

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

# НАУЧНАЯ СЕССИЯ

(3-7 февраля 2014 г.)

*Аннотации сообщений*

Казань  
Издательство КНИТУ  
2014

## **УВАЖАЕМЫЙ КОЛЛЕГА!**

**Ректорат, Ученый совет Казанского национального исследовательского технологического университета (КНИТУ) приглашает Вас принять участие в работе научной сессии по итогам 2013 года.**

**Пленарное заседание состоится 3 февраля 2014 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](http://www.kstu.ru)**

## ОРГКОМИТЕТ

Дьяконов Г.С., ректор - председатель

Абдуллин И.Ш., проректор по НР, зам. председателя оргкомитета

Абдуллин И.А., проректор по ИОНП, зам. председателя оргкомитета

Дресвянников А.Ф., начальник НИО, зам. председателя оргкомитета

### Члены оргкомитета

Абуталипова Л.Н., профессор	Кирпичников А.П., профессор	Сопин В.Ф., профессор
Авилова В.В., профессор	Кондратьев В.В., профессор	Степин С.Н., профессор
Аляев В.А., профессор	Коршунова О.Н., профессор	Стоянов О.В., профессор
Амиров К.Ф., профессор	Косточко А.В., профессор	Сысоева М.А., профессор
Аминова Г.А., профессор	Кочнев А.М., профессор	Суляев Н.И., профессор
Базотов В.Я., профессор	Кузнецов А.М., профессор	Тузиков А.Р., профессор
Барабанов В.П., профессор	Курашов В.И., профессор	Хамматова В.В., профессор
Баранова Н.В., профессор	Клинов А.В., профессор	Харлампида Х.Э., профессор
Башкиров В.Н., профессор	Красина И.В., профессор	Хацринов А.И., профессор
Башкирцева Н.Ю., профессор	Лашков В.А., профессор	Хисамеев И.Г., профессор
Бухаров С.В., профессор	Макаров В.Г., профессор	Шайхиев И.Г., профессор
Валеева Н.Ш., профессор	Махоткин А.Ф., профессор	Шинкевич А.И., профессор
Вольфсон С.И., профессор	Махоткина Л.Ю., профессор	Цейтлин Р.С., профессор
Гайнуллин Р.Н., профессор	Мусин И.Н., профессор	Юшко С.В., профессор
Галяметдинов Ю.Г., профессор	Нефедьев Е.С., профессор	
Гараев И.Г., профессор	Николаев А.Н., профессор	
Гарипов Р.М., профессор	Нуриев Н.К., профессор	
Гильманов Р.З., профессор	Овсиенко Л.В., профессор	
Гумеров Ф.М., профессор	Поливанов М.А., профессор	
Дебердеев Р.Я., профессор	Поникаров С.И., профессор	
Зиятдинова Ю.Н., профессор	Решетник О.А., профессор	
Елизаров В.В., профессор	Рязапова Л.З., профессор	
Емельянов В.М., профессор	Салагаев А.Л., профессор	
Жихарев В.А., профессор	Сафин Р.Г., профессор	
Зенуков И.А., профессор	Сафин Р.Р., профессор	
Зинурова Р.И., профессор	Серазутдинов М.Н., профессор	
Иванов В.Г., профессор	Синяшин О.Г., профессор	
Кайдриков Р.А., профессор	Сироткин А.С., профессор	

# **ПРОГРАММА НАУЧНОЙ СЕССИИ**

## **ПЛЕНАРНОЕ ЗАСЕДАНИЕ**

03.02.2014 г. – Зал заседания Ученого Совета (корп. «А») 10.00

Приветственное слово – Дьяконов Г.С., ректор

## **ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ**

Система инновационного инженерного образования: методология и технологии реализации.

Проф. Кондратьев В.В.

Разработка и внедрение механизма снижения промышленных рисков и повышения живучести предприятий в процессе модернизации производственного потенциала нефтехимического комплекса Республики Татарстан.

Проф. Киселев С.В.

3-7 февраля секционные заседания в соответствии с программой

## ПЛЕНАРНОЕ ЗАСЕДАНИЕ

УДК 378

### СИСТЕМА ИННОВАЦИОННОГО ИНЖЕНЕРНОГО ОБРАЗОВАНИЯ: МЕТОДОЛОГИЯ И ТЕХНОЛОГИИ РЕАЛИЗАЦИИ

Дьяконов Г.С., Гурье Л.И., Кирсанов А.А., Кондратьев В.В., Нуриев Н.К.

Разработана метрико-ориентированная методология проектирования дидактических систем нового поколения, основанная на результатах системного анализа и исследовании операций деятельности инженера. Спроектирована реально-виртуальная среда опережающего обучения в технологическом университете. Реализованы технологии подготовки инженеров в метрическом компетентностном формате с построением многомерных шкал для оценки их деятельностного потенциала и академической конкурентоспособности. Разработана система педагогических компетенций научно-педагогических кадров (НПК).

УДК 378

### РАЗРАБОТКА И ВНЕДРЕНИЕ МЕХАНИЗМА СНИЖЕНИЯ ПРОМЫШЛЕННЫХ РИСКОВ И ПОВЫШЕНИЯ ЖИВУЧЕСТИ ПРЕДПРИЯТИЙ В ПРОЦЕССЕ МОДЕРНИЗАЦИИ ПРОИЗВОДСТВЕННОГО ПОТЕНЦИАЛА НЕФТЕХИМИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН

Хабибуллин Р.З., Башкирцева Н.Ю., Гилязутдинова И.В., Киселев С.В.,  
Краснов М.А., Поникаров С.И., Поникарова А.С., Суржко Н.В.

С широких системных позиций исследуются проблемы управления промышленными рисками и повышения живучести предприятий в процессе инновационной модернизации производственного потенциала предприятий нефтехимического комплекса Республики Татарстан. Глубина исследования составляет 10 лет (с 2003 по 2011 гг). Результаты данного исследования были внедрены на предприятиях ОАО «Нижнекамскнефтехим», ОАО «Нефис Косметикс», ОАО «ТАНЕКО», ОАО «Татнефть», а так же ОАО «Казаньоргсинтез», что позволило повысить эффективность инновационной деятельности по обновлению производственного потенциала и усилить безопасность функционирования этих объектов.

## **СЕКЦИЯ 1.1. МЕХАНИЗМ, ТЕРМОДИНАМИКА И КИНЕТИКА ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В ГОМО - И ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМАХ И МЕТОДЫ ИХ ИССЛЕДОВАНИЯ**

Руководители: Барабанов В.П.,  
Галяметдинов Ю.Г.,  
Кузнецов А.М.,  
Секретарь: Саутина Н.В.,

**4 февраля**

**A-310**

**10:00**

УДК 535.37

**НАНОКОМПОЗИТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ГИБРИДНЫХ КВАНТОВЫХ  
ТОЧЕК CDSE/CDS**

Шамилов Р.Р., Степанов А.Л., Галяметдинов Ю.Г.

Получены полимерные композитные материалы, содержащие гибридные квантовые точки CdSe/CdS и изучены их оптические свойства. Изучена зависимость люминесценции квантовых точек в присутствии наночастиц серебра имплантированные в кварцевую подложку.

УДК 544.022.53

**ОПТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ КОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНОК**

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

Получены два вида многокомпонентных систем:  $\text{SiO}_2/\text{Ln}(\text{III})(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{SiO}_2/\text{C}_{12}\text{EO}_n/\text{H}_2\text{O}$  ( где  $\text{SiO}_2$  – на основе VMOS и PhTEOS;  $\text{Ln}(\text{III})=\text{Er}, \text{Dy}, \text{Nd}, \text{Eu}$ ;  $n=4,9,10$ ). Комплексообразование полученных систем изучено методом ик-спектроскопии.

УДК 544.252.4+532.64:541.64

**ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ В ЭМУЛЬСИОННЫХ СИСТЕМАХ**

**ВОДА / МОНОДОДЕЦИЛОВЫЙ ЭФИР**

**ТЕТРАЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ / ВАЗЕЛИНОВОЕ МАСЛО**

Ситдикова К.И., Саутина Н.В., Галяметдинов Ю.Г.

Получена фазовая диаграмма трехкомпонентной смеси вода / монододециловый эфир тетраэтиленгликоля / вазелиновое масло при 25°C. Определены границы существующих фаз и исследован характер равновесия между жидким кристаллом, эмульсией и микроэмульсией. Предложен подход для

определения областей фазовой диаграммы - нахождение эмульсионных и жидкокристаллических областей с применением метода краевого угла смачивания.

УДК 544.022.522

**СИНТЕЗ И ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ГИБРИДОВ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК CDSE/CDS ТИПА "ЯДРО/ОБОЛОЧКА"**

Гарайшина Р.Р., Шамилов Р.Р., Галяметдинов Ю.Г.

Получены дисперсии квантовых точек CdSe/CdS с люминесценцией от синей до красной области в водно-этанольной и водно-глицериновой средах при температурах от 60 до 180°C. Полученные системы охарактеризованы методами спектрофлуориметрии и электронной спектроскопии.

УДК 544.164

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОНО- И БИЯДЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЛАНТАНОИДОВ(III)**

Романова К.А., Галяметдинов Ю.Г.

Установлены корреляции между положением возбужденных уровней и квантовым выходом люминесценции комплексов лантаноидов(III). Показано, что лимитирующей стадией при фотовозбуждении комплексов может быть как перенос энергии с триплетного уровня лиганда на ион, так и синглет-триплетная конверсия в возбужденном состоянии.

УДК 544.77.022.532

**СОЛЮБИЛИЗАЦИЯ БИОАКТИВНЫХ СУБСТАНЦИЙ В НАНООРГАНИЗОВАННЫХ СРЕДАХ**

Мясникова Ю.С., Селиванова Н.М., Галяметдинов Ю.Г.

Исследована солюбилизация низкомолекулярных веществ в мицеллах двух неионогенных ПАВ на основе амфифильного триблок-сополимера Pluronic P123 и монододецилового эфира декаэтиленгликоля C<sub>12</sub>EO<sub>10</sub>. Степень солюбилизации БАС в мицеллах ПАВ определяли методом флуоресцентной спектроскопии.

УДК 544.015.4

**ФАЗОВОЕ ПОВЕДЕНИЕ И СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА ЛИОТРОПНЫХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ В ПРИСУТСТВИИ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СУБСТАНЦИЙ**

Макарова Д.В., Селиванова Н.М., Нуритдинова Р.А.,  
Губайдуллин А.Т., Галяметдинов Ю.Г.

Методом поляризационной микроскопии исследовано фазовое поведение и проанализировано влияние состава жидкокристаллических систем на основе

монододецилового эфира декаэтиленгликоля в присутствии витамина Е, а также оксигетилированного холестерина. На основе данных малоуглового рентгеновского рассеяния определены структурные свойства исследуемых систем.

УДК 541.18.042.2:678.745

**ИНТЕНСИФИКАЦИЯ ПРОЦЕССОВ ФЛОКУЛЯЦИИ ПОЛИМЕР-  
НЕОРГАНИЧЕСКИМИ ГИБРИДАМИ**

Гришина К.С., Проскурина В.Е., Галяметдинов Ю.Г.

Проанализировано влияние концентрации катионного сополимера акриламида и гибридных образцов на его основе и коллоидных зольей  $Mg(OH)_2$  и  $Al(OH)_3$  на их флокулирующие показатели. Контролируемое сочетание свойств органического и неорганического компонентов в гибридных системах влияет на седиментационную устойчивость суспензии  $Mg(OH)_2$ . В определенной области концентраций полимер-неорганических гибридов отмечена тенденция образования в дисперсной системе суперфлокул.

УДК 541.18.042.2:678.745

**СЕДИМЕНТАЦИЯ СУСПЕНЗИИ ДИОКСИДА ТИТАНА В ПРИСУТСТВИИ  
ИОНОГЕННЫХ СОПОЛИМЕРОВ АКРИЛАМИДА И ПОЛИМЕР-  
НЕОРГАНИЧЕСКИХ ГИБРИДОВ НА ИХ ОСНОВЕ**

Фаизова Р.Р., Проскурина В.Е., Галяметдинов Ю.Г.

Изучены кинетические аспекты седиментации модельной дисперсной системы – суспензии  $TiO_2$  (анатаз) в режиме свободного (нестесненного) оседания в присутствии полимерных флокулянтов. Проанализировано влияние природы сополимеров акриламида и коллоидного золя в гибридных системах, размер частиц и их флокулирующие свойства на агрегацию частиц  $TiO_2$ .

УДК 541.18.042.2:678.745

**ФЛОКУЛЯЦИЯ И УПЛОТНЕНИЕ ОСАДКОВ  
ПОЛИМЕР-НЕОРГАНИЧЕСКИМИ ГИБРИДАМИ В КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ  
СУСПЕНЗИЯХ  $TiO_2$**

Шаброва Е.С., Проскурина В.Е., Галяметдинов Ю.Г.

Изучена кинетика процессов стесненного оседания модельной дисперсной системы – суспензии диоксида титана анатазной модификации при введении высокомолекулярного катионного сополимера акриламида и полимер-

неорганических гибридов. Проанализировано влияние концентрации полимерных добавок на их флокулирующие активности. Установлена корреляция между параметрами на стадиях флокуляции и уплотнения осадков.

УДК 544.252.4

СВЕТОПРЕОБРАЗУЮЩИЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПММА  
И МЕЗОГЕННОГО КОМПЛЕКСА ЕВРОПИЯ

Урюпина Ю.А., Крупин А.С., Молостова Е.Ю., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.

На основе полимерной матрицы ПММА допированной мезогенным комплексом Eu (III) были получены пленки, трансформирующие УФ-излучение в видимое красное; с высокой степенью светопропускания (70-80%) в красной и ИК-области. Полученные пленки могут быть использованы в качестве светотрансформирующих материалов, например в сельском хозяйстве при производстве парников.

УДК 544.722.22

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЯВЛЕНИЙ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА  
ПАВ/ВОДА/ВАЗЕЛИНОВОЕ МАСЛО

Паничкина А.В., Саутина Н.В., Богданова С.А., Галяметдинов Ю.Г.

Построены изотермы межфазного натяжения на границе раздела фаз ПАВ/вода/вазелиновое масло. В качестве ПАВ применялись оксиэтилированный изононилфенол, монододециловый эфир тетраэтиленгликоля, а также ПАВ, синтезированные на основе природных компонентов – яблочный ПАВ (sodium cocoyl apple amino acids) и овсяный ПАВ (sodium lauroyl oat aminoacids). Рассчитаны термодинамические параметры адсорбции этих ПАВ на межфазной границе вода-масло, работа адгезии и коэффициент растекания, найдены значения ККМ ПАВ и их поверхностной активности.

УДК 628.16.09:546.17

УДАЛЕНИЕ НИТРИТ - И НИТРАТ-ИОНОВ В ГЕТЕРОГЕННЫХ  
СИСТЕМАХ

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

Поверхностные воды, подверженные интенсивному загрязнению отходами сельского хозяйства, промышленности, энергетики, городскими стоками и т.п., представляют собой сложную гетерогенную систему. Избыток нитрит- и нитрат-

ионов в воде может привести к гибели водной фауны и отрицательно влияет на организм человека. Проведен сравнительный анализ различных способов удаления нитритов и нитратов из воды.

УДК 606.622.76

**РАЗРАБОТКА КОЛЛОИДНО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ СГУЩЕНИЯ И КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ МИКРООРГАНИЗМОВ ИЗ ПИТАТЕЛЬНОЙ СРЕДЫ**

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

Изучено влияние  $\xi$  – потенциала на устойчивость биосуспензий. Показано, что одним из условий агрегации клеток является снижение  $\xi$  - потенциала. Показано, что наиболее эффективная агрегация дрожжевых клеток наблюдается при взаимодействии с полимерами катионного и амфотерного характера. Проведено исследование по использованию полиэлектролитных флокулянтов фирмы BASF на интенсификацию процесса выделения дрожжевой биомассы.

**5 февраля**

**А-310**

**10.00**

УДК 535.37

**МЕЗОГЕННЫЕ КОМПЛЕКСЫ ЛАНТАНОИДОВ (III) В КАЧЕСТВЕ ЭМИТТЕРОВ ОРГАНИЧЕСКИХ СВЕТОДИОДОВ**

Крупин А.С., Джабаров В.И., Цымрова В., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.

Показана возможность создания органических светодиодов, в качестве эмиттеров которых используются композиты мезогенного комплекса европия в полимерной матрице. Преимуществом данных эмиттеров является высокая эффективность люминесценции, монохроматичность излучения и возможность получения прозрачных светодиодов.

УДК 544.774.4

**КОЛЛОИДНО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР С ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫМИ ВЕЩЕСТВАМИ**

Гатауллин А.Р., Кузнецов К.В., Попова Д.Ю., Богданова С.А., Галяметдинов Ю.Г.

Методами абсорбционной спектроскопии, тензиометрии, динамического и электрофоретического рассеяния света исследованы процессы адсорбции, дезагрегации и стабилизации дисперсий углеродных нанотрубок и фуллеренов  $C_{60}$  в водных растворах неионных поверхностно-активных веществ.

УДК 547.299:665.58

СВОЙСТВА ПОЛИМЕРНЫХ КОСМЕТИЧЕСКИХ ГИДРОГЕЛЕЙ  
В ПРИСУТСТВИИ ПАВ

Шигабиева Ю.А., Богданова С.А., Данилова К.В.,  
Галяметдинов Ю.Г.

Исследовано влияние ПАВ на реологическое поведение полимерных косметических гелей, в которых в качестве добавок применяются ксимедон и экстракт зеленого чая. Выявлена корреляция между структурно-механическими свойствами систем, природой и концентрацией ПАВ и биологической доступностью полезных добавок.

УДК 541.49:532.73

ВЛИЯНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МАССЫ ХИТОЗАНА НА СВЯЗЫВАНИЕ  
ДОДЕЦИЛСУЛЬФАТА НАТРИЯ В ВОДНО-СПИРТОВЫХ СРЕДАХ

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

Изучено влияние молекулярной массы полиэлектролита на взаимодействие хитозана с додецилсульфатом натрия в водно-этанольных средах. Определены параметры связывания образцов хитозана с ПАВ, размеры и молекулярно-массовые характеристики комплексов. С увеличением молекулярной массы хитозана устойчивость полиэлектролит-ПАВ и кооперативность связывания возрастают.

УДК 544.77.022.532

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ СПИРТА НА МИЦЕЛЛООБРАЗОВАНИЕ АНИОННОГО  
ПАВ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ МЕТОДОМ ФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ  
СПЕКТРОСКОПИИ

Фалалеева Т.С., Шилова С.В., Третьякова А.Я., Барабанов В.П.

Изучено влияние добавок короткоцепочечных спиртов на мицеллообразование додецилсульфата натрия в водных растворах. Определены критические концентрации мицеллообразования, рассчитаны количественные параметры мицелл и диэлектрическая проницаемость микроокружения флуоресцентного зонда.

УДК 544.77.022

рН-ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЙ СЕНСОР НА ОСНОВЕ  
ДИМЕТИЛАМИНОМЕТИЛИРОВАННОГО РЕЗОРЦИНАРЕНА

Бекмухаметова А.М., Гайнанова Г.А., Зиганшина А.Ю., Захарова Л.Я.

Показано тушение флуоресценции пирена в индивидуальном растворе диметиламинометилованного резорцинарена. Исследовано влияние температуры и

изменения рН на спектры флуоресценции. Процесс тушения флуоресценции является для исследуемого макроцикла рН-зависимым, что позволяет рассматривать его в качестве перспективного рН-флуоресцентного сенсора.

УДК 543.422:3

ПОЛИМЕРНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ НА ОСНОВЕ ТЕТРАВИОЛОГЕНКАВИТАНДА

Султанова Э.Д., Краснова Е.Г., Мухитова Р.К., Зиганшина А.Ю., Захарова Л.Я.,

Коновалов А.И.

Методом эмульсионной полимеризации получены полимерные нанокапсулы, декорированные по поверхности виологеновыми фрагментами. Определено их строение, размер, молекулярная масса. Показана возможность термоуправляемого инкапсулирования красителя в полость наночастиц.

УДК 541.182.43

ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ ПАВ С МОРФОЛИНИЕВЫМ ФРАГМЕНТОМ В ГОЛОВНОЙ ГРУППЕ

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

Комплексом физико-химических методов количественно охарактеризованы агрегационные свойства и каталитическая активность супрамолекулярных систем на основе моно- и дикатионных ПАВ с морфолиниевым фрагментом в головной группе. Показано их высокое антикоррозионное действие и противомикробная активность.

УДК 544.77.022.532

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ ГЕМИНАЛЬНЫХ ГИДРОКСИЭТИЛЬНЫХ ПАВ: КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ С ДНК И ВСТРАИВАНИЕ В ЛИПИДНЫЙ БИСЛОЙ

Васильева Э.А., Лукашенко С.С., Ибрагимова А.Р.,

Габдрахманов Д.Р., Захарова Л.Я.

Изучены комплексообразующие свойства гидроксиэтильных геминальных ПАВ в отношении ДНК. Показано, что способность амфифилов интегрироваться в липидный бислой и эффективность трансфекции ДНК в значительной степени зависят от длины спейсерного фрагмента ПАВ.

УДК 621.315.615

КОНТРОЛЬ КАЧЕСТВА ЖИДКОСТЕЙ РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ  
НА ОСНОВЕ ДЕТЕРМИНИРОВАННОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ  
РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ РАВНОВЕСНЫХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ  
Колушев Д.Н., Барабанов В.П., Хусаинов М.А., Торсуев Д.М.

С помощью детерминированной математической модели рассчитаны термодинамические параметры равновесных физико-химических свойств орто-, мета-, пара-ксилола, толуола и трансформаторных масел. Установление границ изменения параметров термодинамических и структурных свойств позволяет оценивать степень деградации качества производимых и эксплуатируемых жидкостей.

УДК 544.18: 544.43: 547.414

МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА И МЕХАНИЗМЫ РЕАКЦИЙ ГАЗОФАЗНОГО  
РАСПАДА ИОН-РАДИКАЛОВ НЕКОТОРЫХ С-, N-, O-НИТРОСОЕДИНЕНИЙ  
Нгуен Ван Бо, Храпковский Г.М.

С использованием современных квантово-химических методов определены оптимальные геометрические параметры катион-радикалов и анион-радикалов простейших нитроалканов, нитроэфиров, N-нитроаминов. Проанализированы изменения геометрической и электронной структуры изученных соединений и нейтральных молекул. Изучен ряд альтернативных механизмов газофазного распада ион-радикалов.

УДК 544.18:544.43:544.431.2:544.45:547.418

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ  
ТЕРМИЧЕСКОГО РАСПАДА ОРТО-ЗАМЕЩЕННЫХ НИТРОТОЛУОЛОВ  
Николаева Е.В., Чачков Д.В., Шамов А.Г., Храпковский Г.М.

По данным метода B3LYP/6-31+G(2df,p) наименьший энергетический барьер имеет механизм первичного акта термического распада *o*-замещенных нитротолуолов, связанный с изомеризацией их в *аци*-формы. Однако лимитирующими стадиями этого пути разложения нитротолуолов являются вторичные процессы. Все расставляет на свои места альтернативный механизм этой стадии изомеризации – вращение группы HONO вокруг двойной связи C=N в *аци*-формах нитротолуолов.

УДК 544.227:546.92:546.94

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ НАНОКЛАСТЕРА Pt<sub>2</sub>Os<sub>3</sub>

Гарифзянова Г.Г., Храпковский Г.М.

Кластеры, в которых атомы платины соединены с атомами осмия, представляют интерес в качестве наноматериалов в катализе. Оптимизирован биметаллический нанокластер Pt<sub>2</sub>Os<sub>3</sub> с использованием DFT методов с различными базисными наборами. Расчетные значения длин связей Os-Os меньше, чем значения длин связей Pt-Os.

УДК 544.18: 544.43

АБСОЛЮТНЫЕ ЭНТРОПИИ И ЭНТРОПИИ РЕАКЦИИ ГАЗОФАЗНОГО  
РАСПАДА С-НИТРОСОЕДИНЕНИЙ

Храпковский Г.М., Егоров Д.Л., Шамов А.Г., Чачков Д.В.

С использованием метода B3LYP/6-31G(d,p) рассчитаны энтропии реакции большого числа нитроалканов, нитроалкенов и нитроаренов, а также соответствующих радикалов, образующихся при газофазном мономолекулярном разрыве связи C-NO<sub>2</sub>. По результатам этих расчетов вычислены энтропии данной реакции. Проанализированы наблюдаемые закономерности.

УДК 544.18: 544.43

ЭНЕРГИИ ДИССОЦИАЦИИ СВЯЗИ C-NO<sub>2</sub> АРОМАТИЧЕСКИХ  
НИТРОСОЕДИНЕНИЙ С ВОДОРОДСОДЕРЖАЩИМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ

Храпковский Г.М., Егоров Д.Л., Шамов А.Г.

Рассчитаны энтальпии образования изомерных большого ряда соединений, содержащих разное количество нитро-, amino- и метильных групп, а также соответствующих радикалов, образующихся при газофазном разрыве связи C-NO<sub>2</sub>. Вычислены энергии диссоциации данной связи. Всего изучено более 60 соединений. Проанализированы наблюдаемые закономерности.

УДК 669.295: 539.219.1

ВЛИЯНИЕ МОЩНОЙ ИМПУЛЬСНОЙ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ  
НА АМОРФНЫЙ СПЛАВ Fe<sub>77</sub>Si<sub>13</sub>Cu<sub>1</sub>Nb<sub>3</sub>B<sub>6</sub>: МЁССБАУЭРОВСКИЕ  
И РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Назипов Р.А., Выжимов Ю.М., Пятаев А.В., Баталов Р.И.,  
Баязитов Р.М., Игнатъев А.А.

При ионной имплантации наносекундной длительности в тонкую ленту из аморфного сплава Fe<sub>77</sub>Si<sub>13</sub>Cu<sub>1</sub>Nb<sub>3</sub>B<sub>6</sub> обнаружено изменение направления спонтанной

намагниченности. Для исключения влияния парамагнитной составляющей в мёссбауэровском спектре на форму  $P(H)$  предлагается раздельное восстановление нескольких  $P_n(H)$  в разных диапазонах сверхтонкого поля. Обсуждается природа выявленного эффекта.

УДК 541.49:541.4

СРАВНЕНИЕ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ  
ПРОГРАММНЫХ ПАКЕТОВ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ GPU

Маслий А.Н., Мадиров Э.И.

На примере полной оптимизации геометрии макроциклического кавитанда кукурбит[6]урилы в рамках теории функционала плотности проведено сравнение производительности программного пакета TeraChem, полностью основанного на технологии CUDA, с классическими широко используемыми квантово-химическими программными пакетами.

УДК 541.49:541.4

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДАМИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ РОЛИ ВАН-  
ДЕР-ВААЛЬСОВЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В РАСЧЕТАХ АКТИВАЦИОННЫХ  
ПАРАМЕТРОВ РЕАКЦИИ ДИЛЬСА-АЛЬДЕРА МЕЖДУ ЦИКЛОПЕНТАДИЕНОМ  
И ФУЛЛЕРЕНОМ  $C_{60}$

Маслий А.Н., Кузнецов А.М.

С помощью программных пакетов Priroda, Orca и Gaussian с использованием методов функционала плотности PBE и  $\omega$ B97X-D с атомными базисами SVP и TZVP рассчитаны активационные параметры реакции Дильса-Альдера циклопентадиена и фуллерена  $C_{60}$  без учета и с учетом ван-дер-ваальсовых взаимодействий. Наилучшее согласие теоретических и экспериментальных энтальпий активации прямой и обратной реакций достигнуто на расчетном уровне Orca/PBE/SVP в комбинации с моделью Гримме VDW06 для ван-дер-ваальсовых взаимодействий.

УДК 544.182.34:544.313.2

СУПЕРМОЛЕКУЛЯРНАЯ МОДЕЛЬ ГИДРАТАЦИИ КАТИОНА Pb(II)

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

Методами функционала плотности B3LYP,  $\omega$ B97X и  $\omega$ B97X-D с использованием электронно-остовных псевдопотенциалов для Pb с атомным базисом aug-cc-pvDZ-PP и базисами 6-311++G(d,p) и aug-cc-pvDZ для O и H рассчитаны энтальпии и свободные энергии Гиббса гидратации иона Pb(II). Наилучшее согласие экспериментальных и теоретических параметров гидратации достигается на уровне  $\omega$ B97X/6-311++G(d,p) с методикой UA0 построения диэлектрической полости растворителя в модели PCM.

УДК 544.182.34:544.313.2

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ КОНСТАНТЫ ПОКАЗАТЕЛЯ  
КИСЛОТНОСТИ  $pK_a$  ИОНА Pb(II)

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

Методом функционала плотности версии  $\omega$ B97X с использованием электронно-остовных псевдопотенциалов для Pb с атомным базисом aug-cc-pvDZ-PP и базисом 6-311++G(d,p) для O и H с учетом растворителя (водный раствор) в модели PCM (UA0) выполнены модельные расчеты показателя кислотности  $pK_a$  иона Pb(II). Полученные результаты находятся в прекрасном согласии с экспериментальными данными.

УДК 541.49:541.64

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОГО  
ВЛИЯНИЯ КАРБОНАТ-ИОНА НА ОКИСЛЕНИЕ АРСЕНИТА ГИДРОКСИЛ-  
РАДИКАЛАМИ

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

Исследован механизм окисления арсенита гидроксил-радикалами, рассчитаны структурные и термодинамические характеристики исходных частиц, переходных состояний, а также пред- и постреакционных комплексов, которые формируются в этом процессе. Оценены активационные параметры процесса и показана каталитическая роль карбонат-ионов в окислении арсенита.

УДК 541.49:541.64

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ СТРУКТУРЫ И  
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ФОРМИРОВАНИЯ  
АКВАКОМПЛЕКСОВ Cu(II) В ПОЛОСТИ КУКУРБИТ[n]УРИЛОВ (n=6,8)

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

В рамках теории функционала плотности рассчитаны термодинамические и структурные характеристики аквакомплекса Cu(II) в полости кукурбит[n]урилов (n=6,8). Показано, что ион Cu(II) внутри СВ[6] имеет плоскочувственное окружение из четырех молекул H<sub>2</sub>O, а две другие молекулы связывают комплекс в порталными атомами кислорода за счет водородных связей. В случае СВ[8] аквакомплекс имеет форму тетрагонально искаженного октаэдра, а в его связывании с порталами принимают участие четыре молекулы воды.

УДК 541.49:541.64

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ СТРУКТУРЫ И  
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ФОРМИРОВАНИЯ  
АММИНОКОМПЛЕКСОВ Cu(II) В ПОЛОСТИ КУКУРБИТ[n]УРИЛОВ (n=6,8)

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

В рамках теории функционала плотности рассчитаны термодинамические и структурные характеристики соединений включения на основе амминокомплекса меди(II) и кукурбит[n]урилов (n=6,8). Детально исследована структура внутренней сферы центрального иона и ее стабилизация молекулами воды, связанными водородными связями с кислородными порталными атомами кавитандов.

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  $\omega$ -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 при расчете свободной энергии Гиббса гидратации.

УДК 541.64

**ОЦЕНКА КИНЕТИКИ ФОРМИРОВАНИЯ СВЕРХРАЗВЕТВЛЕННЫХ  
ПОЛИМЕРОВ ПРИ КОНДЕНСАЦИОННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ С ЭФФЕКТОМ  
ЗАМЕЩЕНИЯ**

Дебердеев Т.Р., Иржак В.И.

Рассмотрены кинетические закономерности формирования сверхразветвленных полимеров путем конденсационной полимеризации мономеров типа АВ<sub>2</sub> при учете эффекта замещения. Показано, что среднечисленная степень полимеризации  $P_n$  растет пропорционально глубине превращения и не зависит от соотношения кинетических констант. Эффект замещения сказывается на степени разветвленности и ММР, которое значительно уже, чем при обычном процессе поликонденсации: параметр ветвления  $DV$  и индекс полидисперсности  $P_w/P_n$  тем меньше, чем меньше отношение  $k_2/k_1$ , констант второго и первого присоединения

**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

**СИСТЕМА АВТОМАТИЧЕСКОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ГАЛЬВАНИЧЕСКИХ  
ПРОЦЕССОВ. РАСЧЕТ РАСХОДА ВОДЫ ГАЛЬВАНИЧЕСКОЙ ЛИНИИ  
И КОЛИЧЕСТВА ВРЕДНЫХ ВЕЩЕСТВ В СТОЧНЫХ ВОДАХ**

Мавлетов М.Н., Кайдриков Р.А.

Разработана компьютерная программа для расчета расходу воды для гальванической линии и вредных примесей в сточных водах. Программа применяется для оптимизации работы гальванической линии, путем выявления причин перерасхода воды и повышенного поступления вредных веществ в сточные воды. Оптимизация работы гальванической линии позволит и уменьшит экологическую опасность гальванического процесса.

УДК 620.193

СИСТЕМА АВТОМАТИЧЕСКОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ГАЛЬВАНИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ. РАСЧЕТ ЭКОНОМИЧЕСКОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ ГАЛЬВАНИЧЕСКОЙ ЛИНИИ И ЗАТРАТ НА ВЕНТИЛЯЦИОННОЕ ОБОРУДОВАНИЕ.

Яруллин А.З., Кайдриков Р.А.

Разработана компьютерная программа для оценки экономической эффективности гальванического оборудования, данная программа позволяет подобрать оборудование с необходимой потребителю производительностью, учитывая при этом особенности технологических подводов воды, пара, электроэнергии и вентиляции. Программа применяется при проектировании и оптимизации гальванических линий.

УДК 620.193

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ПРОЦЕССАХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО РАСТВОРЕНИЯ МЕТАЛЛОВ

Плешкова Е.В., Журавлев Б.Л.

Использование теории нелинейных хаотических систем актуально для многих областей науки. Модели, описывающие хаотическое поведение в ряде случаев являются подходящим инструментом описания нерегулярных колебаний и неопределенности, чем стохастические, вероятностные модели. В детерминированной модели будущую траекторию можно предсказать на сколь угодно большое время вперед, зная текущее состояние системы, а в стохастической модели точный прогноз, вообще говоря, невозможен в хаотической модели, возможен прогноз на ограниченное время, определяемое ошибкой прогноза.

УДК 620.193

ИНЖЕНЕРНЫЕ РАСЧЕТЫ СИСТЕМ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ ЗАЩИТЫ

Ахмадишин М.Р., Журавлев Б.Л.

Рассмотрены расчетные методы, дающие возможность объективной количественной оценки скорости коррозии существующих и проектируемых металлических сооружений. Проанализирована, созданная на базе расчетных методов, нормативно-техническая документация, используемая для решения практических коррозионных проблем. Разработан комплект заданий для самостоятельной работы студентов.

УДК 620.193

**ВЛИЯНИЕ СРОКА ЭКСПЛУАТАЦИИ СКВАЖИНЫ НА ПАРАМЕТРЫ  
РАСЧЕТНОЙ МОДЕЛИ КАТОДНОЙ ЗАЩИТЫ ОБСАДНЫХ КОЛОНН**

Долгих С.А., Галиев И.Н., Журавлев Б.Л.

Рассмотрена стандартизованная методика определения параметров катодной защиты обсадных колонн. Разработано программное обеспечение для реализации методики. Проведены расчеты параметров катодной защиты для двух обсадных колонн скважин НГДУ «Бавлынефть». Показана связь срока эксплуатации скважины с параметрами катодной защиты.

УДК 620.193

**ВОЗНИКНОВЕНИЕ И ПОДАВЛЕНИЕ ХАОСА  
В ПРОЦЕССАХ КОРРОЗИИ МЕТАЛЛОВ**

Галиев И.Н., Журавлев Б.Л., Виноградова С.С.

Рассмотрены колебательные и нелинейные явления в процессах растворения металлов и сплавов. Освоена методика спектрального, фрактального и мультифрактального анализа сигналов, математическая обработка стохастических сигналов и структур. Приведены методы управления хаотическими процессами. Представлены примеры использования подхода к коррозионным системам.

УДК 620.193

**ПРОТЕКТОРНАЯ ЗАЩИТА ТРУБОПРОВОДОВ И РЕЗЕРВУАРОВ**

Ахметшин Р.Р., Виноградова С.С.

Рассмотрены вопросы протекторной защиты трубопроводов и резервуаров. Изложено обоснование применения протекторной защиты вместо катодной защиты от внешнего источника тока. Предложены различные конструкции протекторов и схемы их размещения. Описан алгоритм и проведен расчет определения протяженности защитной зоны и срока службы протекторной установки.

УДК 620.193

**МЕТОДЫ УВЕЛИЧЕНИЯ ЗОНЫ ЗАЩИТЫ КАТОДНЫХ УСТАНОВОК**

Шайдуллин Е.В., Виноградова С.С.

Проведен обзор методов электрохимической защиты подземных металлических сооружений, параллельно уложенных трубопроводов; освоена методика расчета совместной катодной защиты существующих и проектируемых

газопроводов и водоводов, параллельно уложенных трубопроводов, разветвленных коммуникаций в жилых районах, перекачивающих станций и нефтебаз.

УДК 620.193

**ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКАЯ КОРРОЗИЯ И ЗАЩИТА ПОДЗЕМНЫХ  
ТРУБОПРОВОДОВ**

Сафин Р.Р., Виноградова С.С.

Проанализированы методы электрохимической защиты подземных трубопроводов, освоена методика расчета параметров электрохимической защиты подземных трубопроводов. Проведен расчет протекторной, катодной защит и анодного заземления для защиты магистрального нефтепровода диаметром 1020 мм, длиной 300 км, имеющего толщину стенки 10 мм.

УДК 620.193

**КОМПЛЕКСНАЯ ЗАЩИТА НЕФТЯНЫХ РЕЗЕРВУАРОВ**

Черкеев А.Г., Виноградова С.С.

Проведен обзор методов протекторной защиты нефтяных резервуаров, освоена методика расчета параметров протекторной защиты резервуаров с высоким уровнем водной фазы, защиты днища резервуара, проведен расчет параметров протекторной защиты нефтяных резервуаров.

УДК 620.193

**КАТОДНАЯ ЗАЩИТА ТРУБОПРОВОДОВ**

Родин С.Е., Виноградова С.С.

Проведен обзор методов катодной защиты нефтяных резервуаров, освоена методика расчета параметров катодной защиты резервуаров, проведен расчет параметров катодной защиты трубопроводов – расчет катодной защиты для трубопровода, расчет катодной защиты для параллельно уложенных трубопроводов, расчет совместной катодной защиты газопровод и водопроводов.

УДК 620.193

**ПРОТЕКТОРНАЯ ЗАЩИТА ЗАПОРНОЙ АРМАТУРЫ**

Насибуллин И.И., 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

**ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКАЯ ЗАЩИТА МАГИСТРАЛЬНЫХ ТРУБОПРОВОДОВ**

Зарипов А.С., Виноградова С.С.

Проведен обзор методов электрохимической защиты магистральных трубопроводов, освоена методика расчета электрохимической защиты магистральных трубопроводов - РД-91.020.00-КТН-234-10 Нормы проектирования электрохимической защиты магистральных трубопроводов и сооружений НПС. Проведен расчет параметров электрохимической защиты магистральных трубопроводов.

УДК 620.193

**ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКАЯ ЗАЩИТА МАГИСТРАЛЬНЫХ ГАЗОПРОВОДОВ**

Борисов М.А., Виноградова С.С.

Проведен обзор методов электрохимической защиты магистральных газопроводов, освоена методика расчета электрохимической защиты магистральных. Проведен расчет параметров электрохимической защиты участка газопровода.

УДК 620.193

**ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКАЯ ЗАЩИТА ОБСАДНЫХ КОЛОН НЕФТЯНЫХ  
СКВАЖИН**

Виссарионова Л.М., Виноградова С.С.

Рассмотрены проблемы коррозионной стойкости обсадных колонн, описываются схемы катодной защиты обсадных колонн нефтяных скважин от коррозии. Освоена методика расчетов электрохимических параметров системы катодной защиты обсадных колонн - РД 153-39.0-531-07 «Инструкция по катодной защите обсадных колонн скважин и выкидных линий (разводящих водоводов) от наружной коррозии». Показано, что на определенных глубинах наблюдаются скачкообразные изменения.

УДК 620.193

**ВЗАИМОСВЯЗЬ ПАРАМЕТРОВ СТОХАСТИЧЕСКОЙ  
МОДЕЛИ ПИТТИНГОВОЙ КОРРОЗИИ**

Тазиева Р.Ф., Виноградова С.С.

Динамику питтинговой коррозии описывают с использованием стохастических моделей, основанных на принципах, заложенных в модели Т. Шибата. В этой модели рассматриваются два одновременно протекающих процесса: «зарождение»

питтингов с частотой  $\lambda$  и «смерть» питтингов с частотой  $\mu$ . Введение коэффициента  $Q$  (доля пассивирующихся питтингов), связывающего между собой параметры  $\lambda$  и  $\mu$  позволило авторам объяснить сложную зависимость параметра модели  $\mu$  от потенциала поляризации.

УДК 620.193

**ДИНАМИКА ПИТТИНГОВОЙ КОРРОЗИИ ПАССИВИРУЮЩИХСЯ МЕТАЛЛОВ  
В РАСТВОРАХ С ОКИСЛИТЕЛЕМ**

Гафиятуллина Н.Р., Ахметова А.Н.

Проведен теоретический обзор о процессах питтингообразования. Проведена оценка влияния различных факторов на динамику питтинговой коррозии пассивирующихся металлов. Исследовано влияние концентрации окислителя гексацианоферрата калия на потенциал зарождения питтингов на поверхности хромоникелевой стали 12Х18Н10Т в хлоридных растворах.

УДК 620.193

**ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ПИТТИНГОВОЙ КОРРОЗИИ**

Абдрахманов Д.Д., Ахметова А.Н.

Рассмотрены виды коррозионных разрушений, виды питтинговой коррозии; механизм зарождения и развития питтингов; методы, применяемые в исследованиях питтинговой коррозии; анализ методов исследования питтинговой коррозии. Проведен обзор преимуществ и недостатков использования химических методов в исследованиях питтинговой коррозии.

УДК 620.193

**НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА ПРОЦЕССА ПИТТИНГООБРАЗОВАНИЯ**

Шакирова Д.Ш., Ахметова А.Н.

Изучены процессы питтинговой коррозии; рассмотрены основные закономерности развития питтинговой коррозии. Проведен обзор литературы отечественных и зарубежных авторов, посвященный нелинейной динамике процесса

питтингообразования. Показаны примеры использования теории детерминированного хаоса в исследованиях питтинговой коррозии.

УДК 620.193

ОПЕРЕЖАЮЩИЙ МОНИТОРИНГ ПАССИВНОГО СОСТОЯНИЯ  
ХРОМОНИКЕЛЕВЫХ СТАЛЕЙ

Ахметова А.Н., Журавлев Б.Л.

Проведен обзор литературных данных о процессах питтинговой коррозии и методах мониторинга пассивного состояния поверхности хромоникелевых сталей. Обоснован подход к опережающему мониторингу пассивного состояния поверхности металлов. Разработан критерий оценки потенциальной коррозионной опасности.

УДК 620.193

МОДИФИКАЦИЯ ПОВЕРХНОСТИ СТАЛИ 12Х18Н10Т В УСЛОВИЯХ  
ГАЛЬВАНОСТАТИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ

Фатхрахманова М.М., Исхакова И.О.

Рассмотрены методы электрохимической модификации поверхности, обеспечивающие повышение стойкости к питтинговой коррозии. Проведен обзор литературных данных о процессах питтинговой коррозии и методах модификации поверхности хромоникелевых сталей. Изучено электрохимическое поведение стали 12Х18Н10Т в условиях гальваностатической поляризации в хлоридных растворах. Показано влияние модификации поверхности на значения потенциала образования питтингов.

УДК 620.193

РАСЧЕТ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ТОКА ЗАЩИТЫ ПО ГЛУБИНЕ  
ОБСАДНОЙ КОЛОННЫ НЕФТЯНОЙ СКВАЖИНЫ

Зарипов А.Р., Исхакова И.О.

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». Показано наличие анодных зон на поверхности эксплуатационной колонны.

УДК 544.6.018

### ТОК ОБМЕНА В УСЛОВИЯХ ИМПУЛЬСНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ

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

Высказано мнение о том, что плотность тока обмена ад-атомов с его ионами в растворе имеет наибольшее значение. Исходя из современных представлений, нестационарность процессов нуклеации, приводит к накоплению ад-атомов осаждаемого металла на поверхности электрода.

УДК 544.6.018

### КОЭФИЦИЕНТ ПЕРЕНОСА В УСЛОВИЯХ ИМПУЛЬСНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ

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

Проведен анализ коэффициентов переноса полученных циклическим потенциостатическим и циклическим гальваностатическим и стационарным методами. Рассмотрены реакции на простых окислительно-восстановительных электродах и при восстановлении комплексов металлов. При переходе от стационарного к импульсным режимам поляризации наблюдается уменьшение коэффициента переноса.

УДК 541.13

### ЭКОЛОГИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ ГАЛЬВАНОТЕХНИКИ И ПУТИ ИХ РЕШЕНИЯ

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

Ориентация экологических мероприятий направлена на разработку новых методов и схем очистки стоков, бесперспективна и приводит к многочисленным негативным последствиям, в частности, росту водопотребления. В качестве первоочередных задач, является снижение экологической опасности технологических операций, утилизация отработанных отходов, подготовка специалистов с соответствующим мышлением.

УДК 541.13

### ОБЩИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ АНОДНОГО ФОРМИРОВАНИЯ И КАТОДНОГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ КОМПЛЕКСОВ МЕТАЛЛОВ

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

Катодный процесс выделения металлов из водных растворов их соединений представляет собой, в конечном счёте, ряд превращений, находящихся в объёме

электролита термодинамически устойчивых комплексов этих металлов в атомы металлической фазы на электроде. Анодных процесс на нерастворимом электроде аналогичен по стадийности катодному процессу, а на растворимом электроде представляет ряд последовательных стадий формирования комплексных соединений.

УДК 541.138

ВЛИЯНИЕ ТИОСУЛЬФАТ-ИОНОВ НА ЭЛЕКТРОВОССТАНОВЛЕНИЕ  
ЭТИЛЕНДИАМИНТЕТРААЦЕТАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ ВИСМУТА (III)

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

Методом вольтамперометрии исследована кинетика катодного восстановления этилендиаминтетраацетатных комплексов висмута в присутствие тиосульфат-ионов. Установлено, что тиосульфат-ионы ускоряют электровосстановление этилендиаминтетраацетатных комплексов висмута. При концентрации лиганда 0,005 моль/л ускорение электродного процесса связано с поверхностным комплексообразованием, а при концентрации лиганда  $> 0,01$  моль/л – с образованием в объеме раствора комплексов с разнородными лигандами  $[\text{BiEdtaS}_2\text{O}_3]^{3-}$ .

УДК 541.13: 621.35

ОДНОФАЗНЫЙ ИОННЫЙ НАГРЕВАТЕЛЬ ДЛЯ НЕФТЕДОБЫВАЮЩИХ  
СКВАЖИН

Ившин Я.В., Афанасьева А.А.

Исследовано влияние состава электролита на динамику нагрева однофазного ионного нагревателя. Разработаны рекомендации по выбору состава и объема электролита в зависимости от конструкции нагревателя и геологической структуры нефтяного пласта. Показано, что преимуществом однофазного ионного нагревателя является простота и надежность конструкции.

УДК 620.193.013

ВЗАИМНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ КАТОДНЫХ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ КРИВЫХ  
ПРИ РАЗЛИЧНОЙ СКОРОСТИ РАЗВЕРТКИ ПОТЕНЦИАЛА

Ившин Я.В.

Рассмотрена процедура взаимного преобразования потенциодинамических поляризационных катодных кривых, снятых при различной скорости развертки

потенциала. Показана возможность их использования для определения скорости процесса контактного обмена.

УДК 621.357

ГАЛЬВАНИЧЕСКОЕ ПОКРЫТИЕ СПИЦ ДЛЯ  
КОМПРЕССИОННО - ДИСТРАКЦИОННОГО ОСТЕОСИНТЕЗА

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

Разработана технология процесса нанесения гальванического никелевого покрытия, содержащего нано частицы алмаза, на острие стальной спицы для компрессионно-дистракционного остеосинтеза. Показано, что это обеспечивает улучшение условий прохождения спицы через кость.

УДК 620.193.013

ПРОЦЕСС ПОЛУЧЕНИЯ ЖЕЛЕЗНЫХ ОСАДКОВ  
МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОГО ЭЛЕКТРОНАТИРАНИЯ

Ившин Я.В., Кайдриков Р.А., Вафиева Г.Д.

Разработан состав электролита и определены параметры процесса нанесения железных осадков с целью ремонта стальных изделий. Показано, что большое влияние на стабильность электролита и качество покрытий оказывает процесс окисления ионов железа (II) в железо (III) кислородом воздуха.

УДК 541.13: 621.35

ТРЕХФАЗНЫЙ ИОННЫЙ НАГРЕВАТЕЛЬ  
ДЛЯ НЕФТЕДОБЫВАЮЩИХ СКВАЖИН

Ившин Я.В., Афанасьева А.А.

Исследовано влияние состава и объема электролита на динамику нагрева трехфазного ионного нагревателя. Установлено, что в случае отказа в работе одной или двух фаз нагреватель продолжает работать, но только с меньшей мощностью. Показано, что преимуществом трехфазного ионного нагревателя перед однофазным является его большая мощность при относительно меньшей массе сетевого кабеля.

УДК 620.193.013:544.65

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АНИОННОГО СОСТАВА КИСЛЫХ  
ЭЛЕКТРОЛИТОВ НА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ  
АЛЮМИНИЯ

Григорьева И.О., Зифиров А.С.

Исследованы электрохимические процессы на чистом алюминии (99,5%) в растворах на основе неорганических кислот ( $H_2SO_4$ ,  $HCl$ ,  $HNO_3$ ) в широком диапазоне концентраций ( $10^{-5}$ -1,0 моль/л) и установлена зависимость ряда

электрохимических и коррозионных характеристик электрода от состава и концентрации раствора. Установлено, что при анодной поляризации в растворах азотной кислоты после достижения потенциала активации имеет место резкое увеличение тока, которое обусловлено образованием на поверхности алюминия сферических питтингов.

УДК 620.193.013:544.65

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ АЛЮМИНИЯ  
В ФОСФАТСОДЕРЖАЩИХ ЭЛЕКТРОЛИТАХ С НЕОРГАНИЧЕСКИМИ  
ДОБАВКАМИ

Григорьева И.О., Хайруллина Л.Р.

Исследовано анодное и коррозионное поведение алюминия (99,5%) в электролитах  $\text{Na}_2\text{HPO}_4$  и  $\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$  в широком диапазоне концентраций ( $10^{-5}$ -1,0 моль/л), а также в 0,1 М растворе трехзамещенного фосфата натрия с добавлением неорганических веществ различной природы и рН. Добавки хлорида натрия и щелочи в фосфатсодержащий раствор влияют на анодное растворение и электрохимические характеристики алюминиевого электрода.

УДК 620.193.013:544.65

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ И СОСТАВА СОЛЕВЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ НА  
ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АЛЮМИНИЯ

Григорьева И.О., Хайруллина Л.Р., Мусавирова Д.Р.

Потенциодинамическим методом исследован процесс анодной поляризации алюминия (99,5%) в нейтральных солевых электролитах, отличающихся анионным составом, в широком диапазоне концентраций ( $10^{-5}$ -1,0 моль/л). Получены экспериментальные результаты, отражающие влияние состава и концентрации электролитов на параметры анодной поляризации и коррозионные характеристики алюминиевого электрода. Установлены оптимальные составы солевых электролитов и режимы ионизации алюминиевого анода для решения ряда прикладных задач.

УДК 620.193.013:544.65

ЗАКОНОМЕРНОСТИ АНОДНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ АЛЮМИНИЯ  
В ВОДНЫХ СРЕДАХ С ПОЗИЦИИ ПРИКЛАДНЫХ АСПЕКТОВ

Григорьева И.О., Хайруллина Л.Р., Зифиров А.С.

Рассматриваются вопросы, связанные с особенностями процессов активации и пассивации алюминия, условиями нарушения пассивности и коррозионного поражения электрода, влиянием агрессивных анионов на питтингообразование. Полученные данные позволяют упорядочить представления о механизме анодного

растворения алюминия и сформулировать практические рекомендации по его оптимизации в различных перспективных технологиях с использованием растворимого алюминиевого анода.

УДК 667.96

ТЕХНОЛОГИЯ СТЕКЛОМАГНЕЗИТОВЫХ ЛИСТОВ  
НА ОСНОВЕ КАУСТИЧЕСКОГО ДОЛОМИТА  
Хузиахметов Р.Х., Мусихин С.Н., Халилов А.А.

Представлены результаты опытов по получению магнезиального вяжущего из доломитов различных месторождений Татарстана и Поволжья. Приведена сравнительная характеристика основных показателей качества стекломagneзитовых листов, полученных с использованием промышленных магнезиальных вяжущих и каустического доломита.

УДК 553

ЭЛЕКТРОННЫЙ ЛАБОРАТОРНЫЙ ЖУРНАЛ ИССЛЕДОВАТЕЛЯ  
Хузиахметов Р.Х., Хузиахметов А.Р.

Предложен универсальный электронный вариант журнала исследователя, предназначенного для регистрации и обработки информации, связанной с переработкой твердого исходного сырья на всевозможные целевые продукты. Журнал состоит из 5 условных частей и включает около 50 универсальных таблиц (EXCEL). Таблица предусматривает автоматическую статистическую обработку информации и визуализацию результатов анализов и испытаний – графики, гистограммы.

УДК 553.611+631.728

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ ВИДОВ  
ФОСФОРНЫХ И ФОСФОРНО-КАЛИЙНЫХ УДОБРЕНИЙ  
НА ОСНОВЕ НИЗКОКАЧЕСТВЕННОГО ФОСФАТНОГО СЫРЬЯ  
Хузиахметов Р.Х., Караев Ы.С.

Представлены результаты исследований составов низкокачественных фосфоритов различных месторождений и полученных на их основе новых видов фосфорных и фосфорно-калийных удобрений методами ДТА, ИКС, РФА.

УДК 544.77

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СОЛЕЙ ПОЛИАКРИЛОВЫХ КИСЛОТ В ПРОЦЕССЕ  
СИНТЕЗА НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА  
Вахитов Т.Р., Катнов В.Е., Степин С.Н.

Методом оптической и фотокорреляционной спектроскопии показана высокая

седиментационная устойчивость и узкое распределение по размерам частиц водных золей наносеребра, полученных фотохимическим восстановлением его аммиачного комплекса в присутствии солей полиакриловых кислот. В ходе экспериментов найдена оптимальная концентрация солей полиакриловых кислот в реакционной смеси, а также показано влияние природы катиона на стабилизирующую способность соединения.

УДК 533.9, 539.215.4

#### ПЛАЗМОДИНАМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ КЕРАМИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ ПРИ АТМОСФЕРНОМ ДАВЛЕНИИ

Катнов В.Е., Гришин П.В., Абдуллин И.Ш.

Осуществлен плазмодинамический синтез наноразмерного  $\text{SiO}_2$  в струе высокочастотной индукционной плазмы при атмосферном воздействии. Методом просвечивающей спектроскопии показано образование сферических наночастиц  $\text{SiO}_2$  размером 10-30 нм. Рентгеноструктурный анализ исходного сырья и продуктов синтеза выявил переход 100 % кристаллической структуры (исходное сырье) в аморфную (продукт синтеза).

УДК 667.637.222

#### ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО НАНОРАЗМЕРНОГО ОКСИДА КРЕМНИЯ В СОСТАВЕ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ ПОКРЫТИЙ

Катнова Р.Р., Гришин П.В., Катнов В.Е.

Методом пневматического распыления (HVLP) и последующим отверждением в терморadiационной печи при температуре 80 °С сформированы полиакрилатные покрытия, содержащие немодифицированный и модифицированный наноразмерный  $\text{SiO}_2$ , полученный плазмодинамическим синтезом. Показано повышение износоустойчивости композиционных покрытий при введении в их состав модифицированных наночастиц оксида кремния до 5 % масс., без изменения прозрачности и блеска покрытий.

УДК 544.77.022, 667.6

#### ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА В СОСТАВЕ ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЫ

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

Синтезированы наночастицы серебра в растворе акрилового сополимера в органических растворителях. Показано равномерное распределение наночастиц по всей толщине покрытия, сформированного из синтезированного композиционного

материала. Методом оптической спектроскопии при исследовании пропускной и отражательной способности покрытий показано увеличение доли проходящего и снижение доли отраженного света при наличии наночастиц серебра в составе покрытий.

УДК 544.77.022, 539.216.2

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РАЗЛИЧНЫХ ФАКТОРОВ НА ОПТИЧЕСКИЕ  
СВОЙСТВА СТЕКЛОВИДНЫХ ПОКРЫТИЙ**

Петровнина Р.Р., Катнов В.Е., Степин С.Н.

Методом оптической спектроскопии показано увеличение пропускной способности кварцевого стекла при нанесении на него стекловидного покрытия из золя наночастиц оксида кремния. Исследовано влияние различных добавок и концентрации наносимых золь, а также температура формирования покрытий. Полученные данные свидетельствуют о необходимости оптимизации состава золь, режимов нанесения и условия отверждения покрытий.

УДК 667.637.2:667.613

**МАРГАНЕЦСОДЕРЖАЩИЕ АКРИЛАТНЫЕ И ЭПОКСИДНЫЕ ПОКРЫТИЯ  
ДЕКОРАТИВНОГО НАЗНАЧЕНИЯ**

Каптелева А.О., Зиганшина М.Р.

Исследованы защитные и физико-механические свойства стирол-акриловых и эпоксидных покрытий, наполненных новыми марганецсодержащими пигментами. Показана полифункциональность синтезированных пигментов, обусловленная широкой гаммой цветовых оттенков и сочетанием высокой кроющей способности и антикоррозионной эффективности.

УДК 667.637.2:667.613

**ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ АКРИЛАТНЫХ И ЭПОКСИДНЫХ ПОКРЫТИЙ,  
НАПОЛНЕННЫХ МАНГАНИТОМ БАРИЯ, ПОЛУЧЕННЫМ КЕРАМИЧЕСКИМ  
СПОСОБОМ**

Ситнова Н.В., Зиганшина М.Р.

Исследованы акрилатные и эпоксидные покрытия, наполненные манганитом бария, синтезированным по керамической технологии. Установлено критическое объемное содержание пигмента в покрытиях по результатам определения физико-механических и антикоррозионных свойств покрытий.

УДК 667.637.2:667.613

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ АКРИЛАТНЫХ И ЭПОКСИДНЫХ ПОКРЫТИЙ,  
НАПОЛНЕННЫХ МАНГАНИТОМ КАЛЬЦИЯ, ПОЛУЧЕННЫМ  
КЕРАМИЧЕСКИМ СПОСОБОМ

Гимадиев Р.Н., Зиганшина М.Р.

Новый марганецсодержащий пигмент исследован в составе покрытий на основе эпоксидной смолы Э-40 и акриловой дисперсии лакротэн Э-241. определен оптимальный уровень наполнения, обеспечивающий необходимый комплекс физико-механических и антикоррозионных свойств покрытий.

УДК 667.622.11

ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА ПРОКАЛОЧНОГО  
МАНГАНИТА БАРИЯ

Батдалов И.М., Зиганшина М.Р.

Исследованы малярно-технические свойства прокалочного манганита бария. установлено сохранение декоративных параметров пигмента до температуры 700°С что позволяет использовать его в термостойких покрытиях.

УДК 667.622.11

ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА ПРОКАЛОЧНОГО  
МАНГАНИТА КАЛЬЦИЯ

Габдрахманова Э.А., Зиганшина М.Р.

Исследованы малярно-технические свойства прокалочного манганита кальция. установлено сохранение декоративных параметров пигмента до температуры 700°С что позволяет использовать его в термостойких покрытиях.

УДК 678.83

ВЫБОР МЕТОДА КОНТРОЛЯ ОКИСЛИТЕЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ  
АНИЛИНА

Ситнов С.А., Сабержанов К.В., Степин С.Н.

Установлено, что оптимальным методом контроля за процессом окислительной полимеризации анилина с использованием также в качестве методов измерения значений рН и оптической плотности, является фиксирование показаний окислительно-восстановительного потенциала.

УДК 544.723

ВЛИЯНИЕ НАПОЛНИТЕЛЯ НА КИНЕТИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ  
АДСОРБЦИОННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ АНИЛИНА

Ситнов С.А., Степин С.Н.

Изучено влияние наполнителя микроталька на особенности протекания процесса адсорбционной полимеризации анилина при различном содержании последнего в исходной смеси. Наличие субстрата оказывает воздействие на некоторые временные фазы и параметры процесса гетерофазного синтеза композитов.

УДК 678.83

ЦВЕТОВЫЕ И МАЛЯРНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ  
ПОЛИАНИЛИНА, ПОЛУЧЕННОГО С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗЛИЧНЫХ  
ДОПАНТОВ

Ситнов С.А., Светлаков И.С., Степин С.Н.

Изучены цветовые и малярно-технические свойства полианилина, полученного с использованием в качестве допантов фосфорсодержащие кислоты. Установлено, что последние оказывают влияние на конечные цветовые и малярно-технические свойства полученных продуктов окислительной полимеризации анилина.

УДК 678.83

ПРОТИВОКОРРОЗИОННЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИАНИЛИНА РАЗЛИЧНОЙ  
СТРУКТУРЫ

Ситнов С.А., Степин С.Н.

Выявлено, что полианилин, синтезированный с использованием кислот-допантов различной химической структуры, не могут быть использованы как соединения ингибирующего типа в составе противокоррозионных лакокрасочных материалах ввиду низких значений рН водных вытяжек, а также каталитического воздействия на процесс электрохимической коррозии стальной подложки.

УДК 620.197.2

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОТИВОКОРРОЗИОННЫХ СВОЙСТВ ПИГМЕНТА  
НА ОСНОВЕ КАЛЬЦИТА С ФОСФОНАТНО-АНИЛИНОВОЙ ОБОЛОЧКОЙ  
В СОСТАВЕ АЛКИДНЫХ ПОКРЫТИЙ

Каюмов А.А., Степин С.Н.

Исследованы защитные свойства алкидных покрытий, наполненных керновыми пигментами, определено их КОСП. Установлено, что наиболее высокими защитными свойствами обладают покрытия, содержащие кальцит, поверхностно-модифицированный фосфонатом анилина, полученного при мольном соотношении компонентов 1:4.

УДК 667.637.2

**МОДИФИКАЦИЯ ЦИНКОВОГО ПОРОШКА С ЦЕЛЬЮ СНИЖЕНИЯ ЕГО  
СОДЕРЖАНИЯ В СОСТАВАХ ХОЛОДНОГО ЦИНКОВАНИЯ**

Толстошеева С.И., Степин С.Н.

Показана возможность уменьшения содержания цинка в эпоксиаминных составах холодного цинкования с сохранением катодного механизма защиты покрытий на их основе за счет дозированной поверхностной модификации частиц пигмента триэтоксисиланом, содержащим эпоксидную группу. Установлено оптимальное содержание модификатора к массе цинкового порошка.

**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.

**4 февраля**

**Д-414**

**10:00**

УДК 544.77.022.532

**САМООРГАНИЗАЦИЯ В СИСТЕМАХ НА ОСНОВЕ ГЕМИНАЛЬНЫХ  
КАТИОННЫХ ПАВ И ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТОВ**

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

Исследовано комплексообразование полиэлектролитов (полиакриловой кислоты и декамера ДНК) и дикатионных геминальных ПАВ с различной длиной спейсера. Определены критические концентрации агрегации, размеры, потенциал и фазовое поведение систем.

УДК 543.51

**ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКАЯ ИНДЕНТИФИКАЦИЯ ПРОДУКТОВ  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДИ- $\beta$ , $\beta'$ -ХЛОРЕТИЛОВЫХ ЭФИРОВ  
АРИЛФОСФОНИСТЫХ КИСЛОТ С ЭТИЛХЛОРАЦЕТАТОМ**

Крутов И.А., Гаврилова Е.Л., Бурангулова Р.Н., Тарасова Р.И., Мусин Р.З.

Методом хромато-масс-спектрометрии с электронной ионизацией исследована реакция между ди- $\beta$ , $\beta'$ -хлорэтиловыми эфирами арилфосфонистых кислот и этилхлорацетатом. Показано, что в реакционной смеси, кроме целевого продукта, присутствуют окись исходного фосфонита и его изомер. Изучена фрагментация молекул компонентов смеси при электронной ионизации. Показано влияние

заместителя в ароматическом фрагменте на интенсивность пика молекулярного иона.

УДК 54.057

НОВЫЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ  
АРИЛГИДРОКСИФОСФОРИЛУКСУСНЫХ КИСЛОТ  
Гаврилова Е.Л., Мушлайкина Л.А., Кочергин Я.С., Тарасова Р.И.

С целью получения новых биологически активных производных фосфорилуксусных кислот исследовалось взаимодействие ацилированной арилгидроксифосфорилуксусной кислоты с аминокислотами обладающими потенциальной нейротропной активностью. С помощью программы PASS показана высокая мнемотропная и антидепрессивная активность синтезированных соединений.

УДК 661.718.1 + 661.727 + 661.2

НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА ДИТИОФОСФОРИРОВАННЫХ АЛЬДЕГИДОВ  
Аксенов Н.Г., Хайруллин Р.А., Газизов М.Б., Ибрагимов Ш.Н., Кириллина Ю.С.

Дитиофосфорилрованные альдегиды являются перспективными синтонами в синтезе полифункциональных P,S-, N, P,S-содержащих органических соединений. Они превращены в соответствующие ацетали, карбоновую кислоту, имидазолидины, оксазолидины, гидразоны и N-замещенные имины.

УДК 661.718.1 + 661.727 + 661.2

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ N-ТРЕТ-БУТИЛ-2-МЕТИЛ-2-ХЛОРПРОПАНИМИНА С О,О-  
ДИАЛКИЛДИТИОФОСФОРНЫМИ КИСЛОТАМИ  
Аксенов Н.Г., Газизов М.Б., Хайруллин Р.А., Гнездилов О.И.

Взаимодействием N-трет-бутил-2-метил-2-хлорпропанмина с О,О-диалкилдитиофосфорными кислотами синтезирован новый тип соединений – соли 2-дитиофосфатоальдиммония. Исследованием реакции методом динамической ЯМР спектроскопии на ядрах  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  и  $^{31}\text{P}$ , выделением интермедиата и изучением химических свойств последнего показано протекание 2 процессов: протонирования по иминной группе и дитиофосфотирования по связи C-Cl.

УДК 547.539.3:547.26'118:547.571

РЕАКЦИИ 1,4-БИС(ДИБРОММЕТИЛ)БЕНЗОЛА С ЭФИРАМИ КИСЛОТ P(IV)  
Иванова С.Ю., Газизов М.Б., Багаува Л.Р., Каримова Р.Ф.

Изучены реакции 1,4-бис(дибромметил)бензола с эфирами кислот P(IV) — диметилowym эфиром метилфосфоновой кислоты и триметилфосфатом. Определены

оптимальные условия образования как смеси — 4-дибромметилбензолкарбальдегида и бензолдикарбальдегида-1,4 (соотношение 1:2), так и последнего в качестве единственного продукта.

УДК 547.751:547.831

ПРИСОЕДИНЕНИЕ ПРОИЗВОДНЫХ ИЗАТИНА К  
ДИМЕТИЛ-(3,5-ДИ-ТРЕТ-БУТИЛ-4-ОКСО-2,5-  
ЦИКЛОГЕКСАДИЕНИЛИДЕН)МЕТИЛФОСФОНАТУ  
Ахметова Е.Ф., Олудина Ю.Н., Бухаров С.В.

Пространственно-затрудненные фенолы и изатины представляют большой практический и теоретический интерес. Осуществлен синтез фосфорилированных производных изатина с пространственно-затрудненными фенольными фрагментами. Структура соединений доказана методами ЯМР  $^1\text{H}$ , ЯМР  $^{31}\text{P}$ , ЯМР  $^{13}\text{C}$  спектроскопии и масс-спектрометрии MALDI-TOF.

УДК 547.562:547-327.

СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ КАПАХА И ФОСЕНАЗИДА, СОДЕРЖАЩИХ  
ФРАГМЕНТЫ ПРОСТРАНСТВЕННОЗАТРУДНЕННОГО ФЕНОЛА  
Олудина Ю.Н., Бухаров С.В., Тарасова Р.И., Гаврилова Е.Л.

Перспективным методом совершенствования фармакотерапии стресс-опосредованных патологических состояний является использование синтетических антиоксидантов из группы фосфорорганических неантихолинэстеразных средств. Осуществлено введение фрагментов пространственно затрудненного фенола в молекулы [2-(дифенилфосфорил)ацетогидразида (фосеназид) и (2-[4-(диметиламино)фенил]-[(2-хлорэтокси)фосфорил]ацетогидразида. Структура и изомерный состав полученных соединений установлен методами спектроскопии ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{31}\text{P}$ .

УДК 615.281.9:547.562.4

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ БЕНЗОФУРОКСАНОВ С СУЛЬФАНИЛАМИДНЫМИ  
ПРЕПАРАТАМИ  
Мухаматдинова Р.Э., Чугунова Е.А., Гибадуллина Э.М., Бурилов А.Р., Бухаров С.В.

Осуществлено взаимодействие (ди)галоген(ди)нитробензофуроксанов с различными сульфаниламидными препаратами. В результате реакций получены соединения, содержащие в одной молекуле две фармакофорные группы. Некоторые синтезированные производные бензофуроксанов изучены на биологическую активность.

УДК 547.748.3

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ РЕЗОРЦИНА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ С  
 $\gamma$ -УРЕИДОАЦЕТАЛЯМИ – НОВЫЙ МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ  
2-АРИЛПИРРОЛИДИНОВ

Смолобочкин А.В., Газизов А.С., Бурилов А.Р., Пудовик М.А., Бухаров С.В.

2-Арилпирролидины являются важной группой гетероциклических соединений, представляющей особый интерес в качестве базовых соединений для синтеза лекарственных препаратов. Разработан новый, удобный одностадийный метод синтеза производных пирролидина.

УДК 547.82:547'26.118

АЗОМЕТИНЫ НА ОСНОВЕ ПИРИДОКСАЛЯ (витамин В<sub>6</sub>)  
И ИХ РЕАКЦИИ С ДИАЛКИЛФОСФИТАМИ

Трифонов А.В., Кибардина Л.К., Чумакова Л.В., Пудовик М.А., Бурилов А.Р.,

Бухаров С.В.

Получен ряд новых азометинов на основе пиридоксаля (витамин В<sub>6</sub>). Установлено, что присоединение к ним диалкилфосфитов приводит к внутренним солевым структурам с кватернизированным атомом азота пиридинового кольца. Аналогичные продукты были получены реакцией Кабачника-Филдса в трехкомпонентной системе (пиридоксаль-диэтилфосфит-амин)

УДК 547.26'118

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ЧЕТВЕРТИЧНЫХ ФОСФОНИЕВЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Амирова Л.Р., Бурилов А.Р., Пудовик М.А., Бухаров С.В.

Создание однокомпонентных эпоксидных композиций, пригодных для применения в качестве покрытий, клеев или связующих для препрегов является актуальной задачей. Получены фосфониевые соединения различного типа и исследовано их влияние на скорость отверждения эпоксидных композиций с использованием в качестве отвердителей ангидридов карбоновых кислот методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК).

УДК 547.565 : 547.26'118

НОВЫЕ ТИПЫ ПОДАНДОВ НА ОСНОВЕ БИЦИКЛИЧЕСКИХ ФОСФОНАТОВ

Галяутдинов Р.В., Садыкова Ю.М., Пудовик М.А., Бурилов А.Р., Бухаров С.В.

Получены новые поданды путем взаимодействия бициклических фосфонатов на основе резорцина и метилрезорцина с дибром-*m*-ксилиленом в тетрагидрофуране в присутствии поташа. Строение полученных соединений доказано методами ЯМР <sup>1</sup>H, <sup>31</sup>P спектроскопии и MALDI TOF.

УДК 547. 241+547. 26. 118

СИНТЕЗ И ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЦЕТАЛЬСОДЕРЖАЩИХ  
 $\alpha$ -ТИОЦИАНОКЕТОНОВ

Гусейнов Ф.И., Бурангулова Р.Н., Писцов М.Ф., Лаврова О.М., Гарифулин М.Р.,  
Насертдинова А.Д., Нгуен Т.Ч.

Исследовано взаимодействие ацетальсодержащих  $\alpha$ -хлороксиранов с родонитом калия с целью изучения характера реакции и природы образующихся продуктов. Установлено, что реакция протекает с образованием тиоцианатокарбонильных соединений, которые гетероциклизуются с образованием сложной гетероциклической системы.

УДК 547. 241+547. 26. 118

СИНТЕЗ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ АЛЬДЕГИДОВ, ИСПОЛЬЗУЯ  
АЦЕТАЛЬСОДЕРЖАЩИЕ  $\alpha$ -ХЛОРОКСИРАНЫ В КАЧЕСТВЕ ИСХОДНЫХ  
СОЕДИНЕНИЙ

Гусейнов Ф.И., Писцов М.Ф.,

Лаврова О.М., Гарифулин М.Р., Насертдинова А.Д., Нгуен Т.Ч.

Показано, что при кипячение 2,5-бис(диэтоксиметил)-2-араил-4-арил-2,5-дигидро-5-гидрокси-1,3-оксазола в среде водного ацетонитрила с выходом 80-85% получается 2-араил-4-арил-1,3-оксазол-5-карбальдегид. При нагревании 2-амино-5-(диэтоксиметил)-6-арил-5-гидрокси-1,3,4-тиадиазина в ангидриде этановой кислоты происходит ацелирование по атомам азота с гидролизом ацетальной группы.

УДК 547.26.118

О НЕКОТОРЫХ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ АДДУКТОВ 4-ГИДРОКСИ-  
3,5-ДИ-ТРЕТ-БУТИЛБЕНЗИЛИДЕНХЛОРИДА И (4-ГИДРОКСИ-3,5-ДИ-ТРЕТ-  
БУТИЛФЕНИЛ)ХЛОРМЕТАНДИФЕНИЛФОСФИНОКСИДА  
С ДИФЕНИЛХЛОРФОСФИНОМ

Исмагилов Р.К., Газизов М.Б., Шамсутдинова Л.П., Бурангулова Р.Н.,

Тараканова А.Л.

В реакциях разложения аддуктов 4-гидрокси-3,5-ди-трет-бутилбензилиденхлорида с дифенилхлорфосфином и (4-гидрокси-3,5-ди-трет-бутилфенил)хлорметандифенилфосфинооксида с дифенилхлорфосфином триметилтиофосфат ведет себя как O-нуклеофил, образуя (4-гидрокси-3,5-ди-трет-бутилфенил)метан бис(дифенилфосфиноксид). Под действием влаги воздуха на бензольный раствор аддукта (4-гидрокси-3,5-ди-трет-бутилфенил)хлорметандифенилфосфинооксида с дифенилхлорфосфином в течение

продолжительного времени (14 дней) происходит реакция восстановительного дехлорирования.

УДК 547.26.118

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИЙ 4-(ДИФЕНИЛФОСФИНИЛМЕТИЛЕН)-2,6-ДИТРЕТ-БУТИЛЦИКЛОГЕКСАДИЕН-2,5-ОНА С НЕКОТОРЫМИ АЗОТ- И СЕРА-НУКЛЕОФИЛАМИ

Тараканова А.Л., Газизов М.Б., Исмагилов Р.К., Шамсутдинова Л.П.

В развитии исследований в области фосфорилированных метиленхинонов исследованы реакции 4-(дифенилфосфинилметилена)-2,6-ди-трет-бутилциклогексадиена с гидразином, диметилгидразином, диэтил- и диизопропилдитиофосфатом. Взаимодействие приводит к образованию продуктов 1,6-присоединения с высокими выходами. Строение продуктов доказано физическими и химическими методами.

УДК 547. 241+547. 26. 118

СИНТЕЗ НОВОГО ПРЕДСТАВИТЕЛЯ 2-ПИРРОЛИДОНА

Гуревич П.А., Босяков В.И., Каратаева Ф.Х.

Разработан препаративный способ получения новой гетероциклической системы 2-оксо-N-(3-оксо-3*H*-индол-2-ил)пирролидин-1-карбоксамид.

В результате взаимодействия 2-хлоро-3*H*-индол-3-она с 4-[(аминокарбонил)амино] бутановой кислотой через стадию промежуточного образования устойчивой 4-({[(3-оксо-3*H*-индол-2-ил)амино]карбонил}амино)бутановой кислоты разработан препаративный метод синтеза новой гетероциклической системы - 2-оксо-N-(3-оксо-3*H*-индол-2-ил)пирролидин-1-карбоксамид

УДК 547.74

НОВЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА ЗАМЕЩЕННЫХ ПИРРОЛОВ

Замалетдинова А.И., Хафизова Е.А., Кадырова С.Ф., Жукова Н.А., Бесчастнова Т.Н.,

Ризванов И.Х., Латыпов Ш.К., Синяшин О.Г., Мамедов В.А.

При взаимодействии 1-(1-пирролидино)циклогексена и 1-(1-пиперидино)циклогексена с хлорпируватами реакция идёт с образованием полизамещенных производных пирролов, а не по реакции Сторка с образованием соответствующих алкил производных циклогексанона. Разработан новый метод синтеза полизамещённых производных пиррола, способных трансформироваться в соответствующие производные индола.

## **СЕКЦИЯ 1.4. СИНТЕЗ, ИССЛЕДОВАНИЕ, РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ОРГАНИЧЕСКИХ И НЕОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРОВ И ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИХ В ПРОИЗВОДСТВЕ**

Руководители: Дебердеев Р.Я.,  
Гарипов Р.М.,  
Стоянов О.В.  
Секретарь: Жукова А.В.

**3-4 февраля**

**В-101**

**10:00**

УДК 678:621.319.2

### **ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ОТВЕРДИТЕЛЕЙ НА ЭЛЕКТРЕТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭПОКСИДНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ОЛИГОМЕРА DER-331**

Лимаренко Н.А., Мочалова Е.Н., Галиханов М.Ф., Дебердеев Р.Я.

Для термоэлектретов на основе олигомера DER-331 исследовано влияние содержания отвердителей: алифатических аминов ДЭТА и ПЭПА и олигоамида Л-20 в составе композиции на ее электретные характеристики. Показано, что максимальные значения электретных характеристик соответствуют стехиометрическому содержанию смолы и отвердителя.

УДК 678:621.319.2

### **ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ УСЛОВИЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ И ОТВЕРЖДЕНИЯ НА ЭЛЕКТРЕТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭПОКСИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ОЛИГОМЕРА DER-331**

Лимаренко Н.А., Леонтьева А.В., Мочалова Е.Н., Галиханов М.Ф.,  
Дебердеев Р.Я.

Исследовано влияние условий одновременной поляризации и отверждения на поверхностный потенциал  $V_s$  полимерных термоэлектретов на основе смолы DER-331 с использованием отвердителей аминного типа. Показано, что при изменении условий одновременной поляризации и отверждения, изменяется структура образующегося эпоксидного композита, и вместе с ней электретные характеристики готового материала.

УДК 541.64:678

### **ИССЛЕДОВАНИЕ ГЛУБИНЫ ПРОНИКНОВЕНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДОВ В ПОЛИЛАКТИДНОМ КОРОНОЭЛЕКТРЕТЕ**

Гужова А.А., Галиханов М.Ф.

Через создание двухслойных полимерных пленок определена глубина залегания носителей зарядов в коронозлектреты на основе полилактида. Представлена модель распределения заряда по объему полярного полимера.