и ботаники.

²Кафедра фармацевтической химии с курсами аналитической и токсикологической химии
Казанский государственный медицинский университет. Пр. Амирхана, 16. г. Казань, 420016.
Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 521-27-88. E-mail: xaziev@inbox.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *Origanum vulgare*, флавоноиды, дифференциальная спектрофотометрия, количественный анализ.

Аннотация

Целью исследования была разработка быстрого метода количественного определения действующих веществ в траве душицы. Испытания проводились на траве душицы обыкновенной, заготовленной в республиках Татарстан и Башкортостан. В результате проведенных экспериментов были подобраны условия экстракции флавоноидов – одной из основных групп действующих веществ данного сырья, при которых в течение 10 минут извлекалось 94% этих соединений. Расчет истинного содержания их в растительном сырье проводился с использованием коэффициента на неполноту экстракции. Методом высокоэффективной жидкостной хроматографии было показано, что доминирующим флавоноидом этого сырья является цинарозид, удельный показатель которого в комплексе с хлоридом алюминия предлагается использовать для расчетов. Достоверность методики была проверена статистически, ошибка метода не превышает 2.48%.

Изучение токсичности некоторых производных бензимидазола

© Васин* Антон Евгеньевич, 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: бензимидазол, 2-метилбензимидазол, 2-бензилбензимидазол, 1,2-добензилбензимидазол, токсичность, мутагенность, *Paramecium caudatum*, *Allium cepa*.

Аннотация

Изучена токсичность бензимидазола, 2-метилбензимидазола, 2-бензилбензимидазола и 1,2-добензилбензимидазола (I-IV) в водных растворах для *Paramecium caudatum* и *Allium cepa* и мутагенность для *Allium cepa*. Рассчитанные физико-химические параметры изученных соединений свидетельствуют о том, что токсичность и мутагенность I-IV коррелируют с липофильностью и объемом их молекул. Вероятно, что возрастание липофильности от I к IV приводит к соответствующему увеличению степени их мутагенности, так как большее количество молекул I-IV может связываться с ДНК по механизму интеркаляции. Токсичность и мутагенность I-IV для *Paramecium caudatum* и *Allium cepa* носят дозозависимый характер. Рассчитанные физико-химические параметры изученных соединений свидетельствуют о том, что токсичность и мутагенность коррелируют с липофильностью и объемом их молекул.

Сравнительный анализ химико-биологических показателей молоди рыб разных участков Волжского отрога Куйбышевского водохранилища в условиях антропогенного воздействия

© Гордеева Мария Эдуардовна, Лапин*⁺ Анатолий Андреевич
и Карусева Александра Юрьевна

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: Maria.Galeeva@gmail.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: ихтиофауна, молодь рыб, Куйбышевское водохранилище, размерный состав, видовой состав, возрастной состав, коэффициент упитанности, антиоксидантная активность крови, антропогенное воздействие.

Аннотация

При анализе данных, предоставленных ФГУ «Средневожрыбводом» было установлено, что преобладающими видами молоди рыб Волжского отрога Куйбышевского водохранилища при разной степени антропогенной воздействия является укля, лещ и окунь. В работе проведен сравнительный анализ таких биологических показателей молоди рыб как длина тела, масса тела, возраст, упитанность, антиоксидантная активность крови в условиях разной степени антропогенной нагрузки. Были разработаны размерно-весовые модели укля, леща и окуня, которые позволят спрогнозировать промысловую массу рыб при разрешенных размерах вылова при условии стабильной кормовой базы на уровне 2013 года и улучшения качества воды. Помимо исследования биологических показателей был проанализирован и один из современных новаторских химических показателей – суммарная антиоксидантная активность крови рыб.

Идентификация органических соединений различных классов в волосах человека методом ГХ-МС/МС

© Кислякова*⁺ Яна Юрьевна, Шешко Татьяна Федоровна
и Серов Юрий Михайлович

*Кафедра физической и коллоидной химии. Российский университет дружбы народов.
Ул. Миклухо-Маклая, 6. г. Москва, 117198. Россия. Тел.: (495) 955-07-66. E-mail: rupf@mail.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: химико-токсикологический анализ, волосы, 3-нафтоиндолы, индазол-3-карбоксамиды, ГХ-МС/МС.

Аннотация

Проведена классификация синтетических каннабиноидов на основе их химического строения. Определены масс-спектрометрические и хроматографические характеристики исследуемых соединений. Подобраны условия исследования внешней поверхности волос на наличие компонентов курительных смесей. Разработана методика анализа внутренней области волос. Проведена процедура валидации данной методики.

Определение констант диссоциации карбоксильных и аминогрупп на альбумине методом потенциометрического титрования

© Дмитриева* Ирина Борисовна, Кергенцев Антон Андреевич
и Чухно⁺ Александр Сергеевич

*Кафедра физической и коллоидной химии. Санкт-Петербургская государственная
химико-фармацевтическая академия. Ул. Профессора Попова, 14, лит. А. г. Санкт-Петербург,
197376. Россия. Тел.: (812) 234-11-38. E-mail: irina@dmitriyev.ru_*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: альбумин, сорбция, потенциометрическое титрование, точка нулевого заряда, константы диссоциации.

Аннотация

Методом потенциометрического титрования исследовано влияние рН и хлорида калия на сорбцию ионов водорода и гидроксид-ионов на альбумине. Установлено, что количества сорбированных ионов H^+ и OH^- на альбумине зависит от рН и ионной силы растворов. Определена точка нулевого заряда альбумина. На основе сорбционных данных вычислено количество функциональных групп альбумина, участвующих в обмене протонами и гидроксид-ионами, рассчитаны средние константы диссоциации этих групп.

Теоретическое и экспериментальное моделирование биосинтеза лигнина

© Карманов^{1*+} Анатолий Петрович, Полешиков² Сергей Михайлович
и Кочева³ Людмила Сергеевна

¹Лаборатория 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.: (909) 120-81-63. E-mail: ark0948@ib.komisc.ru

²Кафедра высшей математики. Сыктывкарский лесной институт (филиал) федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный лесотехнический университет имени С.М. Кирова». Ул. Ленина, 39. г. Сыктывкар, 167982. Республика Коми. Россия. Тел.: (922) 581-04-57. E-mail: polism@list.ru

³Лаборатория химии минерального сырья. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт геологии Коми научного центра УрО РАН. Ул. Первомайская, 54. г. Сыктывкар, 167982. Республика Коми. Россия. Тел.: (8212) 24-54-16. E-mail: lskocheva@geo.komisc.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: лигнин, биосинтез, математическое моделирование.

Аннотация

Приведены результаты экспериментального моделирования биосинтеза *in vitro* в системе пероксидаза–пероксид водорода–кониферилловый спирт. Выявлено сложное поведение системы в ходе дегидрополимеризации монолигнола и предложена математическая модель процесса в виде системы дифференциальных уравнений. Рассмотрены особенности этих уравнений. Приведены результаты численного интегрирования, выполненного методом Рунге-Кутты-Фельберга восьмого порядка.

Антиоксидантная активность кефира

© Сагдеева Камила Ринатовна, Азизова Альфия Ильфатовна,
Мухаметзянова Лейсан Рифкатовна, Девятко Валерия Сергеевна,
Захаров Вадим Валерьевич, Щербакова⁺ Юлия Владимировна
и Ахмадуллина* Фарид Юнусовна

*Кафедра промышленной биотехнологии. Казанский национальный исследовательский
технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 231-43-28. E-mail: balakirevajulia3@mail.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: антиоксидантная активность, кефир.

Аннотация

В работе приведены данные исследований интегральной антиоксидантной активности кефира различных торговых марок методом кулонометрического титрования. Было выявлено влияние жирности кефира на данный показатель. Наибольшей антиоксидантной активностью обладал кефир, выпускаемый *ОАО «Зеленодольским молочноперерабатывающим комбинатом»*.

Метод биотестирования – альтернативный метод оценки изменения качества молока при его термообработке

© Зиганшина Гульназ Атласовна, Баданова Екатерина Григорьевна,

Гарипова Эндже Рузалевна, Азизова Альфия Ильфатовна,

Щербакова⁺ Юлия Владимировна и Ахмадуллина* Фарида Юнусовна

Кафедра промышленной биотехнологии. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: (843) 2314328. E-mail: balakirevajulia3@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

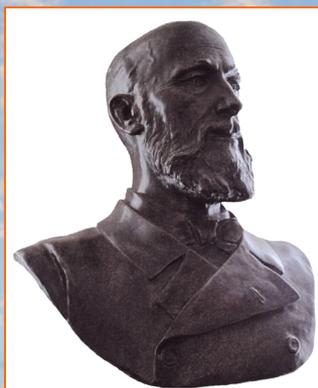
Ключевые слова: биотестирование, молоко, дрожжи *Saccharomyces cerevisiae*.

Аннотация

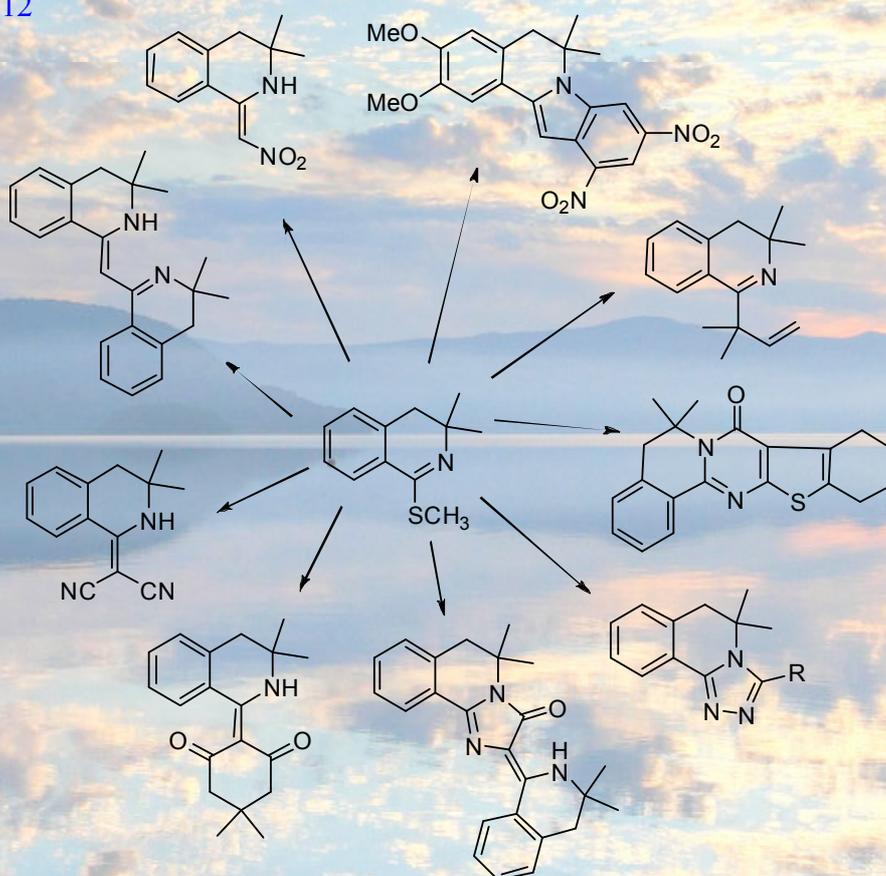
В работе предложена и проведена начальная апробация для оценки качества термообработанного молока система биоконтроля, базирующаяся на дрожжах *Saccharomyces cerevisiae*. Козье молоко, обработанное при режимах пастеризации 76 °С 5 мин (преимущественно) и 90 °С 20 с, обладало более высокой биологической активностью и рост стимулирующими свойствами по сравнению с другими изученными режимами пастеризации (65 °С, 30 мин и 95 °С, 5 мин).

Бутлеровские сообщения

№4, том 42. 2015



ISSN 2074-0212



ISSN 2074-0948

International Edition in English:
Butlerov Communications



Синтез частично гидрированных азотсодержащих гетероциклов: как протекает гетероциклизация по Риттеру?

© Шкляев*⁺ Юрий Владимирович, Вшивкова Татьяна Степановна,
Рожкова Юлия Сергеевна, Стряпунина Ольга Геннадьевна
и Смоляк Андрей Алексеевич

*Институт технической химии УрО РАН. Ул. Академика Королева, 3. г. Пермь, 614013. Россия.
Тел.: (342) 237-82-89. E-mail: yushka@newmail.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: реакция Риттера, азотсодержащие гетероциклы, спиро- σ -комплекс, стабилизация, 3,4-дигидроизохинолин, спира́н, неоспи́ран.

Аннотация

На обширном экспериментальном материале авторами предлагается концепция протекания гетероциклизации по реакции Риттера через образование спиро- σ -комплекса, различные пути стабилизации которого приводят к получению 3,4-дигидроизохинолинов, спиранов, неоспиранов и других гетероциклических систем.

Природные пектины: окислительная деструкция и взаимодействие с урацилами

© Зимин^{1*} Юрий Степанович, Борисова¹⁺ Наталья Сергеевна,
Тимербаева² Гузель Рамилевна, Гимадиева³ Альфия Раисовна
и Мустафин^{1,3} Ахат Газизьянович

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

² Кафедра общеобразовательных дисциплин. Филиал Уфимского государственного
авиационного технического университета. Микрорайон Молодежный, 5.
г. Туймазы, 452750. Республика Башкортостан. Россия.

³ Лаборатория фармакофорных циклических систем. Уфимский институт химии РАН.
Проспект Октября, 71. г. Уфа, 450054. Республика Башкортостан. Россия.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: цитрусовый пектин, яблочный пектин, окислительная деструкция, озон-кислородная смесь, комплексообразование, урацил и его производные.

Аннотация

На основании изучения кинетики окислительной деструкции цитрусового и яблочного пектинов подобраны условия для получения окисленных фракций полисахаридов с заранее заданными молекулярными массами. Спектральными методами исследовано взаимодействие пектинов и их окисленных фракций ($M_{\text{сред.}} \sim 20-25$ кДа) с урацилом и его производными (ПУ). Определены состав и константы устойчивости образующихся комплексных соединений. Установлено, что состав комплексов равен 1 : 1, то есть на одну карбоксильную группу пектина (или его окисленной фракции) приходится одна молекула ПУ. Показано, что электронодонорные заместители, помещенные в пятом положении 6-метилурацила, повышают устойчивость его комплексов с яблочным пектином и его окисленной фракцией.

Разработка метода синтеза арилалифатических диаминоспиртов. Влияние растворителя на региоселективность процесса.

© Крылов^{1*} Александр Владимирович, Борисова^{2*} Елена Яковлевна,
Иванова² Александра Игоревна, Хоанг² Дык Куанг
и Борисова² Надежда Юрьевна

¹ Кафедра физической химии им. Я.К. Сыркина; ² Кафедра органической химии им. И.Н. Назарова.
Московский государственный университет тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова.
Проспект Вернадского, 86. г. Москва, 119571. Россия. Тел.: ¹ (495) 246-05-55 (916);
² (495) 246-05-55 (908). E-mail: ¹ allylnmr@yandex.ru ; ² E-mail: seacastle@mail.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: эпоксид, раскрытие цикла, *N*-нуклеофилы, региоселективность.

Аннотация

Разработан метод синтеза арилалифатических аминоспиртов на основе реакции раскрытия цикла оксида стирола диаминами. Показано, что в условиях низкой поляризующей способности растворителя основным направлением процесса является образование α -замещенных продуктов нормального строения. Для *N,N*-диэтилэтилендиамина исследовано влияние растворителя на региоселективность реакции. Установлено, что соотношение продуктов хорошо коррелирует с величиной диэлектрической проницаемости для смешанных водно-органических растворителей и параметрами полярности E_T и акцепторным числом AN для чистых растворителей.

Бис-тиоэфиры на основе 3,4-дихлор-2(5H)-фуранонов и пропан-1,3-дитиола

© Хоанг Тхи Лиен, Курбангалиева*⁺ Альмира Рафаэловна, Ежова Анна Сергеевна,
Бердников Евгений Александрович и Чмутова* Галина Алексеевна

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

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: гетероциклы, 2(5H)-фураноны, мукохлорная кислота, пропан-1,3-дитиол, бис-тиоэфиры, диастереомеры, спектроскопия ЯМР.

Аннотация

Изучена реакционная способность 3,4-дихлор-2(5H)-фуранонов по отношению к пропан-1,3-дитиолу в условиях основного или кислотного катализа. При взаимодействии мукохлорной кислоты и ее 5-алкоксипроизводных с пропан-1,3-дитиолом в присутствии триэтиламина получены новые бис-тиоэфиры, в молекулах которых два фрагмента 2(5H)-фуранона соединены по атомам углерода C⁴ посредством –S(CH₂)₃S– цепочки. В условиях кислотного катализа реакция мукохлорной кислоты с пропан-1,3-дитиолом протекает с замещением гидроксильной группы и образованием бис-тиоэфира со связанными по атомам углерода C⁵ γ-лактонными циклами. Выявлены сходства и различия в протекании реакций 3,4-дихлор-2(5H)-фуранонов с пропан-1,3-дитиолом и этан-1,2-дитиолом в условиях основного и кислотного катализа. Строение всех новых синтезированных бис-тиоэфиров 2(5H)-фуранона доказано методами спектроскопии ИК, ЯМР ¹H и ¹³C{¹H}.

Некоторые превращения аддуктов левоглюкозенона и 1,3-диенов в подходах к иридоидам

© Биктагиров² Ильгиз Маратович, Файзуллина¹⁺ Лилия Халитовна,
Салихов¹ Шамиль Мубараквич и Валеев^{1*} Фарид Абдуллович

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Уфимский Институт химии
Российской академии наук. просп. Октября, 71. г. Уфа, 450054. Республика Башкортостан. Россия.
Факс: (347) 235-60-66. E-mail: sinymet@anrb.ru

² Федеральное государственное бюджетное учреждение Высшего профессионального
образования Башкирский государственный университет.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: левоглюкозенон, 1,6-ангидросахар, иридоиды, аддукты Дильса-Альдера, циклопентаноиды.

Аннотация

На основе аддукта Дильса-Альдера левоглюкозенона и пиперилена изучены возможности модификации циклогексанового кольца в циклопентановый путем озонолитического расщепления и внутримолекулярной альдольной циклизации.

Проведена реакция аллильного окисления аддуктов Дильса-Альдера левоглюкозенона и 1,3-диенов действием $\text{CrO}_3 \cdot 2\text{Py}$ в CH_2Cl_2 . Обнаружено, что это превращение происходит и при длительном хранении при доступе кислорода воздуха и на свету.

Получение производных фульвокислот и исследование их комплексообразования с ионами меди

© Бурова* Екатерина Владимировна, Потапова*⁺ Ирина Анатольевна,
Пурьгин Петр Петрович и Вишняков Василий Валерьевич

*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: potap59.59@mail.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: фульвокислоты, гуминовые вещества, бурый уголь, оксимы фульвокислот, гидроксиметильное производное фульвокислот, комплексообразование, ионы меди.

Аннотация

Разработан новый метод выделения фульвокислот из бурого угля. Описаны и разработаны методы синтеза производных фульвокислот: синтезированы оксим и гидроксиметильное производные фульвокислот. Впервые исследованы реакции комплексообразования фульвокислот и их производных с ионами меди и показано, что равновесие сорбции устанавливается за 110 минут, а наибольшей сорбируемостью по отношению к ионам меди обладает оксим фульвокислоты.

Синтез 2-алкокси-4,6-ди(2-фенилвинил) пиримидинов, содержащих терминальные ТТФ-фрагменты

© Комиссарова¹⁺ Екатерина Андреевна, Лунегов² Игорь Владимирович,
Майорова⁴ Ольга Александровна, Шкляева^{1,3} Елена Викторовна
и Абашев^{1,4*+} Георгий Георгиевич

¹ Кафедра органической химии; ² Кафедра радиоэлектроники и защиты информации; ³ Лаборатория органических полупроводников. Естественнонаучный институт. Пермский государственный национальный исследовательский университет. Ул. Букирева, 15.

г. Пермь, 614990. Россия. Тел.: ¹⁾ (342) 239-66-12; ²⁾ (342) 239-62-31; ³⁾ (342) 239-64-81.
E-mail: ¹⁾ seshurov@yandex.ru; ²⁾ lunegov@psu.ru; ³⁾ gabashev@psu.ru

⁴ Лаборатория синтеза активных реагентов. Институт технической химии, УрО РАН.
Ул. Ак. Королева, 3. г. Пермь, 614990. Россия Тел.: (342) 237-82-89. E-mail: gabashev@psu.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: тетрагидрофульвален, Y-образный пиримидин, электрохимическое окисление, мостиковые структуры.

Аннотация

Синтезированы новые бананобразные 2-алкокси-4,6-дизамещенные пиримидины, содержащие два тетрагидрофульваленовых фрагмента, связанных с электроноакцепторным пиримидиновым ядром с помощью S-CH₂-C₆H₄-CH=CH-мостиков. Исследованы фотовольтаические свойства полученных соединений.

Синтез ферроценсодержащих 4,6-дизамещенных 2-(1*H*-пиррол-1-ил) пиримидинов

© Антуфьева¹⁺ Александра Дмитриевна, Шаврина² Татьяна Владимировна,
Шкляева^{2,3} Елена Викторовна и Абашев^{1,2*+} Георгий Георгиевич

¹ Лаборатория синтеза активных реагентов. Институт технической химии, УрО РАН.

Ул. Ак. Королева, 3. г. Пермь, 614990. Россия. Тел.: (342) 237-82-89. E-mail: gabashev@psu.ru

² Кафедра органической химии. Пермский государственный национальный исследовательский университет. Ул. Букирева, 15. г. Пермь, 614990. Россия.

Тел.: (342) 239-66-12. E-mail: seshurov@yandex.ru

³ Лаборатория органических полупроводников. Естественнонаучный институт. Пермский государственный национальный исследовательский университет. Ул. Генкеля, 4.
г. Пермь, 614990. Россия. Тел.: (342) 239-64-81. E-mail: gabashev@psu.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: ферроцен, 2-аминопиримидин, 2-(4-пиррол-1-ил)пиримидин, электрохимическое окисление, мостиковые структуры.

Аннотация

Существует несколько основных областей использования ферроценсодержащих соединений в химии материалов: ферроценсодержащие хемосенсоры, электропроводящие, электро- и фотохромные соединения, ферроценсодержащие комплексы с металлами, ферроценсодержащие жидкокристаллические соединения, полимерные соединения, включающие ферроцен, поверхности, химически модифицированные соединениями, включающими ферроцен. В состав таких соединений чаще всего входят гетероциклические соединения и, в частности, азины – пиридины, пиримидины, хинолины, триазины. В представленной публикации описан синтез и электрохимические свойства новых замещенных пиримидинов, в которых центральное пиримидиновое ядро окружено несколькими электронодонорными циклическими фрагментами, один из которых – ферроцен.

Получение 5-[4-(карбазол-9-ил)фенил]тиофен-2-карбальдегида и его конденсация с производным малоновой кислоты. Оптические свойства и электрохимическая полимеризация.

© Бакиев⁴⁺ Артур Наилевич, Горбунов⁴ Алексей Аркадьевич, Лунегов² Игорь Владимирович, Шкляева^{1,3} Елена Викторовна и Абашев Георгий Георгиевич^{1,4*+}

¹ Кафедра органической химии; ² Кафедра радиоэлектроники и защиты информации. Пермский государственный национальный исследовательский университет. Ул. Букирева, 15. г. Пермь, 614990. Россия. Тел.: ¹⁾ (342) 239-66-12; ²⁾ (342) 239-62-31. E-mail: ¹⁾ seshurov@yandex.ru; ²⁾ lunegov@psu.ru

³ Лаборатория органических полупроводников. Естественнонаучный институт. Пермский государственный национальный исследовательский университет. Ул. Генкеля, 4. г. Пермь, 614990. Россия. Тел.: (342) 239-64-81. E-mail: gabashev@psu.ru

⁴ Лаборатория синтеза активных реагентов. Институт технической химии, УрО РАН. Ул. Ак. Королева, 3. г. Пермь, 614990. Россия. Тел.: (342) 237-82-89. E-mail: gabashev@psu.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: карбазол, хромофоры, оптические свойства, электрохимическое окисление.

Аннотация

Синтезирована серия новых карбазол-содержащих хромофоров со структурой D-π-A, в качестве электроноакцепторного фрагмента использовались фрагменты альдегида и этилового эфира 2-цианоакриловой кислоты. 5-[4-(Карбазол-9-ил)фенил]тиофен-2-карбальдегид (**1**) был получен с помощью реакции кросс-сочетания Сузуки, дальнейшая модификация осуществлялась по реакции Кнёвенагеля. Для полученных соединений получены спектры поглощения и флуоресценции, на основании значений красной границы области поглощения рассчитано значение оптической ширины запрещенной зоны, а также исследовано электрохимическое поведение, показано, что альдегид **1** и этил-3-{5-[4(9H-карбазол-9-ил)фенил]тиофен-2-ил}-2-цианопроп-2-еноат способны к электрохимической полимеризации.

Синтез новых халконов, включающих этилендиокситиофеновый фрагмент

© Игнашевич¹ Анна Николаевна, Селиванова³⁺ Дарья Геннадьевна,
Горбунов³ Алексей Аркадьевич, Шкляева^{1,2} Елена Викторовна
и Абашев^{1,3*} Георгий Георгиевич

¹ Кафедра органической химии. Химический факультет. Пермский государственный национальный
исследовательский университет. Ул. Букирева, 15. г. Пермь, 614990. Россия.

Тел.: (342) 239-66-12. E-mail: seshurov@yandex.ru

² Лаборатория органических полупроводников. Естественнонаучный институт. Пермский
государственный национальный исследовательский университет. Ул. Генкеля, 4. г. Пермь, 614990.

Россия. Тел.: (342) 239-44-81. E-mail: gabashev@psu.ru

³ Лаборатория синтеза активных реагентов. Институт технической химии, УрО РАН.

Ул. Академика Королева, 3. г. Пермь, 614013. Россия.

Тел.: (342) 237-82-89. E-mail: gabashev@psu.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 3,4-этилендиокситиофен, халкон, π -сопряженные системы, кросс-сочетание.

Аннотация

С целью получения электропроводящих полимерных пленок синтезирован ряд халконов, включающих 3,4-этилендиокситиофеновый и тиофеновый фрагменты. Исследованы оптические свойства полученных соединений. Установлено, увеличение цепи сопряжения приводит к батохромному сдвигу максимумов поглощения по сравнению со значениями максимумов поглощения исходных соединений. На основе значения длины волны красной границы области поглощения (λ_{onset}) рассчитаны значения ширины запрещенной зоны (E_g^{opt}). Для 2,5-ди{4-[1-оксо-3-(тиофен-2-ил)-проп-2-енил]фенил}-3,4-этилендиокситиофена данное значение составило 2.58 эВ, для 5,5''-ди[3-оксо-3-(тиофен-2-ил)-проп-1-енил]-ter(EDOT)₃ – 1.93 эВ.

Синтетические возможности сульфенилхлоридной группы в β -дикетонатных хелатах

© Свистунова⁺ Ирина Валентиновна и Шапкин Николай Павлович*

Кафедра общей, неорганической и элементорганической химии. Школа естественных наук.
Дальневосточный федеральный университет. Ул. Октябрьская, 27. г. Владивосток, 69000, Россия.
Тел.: (8423) 245-76-69. E-mail: svistunova.iv@dvfu.ru; irasvist@gmail.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: сульфенилхлориды, β -дикетонаты, непредельные соединения, кремнийорганические соединения, СН-кислоты, пиразолы, полиядерные дендримеры.

Аннотация

Получены сульфенилхлоридные производные β -дикетонатных комплексов и исследованы реакции сульфенилхлоридной группы. Изучены реакции присоединения и замещения для сульфенилхлоридов β -дикетонатов, показано, что протекают взаимодействия аналогичные взаимодействиям SCl-группы в органических соединениях. Это дает возможность синтеза широкого круга α -тиозамещенных дикетонатов. Сульфенилхлориды ацетилацетоната хрома(III) использованы для получения дендримеров. Через сульфенилхлоридный комплекс дифторида бора синтезированы новые пиразолы и дикетоны.

Тематический раздел: Препаративные исследования.
Подраздел: Органическая химия.

Полная исследовательская публикация

Регистрационный код публикации: 15-42-4-81

Статья публикуется по материалам доклада на Международном научном форуме "Бутлеровское наследие-2015". <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
Поступила в редакцию 06 апреля 2015 г. УДК 547.655.1+547.599.2.

Тематическое направление: Алкилирование фенолов β -пиненом с использованием фенолята и изопропилата алюминия. Часть 4.

Алкилирование резорцина β -пиненом в присутствии алюминий содержащих катализаторов

© Шумова Ольга Александровна, Чукичева*⁺ Ирина Юрьевна,
Колегова Татьяна Алексеевна и Кучин Александр Васильевич

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки. Институт химии Коми научного центра Уральского отделения РАН. Ул. Первомайская, 48. г. Сыктывкар, 167982.
Россия. Тел/факс: (8212) 21-84-77. E-mail: chukicheva-iy@chemi.komisc.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: фенол, резорцин, β -пинен, алкилирование, фенолят алюминия, изопропилат алюминия, терпенофенолы.

Аннотация

Изучено алкилирование резорцина β -пиненом в присутствии $(\text{PhO})_3\text{Al}$ и $(i\text{-PrO})_3\text{Al}$ при 120 и 160 °С. Установлено, что на алкилирование резорцина β -пиненом оказывают влияние структура карбокатиона, образующегося из β -пинена. Использование эквимольных количеств исходных компонентов (или избытка резорцина) способствуют образованию эфиров хроманового типа, а избытка β -пинена – продуктов *O*- и *C*-алкилирования с борнильным заместителем.

Эффективные пути синтеза пирроло[3,2,1-*ij*]хинолин-1,2-диона и продуктов его окислительных трансформаций

© Медведева*[†] Светлана Михайловна и Шихалиев Хидмет Сафарович

Кафедра органической химии. Химический факультет. ФГБОУ ВПО «Воронежский государственный университет». Университетская пл., 1. г. Воронеж, 394006. Россия.

Тел.: (473) 220-84-33. E-mail: SMMedvedeva@rambler.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 1,2,3,4-тетрагидрохинолин, оксалилхлорид, реакция Штолле, пирроло[3,2,1-*ij*]хинолин-1,2-дион, окисление, [1,3]оксазино[5,4,3-*ij*]хинолин-1,3-дион, [1,4]оксазино[2,3,4-*ij*]хинолин-2,3-дион.

Аннотация

Разработан эффективный путь получения 5,6-дигидро-4*H*-пирроло[3,2,1-*ij*]хинолин-1,2-диона. При постепенном добавлении раствора 1,2,3,4-тетрагидрохинолина к раствору оксалилхлорида в толуоле и последующим кипячением в течение 1-1.5 ч., наряду с простым ацилированием, протекает циклизация, по типу реакции Штолле, приводящая к смеси 5,6-дигидро-4*H*-пирроло[3,2,1-*ij*]хинолин-1,2-диона и 1,1'-(1,2-диоксоэтан-1,2-диил)бис-1,2,3,4-тетрагидрохинолина в соотношении 3 : 1. Полученная смесь была обработана избытком 20% раствора NaOH, нерастворившийся побочный продукт был отделен, при подкислении раствора получен основной продукт. Найдены оптимальные условия для селективного окисления полученного пирроло[3,2,1-*ij*]хинолин-1,2-диона: при действии на последний *мета*-хлорнадбензойной кислоты образуется 6,7-дигидро-1*H*,5*H*-[1,3]оксазино[5,4,3-*ij*]хинолин-1,3-дион, а при действии пероксидисульфата натрия в серной кислоте получен его изомер – 6,7-дигидро-1*H*,5*H*-[1,4]оксазино[2,3,4-*ij*]хинолин-2,3-дион.

Синтез 6-тиозамещенных 3,5-динитро-1,2,3,4-тетрагидропиридинов

© Сурова¹ Ирина Игоревна, Иванова¹ Евгения Владимировна,
Блохин¹ Игорь Васильевич, Шахкельдян¹ Ирина Владимировна,
Атрощенко^{1*} Юрий Михайлович, Кобраков² Константин Иванович,
Кузнецов^{2*+} Дмитрий Николаевич и Федянин³ Иван Владимирович

¹ Кафедра химии. Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого.
Пр. Ленина, 125. г. Тула, 300026. Россия. Тел.: (4872) 35-78-08. E-mail: reaktiv@tspu.tula.ru

² Кафедра органической химии. Московский государственный университет дизайна и технологии.
Ул. Садовническая, 33. г. Москва, 117997. Россия. Тел.: (495) 955-35-58. E-mail: ocdd@mail.ru

³ Институт элементорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН.
Ул. Вавилова, 28, В-334. г. Москва, 119991. Россия. Тел.: (499) 135-92-14. E-mail: octy@xrlab.ineos.ac.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 3,5-динитро-1,2,3,4-тетрагидропиридины, 2-хлор-3,5-динитропиридин, нуклеофильное замещение, селективное гидрирование, *o*-тиокрезол, 1*H*-бензимидазол-2-тиол.

Аннотация

Взаимодействием 2-тиозамещенных 3,5-динитропиридинов с NaBH₄ и ортофосфорной кислотой синтезированы соответствующие 3,5-динитро-1,2,3,4-тетрагидропиридины. Методами ИК- и ЯМР-спектроскопии, а также данными РСА доказано строение полученных соединений.

Высокотемпературные превращения циклических ароматических сульфидов в присутствии кислот Льюиса

© Корнеева¹⁺ Любовь Александровна, Неделькин^{2*} Владимир Иванович
и Зачернюк² Борис Александрович

¹ Кафедра химии и электрохимической энергетики. Национальный исследовательский университет «МЭИ». Ул. Красноказарменная, 14. г. Москва, 111250. Россия.

Тел.: (495) 362-70-31. E-mail: korneevala@bk.ru

² Кафедра неорганической и аналитической химии им. Клячко Ю.А. Московский государственный университет технологий и управления им. К.Г. Разумовского.

Ул. Земляной Вал, 73. г. Москва, 109004. Россия. Тел.: (499) 236-72-95. E-mail :vinedelkin@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: циклические ароматические сульфиды, хлорид алюминия, тиантрен, феноксатиин, дибензотиофен, полиариленсульфиды, полисульфидирование, полимеризация циклов.

Аннотация

Исследовано высокотемпературное взаимодействие циклических ароматических сульфидов (тиантрена, феноксатиина и дибензотиофена) с $AlCl_3$. Установлено, что реакция сопровождается разрывом сульфидных связей и образованием структур полиариленсульфидного типа. Показано, что в отличие от дибензотиофена и феноксатиина в случае тиантрена возможен разрыв обеих C–S связей в цикле, приводящий к выделению бензола с образованием политиантреновых структур циклоцепного строения.

Взаимодействие гидрата 1-герматранола с *D*-винной кислотой в воде

© Барышок^{1*} Виктор Петрович и Ле² Ньят Тхюи Занг

¹ Кафедра химической технологии. Иркутский национальный исследовательский технический университет. Ул. Лермонтова, 83. г. Иркутск, 664074. Россия.

Тел.: (3952) 40-55-13. E-mail: baryvik@yandex.ru

² *Varia-Vung Tau University, Vung-Tau, Vietnam. 80 Trương Công Định, Phường 3, TP. Vũng Tàu*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: гидрат 1-герматранола, *D*-винная кислота, триэтаноламин, бис(μ-тартрато)ди(гидроксо)германат(IV) триэтаноламмония, бис(μ-тартрато)ди-(гидроксо)германат(IV) пиридиния.

Аннотация

При взаимодействии гидрата 1-герматранола, $N(CH_2CH_2O)_3GeOH \cdot H_2O$, с *D*-винной кислотой в водной среде герматрановый цикл разрушается и образуется бис(μ-тартрато)ди(гидроксо)германат(IV) триэтаноламмония. К этому же биядерному комплексу пентакоординированного германия приводит реакция бис(μ-тартрато)ди(гидроксо)дигерманиевой кислоты с триэтаноломином. Молекулы пиридина в бис(μ-тартрато)ди(гидроксо)германате(IV) пиридиния легко замещаются триэтаноломином, образуя также бис(μ-тартрато)ди(гидроксо)германат(IV) триэтаноламмония.

Синтез диадамантилсодержащих димочевин – нового класса мишень-ориентированных ингибиторов растворимой эпоксигидролазы

© Бурмистров⁺ Владимир Владимирович и Бутов* Геннадий Михайлович

Волжский политехнический институт (филиал) Волгоградского государственного технического университета. Ул. Энгельса, 42а. г. Волжский, 404121. Волгоградская область. Россия.

Тел.: (8443) 22-19-59 E-mail: butov@volpi.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: изоцианат, мочевины, адамантан, адамантил, растворимая эпоксигидролаза.

Аннотация

Синтезирована серия адамантилсодержащих 1,3-дизамещенных димочевин содержащих различные спейсеры между мочевиной группой и адамантильным радикалом. Полученные соединения показывают высокую ингибирующую активность в отношении растворимой эпоксигидролазы человека. Реакции проводились в мягких условиях с высокими выходами.

Этоксикарбонил(ацетил)циклогексаноны в реакциях с С- и N-аминотриазолами

© Василькова⁺ Наталья Олеговна, Зараева Надежда Владимировна,
Сорокин* Виталий Викторович и Кривенько Адель Павловна

*Кафедра органической и биоорганической химии. Саратовский государственный университет
им. Н.Г. Чернышевского. Ул. Астраханская, 83. г. Саратов, 410012. Россия. Тел.: (8452) 27-14-91.
Саратовский государственный медицинский университет им. В.И. Разумовского.*

E-mail: vasilkovano@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: С-амино-1,2,4-триазол, N-амино-1,2,4-триазол, циклоконденсация, оксоциклогександикарбоксилаты, диацетилциклогексаноны, триазолохиназолины, N-триазолилиминоциклогексаны, спектры.

Аннотация

Осуществлены реакции поликарбонильных соединений – оксоциклогександикарбоксилатов, диацетилциклогексанонов с С- и N-амино-1,2,4-триазолами. При этом в зависимости от строения реагентов получены функциональнозамещенные триазолохиназолины либо N-триазолилиминоциклогексаны, строение которых установлено с помощью спектральных методов.

Ариламины с фрагментом 1-азаксантена

© **Горохов Валерий Юрьевич**

Кафедра общей химии. ФГБОУ ВПО «Пермская ГСХА» им. академика Д.Н. Прянишникова.

Ул. Петропавловская, 23. г. Пермь, 614000. Пермский край. Россия.

Тел.: (3422) 12-95-68. E-mail: gorokhov_v.yu@mail.ru

Ключевые слова: ариламины, *N*-бензилиден-4-метоксианилин, 5*H*-хромено[2,3-*b*]пиридин-5-ол (1-азаксантгидрол), 4-замещенные-*N*-(5*H*-хромено[2,3-*b*]пиридин-5-ил)анилины, *N*-бензилиден-2-(5*H*-хромено[2,3-*b*]пиридин-5-ил)-4-метоксианилин.

Аннотация

Впервые осуществлен синтез новых 4-замещенных-*N*-(5*H*-хромено[2,3-*b*]пиридин-5-ил)анилинов взаимодействием 5*H*-хромено[2,3-*b*]пиридин-5-ола с ариламинами. Получен новый *орто*-продукт *N*-бензилиден-2-(5*H*-хромено[2,3-*b*]пиридин-5-ил)-4-метоксианилин взаимодействием 5*H*-хромено[2,3-*b*]пиридин-5-ола с *N*-бензилиден-4-метоксианилином.

Краткое сообщение

Регистрационный код публикации: 15-42-4-116

Статья публикуется по материалам доклада на Международном научном форуме "Бутлеровское наследие-2015". <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 547.574. Поступила в редакцию 8 апреля 2015 г.

Тематический раздел: Препаративные исследования.

Подраздел: Органическая химия.

Селективность реакции халконов с производными анилина

© **Быков Ярослав Валерьянович, Пак Викентий Данилович**

и Яганова Надежда Николаевна

Кафедра общей химии. ФГБОУ ВПО «Пермская ГСХА» им. академика Д.Н. Прянишникова.

Ул. Петропавловская, 23. г. Пермь, 614000. Пермский край. Россия.

Тел.: (3422) 12-95-68. E-mail: BykovJaV@mail.ru

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: халконы, бензилиденацетофеноны, основания Шиффа, анилы халкона, *N*-(1,3-дифенилаллилиден)анилины β-ариламинокетоны, 1,3-дифенил-3-(фениламино)пропан-1-оны.

Аннотация

Взаимодействие халконов с 4-замещенными анилинами в безводном этаноле в присутствии гидрохлорида соответствующего амина приводит к образованию продуктов координации по этиленовой связи или карбонильной группе. Образование синтетически труднодоступных *N*-(1,3-дифенилаллилиден)анилинов зависит от характера заместителей в халконе и ариламине.

Синтез порошков сложных оксидов переходных металлов в водных средах

© Иваненко*⁺ Владимир Иванович, Владимирова Сетлана Васильевна,
Аксенова Светлана Владимировна, Якубович Екатерина Николаевна
и Локшин Эфроим Пинхусович

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева Кольского научного центра Российской Академии наук (ИХТРЭМС КНЦ РАН). Академгородок, 26а. г. Апатиты, Мурманская область, 184209. Россия. Тел.: (8155) 57-92-40. E-mail: ivanenko@chemy.kolasc.net.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: сложные оксиды переходных металлов, титан(IV), ниобий(V), тантал(V), комплексообразование, ионный обмен, синтез.

Аннотация

На основе закономерностей комплексообразования и ионного обмена в водных средах разработаны общие подходы и принципы к направленному синтезу материалов в виде монофазных наноразмерных порошков метаниобатов(метатанталатов) щелочных металлов, а также метатитанатов двухвалентных металлов (стронция, бария и свинца). Найдены способы получения прекурсоров, предотвращающих развитие процессов оляции и оксоляции, изучено влияние концентраций реагентов и температуры на состав образующихся твердых фаз. В основу разработки подходов к формированию твердых фаз заданного состава положено изучение процессов катионного замещения с использованием неорганических прекурсоров. Определены значения констант процесса замещения катионов щелочного металла на ионы водорода в гидратированных ниобатах(танталатах) и титанатах. Сродство катиона щелочного металла к гидратированной матрице титана(IV), ниобия(V) и тантала(V) зависит от степени гидратации катиона щелочного металла. Определены условия существования в водных суспензиях твердых фаз с отношением $M:Nb(Ta) = 1$ и $M:Ti = 2$ ($M - Li^+, Na^+, K^+$), соответствующих составу гидратированных метаниобатов, мататанталатов и метатитанатов щелочных металлов. При термической обработке этих прекурсоров образуются монофазные кристаллические наноразмерные или ультрадисперсные порошки метаниобатов, мататанталатов и метатитанатов щелочных металлов стехиометрического состава. С использованием в качестве прекурсоров гидратированных титанатов однозарядных катионов с $M:Ti = 2$ ($M-NH_4^+, Li^+, Na^+, K^+$) в водных суспензиях изучен процесс формирования монофазных кристаллических наноразмерных и ультрадисперсных порошков метатитанатов бария, стронция и свинца стехиометрического состава. Разработан эффективный способ синтеза, обеспечивающий получение монофазных наноразмерных порошков сложных оксидов переходных металлов стехиометрического состава и твердых растворов на их основе.

Амфифильные тиакаликсарены в супрамолекулярных системах

© Стойков*⁺ Иван Иванович, Андрейко Елена Анатольевна

и Падня Павел Леонидович

Кафедра органической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Россия. Тел.: (843) 233-74-62.

E-mail: ivan.stoikov@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: тиакаликсарены, супрамолекулярная химия, амфифильные соединения, самосборка.

Аннотация

Установлен ряд закономерностей образования супрамолекулярных ассоциатов на основе водорастворимых *n*-трет-бутилтиакаликс[4]аренов с органическими кислотами. Было реализовано два подхода по созданию супрамолекулярных структур за счет водородных связей: самоассоциация амфифильных *n*-трет-бутилтиакаликс[4]аренов, агрегация изученных макроциклов с органическими кислотами. Установлено, что увеличение размера заместителей при аммонийном атоме азота макроциклов понижает значение минимальной концентрации, при которой в системе образуются самоассоциаты. Методом динамического светорассеяния показано, что в большинстве случаев самоассоциаты представляют собой сжатые эллипсоиды. Методом УФ-спектроскопии установлено, что *n*-трет-бутилтиакаликс[4]арены, содержащие метильные и этильные заместители при аммонийном атоме азота, сложноэфирные и фталимидные фрагменты с дополнительными центрами координации субстратов, взаимодействуют с гидроксикислотами.

Исследование водорастворимых соединений на основе *n*-трет-бутилтиакаликс[4]арена методом ЯМР диффузометрии

© Архипова^{1,2} Елизавета Анатольевна, Магомедова^{1,2} Лилия Бутаевна,
Конов³ Андрей Борисович, Падня² Павел Леонидович,
Хайрутдинов^{1,2,*+} Булат Имамутдинович, Стойков² Иван Иванович
и Зуев^{1*} Юрий Федорович

¹ Казанский институт биохимии и биофизики. Ул. Лобачевского, 2/31. г. Казань, 420111.
Республика Татарстан. Россия.

² Казанский федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика
Татарстан. Россия.

³ Казанский физико-технический институт. Ул. Сибирский тракт, д. 10/7. Казань, 420029.
Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-90-30. E-mail: khayrutdinov@yahoo.com

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: каликсарены, конформация, ЯМР, самодиффузия, мицеллообразование.

Аннотация

Методом ЯМР-самодиффузии исследовано мицеллообразование 5,11,17,23-тетра-трет-бутил-25,26,27,28-тетраakis[(*N*-(3',3'-диметил-3'-{(этоксикарбонилметил)амидокарбонилметил}аммонийпропил)карбамоилметокси)]-2,8,14,20-тиакаликс[4]арена тетрабромиды в конфигурациях конус и 1,3-альтернат. Предложено феноменологическое объяснение полученных концентрационных зависимостей коэффициента самодиффузии (КСД) этих соединений. Показано, что тиаксикаликсарен в конфигурации конус характеризуется ярко выраженным переходом мономер-мицелла, характерным для классических мицеллообразующих поверхностно-активных веществ (ПАВ). Для данного соединения определена критическая концентрация мицеллообразования (ККМ). Для тиаксикаликсарена в конфигурации «альтернат» с ростом его концентрации отсутствует мицеллярный переход и наблюдается последовательное увеличение степени агрегации.

Электрохимическое окисление металлоорганических дипалладиевых циклов с дифосфонатными мостиковыми лигандами

© Грязнова Татьяна Васильевна и Будникова*⁺ Юлия Германовна

Лаборатория электрохимического синтеза. Институт органической и физической химии имени А.Е. Арбузова Казанского научного центра Российской академии наук. Ул. А.Е. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Факс: (8432) 75-22-53. E-mail: yulia@iopc.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: комплекс палладия, окисление, электролиз.

Аннотация

Изучены редокс-свойства новых дипалладиевых циклов с дифосфонатными мостиками, полученных из ацетатных аналогов. Установлено, что электрохимическое окисление ряда дипалладиевых циклов $[PdL(EtO)_2P(O)]_2$, L = рһру (2-phenylpyridine), bhq (бензо[h]хинолин), рһрз (1-фенилпиразол) в ацетонитриле приводит к образованию соответствующих арилфосфонатов при потенциале -1.1 – 1.4 В отн. Fc/Fc⁺. Установлено, что требуется 8Ф электричества для достижения 100% конверсии комплекса в продукт. Этот способ окисления можно применить в синтезе новых арилфосфонатов из различных аренов в лигандо-направленной реакции ароматического C-H фосфонирования.

Синтез и свойства кристаллов CL-20 с включениями дисперсного алюминия

© Теплов⁺* Георгий Владимирович, Попок Владимир Николаевич,
Киреева Алена Валерьевна и Бычин Николай Валерьевич

Акционерное общество «Федеральный научно-производственный центр «Алтай».

ул. Социалистическая, 1. г. Бийск, 659322. Алтайский край. Россия.

Тел.: (3854) 30-19-37. E-mail: teplov_georgii@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: циклический нитрамин, CL-20, дисперсный алюминий, комплекс с включениями.

Аннотация

В результате работы получены кристаллы гексанитрогексаазаизовюрцитана с включениями дисперсного алюминия. Изучена их поверхность и микроструктура с помощью оптической и электронной микроскопии, определены термоаналитические параметры. Исследована чувствительность образцов к механическим воздействиям, а также удельное электрическое сопротивление и минимальная энергия зажигания кристаллов.

Удобный синтез арилзамещенных 3-(пиразин-2-ил)- и 3-(пиримидин-2-ил)-1,2,4-триазинов

© Копчук^{1,2,*+} Дмитрий Сергеевич, Хасанов² Альберт Фаридович,
Никонов² Игорь Леонидович, Криночкин² Алексей Петрович, Сантра² Согата,
Ковалев² Игорь Сергеевич, Зырянов^{1,2} Григорий Васильевич, Тания² Ольга Сергеевна,
Павлюк² Дмитрий Евгеньевич, Русинов^{1,2} Владимир Леонидович
и Чупахин^{1,2} Олег Николаевич

¹ Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН.
Ул. Ковалевской, 22/Академическая, 20. г. Екатеринбург, 620990. Россия.
Тел./факс: (343) 369-30-58. E-mail: dkorchuk@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: гетероциклизация, 1,2,4-триазин, цианодиазины, иминоэфиры, амидразоны.

Аннотация

Разработаны два эффективных метода получения арилзамещенных 3-(пиразин-2-ил)- и 3-(пиримидин-2-ил)-1,2,4-триазинов в результате гетероциклизации соответствующих амидразонов и 1,2-дионов (предложен оптимизированный метод по сравнению с ранее опубликованными вариантами за счет облегчения процедуры получения амидразонов на основе соответствующих нитрилов вследствие отсутствия необходимости их дополнительной очистки), а также в результате конденсации полученных *in situ* иминоэфиров диазинов с гидразонами изонитрозоацетофенонов.

Влияние смесей амфифильных соединений и ферментных препаратов на смолистость волокнистых полуфабрикатов

© Копнина⁺ Регина Анатольевна, Демьянцева* Елена Юрьевна,
Карпов Илья Алексеевич и Андранович Ольга Сергеевна

Кафедра физической и коллоидной химии. Институт технологии. Санкт-Петербургский государственный технологический университет растительных полимеров. Ул. Ивана Черных, 4. г. Санкт-Петербург, 198095. Россия. Тел.: (904) 638-37-57. E-mail: zz1234567@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

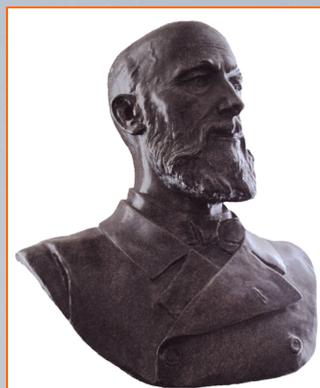
Ключевые слова: неионогенные поверхностно-активные вещества, ферменты липазы, волокнистые полуфабрикаты, обессмоливание, целлюлоза.

Аннотация

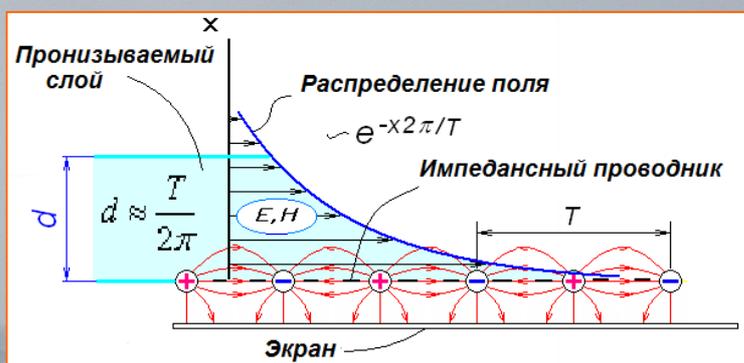
Представлены результаты исследования влияния неионогенных ПАВ (нПАВ), коммерческих ферментов липазы и их смесей на содержание смолистых в различных волокнистых полуфабрикатах. Подобраны оптимальные обессмоливающие композиции, изучены их некоторые коллоидно-химические характеристики и приведены результаты обессмоливающего действия выбранных препаратов. Установлено, что среди исследованных индивидуальных нПАВ большей поверхностной активностью обладает синтанол ДС-10. Предложены смеси исследуемых веществ, обладающие эффектом синергизма. Определено их влияние на остаточную смолистость различных волокнистых полуфабрикатов.

Бутлеровские сообщения

№5, том 42. 2015



ISSN 2074-0212



ISSN 2074-0948

International Edition in English:
Butlerov Communications



Применение чувствительных элементов на спиральных замедляющих системах для контроля процессов в жидких средах

© Астахов^{1+*} Михаил Васильевич, Елизаров^{2*} Андрей Альбертович
и Родин¹ Алексей Олегович*

¹ Кафедра физической химии. Институт новых материалов и нанотехнологий. Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» НИТУ "МИСиС".
Ленинский проспект, 4. г. Москва, 119991. Российская Федерация.
Тел.: (495) 236-87-38. E-mail: astahov@misis.ru

² Кафедра электронной инженерии. Московский институт электроники
и математики Национального исследовательского университета "Высшая школа экономики"
(МИЭМ НИУ ВШЭ) Российская Федерация. E-mail: yelizarov@list.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: электромагнитное излучение, замедляющие системы, мицеллы, коллоидные системы.

Аннотация

В настоящее время электронные приборы и устройства, основанные на использовании замедляющих систем и возбуждаемых в них электромагнитных волн, получили широкое распространение в микроволновой электронике, химии, биологии и медицине в качестве чувствительных элементов для исследования процессов, протекающих в жидкостях.

Рассмотрены особенности контроля процессов образования твердых фаз диэтилдитиокарбамат цинка и меди в растворах электролитов, образование и растворение кристаллов сегнетовой соли и сернокислого никеля из пересыщенных растворов, мицеллярных структур на примере олеата натрия с помощью чувствительных элементов на основе спиральных замедляющих систем.

Влияние высокоразбавленных водных растворов и слабых физических полей на поведение водных организмов

© Лебедева^{1*} Нина Евгеньевна, Киселева²⁺ Юлия Васильевна,
Сергеева² Светлана Юрьевна, Рыжкин^{3,4} Сергей Александрович,
Рыжкина^{2*+} Ирина Сергеевна и Коновалов^{2*} Александр Иванович

¹ Биологический факультет. Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова.
Ул. Ленинские горы, д.1, стр. 12. г. Москва, 119991. Россия.
Тел.: (495) 939-27-76. E-mail: lebedeva1502@yandex.ru.

² Лаборатория физико-химии супрамолекулярных систем. Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, КазНЦ РАН. Ул. Ак. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан.
Россия. Тел.: (843) 273-18-72. E-mail: ryzhkina@iopc.ru, kiseleva@iopc.ru.

³ Кафедра общей гигиены с курсом радиационной гигиены. Казанский государственный медицинский университет Минздрава России. Ул. Бутлерова, 49. г. Казань, 420012. Республика Татарстан, Россия.
Тел.: (843) 236-06-13. E-mail: rsa777@inbox.ru.

⁴ Кафедра общей физики. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 16а.
г. Казань, Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 292-76-33.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: высокоразбавленные водные растворы, слабые физические поля, фенозан калия, водная инфузория спиростома, поведенческая активность, наноассоциаты, самоорганизация, физико-химические свойства.

Аннотация

В работе обсуждаются экспериментальные результаты по влиянию на поведенческую активность водных организмов высокоразбавленных растворов синтетического препарата широкого спектра действия фенозана калия (ФК), обусловленную самоорганизацией растворов. Установлено, что формирование в высокоразбавленных растворах ФК наноассоциатов обуславливает возникновение немонотонных концентрационных зависимостей физико-химических свойств растворов и коррелирует с их биоэффектами. Изучено воздействие слабых физических полей – природного радиоактивного фона и некоторых видов электромагнитных полей и ионизирующего излучения на физиологический статус водных организмов и физико-химические параметры воды.

Влияние воды, активированной в плазменно-растворных системах, на объекты растительного происхождения

© Наумова¹⁺ Ирина Константиновна, Субботкина^{1*} Ирина Николаевна, Силкин^{2*} Сергей Владимирович и Шаповалова¹ Татьяна Александровна

¹ Кафедра химии. Ивановская государственная сельскохозяйственная академия имени академика Д. К. Беляева. Ул. Советская, 45. г. Иваново, 153012. Россия. E-mail: irinauma@mail.ru

² Кафедра агрохимия и земледелие. Ивановская государственная сельскохозяйственная академия имени академика Д. К. Беляева. Ул. Советская, 45. г. Иваново, 153012. Россия. E-mail: ssv-bunker@rambler.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: плазменно-растворная обработка, торцевой разряд, ГРА, посевной картофель, проращивание семян.

Аннотация

В ходе проведенных исследований обнаружено, что газоразрядная обработка воды, приводящая к ее обеззараживанию, удалению из нее органических примесей и ионов тяжелых металлов, интенсифицирует начальные этапы развития растений (всхожесть, развитие корневой системы). В случае использования обработанной плазмой воды при подготовке корнеплодов наблюдается повышение общей урожайности и качества обрабатываемых культур.

Исследование уровня каротиноидов, хлорофиллов *a* и *b* в проростках семян ячменя обыкновенного (*Hordeum vulgare*) после предпосевной обработки семян постоянным магнитным полем и УФ излучением в присутствии озона

© Пурыгин^{1*} Петр Петрович, Цаплев¹ Денис Алексеевич,
Пурыгин¹ Виталий Александрович, Зарубин¹⁺ Юрий Павлович
и Васильева Татьяна Ивановна²

¹ 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: puruginpp2002@mail.ru.

² Кафедра биологической химии. Самарский государственный университет.

Ул. Акад. Павлова, 1. г. Самара, 443011. Самарская область. Россия.

Тел.: (846) 334-54-42. E-mail: biofak@samsu.ru.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: хлорофиллы *a* и *b*, постоянное магнитное поле, УФ излучение, озон.

Аннотация

Предложен эффективный и экологически безопасный способ обработки сельскохозяйственных растений озоном, УФ излучением и постоянным магнитным полем. Данный способ обработки растений может быть применён в различных отраслях сельского хозяйства.

Использование СВЧ излучения в производстве мономеров

© Даминев* Рустем Рифович и Каримов[†] Олег Хасанович

Кафедра общей химической технологии. Уфимский государственный нефтяной технический университет, филиал в г. Стерлитамаке. Пр. Октября, 2. г. Стерлитамак, 453118. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (83473) 24-25-12. E-mail: karimov.oleg@gmail.com

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: СВЧ излучение, мономеры, изопрен, дегидрирование, алюмохромовый катализатор, изобутилен, метилбутены.

Аннотация

Представлены результаты исследований по применению электромагнитного излучения СВЧ диапазона для повышения эффективности процесса синтеза мономеров производства синтетических каучуков. Применение СВЧ излучения рассмотрено на примере технологий синтеза бутадиена и изопрена двухстадийным дегидрированием парафиновых углеводородов и синтезом изопрена из изобутилена и формальдегида. В методе двухстадийного дегидрирования бутана и изопентана применение микроволновой энергии возможно на обеих стадиях. На первой стадии дегидрирования низших парафинов в олефины предложена технология синтеза алюмохромовых катализаторов под воздействием электромагнитного излучения на различных стадиях его приготовления. Воздействие СВЧ поля на стадиях пропитки алюмооксидного носителя и сушки катализатора позволяет получать катализатор с более высокими каталитическими показателями, выход олефинов повышается на 4.3%, селективность возрастает на 3.8%. Катализатор обладает повышенной прочностью и, как предполагается, сроком службы. Предложена усовершенствованная технологическая схема процесса дегидрирования низших парафиновых углеводородов на приготовленном катализаторе. На второй стадии дегидрирования олефинов в диолефины предлагается использовать энергию электромагнитного излучения непосредственно для активации реакции на действующих в промышленности железокалиевых катализаторах. Дегидрирование олефинов под действием СВЧ излучения позволяет снизить энергозатраты процесса без снижения выходов диолефинов. Воздействие микроволнового излучения в процессе синтеза изопрена из изобутилена и формальдегида также позволяет получать высокий выход продукта. Наиболее высокими каталитическими свойствами в электромагнитном поле обладает катализатор на основе катионита КУ-2.

Исследование воздействия микроволнового излучения на эксплуатационные характеристики изоляционных материалов на основе поливинилхлорида

© Шулаев*[†] Николай Сергеевич, Сулейманов Дамир Фанилевич
и Абуталипова Елена Мидхатовна

Уфимский государственный нефтяной технический университет,
филиал ФГБОУ ВПО УГНТУ в г. Стерлитамаке. Пр. Октября, 2. г. Стерлитамак, 453100.
Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (3473) 24-25-12. E-mail: suldf@yandex.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: микроволновое излучение, поливинилхлорид, разрывная нагрузка, влагопоглощение, электрическое сопротивление.

Аннотация

В представленной статье приводятся результаты экспериментального исследования изменения свойств поливинилхлорида при относительно низких (не приводящих к значительному повышению температуры) дозах поглощенной энергии сверхвысокочастотного электромагнитного излучения (СВЧ ЭМИ). Актуальность таких исследований обусловлена с одной стороны, широким использованием данного полимера при изготовлении различных изделий, в частности, для крупнотоннажного производства изолирующих покрытий трубопроводных систем, а с другой, относительно высоким (по сравнению с другими полимерами) показателем поглощения излучения СВЧ-диапазона. Из экспериментальных исследований следует, что при удельной поглощенной энергии менее 10 кДж/кг наблюдается незначительное увеличение прочностных свойств, а при дозе более 30 кДж/кг их снижение по сравнению с немодифицированным образцом. В интервале энергий от 15 до 20 кДж/кг наблюдается увеличение действительной разрывной нагрузки более чем в 1.5 раза. Кроме того, установлено, что в указанном интервале доз облучения СВЧ ЭМИ объемное удельное электрическое сопротивление, определяемое наличием в полимере свободных зарядов и их подвижностью, принимает максимальное значение. С увеличением удельного электрического сопротивления наблюдается снижение свободных зарядов, из-за образования дополнительных связей и конформационных изменений макромолекул, что приводит к увеличению разрывной прочности. Определено, что в интервале доз облучения 10-20 кДж/кг наблюдается уменьшение влагопоглощения в два раза. Уменьшение влагопоглощения можно объяснить увеличением плотности пространственной сетки макромолекул полимера из-за образования поперечных связей. При этом скорость набухания снижается, что свидетельствует о возникновении более жесткой структуры модифицированного полимера. Экспериментально доказана принципиальная возможность использования СВЧ излучения для проведения целенаправленной модификации структуры полярных полимеров, обеспечивающей улучшение их физико-механических свойств. Как показывают оценки, предлагаемый способ повышения эксплуатационных характеристик менее энергоемок и более экологичен по сравнению с традиционным способом упрочнения изделий из поливинилхлорида.

Статья публикуется по материалам доклада на Международном научном форуме "Бутлеровское наследие-2015". <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 547.943.7/541.127/128.24/577.161.6. Поступила в редакцию 25 февраля 2015 г.

Кинетика и механизм УФ-фотопревращений новых синтетических антиоксидантов ряда *N*-замещенных амидов салициловой кислоты

© Медяник¹ Надежда Петровна, Сторожок^{1*} Надежда Михайловна, Поздняков² Иван Павлович и Креков³ Сергей Александрович

¹ ГОУ ВПО «Тюменская государственная медицинская академия» Росздрава.

Ул. Одесская, 54. г. Тюмень, 625023. Россия. Факс: (3452) 20-74-21. E-mail: nadinstor@mail.ru

² Институт химической кинетики и горения Сибирского Отделения РАН. ул. Институтская, 3. Новосибирск, 630090. Россия. Факс: (3832) 30-73-50. E-mail: pozdnyak@ns.kinetics.nsc.ru

³ ГОУ ВПО «Тюменский государственный университет» Министерства образования России. ул. Семакова, 10. г. Тюмень, 625003. Россия. Тел.: (3452) 25-15-94. E-mail: nadinstor@mail.ru

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: амид салициловой кислоты, фотолиз, феноксильный радикал, рекомбинация, ИК-, УФ-спектроскопия, водородная связь, дейтерирование.

Аннотация

Методами оптической спектроскопии, стационарного и наносекундного лазерного импульсного фотолиза (Nd:YAG лазер, 355 нм) исследованы продукты фотолиза *N*-замещенных амидов салициловой кислоты: 1-(*N*-4'-гидроксифенил-3,3',5'-три-*трет*-бутил)-5-этилсалициловой кислоты (**I**) и 1-(*N*-4'-гидроксифенилпропил-3',5'-ди-*трет*-бутил) салициловой кислоты (**II**) в гептане. Методом частичного дейтерирования молекул амидов **I**, **II** показано, что они находятся как в несвязанном состоянии, так и в виде комплексов с внутри- и межмолекулярной водородной связью. Фотолизу подвергаются свободные фенольные группы амидов **I**, **II**, что приводит к появлению триплетного состояния и образованию феноксильных радикалов RO• предположительно в результате поглощения второго кванта света возбужденным синглетным состоянием. Основным каналом гибели триплетного состояния и радикалов RO• является триплет-триплетная (Т-Т) аннигиляция и рекомбинация ($k_{рек} \approx 2.3 \cdot 10^8$ л·моль⁻¹·с⁻¹), соответственно. При УФ-облучении соединений **I**, **II** происходит возбуждение амидных групп, не установлено образования радикальных продуктов за счет ионизации N-H-связи.

Влияние белкового микроокружения на спектральные свойства продигиозина

© Андреева*⁺ Ирина Николаевна, Огородникова Татьяна Ивановна
и Захарченко Наталия Леруновна

ФГБУН Казанский институт биохимии и биофизики, КазНЦ РАН. Ул. Лобачевского, 2/31.
г. Казань, 420111. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 292-72-22. E-mail: irinanikandr@gmail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: продигиозин; абсорбция; флуоресценция; белковое окружение.

Аннотация

Продигиозин – линейный трипиррол – пигмент, образуемый *Serratia marcescens* и придающий растущей культуре характерную красную окраску. Продигиозин растворим в полярных и неполярных органических растворителях и не растворим в воде, но может быть переведен в водную фазу в составе пигмент – белкового комплекса обработкой биомассы детергентами (додецилсульфатом натрия и тритоном X-100). Продигиозин имеет две спектральные формы: красную (максимум поглощения 535 нм) и желтую (максимум поглощения 460-470 нм) в зависимости от рН среды; растущая культура *S. marcescens* содержит обе формы продигиозина. Абсорбционная кривая клеточной суспензии перекрывает область поглощения обеих форм пигмента, но имеет еще один максимум поглощения – при 500 нм. Кривая абсорбции продигиозина в комплексе с нативным белком совпадает с таковой интактных пигментированных клеток. Поглощение при 500 нм характерно для продигиозина ассоциированного с нативным белком и указывает на сохранение взаимоотношений пигмента и белка, близких к существующим в бактериальной клетке; действие денатурирующих агентов приводит к исчезновению в абсорбционном спектре продигиозин-белкового комплекса этого максимума. Обе формы продигиозина флуоресцируют в области 560-580 нм (в зависимости от концентрации), как в спиртовом растворе, так и в составе пигмент-белкового комплекса. Нарушение пигмент – белкового взаимодействия *in vitro* приводит к возрастанию абсорбции и снижению флуоресценции продигиозина. В клеточной суспензии более выражена флуоресценция красной (E₅₃₅) формы пигмента флуоресценция желтой (E₄₆₀₋₄₇₀) и новой, E₅₀₀, значительно слабее, что может указывать на функциональные различия этих форм продигиозина в метаболизме *Serratia marcescens*.

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 15-42-5-56 Подраздел: Биохимия.
Статья публикуется по материалам доклада на “Международном научном форуме
Бутлеровское наследие – 2015”. <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 543.258:543.8. Поступила в редакцию 18 декабря 2014 г.

Интегральная антиоксидантная емкость мицеллярных экстрактов специй по данным гальваностатической кулонометрии

© **Зиганшина Эндже Ришатовна, Зиятдинова⁺ Гузель Камилевна,
Нгуен Конг Фук и Будников* Герман Константинович**

*Кафедра аналитической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 233-77-36. E-mail: Ziyatdinovag@mail.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: гальваностатическая кулонометрия, мицеллярные среды, неионогенные ПАВ, антиоксидантная емкость, специи, анализ пищевых продуктов.

Аннотация

Найдены стехиометрические коэффициенты реакций индивидуальных антиоксидантов специй (галловой, *n*-кумаровой, кофейной и розмариновой кислот, а также рутина, кверцетина, эвгенола, куркумина, капсаицина, тимола, танина, катехина и сиреневого альдегида) с электрогенерированным бромом в мицеллярной среде Brij® 35. Установлено, что максимальное извлечение активных компонентов из специй достигается при однократной экстракции раствором 0.1 М Brij® 35 в течение 10 мин с ультразвуковой обработкой. Соотношение сырье/экстрагент, обеспечивающее максимальное извлечение, устанавливали для каждой специи индивидуально. Оценена интегральная антиоксидантная емкость мицеллярных экстрактов 21 специи, которую выражали в пересчете на 1 г сухого веса. Установлено, что наибольшая антиоксидантная емкость наблюдается для гвоздики и корицы (433±4 и 290±15 Кл/г, соответственно), а наименьшая – для тмина (23±2 Кл/г), что обусловлено природой активных компонентов специй.

Кинетика теплового поражения биообъектов

© Еналеев^{1*} Рустем Шакирович, Амерханова²⁺ Гульнора Ильхамовна,
Теляков³ Эдуард Шархиевич и Гасилов⁴ Вячеслав Сергеевич

¹ Кафедра химической кибернетики; ² Кафедра технологии неорганических веществ и материалов;

³ Кафедра машин и аппаратов химической технологии; ⁴ Кафедра промышленной безопасности;
Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68.

г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-40-22.

E-mail: Amerkhanova-g-i@rambler.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: пожар, термические ожоги, пороговый импульс, критическая температура, модель кожи, кинетика поражения.

Аннотация

Проведен анализ зарубежных методов по критериям теплового поражения биообъектов в аварийных ситуациях. Предложен алгоритм обработки экспериментальных данных по определению кинетических параметров теплового поражения кожного покрова биообъектов при контактных ожогах и тепловом излучении. Обоснован новый подход в прогнозировании вероятностей термических ожогов различной степени тяжести при различных граничных условиях теплообмена.

Спектрофотометрия в анализе двух видов подснежника (*Galanthus L.*)

© Боков^{1*} Дмитрий Олегович, Самылина¹ Ирина Александровна
и Попов² 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.

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: спектрофотометрия, подснежник Воронова (*Galanthus woronowii Losinsk*),
подснежник белоснежный (*Galanthus nivalis L.*), настойка матричная гомеопатическая,
алкалоиды, флавоноиды.

Аннотация

Изучены электронные УФ-спектры поглощения настоек матричных гомеопатических на основе лекарственного растительного сырья двух видов подснежника – подснежника Воронова (*Galanthus woronowii Losinsk*) и подснежника белоснежного (*Galanthus nivalis L.*). В ходе настоящего исследования получены данные о компонентном составе основных биологически активных соединений представителей рода *Galanthus L.* с помощью УФ-спектрофотометрии, получены их «спектрофотометрические профили». Показано, что данный метод может применяться при оценке качества разведенных настоек гомеопатических матричных, служить при доказательстве их подлинности.

Роль моющих растворов, применяемых при санитарно-гигиенических обработках укупорочных пробок, в загрязнении лекарственных препаратов

© **Гужова¹⁺ Светлана Владимировна, Романова³ Наталья Константиновна, Симонова² Надежда Николаевна, Черезова¹ Елена Николаевна, Хакимуллин^{2*} Юрий Нуриевич и Яруллин¹ Рафинат Саматович**

¹Кафедра технологии синтетического каучука. ²Кафедра химии и технологии переработки эластомеров. ³Кафедра технологии пищевых производств.

Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. Карла Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.:(843) 231-42-87.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: инфузионные и инъекционные лекарственные препараты, укупорочные резиновые пробки, стерилизация, дезинфекция, моющие растворы, миграция, деструкция.

Аннотация

Исследована роль моющих растворов, используемых для предстерилизационной очистки укупорочных пробок, в загрязнении инфузионных и инъекционных лекарственных препаратов. Моющие средства, режимы мойки, дезинфекции и стерилизации оказывают деструктивное действие на пробки. Методом атомно-эмиссионной спектроскопии показано, что химические элементы соединений, входящих в состав моющих средств, диффундируют в пробки, а затем в лекарственные препараты.

Способ оценки сыпучести порошкообразных лекарственных веществ

© **Пыжов^{1*} Александр Михайлович, Кукушкин¹ Иван Куприянович, Анисимов¹ Артем Сергеевич, Усенко¹ Алексей Геннадьевич и Пурьгин² Петр Петрович**

¹ Кафедра химии и технологии органических соединений азота. Самарский государственный технический университет. Ул. Молодогвардейская, 244. г. Самара, 443100. Самарская область. Россия. Тел.: (846) 337-08-89. E-mail: argel33@mail.ru

² 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: puryginpp2002@mail.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: лекарственные формы, таблетки, таблеточные автоматы, оценка сыпучести лекарственных материалов, новый способ и устройство.

Аннотация

В данной статье представлены результаты исследований по разработке нового способа оценки сыпучести порошкообразных лекарственных веществ, который основан на последовательном дозировании испытуемого вещества в емкости одинакового объема и последующего определения стандартного отклонения порции дозируемого вещества, так называемого, относительного «разброса навески» вещества, который является мерой сыпучести вещества. Точность оценки дозирования веществ составляет десятые доли миллиграмма. Для оценки сыпучести по новому способу разработано эффективное устройство, имитирующее реальные условия дозирования в таблеточных автоматах, способное с высокой точностью и за короткое время оценивать сыпучесть веществ, взятых в небольших количествах.

Влияние параметров эмульсии на размер наночастиц Fe_3O_4 при гетерофазном синтезе

© Нечаев Антон Игоревич, Вальцифер Виктор Александрович
и Стрельников Владимир Николаевич

Институт технической химии УрО РАН. Ул. Академика Королева, 3.
г. Пермь, 614013. Россия. Тел.: (342) 237-82-90. E-mail: toxambj@mail.ru

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: магнитные наночастицы, магнетит, органоноль, гетерофазный синтез, эмульсия, ГЛБ.

Аннотация

В данной работе разработана методика гетерофазного одностадийного синтеза неполярного органоноля наноразмерного Fe_3O_4 . Синтезированные образцы наночастиц Fe_3O_4 исследовались методом инфракрасной спектроскопией с преобразованием Фурье (FT-IR), рентгеновской дифракцией (XRD), динамическим светорассеянием (DLS), а также просвечивающей электронной микроскопией высокого разрешения (HRTEM). Определены граничные условия синтеза наночастиц Fe_3O_4 разработанным методом. Исследовано влияние типа эмульсии, соотношения фаз, гидродинамических параметров эмульгирования, соотношения стабилизатор/ Fe_3O_4 , гидрофильно-липофильного баланса вводимых в систему ПАВ на средний гидродинамический размер частиц и их распределение по размеру в органоноле. Показано, что площадь поверхности границы раздела фаз оказывает определяющее влияние на размер наночастиц. Установлено, что данный метод применим для синтеза монодисперсных наночастиц Fe_3O_4 размером вплоть до 1 нм, обладающих сродством к неполярным жидким средам.

Коллоидные свойства водных дисперсий декстрана

© Дмитриева* Ирина Борисовна, Чухно⁺ Александр Сергеевич,

Родионова Екатерина Юрьевна и Назипова Альбина Ринатовна

Кафедра физической и коллоидной химии. Санкт-Петербургская государственная химико-фармацевтическая академия. Ул. Профессора Попова, 14, лит. А. г. Санкт-Петербург, 197376.

Россия. Тел.: (905) 214-59-73. E-mail: alex-chuhno@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: декстран, микроэлектрофорез, сорбция, потенциометрическое титрование, изоэлектрическая точка, точка нулевого заряда, коагуляция.

Аннотация

В работе проведено исследование коллоидных свойств водных дисперсий декстрана. Изучение реологических свойств вискозиметрическим методом позволило установить, что при всех исследованных концентрациях декстрана, его водные дисперсии являются ньютоновскими жидкостями. Методом электрофореза проведено определение электрокинетического потенциала частиц декстрана в зависимости от состава дисперсионной среды (рН, природы и концентрации электролита). Изучено влияния различных электролитов и рН на сорбцию ионов водорода и гидроксид-ионов. Определены изоэлектрическая точка декстрана – $pH_{изт} = 5.0$ и его точка нулевого заряда. Точка нулевого заряда колеблется в диапазоне $pH_{тнз} = 4.3-4.8$. Различие изоэлектрической точки и точки нулевого заряда связано со специфической сорбцией ионов. Установлено, что коагуляция декстрана в области $pH > pH_{изт}$ происходит по концентрационному механизму.

Структура и свойства гидролизованной целлюлозы

© **Валишина* Зимфира Талгатовна, Галиуллина⁺ Гузалия Нурзадаевна
и Косточко* Анатолий Владимирович**

*Кафедра химии и технологии высокомолекулярных соединений. Казанский национальный
исследовательский технологический университет. Ул. Карла Маркса, 68. г. Казань, 420015.
Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-40-95. E-mail: zimval1@yandex.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: гидролизованная целлюлоза, вязкость, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ, моделирование.

Аннотация

Проведены комплексные исследования молекулярных, надмолекулярных, морфологических свойств гидролизованной целлюлозы. Выявлена взаимосвязь вязкостных характеристик растворов целлюлозы с параметрами молекулярной и надмолекулярной структуры, что необходимо для создания новых полимерных материалов на основе целлюлозы высокой степени чистоты с требуемым комплексом физико-химических свойств.

Разработана математическая модель процесса кислотного гидролиза целлюлозы различного вида, которая позволяет предсказывать их вязкостные свойства в зависимости от концентрации и природы кислоты, температуры и прогнозировать свойства создаваемых композиций.

Химический анализ кремнийорганических полимеров и материалов на их основе, применяемых в микро- и нанoeлектронике

© Неёлова*⁺ Ольга Владимировна и Газзаева Римма Александровна

*Химико-технологический факультет. Северо-Осетинский государственный университет им. К.Л. Хетагурова. Ул. Ватутина, 44-46. г. Владикавказ, 362025. PCO-Алания. Россия. Тел.: (867) 254-44-22.
E-mail: o.neelova2011@yandex.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: кремнийорганические полимеры, композиционные материалы, содержание ионных примесей, микроэлектроника и нанотехнологии.

Аннотация

Разработан метод атомно-эмиссионного спектрального анализа при 100-кратном обогащении, позволяющий контролировать 15 элементов примесей металлов в высокочистых кремнийорганических материалах. Метод основан на концентрировании примесей на угольном коллекторе после сжигания образца и удаления основного элемента кремния в виде тетрафторида или экстракции деионизованной водой растворимых примесей из нерастворимого остатка. Концентрат примесей на коллекторе возбуждается в плазме дуги переменного тока. Разработанная методика позволяет проводить определение примесей K, Na, Li, Ba, Sr, Ca, Mg, Al, Fe, Ti, Mn, Cr, Cu, Zn, Pb в кремнийорганических каучуках, смолах и ненаполненных и наполненных композициях при содержании их 10^{-2} - 10^{-6} %.

Отделение ионов марганца(II), железа(III), меди(II) и никеля(II) на сильнокислотных катионитах для последующего определения в воде неорганических форм мышьяка методом инверсионной вольтамперометрии

© Те¹⁺ Анастасия Вадимовна, Скворцова^{2*} Лидия Николаевна
и Захарова^{3*} Эльза Арминовна

¹ Кафедра аналитической химии. Национальный исследовательский Томский государственный университет. Пр. Ленина, 36. г. Томск, 634050. Россия.

Тел.: (952) 891-46-66. E-mail: injurious_girl@mail.ru

² Кафедра аналитической химии. Национальный исследовательский Томский государственный университет. Пр. Ленина, 36. г. Томск, 634050. Россия.

Тел.: (913) 887-55-39. E-mail: lnskvorcova@inbox.ru

³ Кафедра физической и аналитической химии. Национальный исследовательский Томский политехнический университет. Пр. Ленина, 30. г. Томск, 634050. Россия.

Тел.: (3822) 56-37-22. E-mail: _elaz38@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: ионный обмен, мешающие ионы, формы мышьяка, метод инверсионной вольтамперометрии, питьевая вода.

Аннотация

Показана возможность применения метода ионного обмена для отделения ионов Mn(II), Fe(III), Cu(II) и Ni(II) от арсенит- и арсенат-ионов с использованием картриджа *IC-H Hypersep* (Metrohm, Швейцария) и сульфокатионитов *KУ-2-8* (Россия) и *Pirolite C100* (Великобритания). Подобраны условия для ионообменного удаления мешающих катионов воды при определении различных форм мышьяка(III, V) методом ИВ. Установлено, что для предложенного способа пробоподготовки воды могут быть использованы отечественные картриджи на основе катионита КУ-2-8. Разработанная методика анализа применена для отдельного определения неорганических форм мышьяка методом ИВ в питьевой воде. Правильность результатов анализа доказана методом «введено-найдено».

Влияние топологической структуры и молекулярной подвижности в полимерных сетках на сигнал стимулированного эха ЯМР

© Кулагина^{1*+} Татьяна Павловна, Карнаух^{1*} Григорий Ефимович, Вяселев^{2*} Олег Муратович и Сармуткина^{1,3} Айса Сергеевна

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

² Институт физики твердого тела РАН. Ул. Институтская, 2. г. Черноголовка, 142432. Московская обл. Россия. Тел.: (496) 522-19-82. E-mail: vyasel@issp.ac.ru

³ Московский государственный университет им. Ломоносова. Ленинские горы, 1, стр. 51. г. Москва, 119991. Россия. Тел.: (495) 939-01-75. E-mail: ice1992.2011@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: ядерный магнитный резонанс, полимерные сетки, спад свободной индукции, стимулированное эхо, корреляционная функция молекулярных движений.

Аннотация

Разработана теория сигналов стимулированного эха для различных последовательностей трех радиочастотных импульсов. На основе теории развиты методы определения корреляционной функции молекулярной подвижности полимерных цепей непосредственно из ЯМР экспериментов (спадов свободной индукции (ССИ) и стимулированного эха). Проведено моделирование ССИ и стимулированного эха в полимерных сетках, определен вид корреляционной функции при различной средней длине цепи N_0 между узлами. Установлено сильное влияние молекулярно-массового распределения (ММР) на вид корреляционной функции в расплавах полимеров.

Модифицированное уравнение вязкости Фогеля-Фульчера-Таммана для смесей моно-, ди- и триэтиленгликолей с учетом их состава

© Сагдеев^{1*+} Дамир Исмагилович, Фомина¹ Марина Георгиевна,
Воробьев² Евгений Сергеевич, Мухамедзянов¹ Габдельнур Хабибрахманович
и Абдулагатов³ Ильмутдин Магомедович

¹ Кафедра вакуумной техники электрофизических; ² Кафедра общей химической технологии;
³ Кафедра теоретических основ теплотехники. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 231-42-70. E-mail: sagdeev@mail.ru.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: полиэтиленгликоли, смеси, уравнение вязкости Фогеля-Фульчера-Таммана, метод симплексных решеток.

Аннотация

Для точных технологических расчетов необходимо знание физико-химических и теплофизических свойств полиэтиленгликолей и их смесей. Зависимости, полученные методом симплексных решеток с использованием компьютерного моделирования, изменяя концентрации компонентов, температуру и давление, позволяют находить оптимальные условия проведения технологических процессов, удовлетворяющие требованиям по выходным параметрам.

Преимущество симплекс-решетчатых планов состоит в том, что располагая результатами эксперимента для чистых веществ, бинарных систем и одной трехкомпонентной системы, как в нашем случае, можно предсказать значение свойства для трехкомпонентной смеси любого состава.

Разработана зависимость на основе уравнения Фогеля-Фульчера-Таммана (ФФТ) с зависимыми от давления коэффициентами для описания температурной зависимости вязкости смесей МЭГ, ДЭГ и ТЭГ при помощи метода симплексных решеток в широком диапазоне изменения температур, давлений и концентраций.

Это уравнение используется для расчета вязкости смесей моно-, ди- и триэтиленгликолей с учетом их состава в области температур от 298 до 473К и давлений до 245 МПа.

Интенсификация процесса тонкого измельчения нитрата аммония

© Кривошеева⁺ Алина Раисовна, Омаров Залимхан Курбанович,

Гатина Роза Фатыховна и Михайлов Юрий Михайлович*

ФКП "Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов".

Ул. Светлая, 1. г. Казань 420033. Республика Татарстан. Россия.

Тел: (843) 541-76-02. E-mail: aneco_ic@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: нитрат аммония, ПАВ, модифицирование, интенсификация измельчения, стеарат натрия.

Аннотация

Проведены исследования кинетики и механизма измельчения нитрата аммония в присутствии стеариновой и пальмитиновой кислот и их простых солей. Установлено, что добавление к нитрату аммония большинства исследуемых поверхностно-активных веществ в количестве 1.0 % масс. приводит к интенсификации процесса тонкого измельчения соли. Выявлено, что увеличение содержания добавок от 1.0 до 5.0 % масс. увеличения степени измельчения нитрата аммония не дает.

Физико-механические характеристики бинарных составов поливинилбутираль – гексоген

© Енейкина* Татьяна Александровна, Зинатуллина⁺ Диана Борисовна,
Романько Надежда Андреевна, Волянюк Сергей Георгиевич,
Гатина Роза Фатыховна и Михайлов Юрий Михайлович

Государственный Научно-Исследовательский Институт Химических Продуктов.
Ул. Светлая, 1. г. Казань, 420033. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 560-20-42.
E-mail: diana.zinatullina89@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: газогенерирующие композиции, поливинилбутираль, гексоген, межмолекулярное взаимодействие, ИК-спектроскопия.

Аннотация

ИК-спектроскопическим методом исследовано межмолекулярное взаимодействие компонентов в составах поливинилбутираль – гексоген при соотношении 1:1, 1:3 и 1:6. Проведены физико-механические испытания составов на универсальном испытательном комплексе *Instron*. Определено, что при соотношении поливинилбутирала и гексогена равном 1:3 наблюдается максимальный уровень их взаимодействия.

Квантово-химическое изучение молекулярной структуры и колебательных спектров метилнитрата и этилнитрата

© Шайхуллина¹⁺ Равия Масгутовна, Храпковский^{2*} Григорий Михайлович и Зверева Елена Евгеньевна³

¹ Кафедра физики. Набережночелнинский институт (филиал) Казанского Приволжского федерального университета. Пр. Мира, 68/19. г. Набережные Челны, 423810. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (855) 258-95-36. E-mail: raviya1@yandex.ru

² Кафедра катализа. Казанский государственный технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-42-53.

³ Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН. Ул. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 273-18-92.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

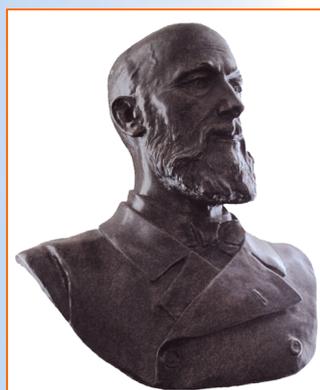
Ключевые слова: метилнитрат, этилнитрат, квантовая химия, молекулярная структура, конформации, колебательные спектры.

Аннотация

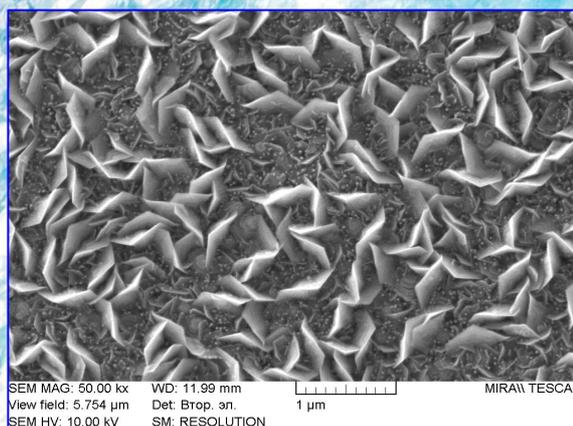
Представлены данные теоретического анализа колебательных спектров метилнитрата, *транс*- и *гош*-конформаций этилнитрата, полученные с использованием методов теории функционала плотности (B3LYP/6-31G(d)). Установлены энергетически наиболее выгодные структуры метилнитрата и этилнитрата, рассчитаны соответствующие этим структурам частоты и формы нормальных колебаний. Выявлены спектральные особенности конформационного состояния метил-, этилнитрата, а также эффекты образования внутримолекулярных водородных связей.

Бутлеровские сообщения

№6, том 42. 2015



ISSN 2074-0212



ISSN 2074-0948

International Edition in English:
Butlerov Communications



Сорбционные и биоцидные свойства композита на основе глауконита Саратовской области и наномеди

© Солдатенко Елена Михайловна, Доронин⁺ Сергей Юрьевич,
Чернова Римма Кузьминична, Вениг* Сергей Борисович,
Сержантов Виктор Геннадьевич, Шаповал Ольга Георгиевна
и Захаревич Андрей Михайлович

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского. Ул. Астраханская, 18/3.
г. Саратов, 410012. Россия. Тел.: (8452) 26-45-53. E-mail: Doroninsu@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: неорганические сорбенты, глауконит, наномедь, сорбция, композиты.

Аннотация

Синтезирован глауконитовый композит с наночастицами меди восстановлением *in situ* медно-аммиачного комплексного иона и охарактеризован различными аналитическими методами. Наночастицы меди интеркалированы в глауконит и адсорбированы на её поверхности. Изучены сорбционные свойства глауконита и композита на его основе по отношению к ионам железа(III), построены изотермы сорбции. Наблюдалась высокая антимикробная активность композита по отношению к штаммам *Escherichia coli* и *Staphylococcus aureus*. Композит на основе глауконита и наночастиц меди перспективен для приложений в медицинской практике.

Технология сульфидов силикатов и композиционных материалов с применением активатора хлорида алюминия

© **Ахметова Резида Тимерхановна, Юсупова* Алсу Ансаровна,
Бараева⁺ Линара Рифатовна и Хацринов Алексей Ильич**

*Кафедра технологии неорганических веществ и материалов. Институт нефти, химии
и нанотехнологий. Казанский национальный исследовательский технологический университет.
Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 238-56-94. E-mail: office@kstu.ru, baraeva.linara@yandex.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: сульфиды силикатов, хлорид алюминия, композиционные материалы.

Аннотация

Показана эффективность применения технологии неорганических веществ на основе сульфидов силикатов при получении серных композиционных материалов. Высокие физико-механические свойства полученных образцов обусловлены химическим взаимодействием серы с хлоридом алюминия, закрепленным на поверхности кремнеземсодержащего материала. Результаты квантово-химических исследований были подтверждены исследованием физико-механических свойств полученных материалов, а также методами физико-химического анализа (ИК-спектроскопия, термогравиметрия, рентгенография, метод электронного–парамагнитного резонанса и петрография). Разработанные материалы могут применяться в конструкциях промышленных, сельскохозяйственных, складских сооружений, в период эксплуатации которых предъявляются повышенные требования по стойкости к агрессивным средам, морозо- и атмосферостойкости, непроницаемости. Расширение применения серы во многом способствует решению экологической проблемы утилизации отходов промышленности, с одной стороны, и значительно удешевляет процесс получения стойких и долговечных материалов.

Характеристики термического разложения и теплового взрыва некоторых компонентов смесевых энергетических материалов

© Попок*⁺ Владимир Николаевич и Жарков Александр Сергеевич

Акционерное общество «Федеральный научно-производственный центр «Алтай».

Ул. Социалистическая, 1. г. Бийск, 659322. Алтайский край. Россия.

Тел.: (3854) 30-19-37. E-mail: vnporok@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: смесевые энергетические материалы, термическое разложение, тепловой взрыв, сокристаллизаты.

Аннотация

В статье представлены результаты экспериментальных исследований параметров термического разложения в нестационарных условиях и характеристик теплового взрыва ряда компонентов смесевых энергетических материалов. Проведена кластеризация веществ по их функциональному назначению в составах смесевых энергетических материалов и наличию функциональных групп, даны рекомендации по выбору веществ из класса окислителей, компонентов горючих-связующих, энергетических добавок для использования в составах смесевых энергетических материалов.

Зажигание целлюлозных материалов: измерение характеристик воспламенения

© Каргин¹⁺ Артем Вячеславович, Еналеев^{2*} Рустем Шакирович,
Гимранов¹ Фидаис Мубараквич и Гасилов¹ Вячеслав Сергеевич

¹ Кафедра промышленной безопасности; ² Кафедра химической кибернетики. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: 8-9297239816. E-mail: a_a384@rambler.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: тепловое излучение, целлюлозные материалы, температура поверхности, автоматизированный эксперимент.

Аннотация

Проведен анализ отечественных и зарубежных данных по измерению характеристик воспламенения целлюлозных материалов. Разработана методика контактного измерения температуры поверхности древесины, текстильных материалов, бумаги. Обоснована конструкция автоматизированного измерительного модуля со сменными держателями крепления образцов. Представлены результаты экспериментов по измерению характеристик зажигания целлюлозных материалов.

Кинетические аспекты восстановления солей палладия(II) в присутствии гидроксилсодержащих соединений

© Крылов* Александр Владимирович, Бахтиева⁺ Екатерина Александровна
и Флид Виталий Рафаилович

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский государственный университет тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова». пр. Вернадского, 86. г. Москва, 119571. Россия. Кафедра физической химии им. Я.К. Сыркина. Тел.: (495) 246-05-55, доб. 916. E-mail: ekaterinabakhtieva@gmail.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: наночастицы, палладий, спирт, полимер.

Аннотация

В работе исследована восстановительная способность гидроксилсодержащих соединений в системе $\text{PdCl}_2 - \text{H}_2\text{O} - \text{R}(\text{OH})_n - \text{NaCl}$ с образованием наноразмерных частиц палладия. Показано, что в водно – органических средах размеры образующихся частиц Pd^0 в значительной мере определяются природой и концентрацией гидроксилсодержащих соединений, что позволяет получать частицы палладия необходимого размера. Установлено, что реакционная способность соединений растет в ряду : алифатические спирты – двух-,трехатомные спирты – оксикислоты.

Предложен механизм реакции, включающий стадии образования аквахлоридных комплексов палладия со спиртами или гидроксикислотами, стадию агрегации и стабилизации образующихся наноразмерных частиц палладия молекулами гидроксилсодержащих соединений. Показано, что введение в систему водорастворимых полимеров поливинилпирролидона и поливинилового спирта значительно усиливает эффект стабилизации образующихся частиц Pd^0 и приводит к уменьшению их размера, а в случае поливинилового спирта наблюдается выделение из раствора полимерных флокулов, содержащих частицы Pd^0 .

Показано, что воздействие ультрафиолетового излучения приводит к заметному увеличению скорости реакции восстановления ионов палладия, что согласуется с механизмом УФ - активации молекулы воды в аквахлоридных комплексах палладия.

Тематическое направление: Гидрохимический синтез пленок халькогенидов металлов. Часть 24.

Термодинамическая оценка условий образования Ga_2Se_3 гидрохимическим осаждением

© Федорова¹ Екатерина Алексеевна, Маскаева^{1,2+} Лариса Николаевна,
Марков^{1,2*} Вячеслав Филиппович и Мокроусова² Ольга Анатольевна

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. Свердловская область. Россия. Тел.: (343) 360-81-68.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: гидрохимическое осаждение, селенид галлия(III), ионные равновесия, долевые концентрации, граничные условия образования.

Аннотация

Расчетом ионных равновесий с использованием термодинамических констант определены долевые концентрации одноядерных гидроксокомплексов галлия(III) в зависимости от pH раствора. Выявлено, что гидролиз ионов металла в системе " $\text{Ga}(\text{NO}_3)_3 - \text{H}_2\text{O}$ " начинается при $\text{pH} \sim 1.5$, в то время как в системе " $\text{Ga}(\text{NO}_3)_3 - \text{Na-ЭДТА} - \text{H}_2\text{O}$ " при pH более 9.0. Рассчитаны граничные условия образования твердых фаз селенида и гидроксида галлия(III) в системах " $\text{Ga}(\text{NO}_3)_3 - \text{H}_2\text{O} - \text{N}_2\text{H}_4\text{CSe}$ " и " $\text{Ga}(\text{NO}_3)_3 - \text{H}_2\text{O} - \text{Na}_2\text{SeSO}_3$ ", а также концентрационные плоскости их осаждения в системах " $\text{Ga}(\text{NO}_3)_3 - \text{Na-ЭДТА} - \text{H}_2\text{O} - \text{N}_2\text{H}_4\text{CSe}$ " и " $\text{Ga}(\text{NO}_3)_3 - \text{Na-ЭДТА} - \text{H}_2\text{O} - \text{Na}_2\text{SeSO}_3$ ".

Потенциостатическое исследование питтингообразования низколегированных сталей

© Трофимов Алексей Алексеевич, Ярославцева Оксана Владимировна,
Рудой Валентин Михайлович и Останин Николай Иванович

*Кафедра технологии электрохимических производств. Уральский федеральный университет имени
первого Президента России Б.Н. Ельцина. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Свердловская
область. Россия. Тел.: (343) 375-46-76. E-mail: yaroslvtseva_ov@list.ru*

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: питтинговая коррозия, питтингостойкость, потенциостатическая поляризация, низколегированные стали.

Аннотация

Методом потенциостатической поляризации исследован процесс питтингообразования низколегированных сталей с содержанием хрома от 1 до 5 % (масс.). Суть метода заключается в потенциостатической поляризации исследуемых образцов в области потенциалов неустойчивого растворения (активно-пассивного перехода) с последующим анализом автоколебаний тока во времени с помощью Фурье-анализа. Анализируя таким образом периодический колебательный процесс, были определены характеристические частоты, соответствующие разным периодам развития процесса питтингообразования, и установлена взаимосвязь колебаний тока на экспериментальных хроноамперограммах с развитием питтингов. На основании выявленных особенностей временного распределения характеристических частот было показано, что процесс питтингообразования может быть представлен состоящим из трех основных этапов: образование оксидной пленки, ее рост, сопровождающийся формированием очагов локального растворения, и развитие отдельных питтингов. Причем, процесс растравливания питтингов также имеет периодический характер.

Локальные электрофизические свойства проводящих пленок ZnO

© Лашкова¹⁺ Наталья Алексеевна, Максимов^{1*} Александр Иванович,
Матюшкин¹ Лев Борисович, Мошников^{1,2*} Вячеслав Алексеевич,
Рябко¹ Андрей Андреевич, Сомов³ Павел Александрович
и Туленин⁴ Станислав Сергеевич

¹ Кафедра микро- и нанoeлектроники. Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина). Ул. проф. Попова, 5. г. Санкт-Петербург, 197376. Россия. Тел.: (812) 234-31-64.

² Кафедра интегральной электроники. Санкт-Петербургский государственный политехнический университет. Ул. Политехническая, 29. г. Санкт-Петербург, 197376. Россия. Факс: (812) 552-60-80.

³ ЗАО «Светлана-Рост». Пр. Энгельса, 27. г. Санкт-Петербург, 194156. Россия. Факс: (812) 320-43-94.

⁴ Кафедра физической и коллоидной химии. Уральский федеральный университет им. Первого президента России Б.Н. Ельцина. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Россия.
Н.А. Лашкова. E-mail: lashkovanat@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: оксид цинка, спрей-пиролиз, химическое осаждение из газовой фазы, растровая электронная микроскопия, сканирующая зондовая микроскопия.

Аннотация

Наноструктуры на основе оксида цинка являются перспективными для развития современных электронных устройств благодаря их уникальным электрическим и оптическим свойствам. Исследованные в данной работе проводящие пленки были синтезированы двумя методами – спрей-пиролизом и химическим осаждением из газовой фазы при низком давлении. Результаты, полученные с помощью растровой электронной микроскопии и атомно-силовой микроскопии, показывают, что поликристаллические слои состоят из зерен длиной 100-550 нм, а основная проводимость осуществляется по границам зерен.

Модификация Ключищенской глины Татарстана

© **Нажарова Лилия Назилевна, Квашнина⁺ Татьяна Сергеевна
и Мингазова Гульфия Гайнутдиновна**

Кафедра "Технологии неорганических веществ и материалов" (ТНВМ). Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (ФГБОУ ВПО «КНИТУ»).

Ул. К.Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: (843) 231-41-31. E-mail: tatka.100@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: глина, диатомит, химический и минеральный состав, комплексный дифракционно-термический анализ, образцы, физико-механические характеристики, микрофотографии, микроструктура, рентгенограммы.

Аннотация

В работе представлены результаты сравнительного анализа химического и минералогического состава глины Ключищенского месторождения Татарстана и диатомитов Инзенского и Ирбитского месторождений, показано их высокое сродство и применение для изготовления строительных стеновых материалов. Определены физико-механические характеристики образцов изготовленных из глины с добавками диатомита и установлена их зависимость от размера частиц, соотношения компонентов и температуры обжига. С использованием лазерного микроскопа изучена микроструктура образцов. Выполнен анализ фазового состава. Выявлены оптимальные условия для изготовления керамических материалов с высокими тепло-физическими характеристиками.

Экспериментальное исследование и компьютерное моделирование стабильного треугольника $\text{LiF-KI-K}_2\text{CrO}_4$ четырехкомпонентной взаимной системы Li,K||F,I,CrO_4

© Бурчаков*⁺ Александр Владимирович, Дворянова Екатерина Михайловна
и Кондратюк Игорь Мирославович

Самарский государственный технический университет. Ул. Молодогвардейская, 244.
г. Самара, 443100. Россия. E-mail: turnik27@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: фазовые равновесия, дифференциальный термический анализ, стабильный треугольник, квазитройная система, расслаивание жидких фаз, моновариантное монотектическое равновесие, T-x-y-фазовая диаграмма, фазовый комплекс.

Аннотация

В работе впервые экспериментально исследована квазитройная система $\text{LiF-KI-K}_2\text{CrO}_4$, которая является стабильным треугольником четырехкомпонентной взаимной системы Li,K||F,I,CrO_4 . В системе образуется тройная эвтектика, имеется область ограниченного твердого раствора на основе фторида лития, вследствие чего полюс кристаллизации смещен внутрь треугольника. Область ограниченной растворимости жидкостей занимает большую область в треугольнике составов. Экспериментальные данные позволили сконструировать трехмерную твердотельную модель фазового комплекса системы в виде T-x-y-диаграммы и построить на ее основе изотермы поверхности ликвидуса, изотермические и политермические сечения, а также рассчитать материальный баланс сосуществующих фаз некоторого образца состава.

Статья публикуется по материалам доклада на Международном научном форуме "Бутлеровское наследие-2015". <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 541.123.3+543.572.3+541.123.6. Поступила в редакцию 31 марта 2015 г.

Экспериментальное исследование и моделирование фазовых превращений в стабильном треугольнике NaF-KF-CsBr четырехкомпонентной взаимной системы Na,K,Cs||F,Br

© Кирсанов*⁺ Андрей Сергеевич и Бурчаков Александр Владимирович
Самарский государственный технический университет. Ул. Молодогвардейская, 244.
г. Самара, 443100. Россия. E-mail: andryxa07-92@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: фазовые равновесия, дифференциальный термический анализ, квазитройная система, стабильный треугольник, четырехкомпонентная взаимная система, эвтектика, Т-х-у фазовая диаграмма.

Аннотация

Четырехкомпонентная взаимная система Na,K,Cs||F,Br состоит из трех стабильных тетраэдров, разделенных двумя стабильными треугольниками. В работе представлено разбиение системы на стабильные элементы и описано химическое взаимодействие компонентов в виде материального баланса для каждого стабильного элемента. Проведен анализ элементов ограничения системы Na,K,Cs||F,Br. Экспериментально изучена методом дифференциального термического анализа квазитройная система NaF-KF-CsBr и определены характеристики неинвариантной точки. Построена трехмерная модель Т-х-у фазовой диаграммы системы.

Экспериментальное исследование секущего треугольника NaF-Na₂MoO₄-Kl четырехкомпонентной взаимной системы Na,K||F,I,MoO₄

© Терентьева⁺ Елизавета Викентьевна, Дворянова Екатерина Михайловна,
Гаркушин* Иван Кириллович и Краснов Михаил Александрович

Кафедра общей и неорганической химии. Самарский государственный технический университет
Главный корпус. Ул. Молодогвардейская, 244. г. Самара, 443100. Самарская область. Россия.

Тел.: (846) 242-36-92. E-mail: Here.and.now-1@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: дифференциальный термический анализ, эвтектика, фазовые равновесия, теория графов, древо фаз.

Аннотация

Проведено разбиение четырехкомпонентной взаимной системы Na,K || F,I,MoO₄ на симплексы с использованием геометрического метода и теории графов. Построено древо фаз системы, выявлены стабильные элементы. Методом дифференциального термического анализа исследованы фазовые равновесия в секущем треугольнике NaF-Na₂MoO₄-Kl. Определён эвтектический состав (экв. %): NaF-2%, Na₂MoO₄-60%, Kl-38% с температурой плавления 506 °С. Для эвтектического состава были определены удельная и молярная энтальпии плавления.

Экспериментальное исследование секущих элементов KCl-KBr-LiKCrO₄ и KCl-KBr-Li₂CrO₄ четырёхкомпонентной взаимной системы Li,K||Cl,Br,CrO₄

© Воронина[†] Елена Юрьевна 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: vor31@inbox.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

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

Аннотация

Проведено разбиение четырехкомпонентной взаимной системы Li,K||Cl,Br,CrO₄ на симплексы с использованием геометрического метода и теории графов. Построено древо фаз системы, выявлены стабильные элементы. Методом дифференциального термического анализа исследованы фазовые равновесия в секущих треугольниках KCl-KBr-LiKCrO₄ и KCl-KBr-Li₂CrO₄. В исследуемых системах сохраняется устойчивость непрерывных рядов твердых растворов на основе хлорида и бромида калия.

Термодинамическая оценка серопоглотительной способности шлаков системы CaO – CaF₂

© 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) 799-70-69. E-mail: se_pratskova@mail.ru.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: оксидно-фторидные расплавы, диаграмма состояния, обобщённая теория «регулярных» ионных растворов.

Аннотация

В рамках обобщённой теории «регулярных» ионных растворов рассчитана тройная диаграмма состояния CaO – CaF₂ – CaS, её изотермические (1500-1700 °С) сечения в условиях двухфазных равновесий расплав – CaO_(т) и расплав – CaS_(т). Оценена сульфидная ёмкость синтетических шлаков на основе CaO – CaF₂.

Фазовый комплекс трехкомпонентной системы $\text{Li}|\text{F}, \text{VO}_3, \text{WO}_4$

© Демин*⁺ Михаил Сергеевич, Бурчаков Александр Владимирович
и Гаркушин Иван Кириллович

Самарский государственный технический университет. Ул. Молодогвардейская, 244.
г. Самара, 443100. Россия. E-mail: mhas04@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: фазовые равновесия, дифференциальный термический анализ, трехкомпонентная система, Т-х-у фазовая диаграмма, трехкомпонентная эвтектика, 3D модель.

Аннотация

Авторами впервые экспериментально изучены двухкомпонентная система $(\text{LiVO}_3)_2\text{-Li}_2\text{WO}_4$ и трехкомпонентная система $(\text{LiF})_2\text{-}(\text{LiVO}_3)_2\text{-Li}_2\text{WO}_4$. В системах были определены составы и температуры двухкомпонентной и трехкомпонентной эвтектик. Особенностью состава трехкомпонентной эвтектики является малое содержание фторида лития. На основе экспериментальных данных сконструирована трехмерная компьютерная модель в среде КОМПАС-3D, позволившая построение поли-термических и изотермических сечений в системе.

Фазовые равновесия в конденсированных системах с участием циклододекана и *n*-алканов

© Гаркушин^{1*} Иван Кириллович, Колядо²⁺ Александр Владимирович, Петров³⁺ Евгений Петрович и Шамитов⁴⁺ Александр Анатольевич

Кафедра общей и неорганической химии. Самарский государственный технический университет. Ул. Молодогвардейская, 244. г. Самара, 443100.

Самарская область. Самара. ¹⁾Тел.: (846) 278-44-77.

E-mail: ¹⁾ baschem@samgtu.ru; ²⁾ kolyado@rambler.ru; ³⁾ e.p.petrov@yandex.ru; ⁴⁾ sansher@mail.ru;

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *n*-декан, *n*-октадекан, циклододекан, фазовые равновесия, ликвидус, эвтектика.

Аннотация

Методом низкотемпературного дифференциального термического анализа с использованием дифференциального сканирующего калориметра теплового потока исследованы системы *n*-декан–*n*-октадекан–циклододекан, *n*-декан–циклододекан, *n*-октадекан–циклододекан. Все исследованные системы относятся к эвтектическому типу. Сплавы эвтектического состава содержат 10.0 % масс. и 30.2 % масс. циклододекана и плавятся при температурах -32.9 и 17.2 °С соответственно. В системе *n*-декан–*n*-октадекан–циклододекан сплав эвтектического состава содержит 84.5 % масс. *n*-C₁₀H₂₂; 5.5 % масс. *n*-C₁₈H₃₈; 10 % масс. C₁₂H₂₄ и имеет температуру плавления -34.9 °С.

Анализ и прогнозирование ликвидусов систем $\text{Li}(\text{Na}),\text{K}||\text{Hal},\text{CrO}_4$ (Hal – F, Cl, Br, I)

© Дворянова¹⁺ Екатерина Михайловна, Игнатьева^{2*} Елена Олеговна,
Чугунова³ Марина Владимировна и Гаркушин^{1*} Иван Кириллович

¹ Кафедра общей и неорганической химии; ² Кафедра бурения нефтяных и газовых скважин.
Самарский государственный технический университет. Ул. Молодогвардейская, 244, главный корпус,
г. Самара, 443100. Самарская область. Россия. Тел.: (846) 242-36-92. E-mail: dvoryanova_kat@mail.ru

³ Кафедра технологии хранения и переработки продуктов животноводства.

Самарская государственная сельскохозяйственная академия.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: прогнозирование ликвидусов, анализ рядов, дифференциальный термический анализ, Т-х диаграмма, эвтектика, фазовые равновесия.

Аннотация

Проведено прогнозирование ликвидусов, основанное на анализе рядов однотипных трехкомпонентных взаимных систем $\text{Li}(\text{Na}),\text{K}||\text{Hal},\text{CrO}_4$ (Hal – F, Cl, Br, I). Результаты прогноза в системах $\text{Na},\text{K}||\text{Br},\text{CrO}_4$ и $\text{Na},\text{K}||\text{I},\text{CrO}_4$ подтверждены экспериментально методом дифференциального термического анализа.

Расчёт и прогнозирование критических температур двухкомпонентных систем из *n*-алканов

© Трунова⁺ Анна Николаевна, Гаркушин* Иван Кириллович,
Назмутдинов Алянус Галеевич и Гаркушин Алексей Иванович

Самарский государственный технический университет. Ул. Молодогвардейская, 244.
г. Самара, 443100. Россия. Тел.: (846) 242-36-92. E-mail: chemsstu@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: критическая температура, *n*-алканы, метод расчета, аналитическое описание.

Аннотация

В работе приводится описание метода расчета критических температур (T_c) для составов системы $C_3H_8 - n-C_9H_{20}$ на основе аналитического описания и графического построения изоконцентрированных зависимостей $T_c = f(n)$ ряда $C_3H_8 - n-C_nH_{2n+2}$ ($n = 4 \dots 10$).

Построены графические зависимости в различных системах координат. Полученные зависимости позволяют определить недостающие значения T_c в системах из *n*-алканов.

Исследование фазовых равновесий в системе дифенил – *n*-гексадекан

© Гаркушин* Иван Кириллович, Колядо Александр Владимирович
и Яковлев⁺ Иван Геннадиевич

Кафедра общей и неорганической химии. Самарский государственный технический университет.

Ул. Первомайская, 18. г. Самара. 443100. Самарская область. Россия. Тел.: (846) 278-44-77.

E-mail: yakovlev.ivan.g@gmail.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: дифференциальная сканирующая калориметрия, дифенил, *n*-гексадекан, фазовые равновесия.

Аннотация

Рассмотрены фазовые равновесия в системе дифенил – *n*-гексадекан. Определены температура плавления и состав эвтектики. По экспериментальным данным построен ликвидус системы. Кроме того, проведен расчет системы методом Шредера – Ле Шателье и определены физико-химические показатели сплава эвтектического состава, такие как температура вспышки и плотность. Выявлена зависимость кинематической вязкости сплава эвтектического состава в диапазоне температур от 25 до 50 °С.

Исследование стабильного тетраэдра LiBr-LiVO₃-NaBr-KBr четырёхкомпонентной взаимной системы Li,Na,K||Br,VO₃

© Мамедова Нурлана Азиз кызы, Самсонова⁺ Инна Николаевна,
Губанова* Татьяна Валерьевна и Гаркушин Иван Кириллович

Кафедра общей и неорганической химии. ФГБОУ ВПО Самарский государственный технический университет. Ул. Молодогвардейская, 244. г. Самара, 443100. Россия.

Тел.: (927) 759-72-95. E-mail: inna7774@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: фазовые равновесия, Т-х диаграмма, дифференциальный термический анализ (ДТА), стабильный тетраэдр, эвтектика.

Аннотация

Методом дифференциального термического анализа изучены фазовые равновесия в стабильном тетраэдре LiBr-LiVO₃-NaBr-KBr четырёхкомпонентной взаимной системы Li,Na,K||Br,VO₃. Определён состав компонентов эвтектического сплава (%мол.): 54.88% LiBr, 2.0% LiVO₃, 7.35% NaBr, 35.77% KBr с температурой плавления 324 °С. Описаны нон- и моновариантные равновесия.

Исследование двухкомпонентной системы себациновая кислота – адипиновая кислота

© Гаркушин^{1*} Иван Кириллович, Колядо¹ Александр Владимирович,
Алёнова¹⁺ Сауле Максотовна, Сукочев¹ Филипп Кириллович
и Штеренберг² Александр Моисеевич

¹ Кафедра общей и неорганической химии. Самарский государственный технический
университет. Ул. Молодогвардейская, 244. г. Самара, 443100. Россия.

Тел.: (846) 242-36-92. E-mail: saule-alenova@mail.ru

² Кафедра общей физики и физики нефтегазового производства. Самарский государственный
технический университет. Ул. Молодогвардейская, 244. г. Самара, 443100. Россия.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: дифференциальный термический анализ, себациновая кислота, адипиновая кислота, эвтектика.

Аннотация

Методом дифференциального термического анализа (ДТА) изучены фазовые равновесия в двухкомпонентной системе себациновая кислота – адипиновая кислота. Выявлен эвтектический состав с температурой плавления 120 °С, содержащий (% масс.): адипиновая кислота – 46.3%, себациновая кислота – 53.7%. Изученная система из двухосновных органических кислот представляет интерес для практического применения в качестве теплоаккумулирующего материала.

Кислотность ароматических сульфокислот в газовой и водной фазах

© Крылов^{1*} Евгений Николаевич, Груздев² Матвей Сергеевич
и Вирзум³ Людмила Викторовна

¹ Кафедра физической и органической химии. Ивановский государственный университет. Ул. Ермака, д.39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (84932) 37-37-03. E-mail: enk2000S@yandex.ru

² Институт химии растворов РАН. Ул. Академическая, д.1. г. Иваново, 153045.

³ Кафедра химии. Ивановская государственная сельскохозяйственная академия имени академика Д.К. Беляева. Ул. Советская, д.45. г. Иваново, 153012. Россия. E-mail: virzum@ivgsxa.ru

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: ароматические сульфокислоты, депротонирование, рКа, локальная электрофильность, электростатический потенциал, квантово-химические дескрипторы.

Аннотация

Кислотные свойства ароматических сульфокислот описаны в рамках количественной теории ЖМКО Пирсона на основе концептуальной DFT. Обнаружено, что величины их рКа линейно коррелированы на локальную электроёмкость реакционного центра (атома кислорода) и его электростатический потенциал, как в газовой фазе, так и в водной среде. Указанная зависимость согласуются с физическим смыслом электрофильности как электроёмкости реакционного центра.

Статья публикуется по материалам доклада на Международном научном форуме "Бутлеровское наследие-2015". <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 546.682.3,221.1. Поступила в редакцию 31 марта 2015 г.

Тематическое направление: Гидрохимический синтез пленок халькогенидов металлов. Часть 23.

Кинетика осаждения сульфида индия(III) из винно-гидроксиламинных растворов тиоацетамидом

© Туленин¹⁺ Станислав Сергеевич, Марков^{1,2*} Вячеслав Филиппович, Маскаева^{1,2} Лариса Николаевна и Третьяков¹ Андрей Валерьевич

¹ Кафедра физической и коллоидной химии. 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: v.f.markov@urfu.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: сульфид индия(III), химическое осаждение, формальная химическая кинетика, скорость химической реакции.

Аннотация

Исследована кинетика осаждения сульфида индия(III) тиоацетамидом из растворов, содержащих винную кислоту и гидроксиламин солянокислый, при температурах 333-363 К в условиях самопроизвольного зарождения твердой фазы в объеме раствора. Выведено формально-кинетическое уравнение скорости образования сульфида индия(III), учитывающее частные порядки реакции химического осаждения сульфида индия по компонентам системы и энергию активации процесса.

Инвариантные кинетические портреты линейной двухстадийной реакции

© Федотов¹⁺ Владислав Харитонович и Кольцов^{2*} Николай Иванович

¹ Кафедра информационных систем. Чувашский государственный университет. Московский пр., 15. г. Чебоксары, 428015. Республика Чувашия. Россия. Тел.: (8352) 58-67-95. E-mail: fvh@inbox.ru

² Кафедра физической химии и высокомолекулярных соединений. Чувашский государственный университет. Московский пр., 15. г. Чебоксары, 428015. Республика Чувашия. Россия. Тел.: (8352) 45-24-68. E-mail: koltsovni@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: линейная двухстадийная реакция, кинетические портреты, нелинейные преобразования, инварианты, стационарные состояния.

Аннотация

Показано, что нелинейные преобразования кинетической модели линейной двухстадийной реакции дают возможность использовать ее для описания сложного поведения реакций, характеризующихся несколькими стационарными состояниями с различными величинами скорости при разных начальных значениях концентраций реагентов.

Применение электрода, модифицированного углеродными нановолокнами и катионным ПАВ, для вольтамперометрического определения сиреневого альдегида и ванилина при совместном присутствии

© Зиятдинова⁺ Гузель Камилевна, Козлова Екатерина Валерьевна, Зиганшина Эндже Ришатовна и Будников* Герман Константинович

Кафедра аналитической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: (843) 233-77-36. E-mail: Ziyatdinovag@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: дифференциально-импульсная вольтамперометрия, химически модифицированные электроды, углеродные нановолокна, ПАВ, фенольные антиоксиданты.

Аннотация

Сиреневый альдегид и ванилин окисляются на стеклоуглеродном электроде, модифицированном углеродными нановолокнами и катионным ПАВ цетилпиридинием бромидом, при 0.77 и 0.88 В, соответственно, на фоне буферного раствора Бриттона-Робинсона pH 2.0. При этом наблюдается двукратное увеличение токов окисления аналитов, катодный сдвиг потенциалов окисления на 10-20 мВ и улучшение формы вольтамперных кривых по сравнению с немодифицированным электродом. Разность потенциалов окисления аналитов, составляющая 110 мВ, позволяет проводить их определение при совместном присутствии. Варьирование концентрации одного из компонентов при фиксированном значении концентрации второго показало, что возможна отдельная регистрация пиков окисления сиреневого альдегида и ванилина. Разработан способ одновременного вольтамперометрического определения сиреневого альдегида и ванилина при совместном присутствии. Диапазон определяемых содержаний составляет 2.5-30 и 5.0-40 мкМ для сиреневого альдегида и ванилина, соответственно, с пределами обнаружения 0.53 и 1.17 мкМ.

Об особенностях пассивации меди в сернокислых растворах

© Бирюков⁺ Александр Игоревич, Тюрин* Александр Георгиевич
и Тронов Артем Павлович

*Кафедра аналитической и физической химии. Челябинский государственный университет.
Ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454136. Россия. Тел.: (351) 799-70-69. E-mail: st4857@yandex.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: медь, сульфатсодержащие водные растворы, диаграммы электрохимического равновесия E – pH, поляризационные кривые.

Аннотация

Построены сечения диаграмм E – pH систем $\text{SO}_4^{2-} - \text{H}_2\text{O}$ и $\text{Cu} - \text{H}_2\text{SO}_4 - \text{H}_2\text{O}$. Сняты поляризационные кривые меди в растворе 1M H_2SO_4 . Анализируются термодинамические и кинетические особенности пассивации меди в сернокислых средах.

Электрохимические свойства комплексов никеля(II) с 2,2'-бипиридилем в присутствии дифенилфосфиновой кислоты

© Хуснуриялова^{1,2} Алия Фанусовна, Калугин^{1,2} Леонид Ермолаевич, Добрынин¹ Алексей Борисович 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: aliya15071993@mail.ru

² Кафедра физической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. КФУ. 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: 2,2'-бипиридил, дифенилфосфиновая кислота, комплексы никеля(II), циклическая вольтамперометрия.

Аннотация

Исследованы электрохимические свойства комплексов никеля с 2,2'-бипиридилем состава $[\text{Ni}(\text{bpy})_n]^{2+}$, где $n = 1-3$, в присутствии дифенилфосфиновой кислоты $\text{Ph}_2\text{P}(\text{O})\text{OH}$. Установлено, что дифенилфосфиновая кислота $\text{Ph}_2\text{P}(\text{O})\text{OH}$ является более сильным лигандом, чем монофенилфосфиновая $\text{PhP}(\text{O})(\text{H})\text{OH}$, и способна вытеснить 2,2'-бипиридил из координационной сферы никеля с образованием новых октаэдрических комплексов состава $[\text{Ni}(\text{Ph}_2\text{P}(\text{O})\text{O})_2(\text{Ph}_2\text{P}(\text{O})\text{OH})_2(\text{DMF})_2]$, структура которых была подтверждена методом рентгеноструктурного анализа. Показано, что электрохимическое восстановление полученных комплексов никеля с дифенилфосфиновой кислотой протекает при более отрицательных потенциалах, чем потенциал восстановления системы никель(II) / 2,2'-бипиридил.

Определение жирных кислот в жидкостях пьезоэлектрическими сенсорами на основе полимеров с молекулярными отпечатками

© Кривоносова¹⁺ Ирина Анатольевна, Дуванова¹ Ольга Васильевна,
Зяблов^{1*} Александр Николаевич, Соколова² Светлана Анатольевна
и Дьяконова² Ольга Вячеславовна

¹ Кафедра аналитической химии Воронежского государственного университета.
Университетская пл., 1. г. Воронеж, 394006. Воронежская область. Россия.

Тел.: (473) 220-89-32. E-mail: duvanovaov@mail.ru

² Кафедра химии Воронежского государственного аграрного университета имени Петра I.
Ул. Мичурина, д. 1. г. Воронеж, 394087. Воронежская область. Россия.

Тел.: (473) 253-76-78. E-mail: sokolova_chm@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: полимеры с молекулярными отпечатками, олеиновая и пальмитиновая кислоты, полиамидокислота (ПАК), полиимиды РД и ДФО, пьезоэлектрический сенсор, растительные масла.

Аннотация

На поверхностях пьезоэлектрических сенсоров с использованием ароматических соединений синтезированы полимеры сравнения и полимеры с молекулярными отпечатками (ПМО) олеиновой и пальмитиновой кислот. Проведен анализ модельных растворов жирных кислот в диапазоне концентраций: для олеиновой кислоты 0.16-0.86 г/дм³; для пальмитиновой кислоты 0.14-0.34 г/дм³. Рассчитаны импринтинг-фактор и коэффициент селективности определяемой кислоты по отношению к родственным соединениям. Пьезоэлектрические сенсоры, модифицированные ПМО, апробированы при анализе растительных масел.

Полная исследовательская публикация

Тематический раздел: Физико-химические исследования.

Регистрационный код публикации: 15-42-6-158

Подраздел: Спектроскопия артефактов.

Статья публикуется как материал заочного участия в Международном научном форуме “Бутлеровское наследие-2015”. <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 543.423.1. Поступила в редакцию 15 апреля 2015 г.

Опτικο-эмиссионная спектрометрия с индуктивно связанной плазмой в исследовании артефактов бронзовой эпохи Кемеровской области

© **Колмыков Роман Павлович**

Кафедра химии твердого тела. Кемеровский государственный университет.

Ул. Красная, 6. г. Кемерово, 650043. Россия.

Кемеровский научный центр СО РАН, пр. Советский, д. 18.

г. Кемерово, 650000. Россия. E-mail: kolmykoff.roman@yandex.ru

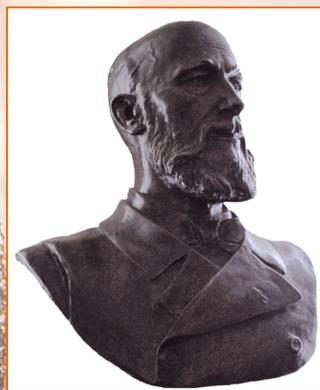
Ключевые слова: ОЭС ИСП, археология, бронза.

Аннотация

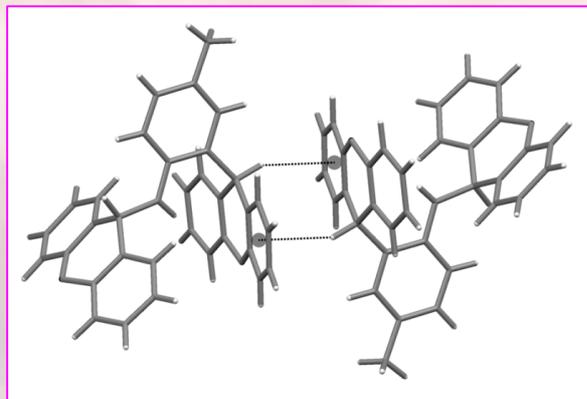
В работе определен элементный состав девяти артефактов одного из археологических памятников Кемеровской области при помощи метода оптико-эмиссионной спектрометрии с индуктивно связанной плазмой. Данный метод позволяет определить концентрации основных компонентов бронзовых изделий, а также примесей, которые помогают археологам в определении времени, технологии производства, источника руды.

Бутлеровские сообщения

№7, том 43. 2015



ISSN 2074-0212



ISSN 2074-0948

International Edition in English:
Butlerov Communications

Тематическое направление: Кинетика и механизм реакций ацильного переноса. Часть 10.

Реакционная способность дипептидов и эфиров карбоновых кислот при их взаимодействии в водных растворах 1,4-диоксана

© Кочетова¹ Людмила Борисовна, Калинина² Наталья Владимировна,
Грабчилева² Юлия Эдуардовна, Симонова² Ксения Александровна
и Кустова^{1*+} Татьяна Петровна

¹ Кафедра органической и физической химии; ² Кафедра неорганической и аналитической химии
Ивановский государственный университет. Ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия.
Тел.: (84932) 37-37-03. E-mail: kustova_t@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: ацилирование, дипептиды, сложные эфиры, вода-диоксан, специфическая сольватация, квантово-химическое моделирование.

Аннотация

Исследовано влияния состава бинарной системы вода-1,4-диоксан и строения сложных эфиров на кинетику реакций глицил-глицина и *L*- α -аланил-*L*- α -аланина с 4-нитрофенилацетатом и активированными нитрогруппой фенилбензоатами. Показано, что рост констант скорости при увеличении доли воды в растворителе связан со специфической сольватацией дипептидов. Кинетические данные сопоставлены с результатами квантово-химического моделирования молекул реагентов. Установлено, что дескрипторами реакционной способности при ацилировании дипептидов могут служить константы Гаммета, pK_a уходящей группы и орбитальные характеристики молекул эфиров.

5-Амино-3-метилтио-1,2,4-триазол, как ключевой полупродукт в синтезе противовирусного препарата Триазавирин®: синтез в промышленном масштабе и количественное определение методом ВЭЖХ

© Тумашов¹ Андрей Артурович, Артемьев^{1*} Григорий Андреевич, Копчук^{1,2+} Дмитрий Сергеевич, Русинов^{1,2} Владимир Леонидович, Уломский^{1,2} Евгений Нарциссович, Чупахин^{1,2} Олег Николаевич и Чарушин^{1,2} Валерий 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: dkorchuk@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: ВЭЖХ, 5-амино-3-метилтио-1,2,4-триазол, колонка "Kromasil".

Аннотация

Разработана аппаратная схема получения 5-амино-3-метилтио-1,2,4-триазола (ключевого полупродукта в ходе синтеза противовирусного препарата «Триазавирин») в промышленном масштабе, а также методика его количественного определения с применением метода ВЭЖХ.

Синтез и цитотоксическая активность новых порфиринов переходных металлов на основе производных хлорофилла *a*

© Тарабукина¹⁺ Ирина Степановна, Пылина² Яна Игоревна,
Велегжанинов² Илья Олегович, Старцева¹ Ольга Михайловна,
Шадрин² Дмитрий Михайлович и Белых^{1*+} Дмитрий Владимирович

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии Коми научного центра Уральского отделения Российской академии наук. Ул. Первомайская, 48.
г. Сыктывкар, 167982. Россия. E-mail: TarabukinaIS@mail.ru, belykh-dv@mail.ru

² Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биологии Коми научного центра Уральского отделения Российской академии наук.
Ул. Коммунистическая, 28. г. Сыктывкар, 167982. Россия.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: метилфеофорбид *a*, хлорин *e*₆, комплексы, фотонезависимая цитотоксичность противоопухолевые цитотоксиканты.

Аннотация

Синтезирован ряд новых порфиринов переходных металлов на основе производных хлорофилла *a* и изучена их фотонезависимая цитотоксическая активность по отношению к клеткам HeLa. Выявлено влияние природы центрального атома и строения лиганда на темную токсичность порфиринов на основе производных хлорофилла *a*. Показано, что внедрение катиона цинка приводит к резкому усилению токсичности соединений, в то время как внедрение катионов никеля и меди в большинстве случаев снижает токсичность. Среди исследованных соединений выявлены потенциальные противоопухолевые темновые цитотоксиканты.

Preparation of bis(2-hydroxyethyl)terephthalate from waste polyethylene terephthalate

© Nazigul S. Satbaeva,¹⁺ Tatiana M. Bogachyova,¹
Alevtina P. Rakhmatullina,^{1*} and Rafinat S. Yarullin^{1,2}

¹ Department of Synthetic Rubber Technology. Kazan State Technological University.

K. Marx St., 68. Kazan, 420001. Republic of Tatarstan. Russia.

² JSC "Tatneftekhiminvest-Holding".

Phone: +7 (843) 23-43-91. E-mail: ¹⁾ nazgul-satbaeva@mail.ru ; ²⁾ E-mail: rah-al@yandex.ru

*Supervising author; [†]Corresponding author

Abstract

The process of depolymerization of waste polyethylene terephthalate (PET) bottles by glycolysis in the presence of a catalyst – zinc acetate was investigated. Degradation of PET was performed in two ways: 1) using conventional heating to 140-180 °C; 2) using microwaves (MW). The process led to a homogeneous mass. The conditions for selection of the desired product – bis(2-hydroxyethyl)terephthalate (BHET) were found. It was studied that the use of MW substantially increases the yield and significantly reducing the time of depolymerization. The concentration of the catalyst (from 0.125 to 1.0 % wt.) has no significant effect on the yield of bis(2-hydroxyethyl)terephthalate when using MW unlike with conventional heating. The resulting product is a white crystalline powder with a melting point 108 °C with hydroxyl number = 436 mg KOH/g, which substantially corresponds to the literature data.

Получение наноструктурированных порошков серебра из дисперсий AgBr

© Лапсина¹⁺ Полина Валентиновна, Кагакин^{2*} Евгений Иванович,
Додонов³ Вадим Георгиевич и Пугачев³ Валерий Михайлович

¹ Центр коллективного пользования. Кемеровский научный центр СО РАН. Пр. Советский, 18. г. Кемерово, 650000. Россия. Тел.: 8-923-608-0271. E-mail: lpy110185@rambler.ru

² Кафедра химической технологии твердого топлива и экологии. Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева. Ул. Весенняя, 28. г. Кемерово, 650000. Россия. E-mail: kagakin55@mail.ru

³ Кафедра химии твердого тела. Кемеровский государственный университет. Ул. Красная, 6. г. Кемерово, 650043. Россия.. E-mail: 233191@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: наноструктурированные порошки, серебро, восстановление.

Аннотация

Предложен способ получения наноструктурированного серебра путем обработки малорастворимой соли AgBr водными растворами восстановителей. Рассмотрена морфология полученных наноструктурированных порошков серебра. Исследовано влияние природы восстановителя на размерные характеристики металла.

Синтез и внутримолекулярная циклизация кетостабилизированного бисилида фосфора в условиях микроволнового облучения

© Маликова¹⁺ Рауиля Надировна, Сахаутдинов^{1*} Ильшат Маратович,
Гайнетдинова² Лиля Мансафовна, Галин^{1,2} Фанур Зуфарович
и Юнусов¹ Марат Сабирович

¹ Уфимский Институт химии РАН. Пр. Октября, 71. г. Уфа, 450054. Республика Башкортостан.

Россия. Тел.: (347) 235-58-01. Факс: (347) 235-60-66. E-mail: rolimalika@mail.ru

² Башкирский государственный университет. Ул. 3. Валиди, 33. г. Уфа, 450074.

Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 273-48-42. E-mail: ioh039@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: кетостабилизированный фосфониевый бисилид, внутримолекулярная циклизация, замещенный 2*H*,6*H*-индолизино[2,1-*f*]пиридо[2,1-*a*]изоиндол.

Аннотация

Осуществлен синтез бисилида фосфора на основе β-фенил-β-аланина и пиромеллитового диангидрида, и изучена его внутримолекулярная циклизация в условиях микроволнового облучения. В результате региоселективно получен полигетероциклический продукт симметричного строения – 4,10-дифенил-3,4,8,10,11-тетрагидро-2*H*,6*H*-индолизино[2,1-*f*]пиридо[2,1-*a*]изоиндол-2,6,8,12-тераон-7.

Синтез производных урацила, содержащих в своей структуре остатки янтарной и малеиновой кислот

© Черникова⁺ Инна Борисовна и Юнусов* Марат Сабинович
Уфимский Институт химии РАН. Пр. Октября, 71. г. Уфа, 450054. Россия.
Тел.: (347) 235-58-39. Факс: (347) 235-60-66. E-mail: leben_87@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 5-аминоурацил, 6-аминоурацил, янтарный ангидрид, малеиновый ангидрид.

Аннотация

Используя в качестве субстрата 5-аминоурацил и янтарный или малеиновый ангидриды, простым способом с высокими выходами синтезированы 4-[(2,4-диоксо-1,2,3,4-тетрагидропиримидин-5-ил)амино]-4-оксобутановая и 4-[(2,4-диоксо-1,2,3,4-тетрагидропиримидин-5-ил)амино]-4-оксобут-2-еновая кислоты соответственно. Показано, что 6-аминоурацил в аналогичных условиях в реакцию не вступает.

Синтез и противомикробная активность 5-арил-4-ароил-3-гидрокси-1-[2-(2-гидроксиэтокси)этил]-3-пирролин-2-онов

© Рогачёв⁺ Сергей Николаевич, Бобылева Александра Александровна, Новикова Валентина Васильевна и Гейн* Владимир Леонидович

Кафедра общей и органической химии. БГОУ ВПО «Пермская государственная фармацевтическая академия Министерства здравоохранения Российской Федерации». Ул. Полевая, 2. г. Пермь, 614081. Россия. Тел.: (342) 236-90-50. E-mail: rogachevsergei@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺ Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 5-арил-4-ароил-3-гидрокси-1-[2-(2-гидроксиэтокси)этил]-3-пирролин-2-оны, синтез, противомикробная активность.

Аннотация

Реакцией 2-(2-аминоэтокси) этанола со смесью ароматического альдегида и метилового эфира ароилпировиноградной кислоты были получены 5-арил-4-ароил-3-гидрокси-1-[2-(2-гидроксиэтокси)этил]-3-пирролин-2-оны. Изучена противомикробная активность синтезированных соединений. Структура полученных 5-арил-4-ароил-3-гидрокси-1-[2-(2-гидроксиэтокси)этил]-3-пирролин-2-онов было доказано на основании ЯМР¹Н спектроскопии.

Разработка метода синтеза винилхлорида жидкофазным дегидрохлорированием дихлорэтана

© Даминев¹ Рустем Рифович, Асфандияров² Радик Нурфаезович, Асфандиярова^{1*} Лилия Рафиковна и Юнусова¹ Гузель Венеровна

¹ Филиал ФГБОУ ВПО Уфимский государственный нефтяной технический университет в г. Стерлитамаке. Кафедра общей химической технологии. пр. Октября, 2, г. Стерлитамак, 453118. Республика Башкортостан. Россия.

² ОАО «Башкирская содовая компания». Ул. Техническая, 32. г. Стерлитамак. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (3473) 24-25-12, 89649642606. E-mail: asfand_lilya@mail.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: дихлорэтан, винилхлорид, синтез, технология, дегидрохлорирование, алкоксид, электрохимия.

Аннотация

Нами установлена возможность синтеза винилхлорида путем взаимодействия 1,2-дихлорэтана (ДХЭ) с алкоксидами четвертичного аммония; проведены серии опытов по синтезу винилхлорида жидкофазным дегидрохлорированием ДХЭ алкоксидами четвертичного аммония, полученными электрохимическим способом из спиртовых растворов четвертичных аммониевых солей. К основным факторами, влияющим на результаты синтеза винилхлорида, являются температура, продолжительность процесса и концентрация спиртового раствора алкоксида четвертичного аммония. Установлено, что винилхлорид выделяется при температуре 0 °С с выходом 85-90%, при повышении температуры наблюдается увеличение выход винилхлорида и при температуре 20 °С составляет 98.0-99.7%. Повышение температуры выше 25 °С приводит к интенсивному пенообразованию, как следствие уносу жидкости из зоны реакции и накоплению ее в приемнике для сбора ВХ. Выделение винилхлорида в условиях реакции дегидрохлорирования происходит достаточно быстро, поэтому определяющим фактором, влияющим на выход, является время дозирования ДХЭ. В ходе проведенных экспериментов выяснилось, что в качестве дегидрохлорирующих агентов могут использоваться различные алкоксиды четвертичного аммония, поэтому представлялось интересным изучить возможность применения алкоксидов, синтезированных из отходов производства аллилхлорида, в синтезе винилхлорида.

Письмо в редакцию

Регистрационный код публикации: 15-43-7-46

Статья публикуется как материал заочного участия в Международном научном форуме “Бутлеровское наследие-2015”. <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 547: 304.2: 386. Поступила в редакцию 25 апреля 2015 г.

Тематический раздел: Препаративные исследования.

Подраздел: Органическая химия.

Трёхкомпонентный синтез *N*-арилметил-4-(5*H*-дibenzo[*a,d*]циклогептен-5-ил)анилинов

© Акентьева Татьяна Анатольевна

Кафедра общей химии. ФГБОУ ВПО «Пермская ГСХА» им. академика Д.Н. Прянишникова.

Ул. Петропавловская, 23. г. Пермь, 614000. Россия. Тел.: (342) 212-95-68.

E-mail: akentjeva-perm@rambler.ru

Ключевые слова: 5*H*-дibenzo[*a,d*]циклогептен-5-ол (дibenzosуберенол), *N*-арилметил-4-(5*H*-дibenzo[*a,d*]циклогептен-5-ил)анилины, имины.

Аннотация

Осуществлён одnoreакторный трёхкомпонентный синтез *N*-арилметил-4-(5*H*-дibenzo[*a,d*]циклогептен-5-ил)анилинов в системе – имин: дibenzosуберенол: тетрагидроборат натрия.

Молекулярные комплексы и взаимодействие 1,3-динитрилоксида-2,4,6-триэтилбензола и стабилизаторов химической стойкости смесевых энергетических материалов

© Попок*⁺ Владимир Николаевич и Федорищева Наталья Анатольевна

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: 1,3-динитрилоксид-2,4,6-триэтилбензол, молекулярные комплексы, сшивающие агенты, термическое разложение, ИК-спектроскопия.

Аннотация

В статье представлены результаты экспериментальных исследований взаимодействия 1,3-динитрилоксида-2,4,6-триэтилбензола с компонентами смесевых энергетических материалов, включая стабилизаторы химической стойкости. Определены соотношения компонентов, соответствующие образованию молекулярных комплексов. Установлены параметры термического поведения молекулярных комплексов, их ИК-спектры. Предложено применять полученные комплексы на основе 1,3-динитрилоксида-2,4,6-триэтилбензола в качестве отверждающего агента с возможностью регулирования времени вулканизации смесевых энергетических материалов.

Абиогенный синтез биологически важных и оптически активных молекул адсорбцией на углероде в раннем архее

© Жмакин Владимир Максимович

ОАО Югозапгеология. пос. Геологов, 30720. Октябрьский район Курской области. Россия.

Тел.: (47142) 2-13-92. E-mail: v.zhmakin@mail.ru

Ключевые слова: архей, атмосфера, углерод, адсорбция, синтез, оптическая активность, аминокислоты, рибоза.

Аннотация

Причины возникновения в природе оптически активных органических молекул не установлены до настоящего времени, но этому может способствовать выяснение условий на Земле в период их появления. В вулканических газах и ранней атмосфере H_2 и H_2 содержащие газы окислялись CO_2 с выделением воды и углерода или CH_2O и $CHOON$. При адсорбции углеродом растворённого в воде CH_2O мог происходить синтез только R рибозы, а с NH_3 и $CHOON$ глицина и только S серина и на его основе других S аминокислот. Адсорбция на углероде комплексно обеспечивала при образовании органических молекул: концентрацию исходных компонентов, гидрофобно-гидрофильные свойства, оптическую чистоту, защиту от гидратации, распада и рацемизации. Показана возможность дегидратации фосфорной кислоты, образования фосфоэфирных связей в нуклеотидах, с участием CH_2O жирных кислот и азотистых оснований.

Влияние дефектной структуры алюмооксидного носителя на адсорбционные свойства нанесенных частиц палладия в реакции гидрирования бутадиена-1,3

© Борецкая⁺ Августина Вадимовна, Ламберов* Александр Адольфович, Ильясов Ильдар Равилович, Ласкин Артем Игоревич и Киргизов Алексей Юрьевич
Кафедра физической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 233-75-36. E-mail: ger-avg91@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: псевдобемит, оксид алюминия, палладиевые катализаторы, гидрирование бутадиена-1,3.

Аннотация

Исследованы нанесенные палладиевые катализаторы на основе γ - Al_2O_3 различной кислотности. Кислотность носителя варьировали введением в гидроксид алюминия уксусной кислоты. Установлено, что введение кислоты не приводит к изменению фазового состава, но сопровождается изменением текстурных характеристик и увеличением количества кислотных центров. Последующее нанесение палладия сопровождается формированием высокодисперсного состояния активного компонента с сильным взаимодействием металл-носитель. Это обуславливает увеличение конверсии гидрирования 1,3-бутадиена и снижение селективности по бутенам.

ЭПР радикалов фенольных антиоксидантов с терпеновыми заместителями

© Садыков^{1*} Раис Асхатович, Сафина¹ Гульназ Дамировна,
Кожанов² Константин Алексеевич, Чукичева¹ Ирина Юрьевна
и Кучин¹ Александр Васильевич

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии Коми научного центра Уральского отделения Российской академии наук. Ул. Первомайская, 48. г. Сыктывкар, 167982. Республика Коми. Россия. Факс: +7 821 244 8121. E-mail: sadykov-ra@chemi.komisc.ru

² Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева Российской академии наук. Ул. Тropicина, 49. г. Нижний Новгород, 603137. Россия. Факс: +7 831 462 7497. E-mail: kostik@iomc.ras.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: спектры ЭПР, стерически затрудненные феноксильные радикалы, константы СТВ.

Аннотация

Изучены спектры ЭПР феноксильных радикалов ряда фенолов с изоборнильными и изокамфильными заместителями, обладающих высокой антиоксидантной активностью и перспективных в качестве лекарственных средств. Определены константы сверхтонкого взаимодействия спина неспаренного электрона с протонами. Обнаружено, что феноксильные радикалы с изоборнильными заместителями в *орто*-положениях ароматического кольца менее стабильны, чем радикалы с *трет*-бутильными заместителями.

Необходимые и достаточные условия существования и единственность температур Бойля и Джоуля-Томсона, объема Бойля и точки перегиба второго вириального коэффициента

© **Умирзаков Ихтиёр Холмаматович**

*Лаборатория моделирования. ФГБУН «Институт теплофизики СО РАН». Пр-кт Лаврентьева, 1.
г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org*

Ключевые слова: температура Бойля, объем Бойля, температура Джоуля, температура Джоуля-Томсона, второй вириальный коэффициент, потенциал взаимодействия.

Аннотация

Найдены необходимые и достаточные условия, налагаемые на сферически симметричный потенциал взаимодействия, чтобы существовали температуры Бойля и Джоуля-Томсона, объем Бойля и точки перегиба второго вириального коэффициента. Доказана единственность температур Бойля и Джоуля-Томсона, объема Бойля и точки перегиба второго вириального коэффициента объема. Доказано, что второй вириальный коэффициент не имеет точки касания оси температуры при конечной температуре.

Вторая частная производная удельного объема по давлению в критической точке фазового перехода жидкость-газ однокомпонентного вещества

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович

Лаборатория моделирования. ФГБУН «Институт теплофизики СО РАН». Пр-кт Лаврентьева, 1.
г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org

Ключевые слова: фазовый переход, уравнение состояния, критическая точка, флуктуационная теория.

Аннотация

Аналитически исследована вторая частная производная от удельного объема по давлению с помощью уравнения состояния флуктуационной теории критической точки и уравнения состояния Ван-дер-Ваальса. Показано, что эта производная в критической точке фазового перехода жидкость-газ не имеет определенного значения. Показано, что вторая частная производная от удельного объема по давлению не является непрерывной функцией и поэтому не является функцией состояния.

Расчет параметров вибрационного смешивания металлических композитов медь-галлий

© Игнатьев* Игорь Эдуардович, Шубин Алексей Борисович
и Игнатьева⁺ Елена Викторовна

*Лаборатория физической химии металлургических расплавов. Институт металлургии УрО РАН.
ИМЕТ УрО РАН. Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург. 620016. Россия.
Тел.: (343) 232-90-35. E-mail: l.ig_a@mail.ru*

*Ведущий направление; ⁺ Поддерживающий переписку

Ключевые слова: галлий, медь, смачиваемость, порошок, вибрационное перемешивание.

Аннотация

Рассмотрен вопрос определения параметров вибрационного воздействия на смесь порошковой меди и жидкого галлия при комнатной температуре, обеспечивающих смачивание частиц меди галлием и образование медно-галлиевой пасты. Построена прогностическая зависимость угла смачивания от амплитуды, частоты и числа циклов вибрации, позволяющая определить необходимую для получения пасты длительность обработки.

Усовершенствование технологии дегидрирования легких парафиновых углеводородов на приготовленном в электромагнитном поле катализаторе

© Даминев* Рустем Рифович, Каримов[†] Олег Хасанович,

Касьянова Лилия Зайнулловна и Каримов Эдуард Хасанович

Кафедра общей химической технологии. Уфимский государственный нефтяной технический университет, филиал в г. Стерлитамаке. Пр. Октября, 2. г. Стерлитамак, 453118. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (83473) 24-25-12. E-mail: karimov.oleg@gmail.com

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: СВЧ излучение, мономеры, изопрен, дегидрирование, алюмохромовый катализатор, изобутилен, метилбутены.

Аннотация

Представлены результаты усовершенствования промышленной технологии дегидрирования легких парафиновых углеводородов на алюмохромовых катализаторах, синтезированных новым способом – пропиткой с использованием электромагнитного излучения СВЧ диапазона. Технология синтеза алюмохромовых катализаторов под воздействием электромагнитного излучения на различных стадиях его приготовления позволяет получать катализатор с более высокими каталитическими показателями, выход олефинов повышается на 4.3%, селективность возрастает на 3.8%. Предложена усовершенствованная технологическая схема процесса дегидрирования легких парафиновых углеводородов на приготовленном катализаторе. Наиболее значимыми преимуществами полученных катализаторов, позволяющими усовершенствовать действующую технологию дегидрирования углеводородов являются: высокая механическая прочность, низкая скорость коксообразования катализатора и высокая термическая стабильность. В результате усовершенствования технологической схемы узел мокрой очистки запыленного углеводородного потока из реактора заменен на сухую очистку, что позволяет использовать отработанный катализатор вторично. Низкое коксообразование катализатора позволит снизить объем образования коксовых глыб в реакторе, деформирующих внутреннюю конструкцию реактора и нарушающих гидродинамический режим. Представлено экономическое обоснование усовершенствования.

Синтез ингибирующего состава для предотвращения коррозии нефтепромыслового оборудования

© Даминев* Рустем Рифович, Исламутдинова*⁺ Айгуль Акрамовна,
Иванов Александр Николаевич и Хамзин Ильдар Расулевич

*Кафедра общей химической технологии. ФГБОУ ВПО Уфимский государственный нефтяной технический университет, г. Стерлитамак. Проспект Октября, 2. г. Стерлитамак, 453116.
Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (3473)24-08-58. E-mail: aygul_ru@mail.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: химическая коррозия, нефтедобыча, металлы, полиэтиленполиамин, дихлорэтан, синтез ингибитора коррозии, защита металлов, электрохимический метод.

Аннотация

Получен ингибитор коррозии на основе продуктов конденсации полиэтиленполиамин (ПЭПА) и 1,2-дихлорэтана. Реакцию осуществляли в аппарате, снабжённом мешалкой при температуре 75 °С в течение 4-х часов. Полученную смесь подвергли однократной перегонке с целью извлечения из остатка компонентов, представляющих наибольшую ценность в плане защитной способности. Разделение смеси оценивали по изменению показателя преломления дистиллята. Ингибирующий состав подвергнут исследованию на антикоррозионную способность электрохимическим методом с использованием анализатора скорости коррозии “Монитор-2М». Полученные данные о величине коррозионного тока обработаны с помощью специально разработанного программного комплекса, позволяющего рассчитать величину защитной способности ингибитора. Также изучены его основные физико-химические свойства: внешний вид, плотность, растворимость и температура вспышки. Обнаружено, что данный ингибитор обладает высокими показателями ингибирующей способности и может применяться как ингибитор коррозии нефтепромыслового оборудования.

Особенности получения бессолевой *N,N*-диметил-*N,N*-диаллиламмонийхлорида и полимера на его основе

© Даминев¹ Рустем Рифович, Асфандияров² Радик Нурфаезович,
Фаткуллин² Раиль Наилевич, Асфандиярова^{1*+} Лилия Рафиковна
и Юнусова¹ Гузель Венеровна

¹ Филиал ФГБОУ ВПО Уфимский государственный нефтяной технический университет
в г. Стерлитамаке. Кафедра общей химической технологии. пр. Октября, 2.
г. Стерлитамак, 453118. Республика Башкортостан. Россия.

² ОАО «Башкирская содовая компания». Ул. Техническая, 32. Республика Башкортостан.
Россия. Тел.: (3473) 24-25-12, (9649) 64-26-06. E-mail: asfand_lilya@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: полимеризация, бессолевой полимер, мономер, синтез, флокуляция, химизм, реакция, технология.

Аннотация

Одним из высокоэффективных флокулянтов, применяющихся в настоящее время, является поли-*N,N*-диметил-*N,N*-диаллиламмоний хлорид (ДМДААХ), синтезируемый радикальной полимеризацией ДМДААХ в водном растворе. Целью исследования являлась разработка метода и технологии производства полидиаллилдиметиламмоний хлорида (полиДАДМАХ), не содержащего в своем составе хлорида натрия. Для проведения экспериментов по определению возможности проведения синтеза бессолевого мономера был проанализирован химизм процесса получения ДМДААХ. В результате экспериментов установлено, что данный метод имеет следующие недостатки: в ходе синтеза в системе накапливаются хлорид натрия, который необходимо выводить из нее; вода, вводимая в нее с каждой новой порцией раствора едкого натра. Увеличение количества воды в системе влечет к потерям продукта, так как часть диметилаллиламина находится в водной фазе в пределах растворимости. Была предложена принципиальная технологическая схема установки получения бессолевого мономера ДМДААХ. Преимуществом предлагаемого метода и технологии является отсутствие образования органически загрязненных сточных вод, что выгодно отличает ее от известных технологий получения бессолевого полиДАДМАХ.

Применение флокулянтов в целях очистки сточных вод химических производств

© Даминев Рустем Рифович, Асфандиярова*⁺ Лилия Рафиковна, Насыров Рамиль Рустамович и Юнусова Гузель Венеровна

Филиал ФГБОУ ВПО Уфимский государственный нефтяной технический университет в г. Стерлитамаке. Кафедра общей химической технологии. пр. Октября, 2, г. Стерлитамак, 453118. Республика Башкортостан. Россия.
Тел.: (3473) 24-25-12, (9649) 64-26-06. E-mail: asfand_lilya@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: дистиллерная жидкость, флокуляция, очистка сточных вод, коагулянт, полиэлектролит, фильтрация.

Аннотация

Проблема снижения негативного воздействия на окружающую природную среду отходов производства кальцинированной соды по аммиачному способу актуальна во всех странах, производящих соду по данному методу. Одним из эффективных способов интенсификации существующих технологий очистки сточных вод является использование высокомолекулярных флокулянтов самостоятельно или совместно с коагулянтами. Для выбора эффективного флокулянта, применяемого в целях сгущения дистиллерной суспензии, осуществлялся анализ применимости следующих видов флокулянтов – Каустамин-15, ВПК-402, Полиакриламид, СКФ-25, Флопам. Анализ полученных результатов серии опытов показал, что из рассматриваемых флокулянтов наилучшие показатели по скорости осаждения, содержанию взвешенных веществ в очищенной суспензии, относительной степени уплотнения имеют следующие марки: Каустамин-15, Полиакриламид, Флопам.

Электрохимическая переработка дистиллерной жидкости аммиачно-содового производства

© **Быковский***⁺ **Николай Алексеевич, Пучкова Людмила Николаевна и Фанакова Надежда Николаевна**

Филиал ФГБОУ ВПО Уфимский государственный нефтяной технический университет в г. Стерлитамаке. Кафедра общей химической технологии. пр. Октября, 2. г. Стерлитамак, 453118. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (3473) 24-25-12. E-mail: nbikovsky@list.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: дистиллерная жидкость, кальцинированная сода, электролизер, мембрана.

Аннотация

Исследован процесс переработки отхода производства кальцинированной соды – дистиллерной жидкости с получением гидроксида кальция, гидроксида натрия и соляной кислоты. Дистиллерная жидкость обрабатывалась гидроксидом натрия до максимального перевода кальция в нерастворимую форму – гидроксид кальция. После отделения осадка фильтрат, состоящий в основном из хлорида натрия, подвергался обработке в трехкамерном мембранном электролизере. Изучены основные закономерности процесса переработки дистиллерной жидкости по указанной методике. Показано, что технологический процесс можно организовать без использования химических реагентов.

Снижение скорости коррозии нефтегазового оборудования методом поляризации поверхности

© Латыпов¹ Олег Ренатович, Боев² Евгений Владимирович
и Бугай¹ Дмитрий Ефимович

¹Кафедра технологии нефтяного аппаратостроения. Уфимский государственный нефтяной технический университет. Ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450062. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 242-08-36. E-mail: latypov83@mail.ru

²Кафедра оборудования нефтехимических заводов. Уфимский государственный нефтяной технический университет, филиал в г. Стерлитамаке. Пр. Октября, 2. г. Стерлитамак, 453118. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (3473) 24-25-12. E-mail: 9196011116@mail.ru

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: скорость коррозии, поляризация, электродный потенциал, pH, окислительно-восстановительный потенциал, промышленная среда.

Аннотация

В статье приводится описание нового метода снижения скорости коррозии металлической поверхности путем ее поляризации. Основной причиной развития коррозии металла является термодинамическая нестабильность его электродного потенциала. Смещение стационарного потенциала в область равновесных значений приводит к поляризации металлической поверхности, а следовательно, к снижению скорости коррозии. Исследования показали, что при изменении основных электрохимических характеристик рабочей среды – pH и окислительно-восстановительного потенциала, происходит смещение электродного потенциала на поверхности металла. Смещение электродного потенциала стали 20 в область обратимого потенциала значительно снизило скорость коррозии. Применение разработанного метода и устройства позволит значительно уменьшить количество применяемых на нефтепромыслах ингибиторов коррозии или полностью их исключить, что приведет к уменьшению материальных затрат и снизит загрязненность готовой продукции ингибирующими веществами.

Разработка конструкции и методики расчета вихревого устройства для очистки газов

© **Афанасенко Виталий Геннадьевич***⁺ и **Боев Евгений Владимирович**
Кафедра «Оборудование нефтехимических заводов». Филиал ФГБОУ ВПО «Уфимский
государственный нефтяной технический университет» в г. Стерлитамаке.
пр. Октября, 2. г. Стерлитамак, 453100. Республика Башкортостан. Россия.
Тел.: (3473) 24-25-12. E-mail: awirus@rambler.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: сепарация, очистка газов, вихревое движение, центробежная сила.

Аннотация

Очистка технологических газов – это один из самых распространенных процессов предприятий газовой и нефтехимической промышленности. Он проводится на различных стадиях производства, как для подготовки газообразного сырья основного органического синтеза, так и для очистки его продуктов. Очистке также подвергаются газы перед выбросом их в атмосферу с целью уменьшения содержания вредных примесей, негативно влияющих на экологию. В данной статье рассмотрены особенности процесса разделения неоднородных газовых смесей в условиях закрученного движения, а также представлена конструкция устройства для проведения данного процесса.

Пластификатор для ПВХ композиций на основе кубового остатка ректификации 2-этилгексанола

© Даминев*⁺ Рустем Рифович, Нафикова* Райля Фаатовна,
Исламутдинова*⁺ Айгуль Акрамовна, Хамзин Ильдар Расулевич
и Иванов Александр Николаевич

Кафедра общей химической технологии. Уфимский государственный нефтяной технический университет, филиал в г. Стерлитамаке. Пр. Октября, 2. г. Стерлитамак, 453118. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (3473) 24-08-58. E-mail: aygul_ru@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: пластификатор, поливинилхлорид, диоктилфталат (ДОФ), лента ПВХ липкая.

Аннотация

В статье предложен усовершенствованный способ производства пластификатора для ПВХ композиций при использовании в качестве сырья кубового остатка ректификации 2-этилгексанола (КОРЭГ). В качестве катализатора реакции этерификации предложено использование стеарата цинка, который является термостабилизатором ПВХ. Изучения кинетики этерификации фталевого ангидрида с КОРЭГ в присутствии стеарата цинка показали, что он катализирует процесс этерификации. По результатам исследований сделан вывод о том, что полученный пластификатор обладает хорошими пластифицирующими свойствами и соответствует установленным требованиям.

Статья предназначена для преподавателей и студентов технических вузов, а также для инженеров-технологов химической и нефтехимической промышленности.

Исследование твердых бытовых отходов, образующихся в г. Стерлитамак, для возможности их использования в печах цементного производства

© Насыров* Рамиль Рустамович и Брызгина Елена Юрьевна[†]

Кафедра общей химической технологии. Уфимский государственный нефтяной технический университет, филиал в г. Стерлитамаке. Пр. Октября, 2. г. Стерлитамак, 453118. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (83473) 24-25-12. E-mail: 86elen86@mail.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: альтернативное топливо, твердые бытовые отходы, теплота сгорания, отходы, природный газ, энергоноситель, цемент, печь, клинкер.

Аннотация

Проведен анализ по существующим методам переработки твердых бытовых отходов и объемам его образования в Республике Башкортостан. Представлены результаты лабораторных исследований проб твердых бытовых отходов, образующихся в г. Стерлитамак, по определению его морфологического, элементного состава, а так же теплотворной способности. Рассмотрена возможность использования твердых бытовых отходов в печах цементного производства в качестве альтернативного источника энергии.

Определение ряда нестероидных противовоспалительных средств в крови в скрининге методами твердофазной экстракции и газовой хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием

© Дворская^{1*+} Оксана Николаевна, Катаев²⁺ Сергей Сергеевич
и Крохин² Илья Павлович

¹ 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

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

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: нестероидные противовоспалительные средства, скрининг, твердофазная экстракция, газовая хроматография, масс-спектрометрия.

Аннотация

Изучена возможность определения ряда нестероидных противовоспалительных средств в процедуре скрининга крови на наркотические и лекарственные вещества с применением методов твердофазной экстракции и газовой хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием. Ибупрофен, диклофенак, кеторолак, индометацин, напроксен и кетопрофен могут быть идентифицированы в крови непосредственно в процедуре скрининга.

Ксантенилирование ариламинов: синтез и строение новых продуктов реакции

© Горохов*⁺ Валерий Юрьевич и Юнникова⁺ Лидия Петровна

Кафедра общей химии. ФГБОУ ВПО «Пермская ГСХА» им. академика Д.Н. Прянишникова.

Ул. Петропавловская, 23. г. Пермь. 614000. Пермский край. Россия.

Тел.: (3422) 12-95-68. E-mail: gorokhov_v.yu@mail.ru, yunnikova@yahoo.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

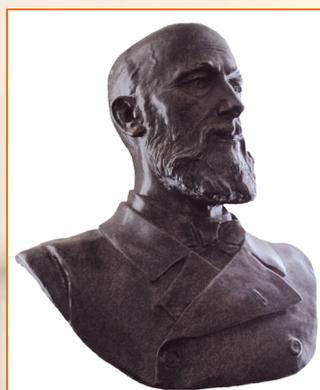
Ключевые слова: 9H-Ксантен-9-ол, перхлорат ксантилия, симметричное ксантенилирование, орто- и N-ксантенилирование, орто-ксантенилирование и N-ацетилирование.

Аннотация

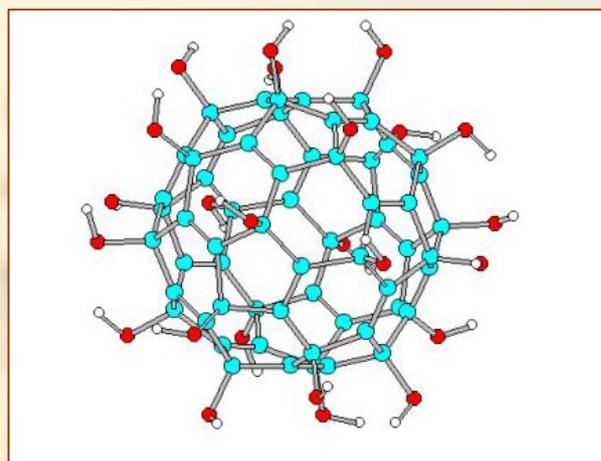
Обнаружены три новых направления для реакции ариламинов с 9H-ксантен-9-олом или перхлоратом ксантилия, заключающиеся в возможности осуществлять одновременное: 1) симметричное ксантенилирование двух орто-положений ариламина с сохранением свободной аминогруппы; 2) орто- и N-ксантенилирование или 3) орто-ксантенилирование и N-ацетилирование. Получение новых соединений осуществлено двумя методами: первый – ксантенилирование N- или орто-анилинов, содержащих фрагмент 9H-ксантена, второй – синтез в системе: ариламин – перхлорат ксантилия или 9H-ксантен-9-ол – растворитель.

Бутлеровские сообщения

№8, том 43. 2015



ISSN 2074-0212



ISSN 2074-0948

International Edition in English:
Butlerov Communications



О роли А.М. Бутлерова и его школы в становлении научного пчеловодства в России

© **Офицеров Евгений Николаевич**

*Кафедра химии и технологии биомедицинских препаратов. Факультет химико-фармацевтических технологий и биомедицинских препаратов. 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*

Аннотация

У нас на слуху "Бутлеровская химическая школа", которой гордятся казанцы. Однако существует в истории и другая Бутлеровская школа – школа научного пчеловодства или пчеловедения. Именно о А.М. Бутлере написал его ученик и последователь, известный музыкант, руководитель Мариинского театра Г.П. Кондратьев: "вождь русского пчеловодства". К пчеловодческой школе Бутлерова можно отнести известных учёных-химиков М. Киттары, А. Чугунова, И. Каблукова, упоминавшегося выше Г. Кондратьева и ряд других. Как написал академик Ю. Золотов: «Почему-то химиков всегда тянуло к пчелам». Действительно, в биографиях очень многих известных и великих химиков есть разделы, связанные с пчеловодством. Причем эти разделы по значимости часто сравнимы с химической деятельностью. Может быть это связано с тем, что многие химики-пчеловоды начинали свою научную карьеру как биологи. Примеров тому достаточно много: М. Киттары, А. Бутлеров, И. Каблуков и другие. Перефразируя Ю. Золотова можно написать и несколько иначе: «Почему-то зоологов, энтомологов, ихтиологов всегда тянуло к химии», так как большинство указанных химиков начинали свою научную карьеру как биологи.

Труды по пчеловодству ученика А.М. Бутлерова и В.В. Марковникова почетного академика АН СССР И.А. Каблукова

© **Смарыгин Сергей Николаевич**

*Кафедра неорганической и аналитической химии, Российский государственный аграрный университет – МСХА имени К.А. Тимирязева. Ул. Тимирязевская, 49. г. Москва, 127550. Россия.
Тел.: (916) 842-28-12. E-mail: smaryguin@mail.ru*

Ключевые слова: бутлеровская школа, А.М. Бутлеров, В.В. Марковников, И.А. Каблуков, пчеловодство, химия меда, химия воска.

Аннотация

Почетный академик АН СССР Иван Алексеевич Каблуков (1857-1942) учился в Московском университете у В.В. Марковникова и проходил стажировку в Петербургском университете у А.М. Бутлерова, поэтому с полным основанием может считаться последователем бутлеровской школы в химии. Он перенял любовь к пчеловодству у А.М. Бутлерова и на протяжении всей своей жизни сочетал научную и общественную деятельность в области химических наук и в области пчеловодства. В предлагаемом сообщении содержится анализ работ И.А. Каблукова по трем направлениям: 1) работы, посвященные химии меда, воска и прополиса и способам обнаружения фальсификации этих продуктов пчеловодства; 2) работы по организации и деятельности отделения пчеловодства Императорского русского общества акклиматизации животных и растений (в том числе, под руководством А.М. Бутлерова), включая проведение передвижных выставок пчеловодства; 3) статьи о состоянии пчеловодства в Европе и Америке.

Природные кислотно-основные индикаторы на основе антоцианов в работах учёных Индии

© Даминев* Рустем Рифович, Иванов⁺ Александр Николаевич,
Хамзин Ильдар Расулевич, Сайтмуратов Пахловон Суратович
и Каримов Олег Хасанович

*Кафедра общей химической технологии. ФГБОУ ВПО Уфимский государственный нефтяной
технический университет, г. Стерлитамак. Пр. Октября, 2. г. Стерлитамак, 453116. Республика
Башкортостан. Россия. Тел.: (3473)24-08-58. E-mail: aspirantdragon@yandex.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: химические индикаторы, кислотно-основное титрование, антоцианы, ипомея двулопастная, китайская роза, катарантус розовый, олеандр обыкновенный, олеандр душистый.

Аннотация

Одним из самых распространённых типов химических индикаторов являются кислотно-основные индикаторы, которые нашли широкое применение в аналитической химии и используются в качественном и количественном методах анализа. В связи с тем, что приготовление индикаторов на основе природного сырья является более простым, дешёвым и безопасным способом, чем изготовление синтетических соединений, ведутся многочисленные исследования в области получения новых натуральных индикаторов. Особое внимание уделяется антоцианам – природным красителям, содержащихся в широком спектре растений. Одной из ведущих стран в данном вопросе является Индия, где в различных исследовательских группах проводят эксперименты с разнообразными видами растений с целью извлечения из цветков и листьев экстрактов с последующей проверкой их на возможность применения в качестве индикаторов. В данной работе представлен обзор наиболее значимых работ учёных Индии за последнее десятилетие, направленных на изучение изменения окраски экстрактов растений, содержащих антоцианы, в зависимости от кислотности среды и возможности последних заменить собой применяемые на сегодняшний день синтетические кислотно-основные индикаторы.

Изменение уровня перекисного окисления липидов в культивируемых клетках ткани *Polyscias filicifolia* при воздействии постоянного магнитного поля

© Стрелкова Маргарита Андреевна, Кириллова*[†] Надежда Васильевна
и Кузьмина Надежда Сергеевна

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

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: культивируемые растительные клетки, *Polyscias filicifolia*, магнитное поле, перекисное окисление липидов.

Аннотация

Изучены изменения перекисного окисления липидов (ПОЛ) в культивируемых растительных клетках *Polyscias filicifolia* при воздействии слабого электромагнитного поля. Культивируемые клетки подвергали воздействию магнитного поля в течение 1, 3, 7 и 9 суток (экспоненциальная фаза роста) и на 12, 16, 19, 25 и 28 суток (стационарная фаза роста). Оценивали продукцию промежуточных и конечных продуктов ПОЛ: диеновых конъюгатов, конъюгированных кетатриенов, оснований Шиффа и малонового диальдегида. На ранних этапах культивирования наибольший повреждающий эффект магнитного поля на биомембраны установлен при 7-ми и 9-ти дневной экспозиции. На конечных этапах культивирования (28-30 сутки) происходит нормализация показателей ПОЛ, что свидетельствует о формировании в культивируемых клетках устойчивости к воздействию магнитного поля.

Состояние ферментной антиоксидантной защитной системы у больных сахарным диабетом II типа

© Кириллова*⁺¹ Надежда Васильевна, Мещерякова¹ Марина Геннадьевна, Спасенкова¹ Ольга Михайловна, Орехова¹ Ирина Анатольевна, Ларионова² Валентина Ильинична и Войтович² Анна Николаевна

¹ Кафедра биохимии. Санкт-Петербургская Государственная химико-фармацевтическая академия. Ул. проф. Попова, 14. Санкт-Петербург, 1977376. Россия.

² ФГБНУ «Институт экспериментальной медицины». Ул. Академика Павлова, 12. г. Санкт-Петербург, 197376. Россия. Тел.: (812) 234-90-33. Факс: 234-60-44. E-mail: kirillovanv47@mail.ru , nadezhda.kirillova@pharminnotech.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: сахарный диабет, СОД, каталаза, глутатионпероксидаза, глутатионредуктаза, параоксоназа.

Аннотация

Выявлено снижение активности ключевых ферментов антиоксидантной защиты в крови больных сахарным диабетом II типа: СОД, каталазы, глутатионпероксидазы, глутатионредуктазы и параоксоназы. Показана интенсификация окислительного стресса у больных сахарным диабетом II типа.

Исследование линейных и звездообразных макромолекул лигнина

© Карманов*⁺ Анатолий Петрович и 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

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: лигнины, скейлинг, корреляционная размерность, конфигурация макромолекул.

Аннотация

Обсуждаются данные экспериментального исследования природных лигнинов, а также результаты имитационного компьютерного моделирования макромолекул со звездообразной и линейной топологией на кубической решетке. Вычислены значения корреляционной размерности и скейлинговых параметров линейной и звездообразной макромолекул.

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Исследование реакционной способности.
Регистрационный код публикации: 15-43-8-52 Подраздел: Химия фуллеренов.
Статья публикуется как материал заочного участия в Международном научном
форуме “Бутлеровское наследие-2015”. <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 541.49.183:546.562.723:547.854.5. Поступила в редакцию 28 апреля 2015 г.

Взаимодействие фуллеренола с биологически активными веществами в водных растворах

© Дмитриева* Ирина Борисовна, Назипова Альбина Ринатовна,
Эрдни-Гаряев Сергей Эдуардович, Чухно⁺ Александр Сергеевич,
Герасимов Виктор Иванович, Мезютин Михаил Юрьевич,

Климкина Екатерина Александровна и Высоцкая Анастасия Алексеевна

Кафедра физической и коллоидной химии. Санкт-Петербургская государственная химико-фармацевтическая академия. Ул. Профессора Попова, 14, лит. А. г. Санкт-Петербург, 197376.

Россия. Тел.: (9052) 14-59-73. E-mail: alex-chuhno@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: фуллеренол, декстран, иммуноглобулин, желатина, глицин, аспарагиновая кислота, набухание, микроэлектрофорез, изоэлектрическая точка.

Аннотация

Проведены исследования ряда физико-химические свойства водных растворов фуллеренола (электропроводности, поверхностного натяжения, оптической активности, влияние на набухание желатины и электрокинетические свойства декстрана), его взаимодействия с различными биологически активными веществами.

Установлено, что фуллеренол не обладает поверхностной активностью, заметно не влияет на электропроводность и pH воды, специфически не взаимодействует с декстраном. Полученные результаты показывают, что фармакологическое действие водных растворов фуллеренола связано с его взаимодействием с белками.

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Исследование реакционной способности.
Регистрационный код публикации: 15-43-8-60 Подраздел: Металлоорганическая химия.
Статья публикуется как материал заочного участия в Международном научном
форуме “Бутлеровское наследие-2015”. <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 547.947.733. Поступила в редакцию 21 апреля 2015 г.

Сравнительный анализ реакционной способности Cu(II) при взаимодействии с окта(4-бромфенил)тетраазапорфирином и Mg-окта(4-бромфенил)тетраазапорфирином

© Звездина¹⁺ Светлана Вениаминовна, Чижова¹ Наталья Васильевна,
Мальцева¹ Ольга Валентиновна, Мамардашвили¹ Нугзар Жораевич
и Койфман^{1,2} Оскар Иосифович

¹ Лаборатория «Координационная химия макроциклических соединений». Федеральное государственное
бюджетное учреждение науки Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН.

Ул. Академическая, 1. г. Иваново, 153040. Россия. Тел.: (84932) 33-69-90 (доб. 2-77). E-mail: svvr@isc-ras.ru

² Институт химии макрогетероциклических соединений, Ивановский государственный химико-
технологический университет. Пр. Шереметевский, 7. г. Иваново, 153000. Россия.
Тел.: (4932) 33-69-90 (доб.2-65). E-mail: koifman@isuct.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: окта-(4-бромфенил)тетраазапорфирин, Mg(II)-окта-(4-бромфенил)тетрааза-
порфирин, хлорид меди(II), комплексообразование, реакция металлообмена, константы
скорости.

Аннотация

Изучена реакция комплексообразования хлорида меди(II) с окта-(4-бромфенил)тетраазапорфи-
рином–лигандом и металлообмен с Mg(II)-окта-(4-бромфенил)тетраазапорфирином в диметилфор-
мамиде (ДМФА). Определены кинетические параметры реакций и проведен сравнительный анализ
их констант скоростей. Установлен первый порядок по соли и по металлокомплексу в реакции
металлообмена Mg(II)-окта-(4-бромфенил)тетраазапорфирина с хлоридом меди(II) в ДМФА. Предло-
жен механизм реакции металлообмена.

Полная исследовательская публикация

Тематический раздел: Физико-химические исследования.

Регистрационный код публикации: 15-43-8-66

Подраздел: Неорганическая химия.

Статья публикуется как материал заочного участия в Международном научном форуме "Бутлеровское наследие-2015". <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 541.123:546.656'711'21. Поступила в редакцию 28 апреля 2015 г.

Изучение последовательности кристаллохимических превращений в $\text{LaMnO}_{3+\delta}$

© **Ведмидь Лариса Борисовна, Янкин* Александр Михайлович, Козин⁺ Владислав Михайлович и Фёдорова Ольга Михайловна**

*Лаборатория статистики и кинетики процессов. ФГБУН Институт металлургии УрО РАН.
Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Россия. Тел.: (343) 232-90-72. E-mail: elarisa100@mail.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: Манганиты редкоземельных элементов, кислородная стехиометрия, фазовые равновесия, эффект Яна-Теллера.

Аннотация

Совокупностью методов рассмотрена эволюция структурных превращений в соединении $\text{LaMnO}_{3.018}$ и определены их температурные границы. Статическим методом измерена температурная зависимость равновесного давления кислорода для реакции диссоциации $\text{LaMnO}_{3.018}$. Вычислены изменения стандартных энтальпии и энтропии образования этого соединения из элементов.

О молекулярном механизме биологической активности апигенина

© **Насибуллин*⁺ Руслан Сагитович, Спирихин Леонид Васильевич, Фахретдинова Динара Илдаровна, Галеева Роза Ибрагимовна**

Башкирский государственный медицинский университет. Уфа. Ул. Ленина, 3.

E-mail: med-fis@yandex.ru

^{*}Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: биологическая активность, флавоноиды, апигенин, ЯМР спектроскопия, квантово-химические расчеты.

Аннотация

Методами спектроскопии ЯМР и квантовой химии проведены исследования взаимодействия молекулы тригидрооксифлавона (апигенина) с молекулой фосфатидилхолина. Показано изменение конформационных состояний молекулы лецитина при формировании комплекса с апигенином, вызывающих образование кинков.

Моделирование фазового равновесия жидкость-жидкость в системах триацилглицериды – жирная кислота – этанол

© **Пермякова Ирина Александровна, Казаков⁺ Дмитрий Александрович, Вольхин* Владимир Васильевич, Воронина Наталья Сергеевна и Зоричев Иван Юрьевич**

*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: моделирование, фазовые равновесия, системы жидкость-жидкость, модель UNIFAC, триацилглицериды, этанол, олеиновая кислота, стеариновая кислота, лауриновая кислота.

Аннотация

Цель работы – определить возможность применения модели UNIFAC для анализа фазовых равновесий в системах TAG – CarbA – EtOH, где TAG – триацилглицериды (подсолнечное масло), CarbA – жирные карбоновые кислоты – олеиновая (OIA), стеариновая (StA), лауриновая (LaurA), EtOH – этанол при температурах от 30 до 70 °С, что связано с утилизацией отходов растительных масел, содержащих свободные жирные кислоты. В работе использована модель UNIFAC с изменёнными параметрами группового взаимодействия (a_{mn} , a_{nm}). Для исследованных систем выполнены как расчёты, так и эксперименты, что позволило построить фазовые диаграммы трёхкомпонентных систем, определить состав точек обратимого перехода систем из гетерогенного состояния в гомогенное, рассчитать по этим данным значения остаточной дисперсии и оценить степень соответствия расчётных данных экспериментальным. Установлено, что для систем с OIA применение модели UNIFAC с изменёнными параметрами группового взаимодействия приводит к расчётным результатам, близким экспериментальным, но даёт существенные отклонения для систем с LaurA и, особенно, с StA. За счёт достаточно высоких $T_{пл}$ эти кислоты повышают вероятность образования в системах твёрдых фаз с увеличением общего числа фаз в них до трёх.

Моделирование и сравнение модового состава галогенидосеребряных фотонно-кристаллических волокон с пустой и цельной сердцевиной и одним кольцом вставок для среднего ИК

© Врублевский Дмитрий Станиславович, Корсаков Александр Сергеевич
и Жукова*[†] Лия Васильевна

Кафедра физической и коллоидной химии. Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Россия.

Тел.: (343) 375-44-45. E-mail: l.v.zhukova@urfu.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: фотонно-кристаллические волокна, компьютерное моделирование, фундаментальная мода, средний ИК диапазон, твердые растворы галогенидов серебра.

Аннотация

Смоделированы модовые составы фотонно-кристаллических волокон с одним кольцом вставок, расположенных в гекса- и октагональном порядке, для случаев с цельной сердцевиной либо с центральным дефектом с более низкой или высокой оптической плотностью материала в расчете на показатель преломления систем $\text{AgCl}_{1-x}\text{Br}_x$ ($x = 0.75, 0.82$ и 0.84). В результате сравнения смоделированных мод выявлены преимущества волокон с активированной сердцевиной, то есть с большим показателем преломления центральной вставки. Предсказана передача больших мощностей по такому волокну, в сравнении со стандартным двухслойным волокном с аналогичными габаритами.

Минерализация щавелевой кислоты при озонировании в присутствии частиц активированного угля

© Казаков⁺ Дмитрий Александрович, Вольхин* Владимир Васильевич,
Гуленова Юлия Олеговна, Обирин Марина Николаевна
и Рожина Дарья Андреевна

*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: щавелевая кислоты, минерализация, озон, активированный уголь.

Аннотация

Приведены результаты изучения влияния образцов активированного угля промышленных марок (БАУ-А и АГ-5) с различными текстурными характеристиками на скорость минерализации щавелевой кислоты при озонировании. Установлено, что в присутствии изучаемых образцов активированного угля скорость минерализации щавелевой кислоты существенно увеличивается, при этом, несмотря на существенное различие текстурных характеристик изучаемых образцов, каталитическая активность образца БАУ-А лишь немного ниже по сравнению с образцом АГ-5. С целью объяснения полученных данных проведён теоретический анализ макрокинетических режимов протекания процесса минерализации щавелевой кислоты под действием озона в присутствии частиц активированного угля. Исследовано влияние размера частиц активированного угля на скорость деструкции щавелевой кислоты, проведена оценка концентрации активных центров (ОН-групп) на поверхности изучаемых образцов активированного угля с применением ИК-Фурье спектроскопии. Как было установлено, концентрация активных центров (ОН-групп) в составе образца БАУ-А лишь немного ниже, чем у образца АГ-5, что согласуется с данными по каталитической активности этих образцов. Обнаружено, что скорость минерализации щавелевой кислоты при озонировании существенно увеличивается с уменьшением размера частиц активированного угля. На основе полученных данных сделан вывод о том, что наиболее вероятной является реализация каталитической минерализации щавелевой кислоты во внешнекинетическом режиме, в котором макроскопическая скорость процесса определяется размером частиц катализатора и концентрацией активных центров на его поверхности и почти не зависит от его текстурных характеристик.

Получение композиционных порошков, содержащих карбиды металлов

© Варакин¹ Александр Владимирович, Лисин^{2*} Вячеслав Львович,
Костылев¹ Виктор Алексеевич, Леонтьев² Леопольд Игоревич,
Захаров² Роберт Григорьевич и Петрова²⁺ Софья Александровна

¹ Общество с ограниченной ответственностью «Технологии тантала». Ул. Ленина, 131. г. Верхняя Пышма, 624096. Свердловская область. Россия. Тел.: (343) 373-26-46. E-mail: ppr-nauka@yandex.ru

² Лаборатория физической химии металлургических расплавов. Институт металлургии Уральского отделения РАН. Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Россия.
Тел.: (343) 267-88-94. E-mail: danaus@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: карбид титана, карбид вольфрама, электрохимическое восстановление, солевой расплав, металлическая матрица.

Аннотация

В работе выполнены исследования реализуемых в лабораторных условиях способов агломерации и спекания плакированных нано- и субмикронных электролитических карбидных порошков в металлической матрице, с целью получения композиционных гранул декамикронного размера. Рассмотрено два варианта агломерации: «брикетирование – размол – рассев – спекание» и «окатывание – рассев – спекание». Исследования проводили на примере порошка карбида титана, плакированного хромом, железом и титаном в матрице из смеси наноразмерных и ультрадисперсных порошков хрома, никеля и титана. Были получены композитные порошки гранулометрического состава +40-125 мкм и +40-160 мкм. В работе исследовано изменение фазового состава композита, состоящего из плакированных 3d-металлами электролитических порошков TiC и WC в металлической матрице, при термообработке и спекании. Показано, что оптимальные термовременные параметры необходимо подбирать не только при изменении химического состава композита, но также и при изменении концентрационных соотношений в составе композита.

Способ карбидизации монолитных стержней тугоплавких металлов

© Варакин¹ Александр Владимирович, Лисин^{2*} Вячеслав Львович, Костылев¹ Виктор Алексеевич, Леонтьев² Леопольд Игоревич, Захаров² Роберт Григорьевич, Петрова²⁺ Софья Александровна, Игнатьева² Елена Викторовна и Шубин² Алексей Борисович

¹ Общество с ограниченной ответственностью «Технологии тантала». Ул. Ленина, 131. г. Верхняя Пышма, 624096. Свердловская область. Россия. Тел.: (343) 373-26-46. E-mail: prp-nauka@yandex.ru

² Лаборатория физической химии металлургических расплавов. Институт металлургии Уральского отделения РАН. Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Россия.

Тел.: (343) 267-88-94. E-mail: danaus@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: вольфрам, титан, карбидизация, химические транспортные реакции, электрохимическое восстановление, солевой расплав.

Аннотация

Проведена карбидизация объемных образцов вольфрамового и титанового стержней методом химических транспортных реакций в расплаве солей. По данным РФА, РСМА, а также измерению микротвердости установлено, что на поверхности стержней образовалось карбидное покрытие толщиной 20-50 мкм. Показано, что анодное растворение является лимитирующим условием процесса карбидизации. Для исключения анодного растворения и ускорения процесса карбидизации предложено через образец пропускать переменный ток.

Тематический раздел: Исследование новых технологий.
Подраздел: Биохимия.

Полная исследовательская публикация

Регистрационный код публикации: 15-43-8-119

Статья публикуется как материал заочного участия в Международном научном форуме "Бутлеровское наследие-2015". <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
Поступила в редакцию 21 апреля 2015 г. УДК 577.112.083+577.152.321.

Тематическое направление: Биоконверсия фитомассы *Helianthus tuberosus* L (топинамбур) в сахара для производства биотоплива. Часть 1.

Биоконверсия клубней топинамбура

© 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: ферментативный гидролиз, мультиэнзимные композиции, топинамбур, биотопливо.

Аннотация

Проведено сравнение эффективности ферментных препаратов с разной субстратной специфичностью и их композиций при гидролизе биомассы клубней топинамбура. Установлен эффект комплементарности действия целлюло-, пектинолитических препаратов и комплекса собственных гидролаз топинамбура, приводящий к тотальному и не избирательному разрушению структурных полисахаридов, что способствует достижению высокой скорости гидролитических превращений, повышению выхода редуцирующих сахаров и степени конверсии при ферментативном гидролизе биомассы клубней топинамбура.

Волоконно-оптические системы для on-line контроля промышленных процессов

© **Корсаков Александр Сергеевич**

*Кафедра физической и коллоидной химии. Уральский федеральный университет им. первого
Президента России Б.Н. Ельцина. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Россия.
Тел.: (343) 375-44-45. E-mail: A.S.Korsakov@urfu.ru*

Ключевые слова: ИК-Фурье спектроскопия, твердые растворы галогенидов серебра и таллия, фотонные ИК-световоды.

Аннотация

Разработаны волоконно-оптические зонды для спектроскопии среднего инфракрасного диапазона (2-18 мкм). Пригодность использования волоконно-оптических зондов для идентификации веществ методами ИК-Фурье спектроскопии продемонстрирована на примере исследования спектров чернил шариковой ручки и чернил принтера и определении последовательности их нанесения. Показана принципиальная возможность использования волоконно-оптических систем для контроля промышленных процессов на примере исследования химического состава и концентрации растворов электролитов в реальном времени, с использованием спектральных методов анализа.

Реологические особенности наполненных нитратцеллюлозных лаковых композиций

© Гайнутдинова⁺ Наталья Сергеевна, Енейкина* Татьяна Александровна,
Солдатов Сергей Васильевич, Павлов Анатолий Петрович,
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.: 544-07-21, 544-09-82. E-mail: 173gnihp@gmail.com*

*Ведущий направления; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: нитратцеллюлозный лак, наполнитель, концентрационная зависимость, эффективная вязкость, реология.

Аннотация

Представлена концентрационная зависимость вязкости наполненного 25%-го нитратцеллюлозного лака (НЦ-лака), имеющая экстремальный характер с минимумом ~ 50 % масс. по отношению к НЦ. Положение концентрационного минимума соответствующего ~50% масс. не зависит от концентрации исходного НЦ-лака. Показана асимптотическая зависимость значения вязкости наполненного 25%-ого НЦ-лака от удельной поверхности частиц октогена при постоянной массовой концентрации наполнителя. Наиболее интенсивный рост вязкости, примерно в ~1.6 раза, происходит при значениях удельной поверхности в интервале 8000-12500 см²/г.

Энергия диссоциации С-Х (X = F, Cl, Br, I) связей в галогензамещенных углеводородах: корреляционные соотношения с электроотрицательностью, силовыми постоянными связей и радиусами атомов X

© Туманов Владимир Евгеньевич

Институт проблем химической физики РАН. г. Черноголовка, 142432.

Московская обл. Россия. Факс: (496) 522-35-07. E-mail: tve@icp.ac.ru

Ключевые слова: энергия диссоциации связи, энтальпия образования радикала, энтальпия образования молекулы, электроотрицательность, силовая постоянная связи, радиус атома, корреляционное уравнение, регрессионное уравнение.

Аннотация

Вычислены или уточнены энергии диссоциации С-Х-связей (X = F, Cl, Br, I) в галогензамещенных углеводородах по энтальпиям образования свободных радикалов, полученных из экспериментальных кинетических данных. Проведено сравнение полученных результатов с литературными данными. Установлена тесная корреляционная связь между энергией диссоциации С-Х-связи замещенных углеводородов с их электроотрицательностью, силовой постоянной и размером атома X. Предложены регрессионные уравнения для различных групп галогензамещенных углеводородов в форме $D_{C-X} = \omega_1 \sqrt{D_{X-X} D_{C-C}} + \omega_2 br_{XX} + \omega_3$, где $D_{F-F} = 158.670 \pm 0.096$ кДж/моль, $D_{Cl-Cl} = 242.58 \pm 0.004$ кДж/моль, $D_{Br-Br} = 193.859 \pm 0.120$ кДж/моль, $D_{I-I} = 152.25 \pm 0.57$ кДж/моль, D_{C-C} рассчитаны по энтальпиям образования свободных радикалов.

Квантово-химическое изучение строения и энергии образования изомерных структур $C_{60}N_2^q$ и $C_{60}N_2H^q$, $q = 0, -1, -2$, на основе фуллерена C_{60}

© Трифонов⁺ Николай Юрьевич и Шестаков* Александр Фёдорович
Лаборатория Комплексных катализаторов. Отдел кинетики и катализа.
Институт проблем химической физики РАН. Проспект академика Семенова, 1.
г. Черноголовка. Московская область. Ногинский район. Россия.
Тел.: (49652) 2-17-63. E-mail: viktor-bilyaev@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: реакционная способность, катализ, фуллерен C_{60} , фиксация азота.

Аннотация

В данной работе были рассмотрены различные интермедиаты фиксации молекулярного азота в присутствии супрамолекулярного комплекса фуллерена C_{60} с γ -циклодекстрином в процессе электролиза. Были найдены структуры, у которых имеется относительно небольшое повышение энергии при присоединении N_2 .

Решение колебательной задачи для молекул фуроксана и диметилфуроксана в координатах X_8^0 с оценкой силового поля в рамках DFT

© **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: фуроксан, диметилфуроксан, обобщенные силовые коэффициенты, координаты X_8^0 , расчеты DFT, частоты нормальных колебаний.

Аннотация

В рамках метода функционала плотности B3LYP 6-311++G(3df,3pd) впервые получено силовое поле молекулы фуроксана и диметилфуроксана в координатах X_8^0 . Найдены обобщенные силовые коэффициенты связей, вычислены частоты нормальных колебаний и проведено их отнесение к определенным видам колебаний.

Изучение окислительного расщепления галогенфеноксциклопропанов под действием азотистой кислоты

© Газзаева*[†] Римма Александровна, Коблова Лариса Борисовна
и Тигиева Лаура Вячеславовна

Кафедра органической химии. Химико-технологический факультет. ФГБОУ ВПО Северо-Осетинский государственный университет им. К.Л. Хетагурова. Ул. Ватутина, 40. г. Владикавказ, 362025. Республика Северная Осетия-Алания. Россия. Тел.: (928) 067-98-53. E-mail: gazaevan@mail.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

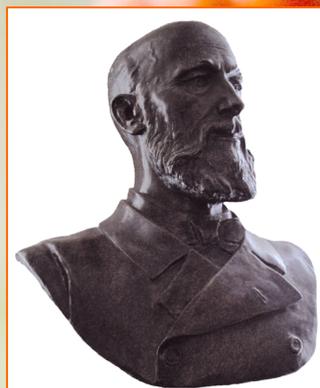
Ключевые слова: 2,2-дихлорциклопропилфениловый эфир, 2,2-дибромциклопропилфениловый эфир, окислительное расщепление, 1-фенокси-1-трифторметоксикарбонил-3,3-дихлор-3-нитропропан, 1-фенокси-1-трифторметоксикарбонил-3,3-дибром-3-нитропропан.

Аннотация

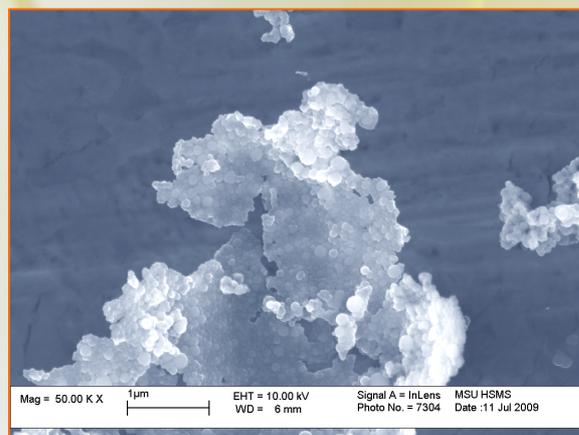
Нами синтезированы 2,2-дихлорциклопропилфениловый и 2,2-дибромциклопропилфениловый эфиры. При взаимодействии полученных соединений с азотистой кислотой, образующейся *in situ*, имеет место преимущественное окислительное расщепление малого цикла. В результате реакции получены и охарактеризованы 1-фенокси-1-трифторметоксикарбонил-3,3-дигалоген-3-нитропропаны.

Бутлеровские сообщения

№9, том 43. 2015



ISSN 2074-0212



ISSN 2074-0948

International Edition in English:
Butlerov Communications



Мировой рынок потребления аморфных кремнеземов и гидротермы Камчатки как новые природные источники для производства наноразмерного кремнезема в России

© **Потапов Вадим Владимирович**

ФГБУН Научно-исследовательский геотехнологический центр ДВО РАН.

Северо-Восточное шоссе, 30. г. Петропавловск-Камчатский, 683002.

Тел.: (84152) 49-54-35. E-mail: vadim_p@inbox.ru

Ключевые слова: золи, нанопорошки кремнезема, области промышленного использования аморфных кремнеземов, гидротермальный раствор.

Аннотация

Мировая потребность в различных типах аморфного кремнезема непрерывно увеличивается. Такая тенденция проявляется и в высокотехнологичных отраслях промышленности, которые связаны с потреблением ультрадисперсных форм кремнезема – золь и нанопорошков. Гидротермальные растворы – новый сырьевой источник для получения золь и нанопорошков SiO₂. Существует необходимость развития технологии получения золь и нанопорошков SiO₂ на основе гидротермальных растворов. Технология должна учитывать размеры и концентрацию частиц SiO₂, кинетику их образования в результате поликонденсации ортокремниевой кислоты, температуру и pH водной среды.

Численное моделирование поликонденсации ортокремниевой кислоты и роста коллоидных частиц кремнезема в гидротермальных растворах

© **Потапов Вадим Владимирович и Шулгина Елена Владимировна**

ФГБУН Научно-исследовательский геотехнологический центр ДВО РАН. Северо-Восточное шоссе, 30. г. Петропавловск-Камчатский, 683002. Россия. Тел.: (84152) 49-54-35. E-mail: vadim_p@inbox.ru

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: гидротермальный раствор, поликонденсация ортокремниевой кислоты, золь кремнезема.

Аннотация

Гидротермальные растворы – природные водные среды, являющиеся одним из потенциальных источников аморфного кремнезема. Существует проблема изучения физико-химических характеристик коллоидного кремнезема в гидротермальном растворе с точки зрения технологии его извлечения и повышения эффективности использования теплоносителя. В рамках этой проблемы необходимо изучение кинетики поликонденсации ортокремниевой кислоты (ОКК). Поликонденсация – один из основных химических процессов в золь-гель технологиях получения оксидных материалов, в том числе – диоксида кремния. В результате поликонденсации кремниевых кислот в водной среде образуется золь, происходит рост его частиц. Кинетика процесса контролирует образование межфазной поверхности при переходе истинных растворов в золи, тем самым во многом определяя влияние начальных условий на свойства золь и структуру конечных материалов.

Тематическое направление: Аморфный кремнезем опал-кристобалитовых пород как возобновляемое сырье для синтеза кремнийорганических соединений и силикатов. Часть 4.

Влияние кремниевых удобрений на растения и почву

© Матыченков^{1*} Владимир Викторович, Бочарникова² Елена Афанасьевна
и Аммосова³ Яна Максимовна

¹ Институт фундаментальных проблем биологии РАН. г. Пущино, 142290. Россия.
E-mail: vmatichenkov@rambler.ru

² Институт физико-химических и биологических проблем почвоведения РАН.
г. Пущино, 142290. Россия.

³ Факультет почвоведения МГУ им М.В. Ломоносова. г. Москва, 119899. Ленинские горы. Россия.

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: аморфный кремнезем, кремниевые удобрения, рис, сахарный тростник, пшеница, ячмень, овёс, рожь, подсолнечник, кукуруза, сахарная свёкла, клевер, томаты, огурцы.

Аннотация

В обзоре обобщены материалы по влиянию кремниевых удобрений на растения и почву. Дана краткая история изучения этого вопроса. Показано, что кремниевые удобрения способны влиять на урожайность сельскохозяйственных культур как прямо, повышая устойчивость растений к биотическим и абиотическим стрессам, так и путем повышения плодородия почв, оптимизируя фосфатный режим, снижая токсичность Al, тяжелых металлов и улучшая физические свойства почв.

Содержание

1. Краткая история изучения роли кремния в системе почва–растение
2. Влияние Si на растения
3. Влияние кремниевых удобрений на плодородие почв

Перспективы применения нанодисперсного кремнезема в рыбоводстве

© Лапин*⁺ Анатолий Андреевич, Говоркова Лада Константиновна,

Чугунов Юрий Викторович, Потапов¹ Вадим Владимирович,

Зеленков² Валерий Николаевич и Сорокина Анастасия Александровна

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

¹ ФГБУН Научно-исследовательский геотехнологический центр ДВО РАН. Северо-Восточное шоссе, 30. г. Петропавловск-Камчатский, 683002. Россия. Тел.: (84152) 49-54-35. E-mail: vadim_p@inbox.ru

² ФГБНУ ВНИИ овощеводства РАН. д. Верея Раменского района Московской области, 140153.

Тел.: 8-910-451-37-45. E-mail: zelenkov-raen@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: золи, нанодисперсный кремнезем, добавки к кормам, токсичность, биотестирование, низшие ракообразные *Daphnia magna* Straus, гуппи, антиоксидантная активность, перекись водорода, ультразвуковое диспергирование.

Аннотация

Для применения нанодисперсного кремнезема из гидротермальных растворов теплоносителей геотермальных электрических станций в рыбоводстве в качестве добавок к кормам проведено тестирование образцов по смертности рачков дафний *Daphnia magna* Straus, которое установило, что нанодисперсный кремнезем не оказывает токсического действия на дафний в водной среде при концентрации $4 \cdot 10^{-2}$ г/дм³ и менее и может быть использован в качестве кормовой добавки в рыбоводстве.

Применение нанодисперсного диоксида кремния в сельском хозяйстве

© Потапов^{1*} Вадим Владимирович, Сивашенко² В.А. и Зеленков³ Валерий Николаевич

¹ ФГБУН Научно-исследовательский геотехнологический центр ДВО РАН.

Северо-Восточное шоссе, 30. г. Петропавловск-Камчатский, 683002.Россия.

Тел.: (84152) 49-54-35. E-mail: vadim_p@inbox.ru

² ФГБНУ Камчатский научно-исследовательский институт сельского хозяйства, ул. Центральная, 4. с. Сосновка, Елизовский район. Камчатский край, 684000. Россия. Тел.: (8924) 780-62-47.

E-mail: sivashenko@inbox.ru

³ ФГБНУ ВНИИ овощеводства РАН, д. Верея Раменского района Московской области. Россия.

Тел.: 8 910 451 3745. E-mail: zelenkov-raen@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: аморфный нанодисперсный кремнезем, гель и нанопорошок кремнезема, гидротермальный раствор, токсичность, добавка в корм, использование с агрохимикатами, кальций-фосфорный обмен.

Аннотация

В статье обсуждаются возможность и перспективность использования нанодисперсного кремнезема (НДК), полученного из гидротермального раствора. Показано, что НДК обладает нетоксичностью и биофильностью. Показано повышение урожайности картофеля при применении НДК путем обработки клубней и внесением в почву в паре удобрениями (азот, фосфор, калий содержащими). При использовании НДК в качестве кормовой добавки для молодняка крупного рогатого скота молочного направления установлено влияние дозы кремнезема на морфометрические характеристики крупного рогатого скота молочного направления, увеличение содержания Са и Р в крови и оптимизация Са/Р.

Кремнийсодержащие препараты на атрановой основе: практика и перспективы применения в растениеводстве России

© Петриченко¹ Владимир Николаевич, Логинов² Сергей Витальевич
и Туркина³ Ольга Степановна

¹ ВНИИ овощеводства. ² ФГУП «ГНИИХТЭОС». ³ НТЦ ООО «Тезис +».
E-mail: vnpetrich@yandex.ru, florasilik@yandex.ru, tos060708@yandex.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: регуляторы роста растений, кремнийсодержащие препараты, урожайность, качество овощных культуры, корреляционная зависимость между качеством и микроэлементами.

Аннотация

Изучено действие кремнийсодержащих регуляторов роста растений. Показано, что препараты нового поколения стимулируют рост и развитие растений, повышают продуктивность овощных культур, улучшают качество продукции и влияют на их химический состав, снижают накопление тяжёлых металлов в с/х культурах. Приведена корреляционная зависимость между содержанием микроэлементов в растениях и биохимическими показателями продукции.

Статья публикуется как материал заочного участия в Международном научном форуме “Бутлеровское наследие-2015”. <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 547.461'62+547.233.3+ 539.26. Поступила в редакцию 30 сентября 2015 г.

Тематическое направление: Аморфный кремнезем опал-кристобалитовых пород как возобновляемое сырье для синтеза кремнийорганических соединений и силикатов. Часть 4.

Синтез и особенности структуры протатрана трис(2-гидроксиэтил)аммония малеината

© Логинов¹ Сергей Витальевич, Гордеев¹ Дмитрий Алексеевич,
Даин¹ Игорь Александрович и Офицеров^{2*†} Евгений Николаевич

¹АО «ГНИИХТЭОС». Шоссе Энтузиастов, 38. г. Москва, 111123. Россия.

E-mail: florasilik@yandex.ru

² 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: атраны, протатраны, трис-(2-гидроксиэтил)аммония малеинат, молекулярная структура, водородная связь, рентгено-структурный анализ.

Аннотация

Рассмотрены особенности пространственного строения протатрана на примере соли трис-(2-гидроксиэтил)амин и малеиновой кислоты. Методом рентгеновской дифракции установлена его кристаллическая структура ($a = 5.5882(6) \text{ \AA}$, $b = 10.4152(13) \text{ \AA}$, $c = 12.2523(17) \text{ \AA}$; $\alpha = 68.284(10)^\circ$, $\beta = 85.301(10)^\circ$, $\gamma = 82.432(10)^\circ$; $Z = 2$, пр. гр. P-1). Структурные единицы кристалла – псевдоциклический кислый анион малеиновой кислоты, протатрановый катион трис-(2-гидроксиэтил)аммония – образуют цепочечную структуру, реализуемую через систему водородных связей, электростатическое взаимодействие и π - π взаимодействие.

Показана роль прямых электростатических взаимодействий в стабилизации структуры и образовании продуктов состава 1:1 в случае малеиновой кислоты.

Аморфный наноразмерный кремнезем гидротермального происхождения: технологии получения, физико-химические характеристики, опыт и перспективы инновационного применения для неорганического материаловедения

© Потапов¹ Вадим Владимирович, Сердан² Анхель Анхелевич
и Кашутин¹ Александр Николаевич

¹ ФГБУН Научно-исследовательский геотехнологический центр ДВО РАН. Северо-Восточное шоссе, 30. г. Петропавловск-Камчатский, 683002. Россия. Тел.: (84152) 49-54-35. E-mail: vadim_p@inbox.ru

² Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова. Ленинские горы, д.1, стр.3, ГСП-1. г. Москва, 119991. Россия. Тел.: (8495) 9395257. E-mail: cerdan@mail.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: золи, нанопорошки кремнезема, мембранное концентрирование, криохимическая вакуумная сублимация, нанодобавки в бетоны.

Аннотация

Технологическая схема получения нанокремнезема на основе гидротермального раствора включает ряд стадий. Основные стадии это поликонденсация ортокремниевой кислоты и рост частиц кремнезема, ультрафильтрационное мембранное концентрирование частиц и получение водных золь кремнезема, криохимическая вакуумная сублимация золь и получение нанопорошков. Полученный по такой технологии нанокремнезем имеет физико-химические характеристики, которые обеспечивают его применение как наномодификатора бетонов (повышение прочности, морозостойкости и другие).

Полимерные композиты и нанокompозиты, содержащие диоксид кремния

© Сугоняко*⁺ Денис Викторович и Зенитова Любовь Андреевна

Кафедра Технологии синтетического каучука. ФГБОУ ВПО «Казанский национальный исследовательский технологический университет». Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Россия.

Тел.: (843) 231-43-32. E-mail: sugonjako@gmail.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: диоксид кремния, кремнезем, силика, армирующий наполнитель, резиновая смесь, шины, механические свойства, нанокompозиты.

Аннотация

Рассмотрено практическое применение диоксида кремния в наиболее важных полимерных системах – в качестве армирующего наполнителя резиновых смесей при производстве экологических шин, модификатора различных пластмасс, клеев, герметиков и так далее. Особое внимание уделено диоксиду кремния как перспективному объекту современных научных исследований. Установлено, что большинство исследований, связанных с влиянием кремнезема на свойства полимеров, относятся к разработке резиновых смесей при производстве шин. При этом, работ, посвященных использованию кремнезема в качестве наполнителя других полимеров (в том числе в сравнении с другими минеральными наполнителями) значительно меньше. Показано, что отдельный интерес представляют научные исследования, посвященные применению кремнезема в наноразмерной области – инновационным методам получения его нанопорошков и разработке полимерных нанокompозитов.

Термодинамическое моделирование фазообразования в сплавах Mo-Si, легированных иттрием

© Ларионов⁺ Алексей Валерьевич, Удоева Людмила Юрьевна,
Чумарев* Владимир Михайлович и Мансурова Анастасия Нургаяновна

Лаборатория пирометаллургии цветных металлов. ФГБУН Институт металлургии, УрО РАН.

Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Свердловская область. Россия.

Тел.: (343) 232-90-24. E-mail: a.v.larionov@ya.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: термодинамическое моделирование, молибден, кремний, иттрий, фазовый состав.

Аннотация

Выполнено термодинамическое моделирование фазообразования при легировании иттрием доэвтектических сплавов Mo-Si. Обнаружено, что значения термодинамических свойств силицидов молибдена Mo_3Si и Mo_5Si_3 , заложенные в базу данных программы HSC Chemistry 6.12, приводят при моделировании двойных сплавов Mo-Si доэвтектического состава к результатам, противоречащим фазовой диаграмме состояния Mo-Si. Установлено, что иттрий в тройных сплавах Mo-Si(5.0%)-Y(0-5.0%) может находиться как в виде силицидов, так и в виде металлического иттрия. Их содержания зависят от температуры и количества добавок в сплав иттрия. Для сохранения двухфазности доэвтектических сплавов Mo-Si количество легирующих добавок иттрия должно быть ограничено.

Тематический раздел: Исследование новых материалов.
Подраздел: Кремний в металлургии.

Полная исследовательская публикация

Регистрационный код публикации: 15-43-9-89

Статья публикуется как материал заочного участия в Международном научном форуме "Бутлеровское наследие-2015". <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>

Поступила в редакцию 15 октября 2015 г. УДК 544.3.01: 669.15: 669.793: 669.857: 669.28'782.018.

Термодинамическое моделирование фазообразования в сплавах Mo-Si, легированных скандием или неодимом

© Ларионов⁺ Алексей Валерьевич, Удоева Людмила Юрьевна
и Чумарев* Владимир Михайлович

Лаборатория пирометаллургии цветных металлов. ФГБУН Институт металлургии, УрО РАН.
Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Свердловская область. Россия.
Тел.: (343) 232-90-24. E-mail: a.v.larionov@ya.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: термодинамическое моделирование, молибден, кремний, скандий, неодим, фазовый состав.

Аннотация

Выполнено термодинамическое моделирование фазообразования при легировании скандием или неодимом доэвтектических сплавов Mo-Si. Установлено, что скандий или неодим в тройных сплавах Mo-Si(5.0%)-(Sc, Nd)(0-5.0%) могут находиться как в виде силицидов, так и в элементном виде. Их соотношения зависят от температуры и количества добавок в сплав скандия или неодима. Для сохранения двухфазности доэвтектических сплавов Mo-Si количество легирующих добавок скандия или неодима должно быть ограничено.

Тематический раздел: Исследование новых материалов.
Подраздел: Кремний в металлургии.

Полная исследовательская публикация

Регистрационный код публикации: 15-43-9-97

Статья публикуется как материал заочного участия в Международном научном форуме "Бутлеровское наследие-2015". <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
Поступила в редакцию 15 октября 2015 г. УДК 544.344.015.2: 669.15:669.28*782.018.

Фазовый состав и микроструктура сплавов Mo-Si, полученных в условиях неравновесной кристаллизации

© Мансурова Анастасия Нургаяновна, Ларионов*⁺ Алексей Валерьевич,
Тюшняков Станислав Николаевич и Маршук Лариса Александровна

Лаборатория пирометаллургии цветных металлов. ФГБУН Институт металлургии, УрО РАН.

Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Свердловская область. Россия.

Тел.: (343) 232-90-24. E-mail: a.v.larionov@ya.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: сплав Mo-Si, фазообразование, структура, силициды, микротвердость, плотность.

Аннотация

При вакуум-дуговой выплавке сплавов Mo-Si из шихт Mo+(5-12)Si формируются силицидные фазы близкие к стехиометрическому составу. Плотность сплавов закономерно снижается по мере роста в них концентрации кремния. Величины микротвердости силицидных фаз в сплаве и чистых силицидов молибдена имеют близкие значения.

Термодинамическое моделирование фазообразования при охлаждении цинксодержащего медеплавильного шлака

© **Тюшняков⁺ Станислав Николаевич** и **Селиванов* Евгений Николаевич**

Лаборатория пирометаллургии цветных металлов. ФГБУН Институт металлургии УрО РАН.

Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Свердловская область. Россия.

Тел.: (343) 232-90-24. E-mail: tyushnyakov.sn@gmail.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: термодинамическое моделирование, железо-силикатный шлак, цинк, медь, фазообразование.

Аннотация

Выполнено термодинамическое моделирование (ТДМ) фазообразования при охлаждении от 3500 °С рабочего тела, отвечающего составу шлака автогенной плавки медно-цинковых концентратов. Результаты ТДМ указали на возможность отгонки цинка из шлака одновременно с переводом части железа (до 24.4%) в металлическое состояние при повышенных температурах, характерных для дугового разряда в электропечах. Повышенные содержания поливалентных ионов железа в шлаке и низкая термическая устойчивость оксидов меди и железа способствуют восстановлению и переходу в газ цинка (выше 1250 °С) и меди (выше 2200 °С).

Термодинамическое моделирование восстановления цинка из медеплавильного шлака

© Тюшняков⁺ Станислав Николаевич и Селиванов* Евгений Николаевич

Лаборатория пирометаллургии цветных металлов. ФГБУН Институт металлургии УрО РАН.

Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Свердловская область. Россия.

Тел.: (343) 232-90-24. E-mail: tyushnyakov.sn@gmail.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: термодинамическое моделирование, восстановление, медь, цинк, железосиликатный шлак, пыль доменных печей, шлак газоочисток сталеплавильных печей.

Аннотация

Выполнено термодинамическое моделирование (ТДМ) восстановления (при 1500 °С) цинка из рабочего тела, отвечающего составу шлака автогенной плавки медьсодержащих сульфидных концентратов. Приведены данные по моделированию составов конденсированных и газовых фаз при нагреве шлака совместно с монооксидом углерода, пылью доменных и шламов газоочисток сталеплавильных печей. Результаты ТДМ указали на возможность отгонки цинка из шлака одновременно с переводом части железа в металлическое состояние. Повышенное содержание цинка в газе (26-27%) предполагает последующее получение окисленных возгонов, переработка которых возможна гидрometаллургическими методами.

Получение алюмокремниевых сплавов в расплаве $\text{KF-AlF}_3\text{-SiO}_2$

© Першин*[†] Павел Сергеевич, Суздальцев Андрей Викторович
и Зайков Юрий Павлович

Лаборатория электродных процессов. Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН.
Ул. Академическая, 20. г. Екатеринбург, 620137. Россия.

Тел.: (343) 374-50-89. E-mail: paffka19@yandex.ru. Сайт: www.ihte.uran.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: алюминий, кремний, силумины, вольтамперометрия, электролиз, KF-AlF_3 .

Аннотация

Методом вольтамперометрии исследована кинетика выделения кремния и алюминия на графитовом катоде в расплаве KF-AlF_3 с добавками SiO_2 (0-1.5 % масс.) при температуре 720 °С. На вольтамперограммах отмечены пики выделения кремния и алюминия при потенциалах -0.85 и -1.30 В относительно газового CO/CO_2 электрода.

Проведен потенциостатический (при потенциалах -0.9 и -1.5 В) и гальваностатический (при катодной плотности тока 0.5 А/см²) электролиз расплава $\text{KF-AlF}_3\text{-SiO}_2$ и показана принципиальная возможность получения кремния и силуминов с содержанием кремния 37 % масс.

Исследование высокотемпературного окисления *in situ* композитов Nb-18.7Si, легированных иттрием и скандием

© Чумарев^{1*} Владимир Михайлович, Удоева¹⁺ Людмила Юрьевна,
Леонтьев² Леопольд Игоревич и Ларионов¹ Алексей Валерьевич

¹Лаборатория пирометаллургии цветных металлов. Институт металлургии, УрО РАН.
Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Россия. Тел.: (343) 232-90-81. E-mail: lyuud@yandex.ru

²Лаборатория пирометаллургии черных металлов. Институт металлургии, УрО РАН.
Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Россия. Тел.: (343) 232-91-20. E-mail: leo@imet.mplik.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: композиты Nb-Si, иттрий, скандий, легирование, окисление, оксидные слои, микроструктура, фазовый состав.

Аннотация

В работе представлены результаты исследований влияния редкоземельных металлов (РЗМ), в частности иттрия и скандия, на устойчивость к окислению естественных (*in situ*) композитов Nb-18.7Si. Методами термогравиметрии, оптической микроскопии и рентгеноспектрального микроанализа оценены скорости окисления образцов эвтектических сплавов Nb-Si с различным содержанием легирующих элементов и выявлены особенности фазового состава и микроструктуры продуктов их окисления. Установлено, что ниже температур пестинга (815 °С) и при содержании в сплаве 1-2 ат.% иттрий и скандий положительно влияют на процесс окисления композитов, снижая скорость образования оксидной пленки. Особенности структуры и состава окисной пленки на исследованных образцах композитов указывают на одновременное протекания процессов поверхностного и внутреннего окисления, что подтверждается формированием под слоем оксидов переходной зоны, сохраняющей двухфазность микроструктуры и исходное соотношение элементов в композитах.

Кинетика окисления естественных композитов Nb-Si, легированных иттрием и скандием

© Гуляева¹⁺ Роза Иосифовна, Мансурова¹ Анастасия Нургаяновна,
Чумарев^{1*} Владимир Михайлович, Леонтьев² Леопольд Игоревич
и Удоева¹ Людмила Юрьевна

¹Лаборатория пирометаллургии цветных металлов. Институт металлургии, УрО РАН.

Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016, Россия. Тел.: (343) 232-91-63. E-mail: gulroza@mail.ru

²Лаборатория пирометаллургии черных металлов. Институт металлургии, УрО РАН.

Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Россия. Тел.: (343) 232-91-20. E-mail: leo@imet.mplik.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

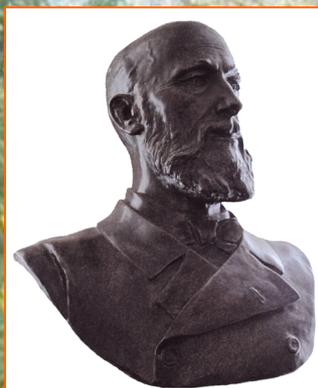
Ключевые слова: композиты, окисление, кинетика, ниобий, кремний, иттрий, скандий.

Аннотация

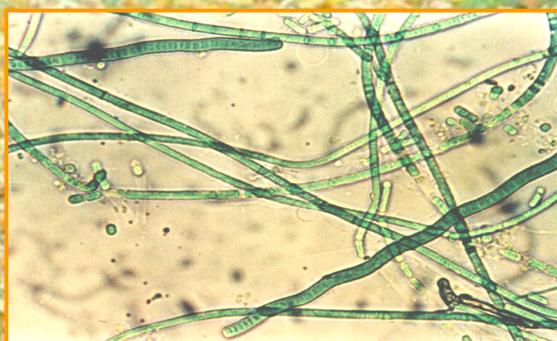
Методами неизотермического нагрева в потоке воздуха изучены механизм и кинетика окисления естественных композитов Nb-Si эвтектического состава, в том числе, легированных иттрием и скандием. Показано, что на начальной стадии окисление сплавов лимитируется химическим взаимодействием кислорода с ниобием и образованием оксидов низшей валентности – NbO, NbO₂, а на второй стадии – диффузией кислорода. Установлены модели и определены кинетические параметры процесса окисления бинарного сплава и композитов Nb-Si, легированных иттрием и скандием.

Бутлеровские сообщения

№10, том 44. 2015



ISSN 2074-0212



International Edition in English:
Butlerov Communications

ISSN 2074-0948



К теории рэтчет-потенциала оксигидратных систем

© Марков¹ Борис Анатольевич и Сухарев^{2*}+ Юрий Иванович

¹ Кафедра «Вычислительной математики». ФГБОУ ВПО «Южно-Уральский государственный университет» (национальный исследовательский университет).

Пр-т Ленина, 76. г. Челябинск, 454080. Россия.

² Кафедра химии твердого тела и нанопроцессов. ФГБОУ ВПО «Челябинский государственный университет». Ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454000. Россия.

Тел.: 8 963 460 2775. E-mail: Yuri_Sucharev@mail.ru.

*Ведущий направление; + Поддерживающий переписку

Ключевые слова: лагранжевы отображения, электроглобулы, фуллероиды, мультиполи, оксигидратные гелевые системы, коллоидные кластеры, самопроизвольный пульсационный поток, диффузный двойной электрический слой, топологический континуум, диссоциативно-диспропорциональный механизм, теория Уитни, геометрия каустик.

Аннотация

Рассмотрены структуры, образуемые частицами геля: формируемая отдельными длинными молекулами, складывающимися в мицеллярные образования. В силу особенностей строения оксигидратных гелей возникает большое количество заряженных кластерных частиц. Эти частицы взаимодействуют с графитовыми электродами. При этом возникают токи свободных зарядов, флуктуации которых обнаружены экспериментально. Рассчитанные величины ожидаемых нанотоков дают достаточно хорошее соответствие с экспериментом.

Данный процесс флюктуационного выплеска движения частиц определяется стохастическим рэтчет-потенциалом, характер образования которого рассматривается в работе.

Стабильность и коэффициент теплового расширения высокотемпературных сверхпроводников $R\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$

© Фетисов¹ Андрей Вадимович, Кожина¹ Галина Анатольевна,
Эстемирова¹ Светлана Хусайновна, Митрофанов¹ Валентин Яковлевич,
Упоров¹ Сергей Александрович, Ведмидь¹ Лариса Борисовна,
Пряничников¹ Степан Викторович, Черепанова¹ Любовь Александровна,
Титова^{1*} Светлана Геннадьевна и Блинова²⁺ Юлия Викторовна

¹ Институт металлургии УрО РАН. Ул. Амундсена, 101.

г. Екатеринбург, 620016. Россия. E-mail: sgtitova@mail.ru

² Институт физики металлов УрО РАН. Ул. С. Ковалевской, 18.

г. Екатеринбург, 620990, Россия. E-mail: sudareva@imp.uran.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: высокотемпературные сверхпроводники, химическая стабильность, механоактивация, кристаллическая структура, замещение катионов.

Аннотация

Методами термогравиметрии, массспектрометрии и магнитометрии исследована химическая стабильность высокотемпературных сверхпроводников $R\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ с $R = \text{Y}$, Nd и Dy по отношению к парам воды. Для увеличения скорости деградации использовали механоактивированные в шаровой мельнице образцы. Установлено, что ослабление диамагнитного сигнала, отвечающего сверхпроводящей фазе, при механоактивации образцов может быть связано как с их химической деградацией, так и с подавлением сверхпроводимости магнетизмом неизученной природы. Такой магнетизм проявляет себя в образцах, содержащих магнитный R -ион. С помощью рентгенографии получены температурные зависимости параметров элементарной ячейки и рассчитаны линейные коэффициенты теплового расширения для составов с $R = (\text{Y}, \text{Ca})$, Eu , (Nd, Eu) . Последний состав обладает положительным и почти постоянным коэффициентом теплового расширения в области температур 80-300 К, что делает его перспективным для использования в сверхпроводящих пленках и композитах.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". <http://butlerov.com/readings/>
УДК 541.123:546.6'711'21. Поступила в редакцию 23 сентября 2015 г.

Структурные превращения в механоактивированном манганите тулия $TmMnO_3$

© Федорова*⁺ Ольга Михайловна, Ведмидь Лариса Борисовна,
Козин Владислав Михайлович и Янкин Александр Михайлович

Лаборатория статистики и кинетики процессов. Институт металлургии УрО РАН.

Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург. 620016. Россия.

Тел.: (343) 232-91-16. E-mail: fom55@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: структурные переходы, манганиты тулия, механоактивация, термогравиметрия, рентгеновский анализ.

Аннотация

Методами высокотемпературной рентгенографии и термического анализа исследованы структурные переходы в гексагональном манганите тулия. При механоактивации в высокоэнергетической шаровой мельнице появляется орторомбическая фаза $TmMnO_3$. Обнаружены следующие структурные переходы как в крупнокристаллическом, так и в механоактивированных образцах: ян-теллеровский переход в орторомбической фазе в интервале температур 900-970 °С, переход в гексагональной фазе из структурной модификации $R6_3cm$ в $R6_3/mmc$ при 1092 °С. Механоактивация снижает температуру ян-теллеровского перехода, но не сказывается на температуре перехода в гексагональной фазе.

Тематическое направление: Утилизация хромсодержащих стоков. Часть 3.

Природа периодических концентрационных колебаний хрома(VI) при восстановлении стальной стружкой

© Фазлутдинов^{1,2*} Константин Камилович, Марков^{1,3} Вячеслав Филиппович, Горохов^{1,2} Андрей Владимирович и Маскаева^{1,3+} Лариса Николаевна

¹ Кафедра физической и коллоидной химии. Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Россия.

Тел.: (343) 375-93-18. E-mail: mln@ural.ru

² ООО "НПП Электрохимия". Новосвердловская ТЭЦ, промзона, здание РСЦ, литер ЖЖЖ, а/я 225. г. Екатеринбург, 620078. Россия. E-mail: kfazl@ya.ru

³ Кафедра химии и процессов горения. Уральский институт ГПС МЧС России. Ул. Мира, 22. г. Екатеринбург, 620022. Россия. Тел.: (343) 360-81-68.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: восстановление хром(VI), химическая кинетика, периодические концентрационные колебания, фаза фойгерита, слоистые двойные гидроксиды, утилизация отходов гальванических производств.

Аннотация

Приведены экспериментальные данные, описывающие периодические концентрационные колебания в реакционной смеси шести- и трехвалентного хрома при проведении процесса восстановления Cr(VI) в сернокислых растворах стальной стружкой. Выявлена зависимость периодичности колебаний и интервала изменения концентрации Cr(VI) в объеме реакционной смеси от температуры, исходного содержания хромового ангидрида, серной кислоты и навески стальной стружки. Концентрационные колебания восстановленной формы хрома Cr(III) совпадают по своему началу и фазе с колебаниями концентрации Cr(VI) в растворе, но значительно уступают по величине. Природу колебаний концентрации хрома в исследованном процессе предложено объяснять циклическим характером процессов пассивации и депассивации поверхности стружки, в основе которых образование в приповерхностной области и разрушение за счет газовыделения хромсодержащих двойных гидроксидов $Fe^II_y Fe^III_x (OH)_{3x+2y-2z} (CrO_4)_z$ со структурой фойгерита.

Тематическое направление: Гидрохимический синтез пленок халькогенидов металлов. Часть 27.

Влияние йодсодержащей добавки на состав, морфологию и структуру тонких пленок селенида свинца

© Юрк¹ Виктория Михайловна, Маскаева^{1,2+} Лариса Николаевна,
Марков^{1,2*} Вячеслав Филиппович, Ибрагимова¹ Зульфия Муллахановна,
Устюгова¹ Виктория Сергеевна и Степановских¹ Елена Ивановна

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. Свердловская область. Россия. Тел.: (343) 360-81-68.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: гидрохимический синтез, тонкие пленки, селенид свинца, легирование йодом.

Аннотация

Методами рентгеновской дифракции и растровой электронной микроскопии с элементным энергодисперсионным анализом исследовано влияние добавки йодида аммония (от 0 до 0.25 моль/л) на элементный состав, параметры структуры и морфологию поверхности гидрохимически осажденных пленок селенида свинца. С ростом концентрации NH_4I в реакционной смеси увеличивается содержание йода в пленках до 4.25 ат. %. Установлено влияние примеси йода на параметр кристаллической решетки селенида свинца и размер микрокристаллитов фазы PbSe в тонкопленочном состоянии.

Рекуррентный метод определения различных наборов кластеров и распределения кластеров по размерам в системе с конечным числом частиц

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович

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

Ключевые слова: система с конечным числом атомов или молекул, конечная система, изолированная система, изотермическая система, кластер, нано-частица, распределение кластеров по размерам, термодинамическое равновесие.

Аннотация

Рассмотрена система с конечным числом одинаковых частиц (атомов или молекул). Разработан рекуррентный метод определения различных наборов кластеров, состоящих из этих частиц. Определены все наборы кластеров для систем, состоящих из 1 до 13 частиц.

Определено распределение кластеров по числу частиц в них в этих системах. Показано, что зависимость вероятности появления кластера от отношения числа частиц в кластере к числу частиц в системе, слабо зависит от числа частиц в системе для систем с числом частиц больше десяти, и эта зависимость быстро убывает с ростом числа частиц в системе.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 531.12, 536.22. Поступила в редакцию 01 сентября 2015 г.

О связи критического фактора сжимаемости и максимального размера кластера в критической точке

© **Умирзаков Ихтиёр Холмаматович**

*Лаборатория моделирования. ФГБУН «Институт теплофизики СО РАН». Пр-т Лаврентьева, 1.
г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org*

Ключевые слова: кластеры, жидкость, газ, твердое тело, кристалл, решетка, координационное число, фазовый переход первого рода, критическая точка, критический фактор сжимаемости, кластерная модель газа, уравнение состояния, вириальный коэффициент, фазовое равновесие, плавление.

Аннотация

Рассмотрена модель газа, состоящего из не взаимодействующих друг с другом кластеров различных размеров, образованных из атомов или молекул однокомпонентного вещества. Показано, что фактор сжимаемости такого газа обратно пропорционален среднему размеру кластеров. Показано, что при критической температуре фазового перехода газ-жидкость число кластеров в единице объема не зависит от числа атомов или молекул в кластере и отлично от нуля только до максимально возможного размера кластеров. Найдена формула для определения критического фактора сжимаемости через максимально возможный размер кластеров. Показано, что эта формула описывает критический фактор сжимаемости многих однокомпонентных веществ с точностью, не меньше экспериментальной. Найдена формула для определения температуры тройной точки через плотности и коэффициенты поверхностного натяжения жидкости и твердого тела. Найдены формулы для определения зависимостей от температуры фактора сжимаемости на линиях фазовых равновесий пар-жидкость и газ-твердое тело. Показано, что спинодали метастабильного пара и сублимирующегося газа из не взаимодействующих кластеров не существуют или они могут совпадать с бинадалями. Найдены формулы для определения линий фазовых равновесий пар-жидкость и газ-твердое тело. Найдены зависимости от температуры изменения энтропии и теплоты фазовых переходов жидкость-пар и твердое тело-газ. Найдены изменение энтропии и теплота фазового перехода жидкость-твердое тело в тройной точке.

Полная исследовательская публикация

Тематический раздел: Термодинамические исследования.

Регистрационный код публикации: 15-44-10-76

Подраздел: Физическая химия.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно

действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>

УДК 533.1. Поступила в редакцию 27 августа 2015 г.

Вывод формулы Тиммерманса-Филиппова из обобщенного уравнения состояния Путилова

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович

*Лаборатория моделирования. ФГБУН «Институт теплофизики СО РАН». Пр-кт Лаврентьева, 1.
г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org*

Ключевые слова: критическая точка, фазовый переход газ-жидкость, критический объем, уравнение состояния, формула Тиммерманса-Филиппова, парный потенциал взаимодействия, холодное давление.

Аннотация

Формула Тиммерманса-Филиппова – равенство критического фактора сжимаемости фазового перехода газ-жидкость и отношения плотностей вещества в критической точке и при абсолютном нуле температуры и нулевом давлении выведено из обобщенного уравнения состояния Путилова. Показано, что эта формула справедлива для произвольных зависимостей от температуры коэффициентов обобщенного уравнения состояния Путилова. Найдены формулы, позволяющие определить критические параметры через холодное давление и его первое и второе производные по объему (плотности).

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 533.1. Поступила в редакцию 16 сентября 2015 г.

Метод определения критического фактора сжимаемости однокомпонентных веществ через температуру Бойля и низкотемпературные параметры жидкости

© **Умирзаков Ихтиёр Холмаматович**

*Лаборатория моделирования. ФГБУН «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 точка, фазовый переход газ-жидкость, критический объем, температура Бойля, идеальная кривая, линия единичной сжимаемости, правило прямолинейного диаметра, формула Тиммерманса-Филиппова, критическое давление, уравнение состояния, Ван-дер-Ваальс.

Аннотация

На основе уравнения состояния Ван-дер-Ваальса получено соотношение между фактором сжимаемости и температурой в критической точке фазового перехода газ-жидкость однокомпонентного вещества и температурой Бойля. Получена также связь между критическим объемом, критической температурой и характеристиками жидкости при низких температурах. Показано, что эти соотношения с хорошей точностью выполняются для ряда веществ. Показано, что уравнение состояния Ван-дер-Ваальса полезно для получения важных соотношений между термодинамическими параметрами.

Полная исследовательская публикация

Тематический раздел: Термодинамические исследования.

Регистрационный код публикации: 15-44-10-92

Подраздел: Физическая химия.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 533.1. Поступила в редакцию 13 сентября 2015 г.

О некоторых следствиях из вириального уравнения состояния

© **Умирзаков Ихтиёр Холмаматович**

*Лаборатория моделирования. ФГБУН «Институт теплофизики СО РАН». Пр-кт Лаврентьева, 1.
г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org*

Ключевые слова: вириальный коэффициент, критическая точка, фазовый переход газ-жидкость, критический объем, критическая температура, уравнение состояния.

Аннотация

Показано, что вириальное уравнение состояния, в котором учтены только первые три вириальных коэффициента дает связь между значениями давления, температуры и второго вириального коэффициента в критической точке, которая имеет место для ряда реальных веществ. Показано, что наложение двух дополнительных условий равенства нулю третьей и четвертой частных производных от давления по объему приводит к существенному улучшению предсказаний вириального уравнения состояния для критической точки.

Полная исследовательская публикация

Тематический раздел: Термодинамические исследования.

Регистрационный код публикации: 15-44-10-98

Подраздел: Физическая химия.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно

действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>

УДК 533.1. Поступила в редакцию 20 сентября 2015 г.

О некоторых следствиях из уравнения состояния Ван-дер-Ваальса для критической точки фазового перехода жидкость-газ

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович

*Лаборатория моделирования. ФГБУН «Институт теплофизики СО РАН». Пр-кт Лаврентьева, 1.
г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org*

Ключевые слова: критическая точка, фазовый переход газ-жидкость, критический объем, температура Бойля, идеальная кривая, линия единичной сжимаемости, правило прямолинейного диаметра, критическое давление, уравнение состояния, Ван-дер-Ваальс.

Аннотация

Из уравнения состояния Ван-дер-Ваальса получены соотношения для определения критических параметров фазового перехода газ-жидкость однокомпонентного вещества. Получено соотношение для определения критического объема через критическую температуру. Получено соотношение для определения критического объема через известное отношение критического давления к критической температуре. Получено соотношение для определения критического объема через критическое давление. Получены следствия из уравнения состояния Ван-дер-Ваальса для однокомпонентных веществ, для которых справедлива формула Тиммерманса, связывающая критические параметры с плотностью кристалла при низких температурах. Показано, что уравнение состояния Ван-дер-Ваальса дает соотношение между критическими параметрами и низкотемпературными характеристиками жидкости, а также соотношение между критическими параметрами и температурой Бойля. Получено соотношение для связи критических параметров с температурой Бойля и объемом Бойля. Установлена связь критических параметров со значением третьего вириального коэффициента в критической точке. Установлена также связь критических параметров с определяющим параметром правила прямолинейного диаметра.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 532.74. Поступила в редакцию 26 августа 2015 г.

Линейная зависимость квадрата радиуса координационной сферы кристаллов от ее номера

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович

*Лаборатория моделирования. ФГБУН «Институт теплофизики СО РАН». Пр-кт Лаврентьева, 1.
г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org*

Ключевые слова: кристалл, решетка, координационное число, простая кубическая решетка, объемно-центрированная кубическая решетка, гранецентрированная кубическая решетка, гексагональная плотная упаковка, алмазная упаковка, тетраэдрическая упаковка, решетка гексагонального льда, решетка β -вольфрама, квазикристаллическая модель.

Аннотация

Показано, что зависимость квадрата радиуса координационной сферы от номера этой сферы простой, объемно-центрированной и гранецентрированной кубических решеток, кристаллов с гексагональной плотной и алмазной (тетраэдрической) упаковками, решеток гексагонального льда, решетка и β -вольфрама с хорошей точностью может быть представлена линейной функцией, и точность этого представления растет с ростом номера координационной сферы. На основе этой зависимости установлено, что номер первого исчезающего пика радиальной функции распределения в кристаллах обратно пропорционален температуре.

Описание линий фазового равновесия жидкость-газ, твердое тело-газ и жидкость-твердое тело однокомпонентного вещества уравнением состояния Ван-дер-Ваальса с зависящими от температуры параметрами

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович

Лаборатория моделирования. ФГБУН «Институт теплофизики СО РАН». Пр-кт Лаврентьева, 1.
г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org

Ключевые слова: линия фазового равновесия, критическая точка, фазовый переход первого рода, критический объем, уравнение состояния Ван-дер-Ваальса, бинадаль.

Аннотация

Рассмотрено уравнение состояния Ван-дер-Ваальса с зависящими от температуры параметрами. Показано, что линию фазового равновесия однокомпонентного вещества в плоскости (температура, плотность) можно описать уравнением состояния Ван-дер-Ваальса с зависящими от температуры параметрами, которые однозначно определяются через температурные зависимости плотностей сосуществующих в равновесии фаз. Определены температурные зависимости параметров уравнения состояния Ван-дер-Ваальса через плотности сосуществующих фаз.

Полная исследовательская публикация

Тематический раздел: Термодинамические исследования.

Регистрационный код публикации: 15-44-10-114

Подраздел: Физическая химия.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 533.1. Поступила в редакцию 10 сентября 2015 г.

Связь между критической температурой и температурой Бойля однокомпонентных веществ. Связь между критическим объемом и объемом Бойля.

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович

*Лаборатория моделирования. ФГБУН «Институт теплофизики СО РАН». Пр-кт Лаврентьева, 1.
г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org*

Ключевые слова: критическая точка, фазовый переход газ-жидкость, критический объем, критическая температура, уравнение состояния.

Аннотация

На основе уравнения состояния Ван-дер-Ваальса получено линейное соотношение между критической температурой фазового перехода газ-жидкость однокомпонентного вещества и температурой Бойля. Получено также линейное соотношение между критическим объемом и объемом Бойля. Показано, что эти соотношения с неплохой точностью выполняются для ряда веществ.

Метод определения критического объема однокомпонентных веществ через температуру Бойля и критическое давление

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович

Лаборатория моделирования. ФГБУН «Институт теплофизики СО РАН». Пр-кт Лаврентьева, 1.
г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org

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

Аннотация

На основе уравнения состояния Ван-дер-Ваальса получено соотношение между объемом и давлением в критической точке фазового перехода газ-жидкость однокомпонентного вещества и температурой Бойля. Показано, что это соотношение с хорошей точностью выполняется для ряда веществ.

Введение

Известно, что уравнение состояния Ван-дер-Ваальса только качественно описывает изотермы реальных веществ. Несмотря на это оно предсказало существование прямой линии на плоскости (температура, плотность), где сжимаемость равна единице. Эта линия существует для многих веществ. Имеет смысл поиск соотношений, вытекающих из уравнения Ван-дер-Ваальса, выполняющихся с хорошей точностью для реальных веществ. В настоящей работе получено соотношение, связывающее критический объем с температурой Бойля и критическим давлением. Выполнение этого соотношения проверено на реальных однокомпонентных веществах. Показано, что оно с хорошей точностью выполняется для ряда веществ.

Результаты и их обсуждение

Уравнение состояния Ван-дер-Ваальса имеет вид

$$p(T, v) = \frac{kT}{v-b} - \frac{a}{v^2}, \quad (1)$$

где p – давление, T – температура, v – объем, приходящийся на одну частицу (молекулу или атом), k – постоянная Больцмана, a и b – положительные постоянные [1].

В критической точке фазового перехода первого рода газ-жидкость однокомпонентного вещества уравнение состояния удовлетворяет условиям

$$p|_{T=T_c, v=v_c} = p_c, \quad \partial p / \partial v|_{T=T_c, v=v_c} = 0, \quad \partial^2 p / \partial v^2|_{T=T_c, v=v_c} = 0,$$

где p_c , T_c и v_c – значения давления, температуры и объема, приходящегося на одну частицу в критической точке [1-3].

С помощью этих условий из (1) легко получить [1]

$$p_c = a / 27b^2, \quad (2)$$

$$v_c = 3b. \quad (3)$$

Температура Бойля T_B определяется из равенства $B(T_B) = 0$, где $B(T)$ – второй вириальный коэффициент [3, 4]. Из уравнения состояния Ван-дер-Ваальса для второго вириального коэффициента легко получить [1]

$$B(T) = b - a / kT,$$

что дает

$$T_B = a/kb. \quad (4)$$

Из (2) и (3) имеем

$$p_c v_c = a/9b,$$

что с учетом (4) дает

$$v_c = kT_B/9p_c. \quad (5)$$

Известно, что труднее всего определить критический объем [2, 3]. Формула (5) может быть полезной для определения критического объема.

Табл. 1. Сравнение критического объема, вычисленного по формуле (5), с опытными данными

вещество	p_c	v_c	T_B	$v_c(5)$	δ	вещество	p_c	v_c	T_B	$v_c(5)$	δ
cyclopropane	44.5	260	975.72	199.8	0.232	toluene	40.6	316	1403.1	314.9	0.003
r12	56	190	929.69	151.3	0.204	r22	49.1	165	888.29	164.9	0.001
rc318	27.4	325	827.02	275.0	0.154	sulfur dioxide	77.8	122	1042.7	122.1	-0.001
sulfur						pentane	33.3	304	1113.5	304.7	-0.002
hexafluoride	37.1	198	727.48	178.7	0.098	Oxygen	49.8	73.4	408.35	74.7	<u>-0.018</u>
r218	26.4	299	790.37	272.8	0.088	r113	33.7	304	1145.2	309.7	<u>-0.019</u>
r115	31.2	252	792.12	231.4	0.082	fluorine	51.5	66.2	383.62	67.9	<u>-0.025</u>
r116	29.4	223	667.71	207.0	0.072	ethylene	49.7	129	724.33	132.8	<u>-0.030</u>
r14	36.9	140	528.8	130.6	0.067	r23	47.7	133	717.29	137.0	<u>-0.030</u>
r114	32.2	293	968.19	274.0	0.065	Argon	48.1	74.9	407.76	77.3	<u>-0.031</u>
propyne	55.5	164	942.1	154.7	0.057	methane	45.4	99	509.74	102.3	<u>-0.033</u>
isobutane	36	263	984.54	249.2	0.052	r41	58	124	818.81	128.6	-0.037
r142b	40.7	231	982.17	219.9	0.048	deuterium	16.4	60.3	113.7	63.2	-0.048
co2	72.8	94	717.93	89.9	0.044	krypton	54.3	91.2	569.61	95.6	-0.048
dimethylether	53	178	991.85	170.5	0.042	r143a	37.1	193	828.7	203.5	-0.055
r13	38.7	180	733.97	172.8	0.040	Xenon	57.6	118	792.81	125.4	-0.063
1-butene	39.7	240	1008.3	231.4	0.036	r152a	44.4	181	938.69	192.7	-0.064
benzene	48.3	259	1326.5	250.3	<u>0.034</u>	ethanol	63	167	1283.9	185.7	-0.112
neon	27.2	41.7	120.32	40.3	<u>0.033</u>	r32	57.5	121	865.67	137.2	-0.134
propane	41.9	203	902.56	196.3	<u>0.033</u>	acetone	46.4	209	1238.8	243.3	-0.164
cyclohexane	40.2	308	1314.4	298.0	<u>0.033</u>	i-propanol	51	219	1435.6	256.5	-0.174
co	34.5	93.1	341.32	90.2	<u>0.032</u>	Water	217.6	56	1599.6	67.0	-0.196
butane	37.5	255	1017.7	247.3	<u>0.030</u>	hydrogen	12.8	65	109.43	77.9	-0.199
r11	43.5	248	1151.1	241.1	<u>0.028</u>	methanol	79.9	118	1439.2	164.1	-0.391
nonane	22.8	548	1339.4	535.3	<u>0.023</u>	Helium	2.24	57.3	22.58	91.9	-0.603
heptane	27	432	1252.3	422.7	<u>0.022</u>	ammonia	111.3	72.5	1034.2	834.0	-0.17
isobutene	39.5	239	1013.6	233.8	<u>0.022</u>	nitrogen trifluoride	44.7		568.46	115.9	
propylene	45.6	181	886.38	177.1	<u>0.021</u>	dodecafluorobutane			902.31		
neopentane	31.6	303	1029.1	296.8	<u>0.021</u>	parahydrogen			110.51		
isohexane	29.7	367	1171.6	359.5	<u>0.021</u>	r227ea			852.28		
ethane	48.2	148	768.49	145.3	<u>0.018</u>	r236ea			923.03		
trans-Butene	40.5	238	1039.8	234.0	<u>0.017</u>	r236fa			898.17		
cis-2-Butene	41.5	234	1049.4	230.4	<u>0.015</u>	r245ea			1060.4		
r21	51	197	1086.2	194.1	<u>0.015</u>	r245fa			977.95		
isopentane	33.4	306	1107.2	302.1	0.013	r123			1058.4		
nitrous oxide	71.5	97.4	754.8	96.2	0.012	r124			926.63		
hydrogen						r125			770.76		
sulfide	88.2	98.5	942.63	97.4	0.011	r134a			875.33		
octane	24.5	492	1311.6	487.8	0.008	r141b			1141.2		
nitrogen	33.5	89.5	326.41	88.8	0.008	carbonyl sulfide			967.76		
decane	20.8	603	1370.2	600.3	0.004	decafluorobutane			913.39		
dodecane	18	713	1403.1	710.3	0.004						
hexane	29.3	370	1185.5	368.7	0.004						

В табл. 1 приведено сравнение критического объема, вычисленного по формуле (5) для 58 из 82 веществ из [5], для которых удалось найти значения критического объема и критического давления в [3, 6]. В табл. 1 p_c приведено в атмосферах, v_c и $v_c(5)$ – в $см^3/моль$, T_B – в кельвинах, $v_c(5)$ – значения v_c , вычисленные по формуле (5), $\delta = 1 - v_c(5)/v_c$, значения температуры Бойля T_B взяты из [5], а p_c и v_c – из [3, 6]. Значения δ , отвечающие отклонению критического объема 12 веществ от (5) в пределах 1% выделены жирным шрифтом, значения δ , отвечающие отклонению v_c 24 веществ от (5) в интервале от 1% до 3% – подчеркнуты, а значения δ , отвечающие отклонению v_c 9 веществ от (5) в интервале от 3% до 5% – выделены курсивом.

Как видно из табл. 1 формула (5) дает значения критического объема для углеводородов, превосходно согласующиеся с опытными данными. Критический объем веществ, в термоди-

намические свойства которых квантовые эффекты вносят существенный вклад (водород, гелий), спиртов (метанол, этанол, изопропиловый спирт, ацетон) и полярных веществ (вода, аммиак) плохо описывается формулой (5).

Для 12 веществ из табл. 1, для которых отклонение v_c от (5) находится в пределах 1%

$$\Delta = 100\% \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^N [1 - v_{c,i}(5) / v_{c,i}]^2 / (N - 1)} = 0,8\% \quad (N=12).$$

Для 36 веществ из табл. 1, для которых отклонение v_c от (5) находится в пределах 3% среднеквадратичные отклонения равны $\Delta = 2.2\%$ ($N=36$). Для 45 веществ из табл. 1, для которых отклонение v_c от (5) находится в пределах 5% среднеквадратичные отклонения равны $\Delta = 2.8\%$ ($N=45$).

На рис. 1 приведено сравнение критического объема ($V_c VdW$, пятый столбец в табл. 1), вычисленного по формуле (5) для 12 веществ из [5], для которых отклонение опытных значений v_c (V_c , третий столбец в табл. 1) от (5) находится в пределах 1%.

На рис. 2 приведено сравнение критического объема ($V_c VdW$, пятый столбец в табл. 1), вычисленного по формуле (5) для 45 веществ из [5], для которых отклонение опытных значений v_c (V_c , третий столбец в табл. 1) от (5) находится в пределах 5%.

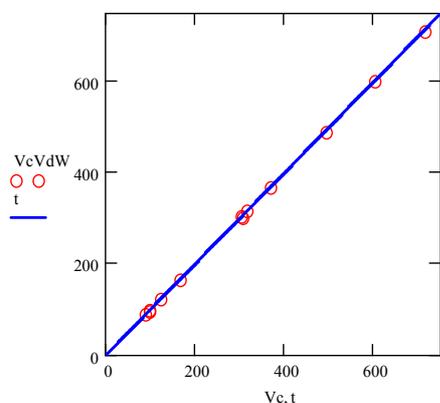


Рис. 1. Сравнение критического объема, вычисленного по формуле (5) с опытными данными. Отклонения не более 1%.

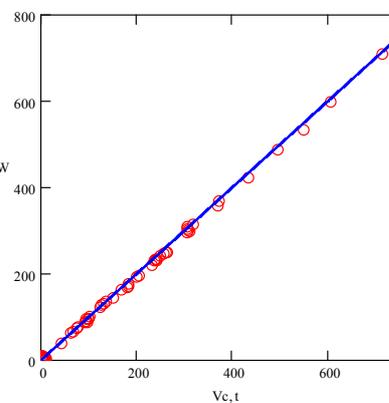


Рис. 2. Сравнение критического объема, вычисленного по формуле (5) с опытными данными. Отклонения не более 5%.

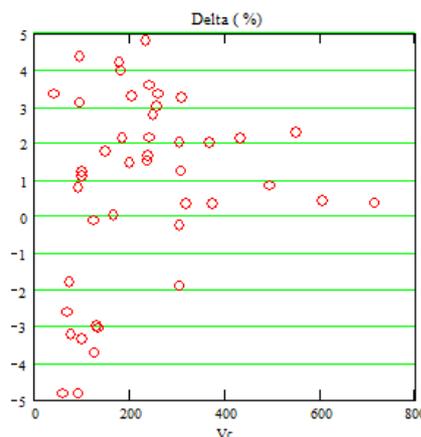


Рис. 3. Относительные отклонения (в %) критического объема, вычисленного по формуле (5) от опытных данных в зависимости от критического объема веществ

На рис. 1 и 2 прямая линия с тангенсом угла наклона, равным единице проведена для того, чтобы показать, что критический объем, вычисленный по формуле (5), находится в хорошем согласии с его опытными значениями для ряда веществ.

На рис. 3 показана зависимость относительных отклонений (Δ , в %) в зависимости критического объема (V_c).

Выводы

1. На основе уравнения состояния Ван-дер-Ваальса получено соотношение между объемом и давлением в критической точке фазового перехода газ-жидкость однокомпонентного вещества и температурой Бойля.
2. Показано, что это соотношение с хорошей точностью выполняется для ряда веществ.
3. Это соотношение можно использовать для определения критического объема с помощью значений критического давления и температуры Бойля.
4. Уравнение состояния Ван-дер-Ваальса полезно для получения важных соотношений между термодинамическими параметрами.

Литература

- [1] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч.1. *Москва: Наука. 1976.* 583с.
- [2] Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. *Москва: Издательство иностранной литературы. 1961.* 930с.
- [3] Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. *Ленинград: Химия. 1982.* 591с.
- [4] Мейсон Э., Сперлинг Е. Вириальное уравнение состояния. *Москва: Мир. 1972.* 280с.
- [5] R. Estrada-Torres, Iglesias-Silva, M. Ramos-Estrada, K.R. Hall. *Fluid phase equilibria. 2007.* Vol.258. P.148-154.
- [6] Филиппов Л.П. Подобие свойств веществ. *Москва: Издательство МГУ. 1978.* 255с.

Полная исследовательская публикация

Тематический раздел: Термодинамические исследования.

Регистрационный код публикации: 15-44-10-118

Подраздел: Физическая химия.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно

действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>

УДК 533.1. Поступила в редакцию 13 сентября 2015 г.

Метод определения критического объема однокомпонентных веществ через температуру Бойля и критическое давление

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович

*Лаборатория моделирования. ФГБУН «Институт теплофизики СО РАН». Пр-кт Лаврентьева, 1.
г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org*

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

Аннотация

На основе уравнения состояния Ван-дер-Ваальса получено соотношение между объемом и давлением в критической точке фазового перехода газ-жидкость однокомпонентного вещества и температурой Бойля. Показано, что это соотношение с хорошей точностью выполняется для ряда веществ.

Полная исследовательская публикация

Тематический раздел: Препаративные исследования.

Регистрационный код публикации: 15-44-10-122

Подраздел: Супрамолекулярная 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 547.233:547.284+547.1'1. Поступила в редакцию 28 августа 2015 г.

Трис(1-амино)трифосфонаты на основе трис(2-аминоэтил)амин: моделирование комплексов с протеиногенными аминокислотами

© **Шабалин Константин Васильевич, Мостовая Ольга Александровна, Адельшина Майя Викторовна и Стойков*⁺ Иван Иванович**

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

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: аминоксфосфонаты, комплексы типа «хозяин-гость», квантовохимическое моделирование.

Аннотация

Проведено моделирование комплексов трис(1-амино)трифосфонатов на основе трис(2-аминоэтил)амин с протеиногенными аминокислотами. Установлены закономерности влияния заместителя у α -атома углерода на энергию стабилизации и геометрию образующихся комплексов. Определены участки связывания, отвечающие за молекулярное распознавание между трис(1-амино)трифосфонатом и α -аминокислотой.

1,3-Диоксолан в синтезе 4,4'-бис(арилметиленимино)дифенилметанов и замещенных 3,4-дигидрохиназолинов

© Эсенбаева¹ Виктория Викторовна, Юнникова^{1*†} Лидия Петровна,
Никонов² Георгий Николаевич и Якимова¹ Ирина Дмитриевна.

¹ ФГБОУ ВО «Пермская государственная сельскохозяйственная академия им. академика Д.Н. Прянишникова». Ул. Петропавловская, 23. г. Пермь, 614990. Пермский край. Россия.
E-mail: yunnikova@yahoo.com

² Eigenchem Technologies Inc., Sid Martin Biotechnology Incubator, University of Florida.
12085, Research Drive, Suite 141, Alachua, Florida, 32615.

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: амины, имины, 1,3-диоксолан; 4,4'-бис(арилметиленимино)дифенилметаны, 3,4-дигидрохиназолины.

Аннотация

Взаимодействие 1,3-диоксолана с имидами, имеющими заместитель в *орто*-, *мета*- или *пара*-положении альдегидного фрагмента, приводит к образованию 4,4'-бис(арилметиленимино)дифенилметанов. Имины, имеющие заместители в *пара*-положении анилинового фрагмента, при взаимодействии с 1,3-диоксоланом образуют замещенные 3,4-дигидрохиназолины.

Синтез и фотофизические свойства дифторборатных комплексов 2-(2'-гидроксифенил)-3H-хиназолин-4-онов

© Носова¹⁺ Эмилия Владимировна, Мошкина¹ Татьяна Николаевна,
Липунова² 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, 620137. Россия. Тел.: (343) 362-30-65. E-mail: lipunova@ios.uran.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: N,O-бидентатные лиганды, VF₂ комплексы, 2-(2'-гидроксифенил)-3H-хиназолин-4-он, фотофизические свойства, флуоресценция.

Аннотация

Осуществлен синтез новых производных 2-(2'-гидроксифенил)-3H-хиназолин-4-она, получены их VF₂ комплексы. Координационные соединения охарактеризованы данными ЯМР ¹H, ¹⁹F, ¹¹B спектроскопии и масс-спектрометрии. Исследована флуоресценция комплексов в растворе ацетонитрила, представлены данные по влиянию заместителей в фенольном фрагменте на фотофизические свойства.

Краткое сообщение

Регистрационный код публикации: 15-44-10-136

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно

действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". <http://butlerov.com/readings/>

УДК 547.74. Поступила в редакцию 14 сентября 2015 г.

Тематический раздел: Препаративные исследования.

Подраздел: Органическая химия.

Синтез и связь между структурой и антигипоксической активностью 5-арил-4-бензоил-3-гидрокси-1-[2-(2-гидроксиэтокси)этил]-3-пирролин-2-онов

© Рогачёв⁺ Сергей Николаевич, Бобылева Александра Александровна, Аликина Наталья Александровна, Апушкин Данила Юрьевич, Гартман Генрих Анатольевич и Гейн* Владимир Леонидович

Кафедра общей и органической химии. ГБОУ ВПО «Пермская государственная фармацевтическая академия Министерства здравоохранения Российской Федерации». Ул. Полевая, 2. г. Пермь, 614090. Россия. Тел.: (342) 236-90-50. E-mail: rogachevsergei@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 5-арил-4-бензоил-3-гидрокси-1-[2-(2-гидроксиэтокси)этил]-3-пирролин-2-оны, синтез, нормобарическая и гемическая гипоксии.

Аннотация

При использовании препаративной методики, был получен ряд соединений 5-арил-4-бензоил-3-гидрокси-1-[2-(2-гидроксиэтокси)этил]-3-пирролин-2-онов. Строение полученных соединений было доказано на основании ИК- и ЯМР ¹H-спектроскопий.

Изучена антигипоксическая активность синтезированных соединений методами нормобарической и гемической гипоксии. Выявлена зависимость между структурой соединений и их антигипоксической активностью.

Концентрирование химических элементов клетками цианобактерий в гидротермах Камчатки

© Зеленков^{1*} Валерий Николаевич, Потапов² Вадим Владимирович
и Марков³ Михаил Витальевич

¹ ФГБНУ ВНИИ овощеводства РАН. д. Веряя Раменского района Московской области.
Россия. Тел.: (8910) 451-37-45. E-mail: zelenkov-raen@mail.ru

² ФГБНУ Научно-исследовательский геолого-технологический центр ДВО РАН.
г. Петропавловск-Камчатский. Россия.

³ Московский государственный педагогический университет. г. Москва. Россия.

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: гиперконцентрирование, клетки цианобактерий, гидротермы, химические элементы.

Аннотация

В работе рассматриваются экспериментальные данные полученные по материалам экспедиций РАЕН на Камчатке в период 2002-2005 гг. Авторы исследовали элементный состав термальных вод и цианобактерий в условиях термальных источников. Авторы распределили химические элементы по степени концентрирования клетками цианобактерий. Показано, что для железа, кальция, алюминия, магния, кремния, бора, марганца, германия, фосфора свойственно высокое концентрирование цианобактериями. Авторы экспериментально выявили факт концентрирования высокой степени для химических элементов клетками цианобактерий в гидротермальных водах Камчатки.

Краткое сообщение

Тематический раздел: Биохимические исследования.

Регистрационный код публикации: 15-44-10-146 Подраздел: Антиоксидантные свойства биологического сырья.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей

интернет-конференции “Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов”.

http://butlerov.com/natural_resources/

УДК 664.951. Поступила в редакцию 26 сентября 2015 г.

Стабилизация антиоксидантных свойств растительных экстрактов амаранта аскорбиновой кислотой в производстве рыбных продуктов

© Лапин*⁺ Анатолий Андреевич, Зеленков¹ Валерий Николаевич, Ислямова Алия Алековна и Ахмерова Ляйсан Ринатовна

Кафедра водных ресурсов и аквакультуры. Казанский энергетический университет.

Ул. Красносельская, 51. г. Казань, 420066. Республика Татарстан, Россия.

Тел.: (843) 519-43-53. E-mail: lapinanatol@mail.ru

¹ *ФБГНУ ВНИИ Овощеводства РАН. Верея, Московской обл. Россия.*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: амарант, аскорбиновая кислота, антиоксидантная активность, фенольное соединение.

Аннотация

Наличие широкого спектра антиоксидантов, включая различные фенольные соединения, характеризуют амарант, как перспективное биологически активное сырье для создания пищевых добавок с аскорбиновой кислотой при разработке новых перспективных видов экологической продукции, которая относится к развивающемуся сегменту мирового рынка продовольствия.

Разработка и валидация аналитических методик для контроля качества активной фармацевтической субстанции Ламивудин

© Петухова Светлана Александровна, Веселова Валерия Николаевна,
Буданова Юлия Евгеньевна и Ивановский*⁺ Сергей Александрович

*Кафедра химии, теории и методики преподавания химии. Ярославский государственный педагогический университет им. К.Д. Ушинского. Ул. Республиканская, 108.
г. Ярославль, 150000. Россия. Тел.: (8452) 73-15-29. E-mail: s.ivanovskiy@yspu.org*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

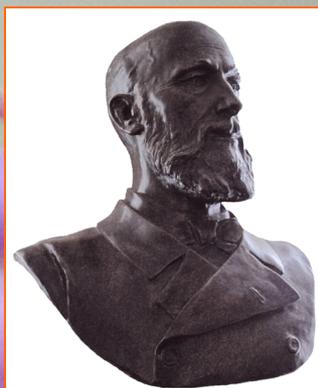
Ключевые слова: ламивудин, валидация.

Аннотация

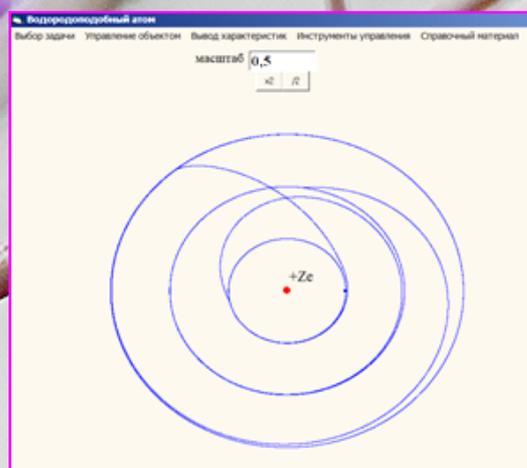
Разработаны аналитические методики контроля качества активной фармацевтической субстанции Ламивудин по показателям: определение посторонних примесей и энантиомерная чистота. Проведена валидация методик и подтверждена пригодность использования их для оценки качества активной фармацевтической субстанции. Подготовлены соответствующие разделы проекта Фармакопейной статьи предприятия. На основе валидационного отчета оформлен раздел регистрационного досье.

Бутлеровские сообщения

№11, том 44. 2015



ISSN 2074-0212



ISSN 2074-0948

International Edition in English:
Butlerov Communications



Планетарная модель атома водорода и водородоподобных структур

© Потапов Алексей Алексеевич*⁺ и Минеев Юрий Вячеславович
г. Иркутск, Россия. Тел.: (395) 246 3009. E-mail: aleksey.potapov.icc@gmail.com

*Ведущий направление; ⁺ Поддерживающий переписку

Ключевые слова: атом водорода, электрон, потенциальная и кинетическая энергия, устойчивость, захват электрона.

Аннотация

Обсуждается планетарная модель Резерфорда-Бора в приложении к атому водорода и водородоподобным структурам. Дается ее обоснование, исходя из законов сохранения энергии и момента количества движения. Раскрывается природа дискретности оптического спектра атома водорода. Предлагается механизм захвата электрона ядром атома. Разработана программа для компьютерного моделирования. Приведены примеры компьютерного исследования атома водорода и водородоподобных катионов.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 533.1. Поступила в редакцию 30 октября 2015 г.

Уравнение состояния Ван-дер-Ваальса, второй вириальный коэффициент, потенциал взаимодействия и условие минимума свободной энергии

© **Умирзаков Ихтиёр Холмаматович**

*Лаборатория моделирования. ФГБУН «Институт теплофизики СО РАН». Пр-т Лаврентьева, 1.
г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org*

Ключевые слова: уравнение состояния, линия единичной сжимаемости, идеальная кривая, второй вириальный коэффициент, потенциал взаимодействия, полярная молекула, свободная энергия.

Аннотация

Из условия минимума свободной энергии получена модификация уравнения состояния Ван-дер-Ваальса (УС ВдВ). Показано, что УС ВдВ способно описать свойства вещества вблизи линии единичной сжимаемости. Показано также, что параметр, который как общепринято считать учитывает только силы притяжения в уравнении состояния Ван-дер-Ваальса, может включать в себя часть отталкивательного взаимодействия. Получены интегральные уравнения для потенциала взаимодействия, отвечающие минимуму свободной энергии как функции одного из взаимосвязанных параметров УС ВдВ. Теоретически получены одно- и двух температурное разложения второго вириального коэффициента, коэффициенты которых определяются через потенциал взаимодействия.

Thematic direction: About some consequences from the virial equation of state. Part 2.

Definition of the critical parameters from second and third virial coefficients

© Ikhtier H. Umirzakov

The Laboratory of Modeling. Kutateladze Institute of Thermophysics of the SB RAS. Lavrenteva Prospect, 1. Novosibirsk, 630090. Russia. Phone: +7 (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org

Keywords: virial coefficient, critical point, liquid-gas phase transition, critical volume, critical temperature, critical pressure, equation of state.

Abstract

It is shown that the virial equation of state gives the relations between temperature, pressure, volume and second and third virial coefficients at the critical point of liquid-gas phase transition of one-component substance. It is shown that the critical values of pressure, temperature and volume can be defined with good accuracy using relations. The relation between temperature, pressure and second virial coefficient at the critical point is found that gives the values of critical pressure for 17 various substances with accuracy equal to 5%. The values of critical temperature for 17 various substances with accuracy equal to 4% can be obtained using the relation between second and third virial coefficients at the critical point if the experimental (or simulated) temperature dependences of second and third virial coefficients are known. The relations obtained can be used to determine the critical parameters of substances.

Полная исследовательская публикация

Тематический раздел: Термодинамические исследования.

Регистрационный код публикации: 15-44-11-44

Подраздел: Физическая химия.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно

действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>

УДК 536.71, 536.33. Поступила в редакцию 29 октября 2015 г.

Вывод уравнения состояния Ван-дер-Ваальса из классической равновесной статистической механики системы из двух частиц

© **Умирзаков Ихтиёр Холмаматович**

Лаборатория моделирования. ФГБУН «Институт теплофизики СО РАН».

Пр-т Лаврентьева, 1. г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17.

E-mail: tepliza@academ.org

Ключевые слова: потенциал Лондона, твердые сферы, равновесие, уравнение состояния Ван-дер-Ваальса, изотермическая система, статистическая сумма, конечная система частиц.

Аннотация

Рассмотрена классическая равновесная статистическая механика изотермической системы из двух частиц, находящихся в сферическом объеме. Взаимодействие частиц со стенками сферы осуществляется посредством потенциала твердых сфер. Показано, что уравнение состояния Ван-дер-Ваальса может быть получено приближенно для системы из двух твердых сфер, взаимодействующих друг с другом посредством потенциала Лондона, если центр масс частиц зафиксирован в центре сферического объема.

Сонохимический синтез нанокompозитов MnO₂/C

© Печищева¹ Надежда Викторовна, Эстемирова^{2*+} Светлана Хусаиновна,
Кожина^{2,3} Галина Анатольевна, Шуняев¹ Константин Юрьевич
и Скрыльник¹ Мария Юрьевна

¹ Лаборатория аналитической химии; ² Лаборатория статистики и кинетики процессов. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии УрО РАН.
Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Россия.

³ Уральский государственный экономический университет. Ул. 8-е Марта, 62.
г. Екатеринбург, 620144. Свердловская область. Россия.
Тел.: (8434) 232-90-40. E-mail: k_shun@mail.ru, esveta100@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: сонохимический синтез, углеродные материалы, механоактивация, нанокompозиты.

Аннотация

Нанокompозиты MnO₂/C получены с помощью двух методик, каждая из которых включала ультразвуковое воздействие и не использовала химически активных веществ. Для первой методики, проводившейся в одну стадию, материалом матрицы служил активированный уголь марки БАУ-А. Сонохимический синтез нанокompозитов из спектрально чистого графита (второй метод) потребовал его модификации с помощью механоактивационного воздействия. По данным рентгенографических исследований все синтезированные композиты были нанокристаллическими и содержали две фазы – оксид марганца(IV) и углерод. Средний размер кристаллитов MnO₂, адсорбированных на пористой структуре углеродных материалов, составил ~5 нм.

Получение наноструктурированных оксидов никеля и кобальта

© Лапсина¹⁺ Полина Валентиновна, Кагакин^{2*} Евгений Иванович,
Попова¹ Анна Николаевна и Додонов³ Вадим Георгиевич

¹ Центр коллективного пользования. Кемеровский научный центр СО РАН. Пр. Советский, 18.
г. Кемерово, 650000. Россия. Тел.: 8-923-608-0271. E-mail: lpv110185@rambler.ru

² Кафедра химической технологии твердого топлива и экологии. Кузбасский государственный
технический университет имени Т.Ф. Горбачева. Ул. Весенняя, 28, г. Кемерово, 650000. Россия.
E-mail: kagakin55@mail.ru

³ Кафедра химии твердого тела. Кемеровский государственный университет.
Ул. Красная, 6. г. Кемерово, 650043. Россия.. E-mail: 233191@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: наноструктурированные порошки, оксид никеля, оксид кобальта.

Аннотация

Предложен способ получения наноструктурированных оксидов никеля и кобальта из наноструктурированных металлических порошков. Рассмотрена морфология полученных наноструктурированных оксидов. Установлено, что получаемые оксиды имеют размеры, сопоставимые с размерами соответствующих металлических прекурсоров.

Synthesis of silver nanoparticles by borohydride method and determination of they size by photon correlation spectroscopy

© Vladimir V. Kuznetsov,^{*+} Veronica V. Smagina,^{*} Alexander F. Krivoschepov,^{*} Grigory V. Avramenko,^{*} and Svetlana P. Katuleva

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia. Panfilov Heroes St., 20. Moscow, 125480. Russia. Phone: +7 (962) 964-91-68. E-mail: vladimir19927@yandex.ru

^{*}Supervising author; ⁺Corresponding author

Keywords: silver nanoparticles, sodium borohydride, photon correlation spectroscopy, polyvinylpyrrolidone, poly-(4,9-dioxadodecane-1,12-guanidinium) chloride.

Abstract

The article is devoted to obtaining silver nanoparticles by borohydride method using as stabilizer the polyvinylpyrrolidone (PVP), polyvinyl alcohol or poly-(4,9-dioxadodecane-1,12-guanidinium) chloride (PDDG). The size of the silver particles and their change during the time was determined; the influence on this feature of the synthesis conditions and the used stabilizer was evaluated.

It was found that the growth of nanoparticles occur during the time by using PVP, that may be connected with its recovering capability. A promising direction is the use of PDDG chloride that allows obtaining the size of the particles practically unchanged during the time and has the pronounced biocidal properties.

Синтез и биологическая активность 2,5-замещенных 6-гидрокси-пиримидин-4(3H)-онов

© Потапова⁺ Анастасия Эдуардовна, Куваева Елена Владимировна,
Яковлев* Игорь Павлович, Федорова Елена Владимировна
и Щеголев Александр Евгеньевич

Кафедра органической химии. Санкт-Петербургская химико-фармацевтическая академия.

Ул. Профессора Попова, 14. Санкт-Петербург, 197376. Россия.

Тел.: (812) 234-11-72. E-mail: stasia005@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺ Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 6-гидроксипиримидин-4(3H)-он, острая токсичность, анальгезирующая активность, противовоспалительная активность.

Аннотация

Получен ряд новых производных 2,5-замещенных 6-гидроксипиримидин-4(3H)-онов. Установлено что скорость реакции и выход конечного продукта определяются электронной природой заместителя в молекулах исходных амидинов гидрохлоридов и малоновом эфире. Полученные соединения проявляют ярко выраженную анальгезирующую и противовоспалительную активность.

Тематический раздел: Исследование новых технологий.
Подраздел: Органическая химия.

Полная исследовательская публикация

Регистрационный код публикации: 15-44-11-69

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". <http://butlerov.com/readings/>
Поступила в редакцию 28 октября 2015 г. УДК 541.183.

Тематическое направление: Твердофазный нанореактор. Часть 5.

Полимерные наноконтейнеры для анестезина

**Альтшулер^{1*} Генрих Наумович, Шкуренко¹⁺ Галина Юрьевна,
Лыршиков² Сергей Юрьевич, Горлов¹ Алексей Александрович
и Альтшулер¹ Ольга Генриховна**

¹ *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*

² *Кемеровский научный центр СО РАН. пр. Советский, 18. г. Кемерово, 650000. Россия*

*Ведущий направление; + Поддерживающий переписку

Ключевые слова: полимерный наноконтейнер, иммобилизованный анестезин, сульфокатиониты.

Аннотация

Показана возможность иммобилизации анестезина в полимерные наноконтейнеры на основе сульфокатионитов: сульфированный поликаликсарен и катионит КУ-23 30/100. Иммобилизация осуществлена ионообменной сорбцией протонированного анестезина из водных растворов. Исследована кинетика десорбции нейтральных молекул и катионов анестезина из полимерных наноконтейнеров.

Тематическое направление: Синтез и исследование свойств катализаторов дожигания. Часть 1.

Влияние ПАВ на вязкостные свойства суспензии $\text{Pd}(\text{NO}_3)_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-La}_2\text{O}_3\text{-HAc-H}_2\text{O}$ для катализаторов дожигания

© Бездетнова¹ Алена Евгеньевна, Марков^{1,2*} Вячеслав Филиппович
Зеленин¹ Виктор Иванович и Маскаева^{1,2+} Лариса Николаевна

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. Свердловская область. Россия. Тел.: (343) 360-81-68

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: катализаторы дожигания, вязкость, суспензии, ионные равновесия, поверхностно-активные вещества, нитрат палладия(II), оксид лантана.

Аннотация

В системе “ $\text{Pd}(\text{NO}_3)_2 - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{La}_2\text{O}_3 - \text{HAc} - \text{H}_2\text{O}$ ” расчетом ионных равновесий с использованием термодинамических констант определены граничные условия образования гидроксидов металлов. Экспериментально показана возможность снижения динамической вязкости суспензии “ $\text{Pd}(\text{NO}_3)_2 - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{La}_2\text{O}_3 - \text{HAc} - \text{H}_2\text{O}$ ”, имеющей $\text{pH} = 3$, при добавлении 1% водного раствора катионоактивного ПАВ Praestol 655 BC в 1.74 раза: с 850.62 до 488.95 мПа·с. Исследована морфология частиц суспензии до и после добавления в нее катионоактивного ПАВ Praestol 655 BC.

Теоретико-экспериментальные исследования эффективности способов пробоподготовки сульфидного сырья цветных металлов к определению микро- и макрокомпонентов методом ИСП-АЭС

© Майорова*⁺ Анна Владимировна, Печищева Надежда Викторовна
и Шуняев Константин Юрьевич

Лаборатория аналитической химии. Институт металлургии УрО РАН. Ул. Амундсена, 101.
г. Екатеринбург, 620016. Россия. Тел.: (343) 267-89-36. E-mail: imeturoran@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: сульфидные руды и концентраты цветных металлов, руда полиметаллическая, определение содержания серебра, золота, железа, кремния, серы, никеля, кобальта, меди, термодинамическое моделирование, атомно-эмиссионная спектрометрия с индуктивно связанной плазмой.

Аннотация

Исследована эффективность вскрытия проб сульфидного сырья цветных металлов с целью подготовки к определению содержания серебра, золота, железа, кремния, серы, никеля, кобальта, меди посредством атомно-эмиссионной спектрометрии с индуктивно связанной плазмой (ИСП-АЭС). Рассмотрено вскрытие двумя методами: кислотным разложением в смеси HCl:HNO₃ (3:1) и сплавлением с Na₂O₂. С помощью термодинамического моделирования (программный комплекс «HSC») показано, что при кислотном вскрытии медной руды с HCl:HNO₃ (3:1) происходит потеря одного из целевых аналитов – кремния; при вскрытии сплавлением с Na₂O₂ потерь не наблюдается. Результаты моделирования вскрытия полиметаллической руды показывают аналогичное поведение аналитов за исключением серы, которая в присутствии бария образует осадок BaSO₄, вследствие чего пробоподготовка рассмотренными методами не может быть использована при ИСП-АЭС определении серы в барийсодержащих рудах. Экспериментальные исследования подтверждают теоретически полученные выводы. Анализ государственных стандартных образцов состава показал эффективность предложенных методов пробоподготовки.

Исследование возможности измерения содержания нитрозилсерной кислоты в смеси кислот

© Козлова^{1*} Надежда Юрьевна, Хацринов^{2*} Алексей Ильич и Гатина Роза Фатыховна^{1*}

¹ Федеральное казенное предприятие «Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов». Ул. Светлая, 1. г. Казань, 420033. Республика Татарстан. Россия.
E-mail: kozlova_nadezhda_2014@mail.ru.

² Кафедра технологии неорганических веществ. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. Сибирский тракт, 12 к.Е. г. Казань, 420111. Республика Татарстан. Россия

*Ведущий направление; + Поддерживающий переписку

Ключевые слова: нитрация, смеси азотной и серной кислот, потенциометрическое титрование, нитрозилсерная кислота.

Аннотация

Проведены исследования растворов смесей азотной и серной кислот в диапазоне концентраций HNO_3 20-23%, H_2SO_4 50-65%, H_2O 10-20%. Показано, что при взаимодействии азотной и серной кислот, в смеси образуется нитрозилсерная кислота. Процесс образования нитрозилсерной кислоты заканчивается через сутки после приготовления смесей. Методом потенциометрического титрования возможно определить нитрозилсерную кислоту в смесях азотной и серной кислот.

Характеристика лигноцеллюлозных материалов как сорбентов радионуклидов

© Кочева¹ Людмила Сергеевна, Карманов^{2*+} Анатолий Петрович,
Шуктомова³ Ида Ивановна, Рачкова³ Наталия Гелиевна
и Котова⁴ Ольга Борисовна

¹ Лаборатория химии минерального сырья. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт геологии Коми научного центра УрО РАН. Ул. Первомайская, 54. г. Сыктывкар, 167982. Республика Коми. Россия. Тел.: (8212) 24-54-16. E-mail: lskocheva@geo.komisc.ru

² 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.: (909) 120-81-63. E-mail: ark0948@ib.komisc.ru

³ Лаборатория миграции радионуклидов и радиохимии. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биологии Коми научного центра УрО РАН. Ул. Коммунистическая, 28. г. Сыктывкар, 167982. Республика Коми. Россия. Тел.: (8212) 24-01-63.

E-mail: shuktomovaii@ib.komisc.ru

⁴ Лаборатория технологии минерального сырья. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт геологии Коми научного центра УрО РАН. Ул. Первомайская, 54. г. Сыктывкар, 167982. Республика Коми. Россия. Тел.: (8212) 24-51-60. E-mail: kotova@geo.komisc.ru

*Ведущий направление; + Поддерживающий переписку

Ключевые слова: лигноцеллюлозные материалы, сорбция, радионуклиды, уран, радий, торий.

Аннотация

Приведены результаты исследования лигноцеллюлозных материалов из соломы овса и ржи. Показана принципиальная возможность создания на их основе универсальных сорбентов радионуклидов. Отмечена перспективность использования лигноцеллюлозных сорбентов для очистки водных сред, загрязненных долгоживущими радиоактивными изотопами U^{238} , Ra^{226} и Th^{232} .

Тематический раздел: Биохимические исследования.
Подраздел: Биохимия.

Полная исследовательская публикация

Регистрационный код публикации: 15-44-11-97

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
Поступила в редакцию 6 октября 2015 г. УДК 545.5.

Тематическое направление: Возможности применения эйхорнии в доочистке вод целлюлозно-бумажного комбината. Часть 1.

Особенности химического состава воды в Волжском плесе Куйбышевского водохранилища

© **Калайда*⁺ Марина Львовна и Хамитова Мадина Фархадовна**

*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: kalayda@mi.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: загрязнение окружающей среды, Куйбышевское водохранилище, сточные воды, тяжелые металлы, рентгенофлуоресцентный анализ, концентрации загрязняющих веществ.

Аннотация

Изучен химический состав воды в районе Лопатинской Воложки Волжского плеса Куйбышевского водохранилища. Рассмотрены особенности химического состава воды на участках выше сброса сточных вод из вторичного отстойника, ниже сброса, в месте смешения вод и во вторичном отстойнике Марийского целлюлозно-бумажного комбината на острове Лопатинском Куйбышевского водохранилища. В сравнительном аспекте показана доля тяжелых металлов в воде в разных условиях.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 545.5. Поступила в редакцию 6 октября октября 2015 г.

Тематическое направление: Возможности применения эйхорнии в доочистке вод целлюлозно-бумажного комбината. Часть 2.

Особенности химического состава донных отложений в Волжском плесе Куйбышевского водохранилища

© **Калайда*⁺ Марина Львовна и Хамитова Мадина Фархадовна**

*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: kalayda@mi.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: загрязнение окружающей среды, Куйбышевское водохранилище, донные отложения, тяжелые металлы, рентгенофлуоресцентный анализ, концентрации загрязняющих веществ.

Аннотация

Изучен химический состав донных отложений в районе Лопатинской воложки Волжского плеса Куйбышевского водохранилища. Рассмотрены особенности химического состава донных отложений на участках выше сброса сточных вод из вторичного отстойника, ниже сброса, в месте смешения вод и во вторичном отстойнике целлюлозно-бумажного комбината на острове Лопатинском Куйбышевского водохранилища. В сравнительном аспекте показана доля тяжелых металлов в донных отложениях в разных условиях.

Тематический раздел: Биохимические исследования.
Подраздел: Биохимия.

Полная исследовательская публикация

Регистрационный код публикации: 15-44-11-113

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
Поступила в редакцию 17 октября 2015 г. УДК 581.6.

Тематическое направление: Возможности применения эйхорнии в доочистке вод целлюлозно-бумажного комбината. Часть 3.

Особенности химического состава *Eichhorniacrassipes*

© Калайда*⁺ Марина Львовна и Хамитова Мадина Фархадовна

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: kalayda@mi.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: загрязнение окружающей среды, Куйбышевское водохранилище, сточные воды, очистка вод, биогидроботанический способ, водные растения, эйхорния, тяжелые металлы, рентгенофлуоресцентный анализ.

Аннотация

Изучен химический состав эйхорнии содержащейся во вторичном отстойнике целлюлозно-бумажного комбината в районе Лопатинской воложки Волжского плеса Куйбышевского водохранилища. Рассмотрены особенности накопления тяжелых металлов в сравнении с другими водными растениями.

Использование вермикультуры в очистке осадков сточных вод: тяжелые металлы в осадках сточных водгородских очистных сооружений

© Калайда^{1*} Марина Львовна и Абдуллин Раиль Райнурович

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: kalayda@mi.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: осадки сточных вод, почвы, загрязнение окружающей среды, тяжелые металлы, вермикультура, дождевые черви, *Eiseniafoetida*, рентгенофлуоресцентный анализ, концентрации химических элементов.

Аннотация

Изучен химический состав осадков сточных вод городских очистных сооружений г. Набережные Челны и экспериментальных субстратов на базе осадков сточных вод и садовой почвы территории г. Казань, в которых содержались дождевые черви. Рассмотрены особенности химического состава субстратов, в которых культивирование *Eiseniafoetida* проводилось при различной степени влажности. Выделены тяжелые металлы – свинец, хром и цинк, которым должно быть уделено особое внимание в биотехнологии очистки осадков сточных вод на основе вермикультуры.

Биогеохимические основы включения в корма рыб червей *Eisenia foetida* как биодобавку

© **Калайда*⁺ Марина Львовна и Абдуллин Раиль Райнурович**

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: kalayda@mi.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: загрязнение окружающей среды, тяжелые металлы, вермикультура, дождевые черви, *Eisenia foetida*, рентгенофлуоресцентный анализ, концентрации химических элементов, микроэлементы в аквакультуре, биодобавки в корма.

Аннотация

Рассмотрены особенности микроэлементного состава экспериментальной почвы на основе осадков сточных вод и выращенных в ней дождевых червей. Показана возможность использования культуры *Eisenia foetida* в биотехнологии очистки сточных вод городских очистных сооружений, а затем как биодобавки к кормам рыб в аквакультуре. Показаны особенности микроэлементного состава *Eisenia foetida* в сравнении с гидробионтами.

Использование вермикультуры в очистке осадков сточных вод: результаты культивирования *Eisenia foetida* в субстрате осадков сточных вод

© **Калайда*⁺ Марина Львовна и Абдуллин Раиль Райнурович**

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: kalayda@mi.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: почвы, осадки сточных вод, тяжелые металлы, загрязнение окружающей среды, биотехнология, вермикультура, дождевые черви, *Eisenia foetida*, рентгенофлуоресцентный анализ, концентрации химических элементов.

Аннотация

Рассмотрены особенности химического состава дождевых червей *Eisenia foetida*, использованных в биотехнологии очистки сточных вод городских очистных сооружений. Показано изменение концентрации тяжелых металлов в субстрате, теле червей и их капролитах. Дождевые черви при культивировании в субстратах с высокими концентрациями микроэлементов и опасных тяжелых металлов способны перерабатывать осадки сточных вод. Наибольший коэффициент биологического поглощения отмечен у цинка, наименьший у свинца.

Содержание и состав углеводов листьев некоторых видов рода *Filipendula*

© Скляревская*⁺ Нелли Владимировна, Гладкая Юлия Александровна
и Толстиков Сергей Викторович

Кафедра фармакогнозии. Лаборатория аналитических методов. Санкт-Петербургская государственная химико-фармацевтическая академия. Ул. Профессора Попова, д.14, литер А. Санкт-Петербург, 197376. Россия. Тел.: (812) 234-43-62. E-mail: nelly.sklyarevskaya@pharminnotech.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: моносахариды, водорастворимые полисахариды, пектиновые вещества, газожидкостная хроматография, *Filipendula ulmaria*, *Filipendula camtschatica*.

Аннотация

Из листьев видов рода лабазник (*Filipendula* Mill.) – *F. ulmaria*, *F. camtschatica* выделены водорастворимые полисахариды, пектиновые вещества, исследован их моносахаридный состав методом газожидкостной хроматографии. Основными мономерными единицами комплекса водорастворимых полисахаридов листьев *F. camtschatica* являются манноза, ксилоза и галактуроновая кислота, листьев *F. ulmaria* – рамноза, глюкоза и манноза.

Определено количественное содержание в образцах сырья свободных моносахаридов, водорастворимых полисахаридов и пектиновых веществ.

Тематическое направление: Полисахариды микроводорослей. Часть 1.

Общая химическая характеристика внеклеточных полисахаридов цианобактерии *Nostoc muscorum* Ag. ex Born. et Flah.

© Шубаков^{1*} Анатолий Александрович, Патова^{2*} Елена Николаевна,
Попейко¹ Оксана Викторовна, Витязев¹ Федор Васильевич
и Михайлова¹ Елена Андреевна

¹ 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

² Лаборатория геоботаники и сравнительной флористики. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биологии Коми научного центра УрО РАН. Ул. Коммунистическая, 28. г. Сыктывкар, 167982. Республика Коми. Россия. Тел.: (8212) 24-64-88.

*Ведущий направление; + Поддерживающий переписку

Ключевые слова: полисахариды, цианобактерии, *Nostoc muscorum*.

Аннотация

Для цианобактерии *Nostoc muscorum* (SykoA C-005-09) дана общая химическая характеристика полисахаридов, выделенных из культуральной жидкости. Содержание гликуроновых кислот и белка во внеклеточных полисахаридах составляет соответственно 22.1 и 7.3%. В составе внеклеточных полисахаридов преобладают четыре моносахарида: манноза (9.0%), галактоза (7.9%), глюкоза (6.9%) и ксилоза (5.9%).

Математическая модель реакторного блока установки производства этиленгликолей

© Латыпов¹ Рамиль Минехатович, Осипов²⁺ Эдуард Владиславович
и Теляков^{2*} Эдуард Шархиевич
¹ ОАО «ТАИФ-НК»

² 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

*Ведущий направление; + Поддерживающий переписку

Ключевые слова: реактор, кинетика химической реакции, этиленгликоли, технология получения гликолей, аппаратурное оформление, математическое моделирование, моделирующие программы.

Аннотация

В среде универсальной моделирующей программы ChemCad построена математическая модель реакторного блока для производств гликолей, учитывающая особенности реально используемого оборудования (реакторов, теплообменников, трубопроводов). Модель идентифицирована по производственным данным с высокой степенью адекватности. Показана перспективность использования модели для решения проектных и оптимизационных задач высокой сложности.

Динамика термо-вакуум-импульсной сушки инертного конструкционного сгорающего материала

© **Мадякин* Владимир Федорович, Енейкина Татьяна Александровна, Осипова Анастасия Юрьевна, Солдатов[†] Сергей Васильевич, Игнатьева Светлана Юрьевна и Гатина Роза Фатыховна**

*Федеральное казенное предприятие “Государственный научно-исследовательский институт химических продуктов”. Ул. Светлая, 1. г. Казань, 420033.
Республика Татарстан. Россия. E-mail: gniihp@bancorp.ru*

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: термо-вакуум-импульсная сушка, конвективная сушка, сгорающий материал, жесткий сгорающий картуз.

Аннотация

Исследовано влияние режимов сушки жестких сгорающих картузов из инертного материала (целлюлоза – поливинил-ацетат – алюминий) на скорость влагоудаления. Показано, что конвективная сушка даже при наиболее высокой температуре равной 110 °С является наименее эффективной. Установлено, что из четырех вариантов термо-вакуум-импульсной сушки наибольшая скорость удаления влаги характерна для режима совмещения термо-вакуум-импульсного прососа горячего теплоносителя (70 °С, вакуум 5 кПа) через слой материала течение 5 минут с одновременным нагревом обогреваемой формы до требуемой температуры. Количество импульсов зависит от влажности материала. Такой режим позволяет сократить время сушки примерно в 8 раз по сравнению со штатным процессом.