

Министерство образования и науки России
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего профессионального образования
«Казанский национальный исследовательский
технологический университет»

100-летию академика П.А. Киртичникова

НАУЧНАЯ СЕССИЯ

(5-8 февраля 2013 г.)

Аннотации сообщений

Казань
Издательство КНИТУ
2013

Коллектив авторов

**100-летию академика П.А.
Кирпичникова. Научная
сессия (5-8 февраля 2013 г.)**

«БИБКОМ»

2013

УДК 378:001
ББК 74.58

Коллектив авторов

100-летию академика П.А. Кирпичникова. Научная сессия (5-8 февраля 2013 г.) / Коллектив авторов — «БИБКОМ», 2013

ISBN 978-5-7882-1351-4

В сборнике опубликованы аннотации сообщений научной сессии КНИТУ, посвященной 100-летию академика П.А. Кирпичникова (5-8 февраля 2013 г.).

УДК 378:001
ББК 74.58

ISBN 978-5-7882-1351-4

© Коллектив авторов, 2013
© БИБКОМ, 2013

Содержание

ОРГКОМИТЕТ	6
ПРОГРАММА НАУЧНОЙ СЕССИИ	8
ПЛЕНАРНОЕ ЗАСЕДАНИЕ	9
СЕКЦИЯ 1.1. МЕХАНИЗМ, ТЕРМОДИНАМИКА И КИНЕТИКА ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В ГОМО – И ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМАХ И МЕТОДЫ ИХ ССЛЕДОВАНИЯ	11
СЕКЦИЯ 1.2. ТЕОРИЯ СОВРЕМЕННЫХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ, НАНОТЕХНОЛОГИИ И НАНОМАТЕРИАЛЫ	28
СЕКЦИЯ 1.3. НАПРАВЛЕННЫЙ СИНТЕЗ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ЗАДАННОЙ СТРУКТУРОЙ, КАК ОСНОВА ДЛЯ СОЗДАНИЯ МАТЕРИАЛОВ И ТЕХНОЛОГИЙ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ	51
Конец ознакомительного фрагмента.	56

100-летию академика П.А. Кирпичникова. Научная сессия (5-8 февраля 2013 г.)

УВАЖАЕМЫЙ КОЛЛЕГА!

Ректорат, Ученый совет Казанского национального исследовательского технологического университета (КНИТУ) приглашает Вас принять участие в работе научной сессии по итогам **2012** года.

Пленарное заседание состоится **5 февраля 2013** года в новом зале Ученого совета. Заседания по секциям проводятся в соответствии с основными научными направлениями вуза.

РЕГЛАМЕНТ РАБОТЫ СЕКЦИИ

Доклад на пленарном заседании **20** минут

Доклад на заседании секции **15** минут

Вопросы на выступление **5** минут

Вопросы к докладчикам на пленарном заседании подаются в письменном виде.

Заявки на использование проекционной техники необходимо подать не позднее чем за **5** дней до начала секции в НИО, корпус «А», ком. **200**

Телефоны для справок: **231-42-90, 231-89-41**

Материалы научной сессии размещены на сайте **www.kstu.ru**

ОРГКОМИТЕТ

Дьяконов Г.С., ректор – председатель
Абдуллин И.Ш., проректор по НР, зам. председателя
Абдуллин И.А., проректор по ИОНП, зам. председателя
Дресвянников А.Ф., начальник НИО, зам. Председателя
Члены оргкомитета
Абутаипова Л.Н., профессор
Авилова В.В., профессор
Аляев В.А., профессор
Амиров К.Ф., профессор
Аминова Г.А., профессор
Базотов В.Я., профессор
Барабанов В.П., профессор
Башкиров В.Н. , профессор
Башкирце ва Н.Ю.профессор
Валеева Н.Ш., профессор
Вольфсон С.И., профессор
Гаврилов В.И., профессор
Гайнуллин Р.Н., профессор
Галяметдинов Ю.Г., профессор
Гумеров Ф.М., профессор
Дебердеев Р.Я., профессор
Зинурова Р.И., профессор
Зиятдинова Ю.Н., профессор
Елизаров И.И., профессор
Емельянов В.М., профессор
Жихарев В.А., профессор
Зенуков И.А., профессор
Иванов В.Г., профессор
Кайдриков Р.А., профессор
Кирпичников А.П., профессор
Кондратьев В.В., профессор
Коршунова О.Н., профессор
Косточко А.В., профессор
Кочнев А.М., профессор
Кузнецов А.М., профессор
Курашов В.И., профессор
Клинов А.В., профессор
Красина И.В., профессор
Дашков В.А., профессор
Лиакумович А.Г., профессор
Макаров В.Г., профессор
Максимов В.А., профессор
Махоткин А.Ф., профессор
Махоткина Л.Ю., профессор
Мусин И.Н., профессор
Нефедьев Е.С., профессор

Нуриев Н.К., профессор
Овсиенко Л.В., профессор
Николаев А.Н., профессор
Поливанов М.А., профессор
Поникаров С.И., профессор
Решетник О.А., профессор
Рязапова Л.З., профессор
Салагаев А.Л., профессор
Сафин Р.Г., профессор
Сафин Р.Р., профессор
Семенов Г.В., профессор
Серазутдинов М.Н., профессор
Синяшин О.Г., профессор
Сироткин А.С., профессор
Сопин В.Ф., профессор
Степин С.Н., профессор
Стойанов О.В., профессор
Сысоева М.А., профессор
Суляев Н.И., профессор
Тузиков А.Р., профессор
Фафурин В.А., профессор
Хабибуллин А.С, профессор
Хамматова В.В., профессор
Харлампиди Х.Э., профессор
Хацринов А.И., профессор
Хисамеев И.Г., профессор
Шайхиев И.Г., профессор
Шинкевич А.И., профессор
Цейтлин Р.С, профессор
Юшко С.В., профессор

ПРОГРАММА НАУЧНОЙ СЕССИИ

ПЛЕНАРНОЕ ЗАСЕДАНИЕ

05.02.2013 г. – Зал заседания Ученого Совета (корп. «А») **10:00**

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

Приветственное слово Дьяконов Г.С., ректор
П.А. Кирпичников. История успеха Зенитова Л.А.
Работы П.А. Кирпичникова и его школы в области стабилизации полимеров
Мукменева Н.А., Черезова Е.Н., Кочнев А.М.

Применение концепции блоков связей инструмента адекватного прогнозирования топологической структуры и гель-точки для полимеров, получаемых реакцией полиприсоединения
Дебердеев Т.Р.

Контролируемая радикальная полимеризация – инновационная синтетическая составляющая реакционно-литьевого формирования полимеров
Улитин Н.В.

5-8 февраля секционные заседания в соответствии с программой

ПЛЕНАРНОЕ ЗАСЕДАНИЕ

УДК 544.032.72: 544.431.7

П.А. КИРПИЧНИКОВ. ИСТОРИЯ УСПЕХА

Зенитова Л.А

Доклад посвящен жизни и творческой деятельности члена-корреспондента РАН Петра Анатольевича Кирпичникова, 24 года возглавлявшего Казанский государственный технологический университет и 26 лет кафедру технологии синтетического каучука. 5 января 2013 года П.А. Кирпичникову исполнилось бы 100 лет. Крупный организатор, обладающий государственным мышлением, талантливый ученый, педагог и воспитатель молодежи, П.А. Кирпичников оставил заметный след в науке.

УДК 544.032.72: 544.431.7

РАБОТЫ П.А. КИРПИЧНИКОВА И ЕГО ШКОЛЫ В ОБЛАСТИ СТАБИЛИЗАЦИИ ПОЛИМЕРОВ

Мукменева Н.А., Черезова Е.Н., Кочнев А.М

Показана основополагающая роль член-корреспондента РАН Кирпичникова П.А. в создании нового научного направления по синтезу и использованию фосфорорганических соединений в качестве неокрашивающих стабилизаторов для различных полимеров в процессах их переработки и эксплуатации. Представлены результаты многолетних исследований научной школы П.А. Кирпичникова по разработке теоретических и практических подходов к созданию фосфорорганических, аминных, серусодержащих, фенольных антиоксидантов и цветостабилизаторов, в том числе макроциклической структуры.

УДК 544.032.72: 544.431.7

**ПРИМЕНЕНИЕ КОНЦЕПЦИИ БЛОКОВ СВЯЗЕЙ ИНСТРУМЕНТА
АДЕКВАТНОГО ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ТОПОЛОГИЧЕСКОЙ
СТРУКТУРЫ И ГЕЛЬ-ТОЧКИ ДЛЯ ПОЛИМЕРОВ,
ПОЛУЧАЕМЫХ РЕАКЦИЕЙ ПОЛИПРИСОЕДИНЕНИЯ**

Дебердеев Т.Р

Показана возможность применения концепции блоков связей как простого инструмента адекватного прогнозирования формирования топологической структуры и гель-точки получаемых полиприсоединением полимеров. На примере формирования эпоксиаминных систем с учетом “эффекта замещения” и протекания конкурирующих реакций представлена кинетика формирования топологической структуры и показана возможность оценки гель-точки.

УДК 544.032.72: 544.431.7

**КОНТРОЛИРУЕМАЯ РАДИКАЛЬНАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ
– ИННОВАЦИОННАЯ СИНТЕТИЧЕСКАЯ
СОСТАВЛЯЮЩАЯ РЕАКЦИОННО-ЛИТЬЕВОГО
ФОРМИРОВАНИЯ ПОЛИМЕРОВ Улитин Н.В**

Проведен обзор современного состояния в области реакционно-литьевого формования пластмассовых изделий из синтезируемых *in situ* термопластов. Рассмотрены особенности и перспективы применения различных методов контролируемой радикальной полимеризации в технологии реакционно-литьевого формования. Особое внимание уделено работам, которые описывают механизмы различных методов контролируемой радикальной полимеризации на количественном уровне в виде математических моделей, позволяющих оценивать параметры полимеризационных процессов и молекулярно-массовые характеристики образующихся продуктов.

СЕКЦИЯ 1.1. МЕХАНИЗМ, ТЕРМОДИНАМИКА И КИНЕТИКА ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В ГОМО – И ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМАХ И МЕТОДЫ ИХ ССЛЕДОВАНИЯ

*Руководители: Барабанов В.П.,
Галяметдинов Ю.Г.,*

*Кузнецов А.М.,
Секретарь: Проскурина В.Е.,*

7 февраля А-318 10:00

УДК 544.015.4 + 535.015 + 53.097

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ И ОПТИЧЕСКОЙ АНИЗОТРОПИЙ, И ИХ ЗАВИСИМОСТЬ ОТ КОНФОРМАЦИЙ МОЛЕКУЛ В ЖК ПРОИЗВОДНОМ ФЕРРОЦЕНА

Кадкин О.Н., Галяметдинов Ю.Г

На основе параметров, полученных с применением компьютерного моделирования молекул (HYPERCHEM), методом МО произведен расчет диэлектрической и оптической анизотропий различных конформеров.

УДК 541.13

СРАВНЕНИЕ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ КВАНТОВО- ХИМИЧЕСКИХ ПРОГРАММНЫХ ПАКЕТОВ GAUSSIAN 09, ORCA 2.8 И PRIRODA 11 НА ПРИМЕРЕ РАСЧЕТА СТРУКТУР КОМПЛЕКСОВ НИКЕЛЯ(II) И МЕДИ(II)

Гришаева Т.Н., Маслий А.Н

Проведено сравнение производительности и точности трех квантовохимических программных пакетов на примере расчета структурных характеристик этилендиаминового комплекса меди(II) и цикленового комплекса никеля(II) и сопоставление полученных данных с результатами РСА для этих комплексов.

УДК 544.182.32

**ВЛИЯНИЕ ТИОЦИАНАТ-ИОНОВ НА ЭЛЕКТРОВОССТАНОВЛЕНИЕ
КОМПЛЕКСОВ ВИСМУТА(III) ИЗ ВОДНЫХ
ЭТИЛЕНДИАМИНТЕТРААЦЕТАТНЫХ РАСТВОРОВ**

Борисевич С.В., Стародубец Е.Е

Методом B3LYP выполнены квантово-химические расчеты геометрических параметров и распределения электронной плотности этилендиаминтетраацетатного и этилендиаминтетраацетатно-тиоцианатного комплексов Bi(III). На основе анализа граничных орбиталей предложено объяснение замедления разряда смешанно-лигандного комплекса.

УДК 544.182.34:544.313.2

**СУПЕРМОЛЕКУЛЯРНАЯ МОДЕЛЬ
ГИДРАТАЦИИ КАТИОНА ВИСМУТА(III)**

Борисевич С.В., Кузнецов А.М

Методами функционала плотности версий B3LYP и ω -B97XD с использованием атомных базисов aug-cc-pvDZ-PP (Bi) и aug-cc-pvDZ (O и H) выполнены расчеты стандартных энтальпий и свободных энергий гидратации иона Bi(III). Установлено, что наиболее вероятным координационным числом является КЧ=8. Показана существенная роль учета различий в стандартных состояниях для газовой фазы и для раствора.

УДК 544.182.34:544.313.2

**КОМБИНИРОВАННАЯ МОЛЕКУЛЯРНО-КОНТИНУАЛЬНАЯ
МОДЕЛЬ СРЕДЫ В КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТАХ
СТАНДАРТНЫХ ЭЛЕКТРОДНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ**

Маслий А.Н., Кузнецов А.М

Показано, что включение в расчетную квантово-химическую схему оптимального количества молекул растворителя ближайшей координационной сферы иона с последующим применением континуальной модели позволяет получить хорошее согласие расчетных и экспериментальных значений стандартных электродных потенциалов. Приведены расчеты электродного потенциала для ионной пары $Fe(CN)_6^{3-}/Fe(CN)_6^{4-}$, выполненные в рамках функ-

ционалов плотности B3LYP и ω -B97XD (версии UA0 и UFF расчетов размеров диэлектрической полости) в атомных базисах aug-cc-pvDZ и 6-311++G(d,p).

УДК 544.182.34:544.313.2

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ГИДРАТАЦИИ И КОНСТАНТЫ ГИДРОЛИЗА КАТИОНА Pb(II)

Бальцер Б.С., Бусыгина А.А., Маслий А.Н., Кузнецов А.М

Методами функционала плотности версий B3LYP и ω -B97XD с учетом влияния среды в модели РСМ (модели UA0 и UFF для расчетов размеров диэлектрической полости) выполнены расчеты структурных и термодинамических параметров гидратации иона Pb(II). Предложена модель для расчета константы гидролиза иона Pb(II). Полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

УДК 541.13

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СТАБИЛЬНОСТИ ИНТЕРМЕДИАТОВ РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ Pb(II) ГИДРОКСИЛЬНЫМИ РАДИКАЛАМИ

Твердов И.Д., Потапова А.В., Маслий А.Н., Кузнецов А.М

В рамках теории функционала плотности в модели РСМ учета среды определены структуры и термодинамические параметры образования возможных интермедиатов окисления Pb(II) радикалами OH^\bullet , а также продуктов их диспропорционирования и димеризации.

УДК 541.49:541.64

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ ДИЗАЙН ВКЛЮЧЕНИЯ ДИМЕТИЛГЛИОКСИМАТА Ni(II) В НАНОКАВИТАНД КУКУРБИТ[8]УРИЛ

Гришаева Т.Н., Маслий А.Н., Кузнецов А.М

С учетом участия молекул воды изучена структурная специфика стабилизации комплекса диметилглиоксимата Ni(II) в полости нанокавитанда кукурбит[8]урилла. В рамках теории функционала плотности рассчитаны термодинамические параметры образования соединения включения и показано, что закрепление металлокомплекса в полости макроцикла

осуществляется за счет дополнительных шести молекул воды, связанных с портами кавитанда.

УДК 541.13

КОМБИНИРОВАННАЯ МОЛЕКУЛЯРНО-КОНТИНУАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ СОЛЬВАТАЦИИ В РАСЧЕТАХ КОНСТАНТ ДИССОЦИИ КИСЛОТ

Гришаева Т.Н., Маслий А.Н., Кузнецов А.М

Показано, что только на основе комбинированной молекулярно-континуальной модели сольватации можно удовлетворительно воспроизвести экспериментальные значения констант диссоциации кислот. Приведены примеры расчетов для ступенчатой диссоциации угольной и мышьяковистой кислот, выполненных с помощью методов функционала плотности B3LYP и ω -B97XD в модели PCM (UA0 и UFF) в атомных базисах aug-cc-pvDZ и 6-311++G(d,p).

УДК 621.315.615

ОЦЕНКА ЭНЕРГИИ УНИВЕРСАЛЬНЫХ И СПЕЦИФИЧЕСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ПО МАКРОСКОПИЧЕСКИМ СВОЙСТВАМ БИНАРНЫХ СИСТЕМ АЦЕТОН —МЕТАНОЛ И БЕНЗОЛ—ЦИКЛОГЕКСАН

Колушев Д.Н., Барабанов В.П., Хусаинов М.А., Торсуев Д.М

При смешении жидкостей происходит перераспределение энергии между видами межмолекулярных взаимодействий и изменение макроскопических свойств смеси исходных компонентов. Используя равновесные значения свойств смесей ацетон-метанол и бензол-циклогексан, можно провести оценки энергии специфических и универсальных межмолекулярных взаимодействий, результаты которых совпадают с данными, полученными квантово-химическими методами.

УДК 621.315.615

РАСЧЕТ ЭНТАЛЬПИИ СМЕШЕНИЯ В БИНАРНЫХ СИСТЕМАХ

Колушев Д.Н., Барабанов В.П., Хусаинов М.А., Торсуев Д.М

Используя модифицированное уравнение Этвёша по данным о равновесных свойствах бинарных систем ацетон-метанол и бензол-циклогексан были рассчитаны энтальпии смешения

ния. Показано, что смешение ацетона с метанолом сопровождается уменьшением мольного объема смеси, а бензола с циклогексаном, – расширением мольного объема. Изменения объема бинарных растворов связаны с перераспределением сил между видами межмолекулярных взаимодействий, проявляющимся в макроскопических свойствах жидкости.

УДК 543.422:519.237.7

КОМПЕНСАЦИОННЫЙ И КООПЕРАТИВНЫЙ ЭФФЕКТЫ В ТЕРМОДИНАМИКЕ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ ГИДРОПЕРОКСИДОВ

Ремизов А.Б., Скочилор Р.А

Проведен анализ результатов исследования ИК-фурье спектров растворов гидропероксидов третичного бутила, кумила (ГПК) и трифенилметила в различных растворителях, а также растворов ГПК в н-декане с добавлением ацетона, ацетофенона и ацетонитрила как акцепторов протона. При этом использовался факторный анализ. Выполнены квантово-химические расчеты само- и гетеро-ассоциатов ГПК. Обнаружены компенсационный и кооперативный эффекты в термодинамике водородных связей гидропероксидов.

УДК 547.793, 513.7 КС

МОДЕЛЬ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ ТРИАКВАХЛОРИДА РОДИЯ И ТЕТРАХЛОРИДА ПЛАТИНЫ С ДИНАТРИЕВОЙ СОЛЬЮ 4,6-ДИНИТРО-1ОКСОБЕНЗ-[6,5-с] -2,1,3- ОКСОБЕНЗОКСАДИАЗОЛДИОЛА В ВОДНОЙ СРЕДЕ

Галимзянова Л.Р., Гусева Е.В., Сайфутдинов А.М., Назмутдинов Р.Р

Методами электронной спектроскопии, рН-метрии и кондуктометрии изучено взаимодействие в водной среде аквахлорокомплексов родия (III) и хлорокомплексов платины(IV) с динатриевой солью 4,6-динитро-1-оксобенз-[6,5-с] -2,1,3-оксадиазолдиола-5,7 (Na₂DODNBF). Обработка результатов измерений выполнена с применением методов математического моделирования без начального предположения о модели равновесия в растворе (эволюционный факторный анализ). Полученные данные о стехиометрическом составе комплексов позволили установить структуры комплексных форм соединений в растворе.

УДК 541.9+546+924 ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТРИАКВАХЛОРИДА РОДИЯ И ТЕТРАХЛОРИДА ПЛАТИНЫ С (III) -СОДЕРЖАЩИМИ КАЛИКС[4]РЕЗОРЦИНАМИ В АЦЕТОНЕ И ЭТАНОЛЕ

Гусева Е.В., Гришин Е.И., Зинкичева Т.Т., Гаврилова Е.Л

Изучено взаимодействие каликс[4]резорцинов, содержащих на нижнем ободе молекулы по четыре аминогруппы $\{-ArNH_2 - (L_1), -ArN(CH_3)_2 - (L_2), -ArN(C_2H_5)_2 - (L_3)\}$ и находящихся в конформации кресло (L_1) или конус (L_2, L_3), с $RhCl_3 \cdot 3H_2O$ и $PtCl_4$ в ацетоне, этаноле. Взаимодействие (L_2, L_3) с $RhCl_3 \cdot 3H_2O$ и $PtCl_4$, а также выделение продукта в твердую фазу возможно лишь в этаноле. Все выделенные в твердую фазу соединения охарактеризованы методами ИК-, КР-, ЯМР¹H-, ЭПР-, РЭ-, электронной спектроскопии, кондуктометрии. Состав подтвержден данными элементного, рентгенофлуоресцентного и дериватографического анализов.

УДК 541.9+546+924 ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТРИАКВАХЛОРИДА РОДИЯ И ТЕТРАХЛОРИДА ПЛАТИНЫ С ФОСФОРСОДЕРЖАЩИМИ КАЛИКС[4]РЕЗОРЦИНАМИ В АЦЕТОНЕ

Потапова А.В., Гусева Е.В

Изучено взаимодействие каликс[4]резорцинов, содержащих на нижнем ободе молекулы по четыре фосфорсодержащих группы $\{-ArPPh_2 - (L_1), -ArPPh_3 - (L_2), -ArPPh_2N(C_2H_5)_2 - (L_3), -ArP(O)(OC_2H_5)_2 - (L_4)\}$ и находящихся в конформации кресло (L_1) или конус (L_2, L_3, L_4) с $RhCl_3 \cdot 3H_2O$ и $PtCl_4$ в ацетоне. Выделены в твердую фазу продукты, в которых связь иона металла осуществляется как посредством фосфора, так и по азоту или кислороду гидроксильных групп. Состав подтвержден данными элементного, рентгенофлуоресцентного и дериватографического анализов.

УДК 544.77.022.532

ЭФФЕКТЫ ВЛИЯНИЯ ДЕКАНОЛА НА ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ НЕИОННОГО ПАВ И ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЮ ИОНОВ ЛАНТАНОИДОВ

Макарова Д.В., Селиванова Н.М., Галяметдинов Ю.Г

Проанализировано влияние деканола на процессы самоорганизации $C_{12}EO_{10}$, на параметры адсорбционного слоя, размеры мицелл и числа агрегации. Подобран состав мицеллярной композиции для эффективной солюбилизации зонда на основе хелата Tb(III).

УДК 544.77.022.532

**ФОРМИРОВАНИЕ МИЦЕЛЛ НЕИОННОГО ПАВ
В ПРИСУТСТВИИ ИОНОВ ЛАНТАНОИДОВ В
ВОДНЫХ И ВОДНО-ДЕКАНОЛЬНЫХ СРЕДАХ**

Кузовкова М.А., Губайдуллин А.Т., Селиванова Н.М., Галяметдинов Ю.Г

На основе данных тензиометрии, ДРС, малоуглового рентгеновского рассеивания, флуоресцентного анализа установлены механизмы формирования мицелл в присутствии ионов лантаноидов и деканола в системе $C_{12}EO_4/H_2O$.

**УДК 544.252.4 ПОЛЯРИЗОВАННАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ
В ЛИОТРОПНЫХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ И
ГИБРИДНЫХ МАТЕРИАЛАХ НА ИХ ОСНОВЕ**

Шихобалова О.А., Селиванова Н.М., Галяметдинов Ю.Г

Впервые показано, что лантаноидсодержащие лиомезофазы и гибридные материалы на их основе проявляют поляризованную люминесценцию. Установлено влияние типа иона Ln на величину поляризации и анизотропии.

УДК 537.632.2

**ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ЛАНТАНОИДСОДЕРЖАЩИЕ
МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОПТОЭЛЕКТРОНИКИ**

**Молостова Е.Ю., Крупин А.С., Шамсутдинова
Р.Д., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г**

Синтезированы новые соединения на основе аддуктов трис(β -дикетонатов) лантаноидов с основаниями Льюиса. Методами ДСК и ПОМ определены температуры, термодинамические параметры фазовых переходов и типы мезофаз данных соединений. Изучены люминесцентные свойства нанокомпозитов на основе сопряженного полимера и полученных аддуктов лантаноидов.

УДК 544.252.2:544.16

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫХ СВОЙСТВ
КОМПЛЕКСОВ ЛАНТАНОИДОВ(III) С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
AB INITIO МЕТОДОВ КВАНТОВОЙ ХИМИИ**

Романова К.А., Фрейдзон А.Я., Багатурьянц А.А., Стрелков М.В.,

Галяметдинов Ю.Г

С использованием *ab initio* методики ХМСQDPT2/CASSCF произведен расчет низших синглетных и триплетных уровней в комплексах лантаноидов(III), включавший также стадию оптимизации геометрии возбужденного состояния. Смоделированные возбужденные состояния оказались лигандно-локализованными. Полученные теоретические результаты близки к экспериментальным данным.

УДК 544.252.4

**ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ КОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ
СОПРЯЖЕННОГО ПОЛИМЕРА ПОЛИ-(N-ВИНИЛКАРБАЗОЛА)
И МЕЗОГЕННОГО КОМПЛЕКСА ЕВРОПИЯ (III)**

**Крупин А.С., Шамсутдинова Р.Д., Молостова
Е.Ю., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г**

Показана возможность создания композитов с различным содержанием комплекса европия в полимерной матрице. Исследованы люминесцентные свойства композитов в растворах и пленках, топография поверхности пленок композитов и относительный квантовый выход люминесценции. Установлено оптимальное соотношение полимеркомплекс в композите.

УДК 537.632.2

ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ЛАНТАНОИДСОДЕРЖАЩИЕ СМЕСИ

**Шамсутдинова Р.Д., Крупин А.С., Молостова
Е.Ю., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г**

Синтезированы новые жидкокристаллические комплексы трис(β -дикетонатов) лантаноидов с основаниями Льюиса. Методом ПОМ определены типы мезофаз и температуры фазовых переходов соединений. Получены ЖК смеси, содержащие лантанидомезогены и обладающие широким температурным интервалом мезофазы. Изучены люминесцентные свойства данных смесей.

УДК 544.252.4

ВЛИЯНИЕ ДОБАВОК ДЕКАНОЛА НА СМАЧИВАЮЩУЮ СПОСОБНОСТЬ И РАБОТУ АДГЕЗИИ ЛИОМЕЗОФАЗ НА ПОЛИМЕРНОЙ ПОДЛОЖКЕ (ТЕФЛОН)

Ситдикова К.И., Галеева А.И., Галяметдинов Ю.Г

Изучено взаимодействие лиомезофаз на основе неионных ПАВ – олигоэтиленоксидов $C_{12}EO_{10}$ и $C_{12}EO_4$ (где $EO_n = (-O-CH_2-CH_2-)_n$) и гидрата нитрата лантана в водно-деканольных средах с тефлоном. Подтверждена возможность прогнозирования смачивающей и адгезионной способности лиотропных жидкокристаллических систем к подложке в зависимости от содержания деканола. При добавлении спирта смачивающая способность лиомезофаз полимера возрастает, а значение работы адгезии уменьшается.

УДК 544.015.4

ПЛЕНКИ НАНОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПРЕКУРСОРОВ СИЛИКАТА С ПАВ

Заскокина Л.О., Осипова В.В., Галяметдинов Ю.Г

Синтез силикатных матриц осуществлялся при различных мольных и массовых соотношениях исходных веществ. Получены жидкокристаллические системы на основе ПАВ и воды. В ЖК системы вводилась силикатная матрица, которая встраивалась между мицеллярными

агрегатами ПАВ. Методом spin coating были получены пленки композита. Осуществлена обработка пленок комплексами лантаноидов для определения их оптических характеристик.

УДК 544.022.532

НАНОКОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК И ПОЛИКАРБОНАТА

Идрисова Г.И., Хомяков Е.Г., Осипова В.В., Галяметдинов Ю.Г

Методом, разработанным на кафедре ФКХ, синтезированы квантовые точки (КТ) CdSe/CdS-ядро/оболочка на основе которых по методу SAS получен нанокompозит в виде микрокапсул (МК) варьированного размера. Размер МК определен по методу ДРС. Спектры люминесценции МК полностью совпадают со спектрами исходных КТ, что подтверждает эффективность использованного метода получения нанокompозита.

7 февраля А– 318 10.00

УДК 547.233: 661.185.23

КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ БИС- ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ 1,4-ДИАЗАБИЦИКЛО[2.2.2]ОКТАНА

Захарова Л.Я., Жильцова Е.П., Гимранова Р.Ф., Лукашенко С.С., Паширова Т.Н., Валеева Ф.Г., Гайсин Н.К., Гнездилов О.И

Методами спектрофотометрии, тензиометрии, флуориметрии, ЯМР-ИГМП исследованы агрегационные и адсорбционные свойства 1-алкил-4-этил-1,4-дiazониабицикло[2.2.2]октан дибромидов, а также их каталитический эффект в реакции гидролитического расщепления фосфоэфирных связей.

УДК 544.77.022.532

**САМООРГАНИЗАЦИЯ КАТИОННЫХ АМФИФИЛОВ В ПРИСУТСТВИИ
ПРИРОДНЫХ И СИНТЕТИЧЕСКИХ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТОВ**

**Васильева Э.А., Ибрагимова А.Р., Воронин
М.А., Лукашенко С.С., Захарова Л.Я**

Сформированы супрамолекулярные системы на основе катионных амфифилов и поли-электролитов различной природы. Комплексом методов (тензиометрия, кондуктометрия, динамическое и электрофоретическое рассеяние света, флуоресцентная спектроскопия) определены критические концентрации агрегации, размеры, заряд этих систем.

УДК 544.77.022.532:541.128.5

**АМФИФИЛЬНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ С
ДИТЕРПЕНОИДНЫМ ФРАГМЕНТОМ: АГРЕГАЦИЯ,
КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ И КАТАЛИЗ**

**Габдрахманов Д.Р., Воронин М.А., Хайбуллин Р.Н., Стробыкина
И.Ю., Файзуллин Д.А., Зуев Ю.Ф., Катаев В.Е., Захарова Л.Я**

Комплексом физико-химических методов изучены агрегационные свойства новых изо-стевиолсодержащих амфифилов в водных растворах, их комплексообразующая способность с синтетическим двухцепочечным олигонуклеотидом, каталитический эффект в реакции разложения экотоксикантов различной гидрофобности.

УДК 541.182.43

**АГРЕГАЦИОННЫЕ И КАТАЛИТИЧЕСКИЕ
СВОЙСТВА ПАВ, СОДЕРЖАЩИХ ДВА
ЗАРЯЖЕННЫХ ФРАГМЕНТА В ГОЛОВНОЙ ГРУППЕ**

Яцкевич Е.И., Миргородская А.Б., Лукашенко С.С., Захарова Л.Я

Комплексом физико-химических методов охарактеризованы свойства супрамолекулярных систем на основе дикатионных и цвиттер-ионных ПАВ. Проведено сопоставление их агрегационного поведения и каталитического эффекта в процессах гидролиза эфиров карбоновых кислот.

УДК 541.18.042.2:678.745

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФЛОКУЛЯЦИИ
В ГРАВИТАЦИОННОМ И ЦЕНТРОБЕЖНОМ
ПОЛЯХ НА ГИБРИДНЫХ НАНОСИСТЕМАХ**

Проскурина В.Е., Тухватуллина Р.З., Лерхе Д., Зобиш Т., Галяметдинов Ю.Г

Изучена кинетика процессов свободного и стесненного оседания модельной дисперсной системы – суспензии диоксида титана анатазной модификации в присутствии гибридных полимер-неорганических наносистем. Проанализировано влияние размера частиц гибридных образцов в гравитационном поле и угловой скорости вращения центрифуги в центробежном поле на скорость седиментации суспензии TiO_2 .

УДК 541.18.042.2:678.745

**СЕДИМЕНТАЦИЯ ДИОКСИДА ТИТАНА НА ГИБРИДНЫХ ПОЛИМЕР-
НЕОРГАНИЧЕСКИХ НАНОСИСТЕМАХ В ВОДНО-СОЛЕВЫХ СРЕДАХ**

**Тухватуллина Р.З., Фаизова Р.Р., Шаброва
Е.С., Проскурина В.Е., Галяметдинов Ю.Г**

Подобраны условия синтеза гибридных полимер-неорганических наносистем на основе коллоидного золя $\text{Al}(\text{OH})_3$ и ионогенных сополимеров акриламида. В режиме свободного (нестесненного) оседания на модельной дисперсной системе – суспензии TiO_2 (анатаз) проанализировано влияние природы и концентрации гибридных наносистем в водно-солевых средах, создаваемых электролитами NaCl , $\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$, FeCl_3 и AlCl_3 .

**УДК 541(64+49):532.73 КОЛЛОИДНО-ХИМИЧЕСКИЕ
ХАРАКТЕРИСТИКИ КОМПЛЕКСОВ ХИТОЗАН-
ПАВ В ВОДНО-СПИРТОВЫХ СРЕДАХ**

**Зинурова О.А., Хайруллина Р.Р., Шилова
С.В., Третьякова А.Я., Барабанов В.П**

Методом динамического светорассеяния и спектрофотометрии изучена самоорганизация хитозана с анионным ПАВ в водно-спиртовых средах. Показано, что ассоциативное взаимодействие в системе приводит к формированию заряженных частиц полимер-коллоидного комплекса хитозан-ПАВ с размером 70-200 нм.

УДК 541.64:541.18.041.2

**ИНТЕНСИФИКАЦИЯ ВОДООЧИСТКИ
СОЛЯМИ ОРТОФОСФОРНОЙ КИСЛОТЫ**

Абдуллазянова Г.Г., Галяметдинов Ю.Г., Барабанов В.П

На примере дисперсной системы сложного состава изучены особенности процессов коагуляции в присутствии гидро- и дигидрофосфатов калия и натрия. Методами седиментации и спектрофотометрии установлены оптимальные концентрации реагентов, введение которых позволило достичь значений ПДК по многим показателям.

УДК 542.91:1' 128' 118

**ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ ТИОКИСЛОТЫ
ЧЕТЫРЁХКООРДИНИРОВАННОГО
ФОСФОРА И ИХ АММОНИЕВЫЕ СОЛИ**

**Альметкина Л.А., Низамов И.С., Мартьянов
Е.М., Гуревич П.А., Черкасов Р.А**

Получены новые оптически активные дитиофосфоновые и бисдитиофосфоновые кислоты взаимодействием аналогов реагента Лоуссона с фенилэтанолом, парацетамолом, этамбутолом, диметилтарtratом, их соли в реакциях с аммиаком и фенилэтиламином. Проведен анализ биоактивности продуктов.

УДК 676.2.02:661.718.5

**ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ НАБУХАНИЯ
ГИДРОФОБИЗИРОВАННОГО КАРТОНА**

Гарифуллина Р.А., Булидорова Г.В

Исследовалась возможность гидрофобизации картона составами на основе кремнийорганических соединений с добавлением латекса. Определялась смачиваемость поверхности и кинетика набухания образцов. Показана перспективность использования композиций полиметилгидридсилоксана и латекса.

УДК 544.77.032.1

ДЕЗАГРЕГАЦИЯ И СТАБИЛИЗАЦИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ НЕИОННЫХ ПАВ

Гатауллин А.Р., Богданова С.А., Галяметдинов Ю.Г

Исследовано влияние неионных поверхностно-активных веществ (ПАВ) – производных оксида этилена на процесс ультразвукового диспергирования и стабилизацию суспензий одностенных углеродных нанотрубок в воде. Показано, что размер частиц и устойчивость суспензий зависят от природы, степени оксиэтилирования и концентрации ПАВ.

УДК 678.7.01:539.2

ВОЗМОЖНОСТИ МЕТОДА АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АДГЕЗИИ РАЗЛИЧНЫХ ВЕЩЕСТВ

**Саутина Н.В., Старостина И.А., Селиванова Н.М.,
Стоянов О.В., Везенов Д.В., Галяметдинов Ю.Г**

Методом атомно-силовой микроскопии определены значения адгезии тиолов к полимерам, а также силанов к поверхности лиотропных жидких кристаллов (ЛЖК). ЛЖК проявляют большую адгезию к исследованным веществам по сравнению с полимерами. Найдено, что адгезия полимеров определяется их полярностью, а в случае ЛЖК существенно зависит от состава системы.

УДК 547.299:665.58

ВЛИЯНИЕ АМФИФИЛЬНЫХ КОМПОНЕНТОВ ПОЛИМЕРНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ВЫСВОБОЖДЕНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Шигабиева Ю.А., Богданова С.А., Галяметдинов Ю.Г

Разработаны рецептуры полимерных косметических гелей, в которых в качестве антиоксидантов, противовоспалительных и фотопротекторных добавок применяются пропиленгликолевый экстракт зеленого чая и N-(β-гидроксипропил)-4,6-диметилдигидропиримидон-2. Исследовано совместное влияние биологически активных добавок и амфифильных компонентов рецептур на высвобождение и биодоступность активных компонентов.

УДК 661.18.3.185.648.18

МИЦЕЛЛОБРАЗОВАНИЕ И МОЮЩЕЕ ДЕЙСТВИЕ КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ БИНАРНОЙ СМЕСИ ПАВ

**Дерзаева Л.А., Курмаева А.И., Горелова Е.Г.,
Юсупова Р.И., Потапова М.В., Барабанов В.П**

Дан анализ изотерм поверхностного натяжения индивидуальных и бинарных смесей ПАВ. Показано, что изотермы бинарной смеси имеют величины ККМ, соответствующие гомологам АПАВ, зависящими от наличия в системе комплексона, электролитов и жесткости воды. Предложен и проверен способ оценки моющей способности СМС и ЖМС на основании анализа изотерм поверхностного натяжения. Вид изотерм бинарной смеси ПАВ характерен для смеси гомологов.

УДК 541.18.041.2: 661.185

ПОВЕРХНОСТНЫЙ ЗАРЯД И ЭЛЕКТРОКИНЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА БИОСУСПЕНЗИЙ

**Кулагина Е.М., Потапова М.В., Юсупова
Р.И., Курмаева А.И., Барабанов В.П**

Изучено влияние pH на поверхностный заряд клеток биосуспенсиий. Исследована электрофоретическая подвижность клеток в системах «клетки – культуральная жидкость», «клетки – 0.85 % NaCl» и «клетки – цитратно-фосфатный буфер (ц.ф.б.)» от pH. Поверхностный заряд клеток микроорганизмов является одним из определяющих факторов при их агрегации. Установлена взаимосвязь устойчивости биосистем с ξ - потенциалом клеток.

УДК 541.18.041.2: 661.185

АЭРОБНАЯ МИКРОБИОЛОГИЧЕСКАЯ ПЕРЕРАБОТКА ОРГАНИЧЕСКИХ ОТХОДОВ СЕЛЬХОЗПРЕДПРИЯТИЙ

Кулагина Е.М., Межеричкий Д.С., Цикун Р.Г., Юсупова Р.И., Барабанов В.П

Разработана принципиальная схема производства органического удобрения из отходов сельхозпредприятий. Проведена финансово-экономическая оценка производства.

УДК 541.182.4/6:622.276/279

**ВЛИЯНИЕ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТОВ НА ПОКАЗАТЕЛИ СТАБИЛЬНОСТИ
ЛАТЕКСНЫХ ДИСПЕРСИЙ ВПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ
С СОЛЯМИ МЕТАЛЛОВ РАЗЛИЧНОЙ ВАЛЕНТНОСТИ**

Илалдинова Г.Ж., Адебайо А., Церажков П.И., Крупин С.В

Получены системы на основе латексов и водорастворимых полиэлектролитов. Стабильность и размерность частиц охарактеризована значениями электрокинетического потенциала и методом светорассеяния соответственно. Показана возможность повышения стабилизации латексов в условиях повышенной минерализации пластовых вод нефтяных месторождений.

УДК 541.182.4/6:622.276/279

**ВЛИЯНИЕ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТОВ НА СТАБИЛЬНОСТЬ
ГЛИНИСТЫХ ДИСПЕРСИЙ КАК РЕАГЕНТОВ ДЛЯ ВЫРАВНИВАНИЯ
ПРОФИЛЯ ПРИЕМИСТОСТИ НЕФТЯНЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ
С НЕОДНОРОДНОЙ ВОДОПРОНИЦАЕМОСТЬЮ КОЛЛЕКТОРА**

Рахматуллина К.И., Адебайо А., Церажков П.И., Крупин С.В

Изучено влияние полиэлектролитов на кинетику осаждения глины и охры. Проанализировано влияние активации среды на кинетику седиментации частиц глины и охры в водных растворах полимеров различной природы. Показана возможность применения глинистых дисперсий для выравнивания профиля приемистости в комплексе с водорастворимыми полиэлектролитами.

УДК 541.182.4/6:622.276/279

**ИЗУЧЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ СТАБИЛИЗАЦИИ СИСТЕМ НА
ОСНОВЕ ДИСПЕРСИЙ ГЛИНЫ И КАУЧУКОВ В ВОДНОЙ СРЕДЕ**

Церажков П.И., Адебайо А., Крупин С.В

Исследовано влияние стабилизирующих агентов на агрегативную и седиментационную устойчивость латексов и глин соответственно. Изучены возможности временного и постоянного эффекта стабилизации дисперсных систем. Произведена оценка возможности применения последних в качестве реагентов для выравнивания профиля приемистости и повышения

нефтеотдачи пластов нефтяных месторождений при помощи линейных насыпных и сочлененных моделей пласта.

УДК 544.18:544.43:544.431.2:544.45:547.418

**МЕХАНИЗМЫ ТЕРМИЧЕСКОГО РАСПАДА
ОРТО-ЗАМЕЩЕННЫХ НИТРОАРЕНОВ ПО
РЕЗУЛЬТАТАМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО РАСЧЕТА**

Николаева Е.В., Чачков Д.В., Шамов А.Г., Храпковский Г.М

Методом ВЗLYP/6-31+G(2df,p) исследованы механизмы термодеструкции онитротолуола, 2,4- и 2,6-динитротолуолов, 2,4,6-тринитротолуола, о-нитроанилина и онитрофенола. Сравнение результатов расчета с имеющиеся экспериментальными данными по термораспаду этих соединений ставит под сомнение ранее обсуждаемые механизмы термического разложения о-замещенных нитроаренов.

УДК 544.18:[004.051+004.032]

**ВРЕМЕННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РАСЧЕТОВ
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ НА
СОВРЕМЕННОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКЕ**

Аристов И.В., Шамов А.Г

Исследована зависимость времени расчета с использованием популярных методов квантово-химических расчетов от характеристик вычислительной техники, таких как количество задействованных ядер процессора и его архитектуры, объема выделяемой оперативной памяти, скорости обмена данными с жестким диском. Определены основные зависимости и предложены оптимальные решения по организации многопоточных вычислений.

СЕКЦИЯ 1.2. ТЕОРИЯ СОВРЕМЕННЫХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ, НАНОТЕХНОЛОГИИ И НАНОМАТЕРИАЛЫ

Руководитель: Кайдриков Р.А.

Секретарь: Зильберг А.И.

6 февраля Е-525 14:00

УДК 620.193

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ КАТОДНОЙ ЗАЩИТЫ ОБСАДНОЙ КОЛОННЫ НЕФТЯНОЙ СКВАЖИНЫ

**Долгих С.А., Журавлев Б.Л., Кайдриков
Р.А., Ткачева В.Э., Виноградова С.С**

Рассмотрены стандартизованные европейские методики определения тока защиты и смещения потенциала на забое обсадной колонны нефтяной скважины. На основании экспериментально полученных данных для одной из обсадных колонн ОАО «Татнефть» проведены расчеты и получены числовые значения искомых параметров.

УДК 620.193

МЕТОДИКА РАСЧЕТА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ТОКА ПО ГЛУБИНЕ ОБСАДНОЙ КОЛОННЫ

**Долгих С.А., Баженов В.В., Журавлев Б.Л.,
Кайдриков Р.А., Ткачева В.Э., Виноградова С.С**

Предложена методика расчета распределения плотности тока по глубине обсадной колонны, основанная на материалах РД 153-39.0-531-07. Приведен пример расчета распределения плотности тока защиты по глубине для обсадной колонны скважины № 22505 НГДУ «Бавлынефть» ОАО «Татнефть». Установлено наличие анодных зон на поверхности эксплуатационной колонны.

УДК 620.193

ЗАЩИТА ВЕРТИКАЛЬНЫХ РЕЗЕРВУАРОВ ОТ ВНУТРЕННЕЙ И ГРУНТОВОЙ КОРРОЗИИ

Закиров И.Р., Журавлев Б.Л

Проведен обзор литературы, посвященный проблемам коррозии внутренней поверхности резервуаров и методам защиты от коррозии. Освоена методика расчета параметров протекторной защиты в соответствии с инструкцией. Создано программное обеспечение, позволяющее производить расчет параметров протекторной защиты РВС.

УДК 620.193

РАСЧЕТ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛА И ТОКА ПО ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛОВ В КОРРОЗИОННЫХ СИСТЕМАХ

Панарина Д.В., Журавлев Б.Л

Проанализированы методы расчета показателей коррозии металлов. Рассмотрена коррозия металлов в активном и пассивном состоянии. Описаны теоретические основы методов расчета параметров коррозионных систем. Проведены расчет токов в коррозионных системах графическим и аналитическим методами; расчеты распределения потенциала и тока по поверхности металлов при контактной, протекторной и катодной защите.

УДК 620.193

ЗАЩИТА ГОРИЗОНТАЛЬНЫХ РЕЗЕРВУАРОВ ОТ КОРРОЗИИ

Ахмадишин М.Р., Журавлев Б.Л

Разработана программа расчета протекторной защиты горизонтальных резервуаров. Проведен расчет, проанализировано влияние удельного сопротивления воды на значения силы тока защиты, общую длину и массу протекторных стержней. Разработан комплект заданий для самостоятельной работы студентов.

УДК 620.193

ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛА И ТОКА ПРИ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ ЗАЩИТЕ ОБСАДНЫХ КОЛОНН

Камалов А.Р., Журавлев Б.Л

Представлен теоретический обзор видов коррозионных поражений обсадных колонн и прогнозирование коррозионных отказов. Рассмотрены основы катодной защиты обсадных колонн нефтяных скважин и контроль ее эффективности в процессе эксплуатации. Выполнен анализ результатов исследования распределения тока и потенциала по длине обсадных колонн. ОАО «Татнефть».

УДК 620.193

САМООРГАНИЗАЦИЯ И СИНЕРГЕТИКА В ПИТТИНГОВОЙ КОРРОЗИИ

Плешкова Е.В., Журавлев Б.Л

Проведен обзор по вопросам синергетики и самоорганизации коррозионных процессов. Рассмотрены закономерности процесса питтинговой коррозии. Приведен пример возникновения и подавления хаоса в процессах питтинговой коррозии.

УДК 620.193

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКАЯ ЗАЩИТА ВЕРТИКАЛЬНЫХ РЕЗЕРВУАРОВ

Шафиков Ф.Ф., Журавлев Б.Л

Разработана программа расчета протекторной защиты вертикальных резервуаров. Проведен расчет, проанализировано влияние средней высоты слоя воды на значение силы тока защиты, общую длину и массу протекторных стержней.

УДК 620.193

АНАЛИЗ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ПРОЦЕССА ПИТТИНГОВОЙ КОРРОЗИИ

Каштанова Е.С., Журавлев Б.Л

Проведен анализ литературных данных в области питтинговой коррозии металлов, рассмотрены механизмы образования, основные закономерности зарождения и развития питтинговой коррозии, влияние окислителя и активатора на питтинговую коррозию. Приведены методы исследования на стойкость к питтинговой коррозии, методы борьбы с ней.

УДК 620.193

ПИТТИНГООБРАЗОВАНИЕ НА ПАССИВИРУЮЩИХСЯ МЕТАЛЛАХ

Кольцова М.Н., Журавлев Б.Л

Проведен обзор современных представлений о процессах питтинговой коррозии, описывающие образование и разрушение пассивной пленки. Рассмотрены статистическая и динамическая модели питтинговой коррозии. Проанализирован пример комплексной оценки устойчивости сталей к питтинговой коррозии.

УДК 620.193

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В КОРРОЗИОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

Осипова А.В., Журавлев Б.Л

Проведен обзор физических методов исследования коррозии. Рассмотрены примеры использования физических методов, позволяющих получить информацию об элементном составе, структуре, идентифицировать состояние корродирующих металлов. Использование методов спектроскопии в коррозионных исследованиях считается перспективным для изучения коррозии и борьбы с ней.

УДК 620.193

МОДЕЛИ И МЕТОДЫ ПРОГНОЗА ПИТТИНГОВОЙ КОРРОЗИИ

Саттарова С.В., Виноградова С.С

Проведен обзор теории развития питтингов и стохастических моделей питтинговой коррозии. Сделан анализ питтингостойкости нержавеющей сталей в системах горячего водоснабжения, освоен метод прогноза питтингостойкости нержавеющей сталей, рассмотрено влияние движения среды на пассивацию питтингов.

УДК 620.193

ПРОТЕКИОРНАЯ ЗАЩИТА ЗАПОРНОЙ АРМАТУРЫ

Рахматуллина Г.М., Виноградова С.С

Проведен обзор методов электрохимической защиты трубопроводов, освоена методика расчета параметров электрохимической защиты запорной арматуры, проведен расчет параметров электрохимической защиты запорной арматуры для разных диаметров трубопроводов.

УДК 620.193

ЭКОЛОГИЧЕСКАЯ БЕЗОПАСНОСТЬ ПРОИЗВОДСТВ МЕДИЦИНСКИХ ИНСТРУМЕНТОВ

Садретдинова Г.Р., Виноградова С.С

Проведен обзор методов очистки сточных вод, описаны пути снижения экологической опасности, освоена методика расчета расхода воды на промывку процессов никелирования и хромирования. Результаты работы использованы при обосновании выбора технологии очистки сточных вод завода КМИЗ.

УДК 620.193

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКАЯ ЗАЩИТА ОТ КОРРОЗИИ МАГИСТРАЛЬНЫХ ГАЗОПРОВОДОВ

Ахметшин Н.И., Виноградова С.С

Проведен обзор методов электрохимической защиты от коррозии магистральных газопроводов, освоена методика расчета параметров электрохимической защиты магистральных трубопроводов, проведен расчет параметров электрохимической защиты магистрального трубопровода диаметром 0,53 м. – расчет протекторной защиты, катодной защиты, дренажной защиты и защиты кожуха.

УДК 620.193

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ИССЛЕДОВАНИЯХ ЭЛЕКТРООСАЖДЕНИЯ И КОРРОЗИИ МЕТАЛЛОВ

Печенкин А.В., Виноградова С.С

Проведен обзор спектроскопических методов исследования электроосаждения и коррозии металлов. Рассмотрены примеры применения импедансной спектроскопии в коррозионных исследованиях. Освоена методика определения термической стойкости ингибиторов.

УДК 620.193

РАСЧЕТНЫЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ТОКОВ КОРРОЗИИ ГАЛЬВАНИЧЕСКОЙ ПАРЫ

Хайруллина Л.Р., Горшков А.Н., Плешкова Е.В., Ахмадишин М.Р

Рассмотрен процесс растворения металла в растворе электролита с выделением водорода, на примере растворения цинкового электрода в контакте с медным электродом. Изучено влияние состава растворов на коррозионное поведение контактной пары цинк-медь с различным соотношением поверхностей электродов контактной пары.

УДК 539.17.177

ИССЛЕДОВАНИЕ ПИТТИНГОВОЙ КОРРОЗИИ ХРОМОНИКЕЛЕВЫХ СТАЛЕЙ В ХЛОРИДНЫХ РАСТВОРАХ

Гаврилова А.Г., Исхакова И.О

Рассмотрены теоретические представления питтинговой коррозии хромоникелевых сталей, представлен зарубежный опыт в области исследования питтинговой коррозии, показаны основные характеристики потенциостата серии ИПС, проведен частотный анализ флуктуаций потенциала стали 12Х18Н10Т при гальваностатической поляризации в хлоридных растворах.

УДК 539.17.177

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНТАКТНОЙ КОРРОЗИИ МНОГОЭЛЕКТРОДНЫХ СИСТЕМ

Лотфуллина Г.И., Исхакова И.О

Рассмотрены теоретические представления контактной коррозии многоэлектродных систем, представлено моделирование и расчет процесса контактной коррозии двухэлектродных систем, показано определение максимального коррозионного тока и контролирующих факторов коррозии, приведен расчет процесса контактной коррозии многоэлектродной системы.

УДК 539.17.177

МЕТОД ИМПЕДАНСНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ В ИССЛЕДОВАНИИ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ СТАЛИ 12Х18Н10Т

Валиуллина М.М., Исхакова И.О

Представлены теоретические основы метода импедансной спектроскопии, рассмотрены способы представления импеданса, структурные элементы в импедансных моделях, показан выбор эквивалентной электрической схемы, представлен импеданс простых электрохимических систем, рассмотрены способы измерения импеданса электрохимических ячеек, освоена методика измерения импеданса электрохимических ячеек с использованием современных приборов.

УДК 539.17.177

**МОДИФИКАЦИЯ ПОВЕРХНОСТИ ХРОМОНИКЕЛЕВЫХ
СТАЛЕЙ В ХЛОРИДНЫХ РАСТВОРАХ ПРИ
ГАЛЬВАНОСТАТИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ**

Исхакова И.О., Виноградова С.С., Кайдриков Р.А., Журавлев Б.Л

Рассмотрена модификация поверхности хромоникелевых сталей в условиях гальваностатической поляризации при автоколебательном режиме локального растворения. Показано влияние на процесс модификации поверхности стали в хлоридном растворе плотности тока, продолжительности поляризации, введения окислителя.

УДК 539.17.177

**МОДИФИКАЦИЯ ПОВЕРХНОСТИ ХРОМОНИКЕЛЕВЫХ
СТАЛЕЙ В ХЛОРИДНЫХ РАСТВОРАХ ПРИ
ГАЛЬВАНОСТАТИЧЕСКОЙ ИМПУЛЬСНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ**

Исхакова И.О., Виноградова С.С., Кайдриков Р.А., Журавлев Б.Л

Рассмотрена модификация поверхности хромоникелевых сталей в условиях импульсной гальваностатической поляризации. Получены диаграммы, показывающие влияние режима поляризации для стали 12Х18Н10Т в хлоридных растворах в присутствии окислителя на области устойчивости активно-пассивного и локально-активного состояний. Показано влияние параметров режима на значения максимальных потенциалов образования питтингов.

УДК 539.17.177

**МЕТОД ОПЕРЕЖАЮЩЕГО МОНИТОРИНГА ПАССИВНОГО
СОСТОЯНИЯ ХРОМОНИКЕЛЕВЫХ СТАЛЕЙ**

Ткачева В.Э., Виноградова С.С., Макарова А.Н

Обоснован новый подход к опережающему мониторингу пассивного состояния металлов, заключающийся в разделении во времени процессов воздействия электрического тока на металл, ужесточающего условия его эксплуатации, и последующей оценки коррозионного состояния поверхности металла. Разработан критерий оценки потенциальной коррозионной опасности. Показаны преимущества циклического потенциостатического метода мониторинга.

УДК 541.13: 621.35

ИОННЫЙ НАГРЕВАТЕЛЬ ДЛЯ НЕФТЕДОБЫВАЮЩИХ СКВАЖИН

Ившин Я.В., Малашина О.В

Исследовано влияние состава электролита на динамику нагрева и определены эксплуатационные свойства нагревателя. Разработаны рекомендации по выбору состава и объема электролита в зависимости от конструкции нагревателя и геологической структуры нефтяного пласта. Рассмотрены преимущества ионного нагревателя и его конкурентоспособность.

УДК 621.357

МОДИФИКАЦИЯ СПИЦ ДЛЯ КОМПРЕССИОННО-ДИСТРАКЦИОННОГО ОСТЕОСИНТЕЗА

Ившин Я.В., Кайдриков Р.А., Зильберг А.И

Предложено, с целью улучшения условий прохождения стальной спицы для компрессионно-дистракционного остеосинтеза через кость, наносить на острие спицы твердое износостойкое покрытие. Разработана технология процесса нанесения гальванического никелевого покрытия, содержащего частицы алмаза.

УДК 620.193.013

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СКОРОСТИ КОНТАКТНОГО ОБМЕНА ПО ПОТЕНЦИОДИНАМИЧЕСКИМ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫМ КРИВЫМ

Ившин Я.В

Проведен анализ кинетики контактного обмена по потенциодинамическим поляризационным кривым. Приведен метод расчета тока нестационарного процесса контактного обмена и количества металла. Показана хорошая сходимость полученных результатов с экспериментальными данными

УДК 620.193.013

ОСОБЕННОСТИ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ ЦИНКОВЫХ ПОКРЫТИЙ МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОГО ЭЛЕКТРОНАТИРОВАНИЯ

Ившин Я.В., Кайдриков Р.А

Определены параметры процесса нанесения цинковых покрытий способом селективного электронатироваания. Методом коротко замкнутой гальванопары исследовали процесс коррозии цинкового покрытия на стальной основе. Показано влияние состава и кислотности электролита на скорость коррозионного процесса.

УДК 541.138

АНОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ НА ВИСМУТОВОМ ЭЛЕКТРОДЕ В РАСТВОРЕ СЕРНОЙ КИСЛОТЫ, СОДЕРЖАЩЕЙ ТИОЦИАНАТ-ИОНЫ

Петрова Т.П., Стародубец Е.Е., Шапник А.М

При исследовании анодного растворения висмута в растворах серной кислоты установлено, что профиль циклической вольтамперограммы (ЦВА) определяется концентрацией SCN^- -ионов. При концентрации SCN^- -ионов 0,005...0,1 М на ЦВА фиксируются анодный пик и минимум тока в области потенциалов 0,2...0,3 В, обусловленный адсорбцией тиюцианат-ионов и их деструкцией.

УДК 544.6.018

НОСИТЕЛИ ЗАРЯДОВ В ЭЛЕКТРОЛИТАХ НА ОСНОВЕ СОЕДИНЕНИЙ ХРОМА (III).СИСТЕМА ХРОМ (III) – ВОДА

Березин Н.Б., Березина Т.Н., Межевич Ж.В., Чевела В.В

Показано, что термодинамическая устойчивость комплексов $[\text{Cr}_{\text{aq}}]^{3+}$; $[\text{Cr}_2\text{OH}]^{5+}$; $[\text{Cr}_2(\text{OH})_2]^{4+}$; $[\text{Cr}_4(\text{OH})_5]^{7+}$ невелика, а, следовательно, и их реакционная способность может быть достаточно высокой. Наличие высокого положительного заряда должно способствовать вхождению таких комплексов в зону электрохимической реакции – ДЭС и их восстановлению.

УДК 544.6.018

НОСИТЕЛИ ЗАРЯДОВ В ЭЛЕКТРОЛИТАХ НА ОСНОВЕ СОЕДИНЕНИЙ ХРОМА (III) СИСТЕМА ХРОМ (III) – ГЛИЦИН – ВОДА

Березин Н.Б., Березина Т.Н., Шарифуллина А.У., Чевела В.В

При увеличении концентрации глицина доли накопления гидроксокомплексов становятся пренебрежимо малыми. В растворе существуют преимущественно моноядерные комплексы хрома (III) с глицином $[\text{Cr}(\text{HGly})_3\text{Gly}]^{2+}$, $[\text{Cr}(\text{HGly})_2\text{Gly}_2]^+$, $[\text{CrGly}_4]^-$, $[\text{Cr}(\text{HGly})_6]^{3+}$, $[\text{Cr}(\text{HGly})_4\text{Gly}_2]^+$. Наличие соединений хрома (III) в виде катионных комплексов способствует вхождению их в зону электрохимической реакции и восстановлению, что подтверждается на практике.

УДК 544.6.018

ЭКОЛОГИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ ГАЛЬВАНОТЕХНИКИ И ПУТИ ИХ РЕШЕНИЯ

Березин Н.Б., Березина Т.Н

Электрохимическая технология является серьезным источником загрязнения окружающей среды. Предотвращение ее отрицательного воздействия на экологическую обстановку является актуальной задачей. В качестве первоочередных задач предложено снижение экологической опасности хромирования и хроматирования. Актуальным является замена соединений хрома (VI) на хром (III), замена процессов кадмирования на сплавы цинка, сокращение водопотребления, утилизация отработанных отходов и шламов.

УДК 620.193.013:544.65

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СОСТАВА СОЛЕВЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ НА АНОДНОЕ И КОРРОЗИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ АЛЮМИНИЯ

Григорьева И.О., Ахмадишина Г.Т

Потенциодинамическим методом исследован процесс анодного растворения алюминия (99,5 %) в солевых хлоридсодержащих электролитах в широком диапазоне концентраций. Установлена зависимость электрохимических и коррозионных характеристик алюминиевого

электрода от состава и концентрации раствора. Определены оптимальные составы электролитов и условия поляризации, при которых поверхность алюминиевого электрода поддерживается в активном состоянии, а процесс его саморастворения сведен к минимуму.

УДК 620.193.013:544.65

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ АЛЮМИНИЯ В ХЛОРИДСОДЕРЖАЩИХ ЭЛЕКТРОЛИТАХ С ДОБАВКАМИ ПАВ

Григорьева И.О., Хайруллина Л.Р

Исследовано анодное и коррозионное поведение алюминия (99,5 %) в электролитах на основе NaCl (1,0 моль/л) с добавлением (5,0 %) органических модифицирующих веществ различной природы и pH. Показано, что анодный процесс протекает через образование и последующее растворение хемосорбционного комплекса, содержащего атомы Al, молекулы H₂O и ПАВ, Cl⁻-ионы. Установлено, что некоторые модифицирующие добавки являются эффективными ингибиторами коррозии алюминия в хлоридсодержащих растворах без потери активности анодного материала.

УДК 620.193.013:544.65

ВЛИЯНИЕ СОСТАВА И КОНЦЕНТРАЦИИ ЩЕЛОЧНЫХ РАСТВОРОВ НА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ И КОРРОЗИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ АЛЮМИНИЯ

Григорьева И.О., Ахмадишина Г.Т

Изучено коррозионное поведение и анодное растворение алюминия (99,5 %) в растворах щелочей NaOH, NH₄OH, KOH, LiOH в широком диапазоне концентраций.

Установлена зависимость анодной и катодной поляризации, а также коррозионных характеристик (ток и потенциал коррозии) от состава и концентрации (pH) щелочных растворов. Показано, что значения анодной плотности тока в пассивной области зависит от природы катиона и обусловлены растворимостью алюмината.

УДК 620.193.013:544.65

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ АЛЮМИНИЯ В НИТРАТСОДЕРЖАЩИХ ЭЛЕКТРОЛИТАХ

Григорьева И.О., Хайруллина Л.Р

Электрохимическими методами исследовано влияние нитрат-ионов на процесс анодного растворения и коррозионные характеристики алюминиевого электрода в водных растворах электролитов различного состава в широком диапазоне концентраций и pH. Показано, что при подщелачивании нитратсодержащих растворов изменяется характер анодной поляризации электрода. Установлено, что добавление щелочи значительно сдвигает потенциал коррозии в область более отрицательных значений и способствует увеличению коррозионного тока на два-три порядка.

УДК 620.193

НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ КОРРОЗИИ АЛЮМИНИЯ И ЕГО СПЛАВОВ

Григорьева И.О., Горшков А.Н

Рассмотрены особенности электрохимической коррозии алюминия и его сплавов в различных условиях и средах. При оценке коррозионной стойкости алюминиевых сплавов следует оперировать совокупностью основных электрохимических характеристик – ток растворения, потенциалы пробоя и коррозии. Показана возможность защиты алюминия в кислых средах при использовании катионов металлов, способных контактно осаждаться на его поверхности с высоким перенапряжением выделения водорода.

УДК 541.123

ВЛИЯНИЕ НАНОРАЗМЕРНОГО ОКСИДА КРЕМНИЯ НА РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОЛИТА-СУСПЕНЗИИ

Плешкова Е.В., Плешков В.А

Выявлено резкое увеличение вязкости электролита цинкования, содержащего микрочастицы оксида алюминия (1-5 мкм) при введении в него наноразмерного диоксида кремния (аэросил А-300). Достижение точки гелеобразования происходит при концентрации SiO_2 в рас-

творе 40г/л. Содержание дисперсной фазы в осаждаемых покрытиях заметно превышает значения, полученные из электролитов-суспензий, не содержащих оксид кремния.

УДК 539.234

СИНТЕЗ ТОНКИХ ПЛЕНОК СУЛЬФИДОВ МЕТАЛЛОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ИНЕРТНОГО НОСИТЕЛЯ

Плешков В.А., Юсупов Р.А

Разработана рецептура синтеза сорбентов на основе сульфида свинца на носителях с высокоразвитой поверхностью (цеолиты, диатомиты). Методами рентгенофлуоресцентного анализа и потенциометрического титрования исследованы параметры и физико-химические свойства синтезированных сорбентов.

УДК 539.234

СПОСОБ РАЗДЕЛЕНИЯ СОЕДИНЕНИЙ МОЛИБДЕНА И КОБАЛЬТА

Хацринова Ю.А., Хацринов А.И

Разработан способ разделения соединений молибдена и кобальта в отработанном катализаторе. Для этого гранулы катализатора сплавляли с гидроксидом натрия с последующим переводом сплава в раствор. Оптимизированы соотношение компонентов, температура и время процесса.

УДК 541.2; 621.793

ВЛИЯНИЕ АМОРФНОГО БОРА НА ЖАРОСТОЙКОСТЬ НИКЕЛЕВЫХ ПОКРЫТИЙ

Фомина Р.Е., Халиуллина Э.Р

Получены композиционные электрохимические покрытия (КЭП) из аммиачного электролита никелирования, модифицированного ультрадисперсными частицами бора. Показано соосаждение частиц бора с никелевой матрицей от 4,5 до 9 мас. % при концентрации 3-10 г/дм³. Выявлено, что частицы бора увеличивают жаростойкость никелевых покрытий в 1,5 раза.

УДК 541.2; 621.793

ВЛИЯНИЕ ЧАСТИЦ КАРБИДА КРЕМНИЯ НА ЭКСПЛУАТАЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЦИНКОВЫХ ПОКРЫТИЙ

Мингазова Г.Г., Галеева А.А

Изучены эксплуатационные свойства композиционных электрохимических покрытий с матрицей из цинка, полученные из сульфатного электролита цинкования. В качестве дисперсной фазы, использовались наночастицы карбида кремния концентрацией 310 г/дм³. Коррозионная стойкость Zn-КЭП повышается в 2 раза по сравнению с контрольным цинковым покрытием в 3 % растворе хлорида натрия. После обработки при 300⁰С происходит повышение показателя стойкости КЭП в 3 % растворе NaCl по сравнению с цинковым покрытием в 5 раз.

УДК 544.4

КИНЕТИКА ИЗВЛЕЧЕНИЯ АМОРФНОГО КРЕМНЕЗЕМА ИЗ ДИАТОМИТА

Нажарова Л.Н., Филиппович Е.Н., Сайфутдинов А.М

Рассмотрен процесс обработки диатомита Инзенского месторождения раствором гидроксида натрия различной концентрации в диапазоне температур 25-90⁰С. Определена степень извлечения аморфного кремнезема. Рассчитаны значения энергий активации и констант скорости. Предложен механизм щелочной обработки. Полученные активационные параметры описывают процессы насыщения аморфной фазы кремнезема молекулами воды и ионами натрия и гидроксида, а также перестройки координационной сферы силикат-ионов.

УДК 631.85:661.15

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭКСПЛУАТАЦИОННЫХ СВОЙСТВ КЭП С МАТРИЦЕЙ ИЗ ХРОМА С НАНОЧАСТИЦАМИ SiO₂

Водопьянова С.В., Фомина Р.Е., Мингазова Г.Г., Сайфуллин Р.С

Изучены эксплуатационные свойства композиционных покрытий с наночастицами Al₂O₃ и SiO₂, как при их совместном присутствии, так и отдельно. Установлено улучшение свойств

покрытий при совместном присутствии наночастиц в электролите-суспензии. Показано влияние термообработки (отжига) на изменение свойств покрытий.

УДК 620.22, 691.620.18

ТЕХНОЛОГИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО НАСЛАИВАНИЯ КАК ОСНОВА ПОЛУЧЕНИЯ СЕРОСОДЕРЖАЩИХ МАТЕРИАЛОВ

Бараетва Л.Р., Ахметова Р.Т

Аморфный диоксид кремния широко используется в различных областях: как носитель для катализаторов, в хроматографии, в технологии молекулярного наслаивания (МН), в технологии золь-гель для получения нанокомполитов с широким диапазоном свойств. Элемент, адсорбированный на поверхности аморфного диоксида кремния, обладает реакционной способностью и способен взаимодействовать с другими элементами. Формирование связей в двойных системах « $\text{SiO}_2\text{-FeCl}_3$ », « $\text{FeCl}_3\text{-S}$ » и тройной системе « $\text{SiO}_2\text{FeCl}_3\text{-S}$ » подтверждены различными физико-химическими методами исследования.

УДК 544.4

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АКТИВАТОРА ХЛОРИДА ЦИНКА В ТЕХНОЛОГИИ НЕОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛИСУЛЬФИДОВ

Сабахова Г.И., Ахметова Р.Т., Лин А.И

С использованием квантово-химических методов (DFT/ базис 4. in) программного пакета Priroda исследованы на наноуровне возможные варианты присоединения радикалов серы к модифицированной хлоридом цинка поверхности кремнезема. Выявлена зависимость прочности связи и длин связей между атомами серы от количества атомов в сульфидной цепочке. Наиболее прочная связь образуется в молекулах с малым количеством атомов серы, с увеличением атомов серы более трех наблюдается альтернирование коротких связей.

УДК 667.96

ТЕХНОЛОГИЯ СТЕКЛОМАГНЕЗИТОВЫХ ЛИСТОВ НА ОСНОВЕ БИШОФИТА И РАЗЛИЧНЫХ МАГНЕЗИАЛЬНЫХ ВЯЖУЩИХ

Хузиахметов Р.Х., Мусихин С.И

Разработана технология стекломagneзитовых листов (СМЛ) с регулируемыми физико-химическими свойствами (прочность, плотность, водопоглощение) на основе $MgCl_2 \cdot 6H_2O$ и магнезиальных вяжущих различных марок. Пробная партия СМЛ, выпущенная ООО «Магнемикс» (250 листов размером 2,85x1,24x0,006м), использована для облицовки производственного помещения площадью около 200 м².

УДК 544.77

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРИРОДЫ ВОССТАНОВИТЕЛЯ НА ЗАКОНОМЕРНОСТИ СИНТЕЗА И СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА

Катнова Р.Р., Катнов В.Е., Степин С.Н

В водной среде с использованием различных водорастворимых соединений серебра, восстановителей и стабилизаторов осуществлен синтез наночастиц серебра. Результаты свидетельствуют о необходимости достижения оптимального соотношения между скоростью реакции восстановления серебра и сорбцией молекул стабилизатора.

УДК 667.637.222, 675.026.1

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ НАНОРАЗМЕРНОГО SiO₂ НА СВОЙСТВА ПОЛИУРЕТАНОВЫХ ПОКРЫТИЙ

Чапчина В.С., Гришин П.В., Катнов В.Е

Определено оптимальное содержание наноразмерного SiO₂, отвечающего максимальным эксплуатационным свойствам композиционных полиуретановых покрытий. Выявлено совпадение оптимума содержания дисперсной фазы, отвечающего высокой износоустойчивости покрытий, с началом изменения их оптических характеристик.

УДК 667.637.2

**НАНОРАЗМЕРНЫЙ ЦИНКОВЫЙ ПОРОШОК В СОСТАВЕ
ЦИНКНАПОЛНЕННЫХ ЭПОКСИДНЫХ ПОКРЫТИЙ**

Степин С.Н., Толстошеева С.И., Давыдова М.С

Показана возможность сохранения надлежащего уровня катодной защиты протекторных покрытий при снижении содержания в них цинка ниже критического путем замены 1 % цинкового порошка на наноцинк. Общее содержание жертвенного металла обеспечивающее катодную защиту стали, снижается до 60 %.

УДК 544.77

**СТИМУЛИРУЮЩЕЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ – КАК
ФАКТОР, ОПРЕДЕЛЯЮЩИЙ РАЗМЕР ЧАСТИЦ
В ПРОЦЕССЕ СИНТЕЗА НАНОСЕРЕБРА**

Катнова Р.Р., Вахитов Т.Р., Степин С.Н

Показана возможность синтеза и стабилизации наночастиц серебра диаметром менее 25 нм с узким распределением по размерам в растворе полимера. Установлена зависимость коллоидно-химических характеристик получаемых наносuspensions от типа, интенсивности и продолжительности стимулирующих воздействий (нагрев, УФ-излучение).

УДК 544.77.022, 667.613.5:620.193.81

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА НА
ЭКСПЛУАТАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИМЕРНЫХ ПОКРЫТИЙ**

Мингалиева Р.Р., Катнова Р.Р., Степин С.Н

Исследовано влияние содержания наночастиц серебра на свойства полиуретановых покрытий, применяемых для антибактериальной защиты различных объектов. Установлена зависимость эксплуатационных характеристик покрытий от природы восстановителя-стабилизатора, применяемого в процессе синтеза наночастиц серебра.

УДК 661.73

**ПОЛУЧЕНИЕ ПРОТИВОКОРРОЗИОННОГО ПИГМЕНТА
МЕХАНОХИМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКОЙ ОКСИДА МАГНИЯ**

Федосеев Д.А., Сороков А.В

Проведена механохимическая обработка оксида магния оксиэтилидендифосфоновой кислотой. Показано, что полученные продукты обладают пигментными свойствами. Получены грунтовочные составы с различным содержанием синтезированных пигментов и исследованы противокоррозионные свойства покрытий на их основе. Определен оптимальный состав пигментной части и показана возможность использования, полученных пигментов для получения грунтовок противокоррозионного назначения.

УДК 661.579

**ПРИМЕНЕНИЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ АМИНОВ ДЛЯ
УСКОРЕНИЯ ОТВЕРЖДЕНИЯ ПОЛИУРЕТАНОВЫХ ПОКРЫТИЙ**

Муталлапова Л.Р., Сороков А.В

Разработана полиуретановая композиция с содержанием дифенилолпропана. Изучены влияние количества аминного катализатора на физико-механические свойства покрытий. Предложено использовать в качестве катализатора амины, модифицированные эпоксидными олигомерами с различной молекулярной массой.

УДК 667.657.27

**ПРОТИВОКОРРОЗИОННЫЕ СВОЙСТВА СТИРОЛ-АКРИЛАТНЫХ
ПОКРЫТИЙ, НАПОЛНЕННЫХ МАНГАНИТ-СУЛЬФАТОМ БАРИЯ**

Кузнецов И.М., Пилипенко А.В., Зиганшина М.Р

Проведена оптимизация условий синтеза манганит-сульфата бария керамическим методом. Исследованы противокоррозионные свойства полученных соединений. Разработана рецептура противокоррозионной стирол-акрилатной грунтовки, содержащей манганит-сульфат бария в качестве противокоррозионного пигмента.

УДК 667.657.27

ЗАЩИТНЫЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ ВОДНЫХ ДИСПЕРСИЙ ПОЛИМЕРОВ

Каптелева А.О., Азизова Э.Т., Зиганшина М.Р

Исследовано влияние синтезированного керамическим методом манганита кальция в составе стирол-акрилатных композиций на защитные свойства покрытий. Установлено оптимальное содержание пигмента в покрытиях. Показано преимущество разработанного лакокрасочного материала перед промышленными аналогами.

УДК 667.657.27

АНАЛИЗ ЗАЩИТНЫХ СВОЙСТВ АЛКИДНЫЕ КОМПОЗИЦИИ, НАПОЛНЕННЫЕ МАЛОТОКСИЧНЫМИ КЕРАМИЧЕСКИМИ МАРГАНЕЦСОДЕРЖАЩИМИ ПИГМЕНТАМИ

Азизова Э.Т., Пилипенко А.В., Зиганшина М.Р

В качестве противокоррозионных пигментов использовались керамические манганиты кальция и бария. Найдены значения критического объемного содержания пигментов, разработаны рецептуры грунтовок, покрытия на основе которых по противокоррозионной эффективности превосходят промышленный аналог.

УДК 667.657.27

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ ЗАЩИТНЫХ ЭПОКСИДНЫХ ПОКРЫТИЙ, НАПОЛНЕННЫХ КЕРАМИЧЕСКИМИ МАРГАНЕЦСОДЕРЖАЩИМИ ПИГМЕНТАМИ

Ситнова Н.В., Зиганшина М.Р

Разработаны и получены эпоксидные лакокрасочные материалы, наполненные синтезированными противокоррозионными пигментами. Показано превосходство по противокоррозионной эффективности синтезированных пигментов перед токсичным хроматом цинка.

УДК 667.657.27

**РАЗРАБОТКА ПРОТИВОКОРРОЗИОННОЙ ГРУНТОВКИ,
СОДЕРЖАЩЕЙ МАНГАНИТ-СУЛЬФАТ БАРИЯ**

Ахмадуллин А.А., Зиганшина М.Р

Показана эффективность синтезированного керамического пигмента в составе эпоксидных и алкидных композиционных материалов. Разработаны рецептуры противокоррозионных грунтовок по защитным свойствам, превосходящие промышленные аналоги.

УДК 678.048.25

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ ФОСФОНОВЫХ
КИСЛОТ В КАЧЕСТВЕ ДОПАНТОВ ПРИ СИНТЕЗЕ ПОЛИАНИЛИНА**

Печинникова А.С., Ситнов С.А., Степин С.Н

Установлено, что оксиэтилендифосфоновая и нитрилотриметилфосфоновая кислоты могут быть использованы в качестве допирующих агентов при синтезе полианилина. Контроль за протеканием полимеризации осуществляли по изменению оптической плотности реакционной среды при $\lambda=750$ нм.

УДК 544.723

**ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В СИСТЕМЕ
ТАЛЬК-ОКСИЭТИЛИДЕНДИФОСФОНОВАЯ КИСЛОТА**

Ситнов С.А., Степин С.Н

Кислотно-основным титрованием установлено, что оптимальное процентное содержание оксиэтилендифосфоновой кислоты (при расчете на микротальк), соответствующего наиболее полному превращению поверхности наполнителя в соль ОЭДФ, составляет 8%.

УДК 675.1.01

РАЗРАБОТКА ПЛЕНКООБРАЗУЮЩЕЙ ОСНОВЫ УФ-ОТВЕРЖДЕНИЯ ДЛЯ ПОКРЫВНОГО КРАШЕНИЯ КОЖ

Рыбаченок А.Г., Сороков А.В., Степин С.Н

Проведен анализ патентной и периодической литературы по покрывному крашению кож с использованием пленкообразующих веществ, отверждаемых УФ-лучами. Показан интерес к полиуретановым покрытиям, которые обладают комплексом ценных свойств. Получены покрытия на коже с использованием полиуретановых пленкообразующих веществ, отверждаемых УФ-лучами.

УДК 627.629

**ИССЛЕДОВАНИЕ АНТИКОРРОЗИОННЫХ СВОЙСТВ
НОВОГО КЕРНОВОГО БРУСИТОВОГО ПИГМЕНТА С
ОБОЛОЧКОЙ ИЗ АМИННОЙ СОЛИ ФОСФОНОВОЙ КИСЛОТЫ**

Каюмов А.А., Степин С.Н

Получен новый керновый пигмент посредством формирования оболочки из аминной соли фосфоновой кислоты на поверхности частиц дисперсного брусита. Исследованы противокоррозионные свойства полученного пигмента в составе алкидных покрытий на основе лака ПФ-060.

УДК 667.622.11

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДОЛОМИТА В КАЧЕСТВЕ СЫРЬЯ
ПРИ ПОЛУЧЕНИИ ФЕРРИТНЫХ ПИГМЕНТОВ**

Сафиуллин М.И., Степин С.Н

Исследована возможность использования природного доломита в качестве сырья для получения ферритного пигмента по керамической технологии. Полученные пигменты показали высокие противокоррозионные свойства, что свидетельствует о перспективности исследований в данном направлении.

УДК 537.9; 537.611.44; 519.876.5

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА КЛАСТЕРОВ
МАГНИТНОГО СИЛИЦИДА Fe_3Si ПРИ ИОННО-ЛУЧЕВОМ СИНТЕЗЕ**

Балакирев Н.А., Жихарев В.А

Предложена модель формирования тонкой пленки магнитного силицида в приповерхностном слое кремниевой мишени при высокодозной имплантации ионов железа. В рамках модели атомы железа, совершающие случайные блуждания в двумерном слое, присоединяются к растущему кластеру если их концентрация в окрестности кластера достаточна для формирования необходимого соединения.

СЕКЦИЯ 1.3. НАПРАВЛЕННЫЙ СИНТЕЗ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ЗАДАННОЙ СТРУКТУРОЙ, КАК ОСНОВА ДЛЯ СОЗДАНИЯ МАТЕРИАЛОВ И ТЕХНОЛОГИЙ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ

Руководитель: Синяшин О.Г.

Секретарь: Исмагилов Р.К.

6 февраля Д-414 10:00

УДК 547.539+547.26118+547.571

РЕАКЦИИ ХЛОРИДОВ Р(III) С АЛИФАТИЧЕСКИМИ АЛЬДЕГИДАМИ

Хайруллин Р.А., Газизов М.Б., Каримова Р.Ф

Разработан новый подход к исследованию реакций электрофильных хлоридов Р(III) с алифатическими альдегидами, суть которого заключается в удалении кислых примесей из хлорида Р(III) и каталитическом блокировании электроноакцепторного центра карбонильной группы. Синтезированы первичные интермедиаты. Структура их подтверждена физическими и химическими методами.

УДК 547.565.2:547-327:547-386:54.057

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ КАЛИКС[4]РЕЗОРЦИНОВ И ГИДРАЗИДОВ ФОСФОРИЛУКСУСНЫХ КИСЛОТ

Сайфутдинова М.Н., Гаврилова Е.Л., Тарасова Р.И., Кочергин Я.С

Синтезированы новые нетоксичные молекулярные комплексы на основе каликс[4]резорцинов и лекарственных препаратов нейротропного действия класса фосфорилацетогидразидов.

УДК 547.565.2:547-327:542.86

**СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ КАЛИКС[4]РЕЗОРЦИНОВ И ГФУК**

Мушлайкина Л.А., Сайфутдинова М.Н., Гаврилова Е.Л

Процесс комплексообразования каликс[4]резорцинов и ГФУК в этанольном и/или водно-этанольном растворе исследовался методом УФ спектрофотометрии.

УДК 547.539 + 547.303

**РЕАКЦИИ N-АЛКИЛ-2-ХЛОРАЛЬДИМИНОВ
С КИСЛОТАМИ ФОСФОРА**

Аксенов Н.Г., Хайруллин Р.А., Газизов М.Б

Показано, что диалкилфосфиты с N-алкил-2-хлоральдимидами образуют продукты присоединения по иминной группе, которые изомеризуются через азиридиновый интермедиат. В случае O,O-диалкилдитиофосфорных кислот параллельно протекает два процесса: протонирование по азоту и нуклеофильное замещение атома хлора дитиофосфатным анионом.

УДК 547.539 + 547.303

**СИНТЕЗ ДИТИОФОСФОРИЛИРОВАННЫХ
АЛЬДЕГИДОВ И ИХ ПРОИЗВОДНЫХ**

Аксенов Н.Г., Хайруллин Р.А., Газизов М.Б

Гидролизом солей соответствующих иминов синтезированы альдегиды. Получены их производные: имины, ацетали, спирты, гидразоны. Структура синтезированных соединений подтверждена спектрами ЯМР на ядрах ^1H и ^{31}P .

УДК 547.26.118

**НОВЫЕ РЕАКЦИИ ТРИМЕТИЛОРТОФОРМИАТА С
ГАЛОГЕНФОСФОРСОДЕРЖАЩИМИ ПРОИЗВОДНЫМИ
ПРОСТРАНСТВЕННО-ЗАТРУДНЕННЫХ ФЕНОЛОВ**

Исмагилов Р.К., Газизов М.Б., Каримова Р.Ф., Шамсутдинова Л.П.,

Бурангулова Р.Н., Тараканова А.Л

Обнаружены и изучены новые направления реакций хлорида (4-гидрокси-3,5-дигрет-бутилфенил) хлорметандифенилхлорфосфония с триметилортоформиатом. Осуществлено моделирование промежуточных стадий химических превращений.

УДК 547.539:547.26.118:547.573

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДИФЕНИЛБРОММЕТАНА
С О- И S-МЕТИЛДИЭТИЛТИОФОСФИНАМИ**

Иванова С.Ю., Газизов М.Б., Багаува Л.Р., Каримова Р.Ф., Валиева Г.Д.,

Исмагилов Р.К

Установлено, что в реакции дибромметана с О-метилдиэтилтиофосфинатом реализуется диэтилфосфорилтиоилирование. Его взаимодействие с S-метилдиэтилтиофосфинатом протекает при более жестких условиях и по двум маршрутам – диэтилфосфорилтиоилирования и метилтиоилирования.

УДК 547.512:541'26.118:547.415.1

**СИНТЕЗ НОВЫХ ФОСФОРИЛИРОВАННЫХ БИС
(ГИДРОКСИАРИЛ)ДИИМИНОВ НА ОСНОВЕ
САЛИЦИЛОВОГО АЛЬДЕГИДА И ДИАМИНОВ**

Ваничкина А.П., Бухаров С.В., Багаутдинова Р.Х

Найден удобный метод постадийного синтеза фосфорсодержащих бисазометиннов заключающийся в первоначальном фосфорилировании салицилового альдегида, с последующей конденсацией полученного продукта с диаминами. Полученные соединения представляют интерес как лиганды в комплексообразовании.

УДК 547.82:541'26.118:547.223.1

**ФОСФОРИЛИРОВАННЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ
ПИРИДОКСАЛЯ. СИНТЕЗ И СВОЙСТВА**

Трифонов А.В., Кибардина Л.К., Бухаров С.В

Синтезированы моноимины на основе пиридоксаля, и изучено их фосфорилирование шестичленными хлортиофосфатами. Реакция осуществляется с участием фенольной группы и сопровождается внутримолекулярными превращениями с образованием фосфорилированных дигидрофурипиридинов. Состав и строение полученных соединений подтверждены данными элементного анализа, ИК, ЯМР – ^1H , ^{31}P – спектроскопии, спектрометрии MALDI, PCA.

УДК 547.562.4

НОВЫЕ ФУНКЦИОНАЛЬНО ЗАМЕЩЕННЫЕ БЕНЗОФУРОКСАНЫ

**Мухаматдинова Р.Э., Чугунова Е.А.,
Гибадуллина Э.М., Бухаров С.В., Бурилов А.Р**

С целью синтеза «гибридных» препаратов, содержащих в себе два лекарственных фармакофора в одной молекуле, осуществлено взаимодействие (ди)галогендинитробензофуороксанов с аминокислотами и нитроаминспиртами. Синтезированные производные изучены на биологическую активность.

УДК 547.327:547.831

**РЕАКЦИИ АМИДА 4-АМИНОБЕНЗОЛСУЛЬФОКИСЛОТЫ
С 3,5-ДИ-ТРЕТ-БУТИЛ-4-ГИДРОКСИБЕНЗИЛАЦЕТАТОМ
И 3,5-ДИ-ТРЕТ-БУТИЛ-4-ГИДРОКСИБЕНЗИЛАМИНОМ**

Бухаров С.В., Олудина Ю.Н., Ахметова Е.Ф

Осуществлен синтез производных амида 4-аминобензолсульфокислоты, содержащих 3,5-ди-трет-бутил-4-гидроксибензильные заместители в аминном и амидном фрагментах. Предложен способ синтеза 3,5-ди-трет-бутил-4-гидроксибензиламина. Структура соединений доказана методом спектроскопии ЯМР ¹

Конец ознакомительного фрагмента.

Текст предоставлен ООО «ЛитРес».

Прочитайте эту книгу целиком, [купив полную легальную версию](#) на ЛитРес.

Безопасно оплатить книгу можно банковской картой Visa, MasterCard, Maestro, со счета мобильного телефона, с платежного терминала, в салоне МТС или Связной, через PayPal, WebMoney, Яндекс.Деньги, QIWI Кошелек, бонусными картами или другим удобным Вам способом.