

Федеральное
агентство по
образованию

**Вестник
МИТХТ**

5/2007
октябрь

Научно-технический
журнал

Издается с февраля 2006 г.
Выходит один раз в два
месяца

Учредитель:
МИТХТ им. М.В.Ломоносова

Главный редактор:
В.С. Тимофеев
Зам. главного редактора:
А.К. Фролкова
В.В. Фомичев

Редакционная коллегия:
Р.Р. Биглов
Д.В. Дробот
В.Ф. Корнюшко
Н.Т. Кузнецов
А.И. Мирошников
Ю.П. Мирошников
А.Н. Озерин
Л.А. Серафимов
С.М. Сухорукова
В.А. Тверской
А.Ю. Цивадзе
В.И. Швеи
В.Д. Юловская

© МИТХТ им. М.В. Ломоносова

ISSN 1819-1487

СОДЕРЖАНИЕ

ХИМИЯ И ТЕХНОЛОГИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

- В.М. Казакова, Н.Е. Минина. Анион-радикалы замещенных нитро- и динитробензолов..... 3
- Я.Я. Отман, П.В. Мельников, Е.А. Поленов, В.Р. Флид. Парамагнитные комплексы никеля (I), стабилизированные норборнадиеном..... 17
- Д.М. Смекалкин, Б.К. Новосадов, Е.А. Поленов. Ферми-контактные взаимодействия во фторалкилзамещенных π -радикалах. Релейный зарядовый эффект граничных МО и его квантовохимическое моделирование методом INDO..... 21

ХИМИЯ И ТЕХНОЛОГИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ И БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

- А.В. Баранов, Н.С. Цвид, В.И. Лукьянченко, Д.И. Прохоров, Ю. Г. Кириллова, В.И. Швеи. Исследование путей синтеза цитозинового мономера отрицательно заряженных пептидно-нуклеиновых кислот..... 28
- Н.П. Боярская, Ю.Г. Кириллова, Д.С. Усипов, В.И. Швеи. Твердофазный синтез декамера отрицательно заряженных ПНК с псевдопептидной связью *Gly ψ L-Glu*..... 33

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

- А.В. Макашова, Л.В. Иванова, А.В. Тимошенко. Энергосберегающие схемы экстрактивной ректификации смеси циклогексан – бензол – этилбензол – *n*-пропилбензол с анилином качестве разделяющего агента. II. Комплексы с частично связанными тепловыми и материальными потоками..... 37
- С.Л. Назанский, А.В. Солохин, В.С. Тимофеев. Разделение смеси этанол – вода с использованием комплекса ректификационных колонн, работающих под разными давлениями..... 47

ХИМИЯ И ТЕХНОЛОГИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

- В.В. Арбенина, Т.В. Данилова, А.С. Кашуба, Е.В. Пермикина. Исследование процесса нанесения пассивирующих покрытий CdTe на эпитаксиальные слои $Cd_xHg_{1-x}Te$ для создания фотоприемников ИК-диапазона..... 51
- А.Н. Кочетов, Л.Ю. Аликберова, Е.В. Савинкина. Использование комплексных соединений Cu(II) для очистки промышленно значимых 2-(ацил)индандионон-1,3..... 57
- Ю.О. Лагунова, А.Ф. Селиверстов, Е.Е. Якимова. Фотохимическая и фотоокислительная деструкция ЭДТА в сточных водах радиохимических производств, содержащих ^{60}Co 60
- А.М. Хорт, Е.А. Шелонин, Д.С. Никулин, А. Г. Яковенко. Исследование образования фотолюминесцирующего пористого кремния с характеристикой его пористостью..... 63

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА

- А.А. Быков, Е.А. Паутова, Э.М. Карташов. Уравнения совместности Бельтрами – Митчелла в динамической термоупругости..... 68
- В.И. Божко. Автоматическая система нечеткого регулирования толщины полотна при каландровании..... 74
- Э.М. Карташов, В.А. Ломовской, В.В. Зар, В.П. Волошин, А.Е. Чалых. Термомеханическая реакция системы сустав – синовиальная жидкость на периодические воздействия в рамках реологической модели Максвелла..... 79
- Abstract..... 84

ABSTRACT

- V.M. Kazakova, N.E. Minina. Radical anions of substituted nitro- and dinitrobenzenes. 3
This article presents the results obtained by means of polarographic investigation and EPR spectra in a series of substituted nitro- and meta-dinitrobenzenes in aprotic solvents. The theoretical data obtained with the use of quantum-chemical MOH-calculations with Mac Lachlan correction and INDO were discussed.
- Y.Y. Othman, P.V. Melnikov, E.A. Polenov, V.R. Flid. Nickel (I) paramagnetic complexes stabilized by norbornadiene. 17
During the reaction between the norbornadiene and bis- η^3 -allyl nickel complexes $Ni(allyl)_2$ ($allyl-C_3H_5$, $1-CH_3C_3H_4$, $2-CH_3C_3H_4$) ESR method detected the presence of a paramagnetic nickel (I). The concentration is about 10^{-4} — 10^{-6} of the concentration of nickel imposed into the system. Dependence of paramagnetic particles concentration vs. temperature was detected. Based on the findings the structures of the complexes of nickel (I) are discussed, as well as possible ways of their formation.
- D.M. Smekalkin, B.K. Novosadov, E.A. Polenov. Fermi contact couplings in fluoroalkyl-substituted π -radicals. Relay charge effect of lomo and homo and its quantum chemical modeling by means of indo calculations. 21
The new interpretation of physical phenomenon in EPR spectra of fluoroalkyl π -radicals was made. We named this phenomenon the relay charge effect of fluorine hyperfine coupling (RCE-F). The sharp relationship of Fermi contact spin density on ^{19}F nucleus and the radical charge was found out. The orbital origin of current effect was investigated.
- A.V. Baranov, N.S. Tsvid, V.I. Lukyanchenko, D.I. Prokhorov, Yu.G. Kirillova, V.I. Shvets. Investigation of synthesis of cytosine-containing monomer for negatively charged peptide nucleic acids. 28
A cytosine-containing monomer for negatively charged peptide nucleic acids has been prepared for the first time, and the ways of its synthesis have been optimized.
- N.P. Boyarskaya, Yu.G. Kirillova, D.S. Esipov, V.I. Shvets. Solid-phase synthesis of negatively charged pna decamer with *Gly ψ L-Glu* pseudopeptide bond. 33
Solid-phase Boc-protocol and synthetic strategy of negatively charged peptide nucleic acids has been suggested. New thymine containing negatively charged PNA decamer based on L-glutamic acid and glycine was synthesized.
- A.V. Makashova, L.V. Ivanova, A.V. Timoshenko. The energy saving extractive distillation flow sheets of cyclohexane – benzene – ethylbenzene – *n*-propylbenzene mixture with aniline as separating agent. II. Complexes with partially thermally coupled columns. 37
*Extractive distillation of cyclohexane – benzene – ethylbenzene – *n*-propylbenzene mixture with aniline as separating agent in complexes with partially thermally coupled columns was investigated. Manifold of the workable flow sheets were synthesized. Each flow sheet was optimized by the criteria of the scheme minimum energy consumption. The optimal flow sheet was found which is characterized by the energy consumption 17% lower as compared to the best one with two-outlet columns.*
- S.L. Nazansky, A.V. Solokhin, V.S. Timofeev. Separation of ethanol–water mixture by flowsheet with distillation columns at different pressures. 47
By numerical simulation methods the possibility of separation of ethanol–water azeotropic mixture by means of a distillation unit, including columns at different pressures was investigated.
- V.V. Arbenina, T.V. Danilova, A.S. Kashuba, E.V. Permikina. The research of process of CdTe passivation coverings formation on epitaxial layers $Cd_xHg_{1-x}Te$ for creation of IR-photodetectors. 51
The features of formation passivation coverings of cadmium telluride on epitaxial layers $Cd_xHg_{1-x}Te$ used for manufacturing of matrix photodetectors of the IR-range are investigated. The laws of process of passivation coverings creation by a method of «the hot wall » are established at unitary and repeated use of CdTe source.

- A.N. Kochetov, L.U. Alikberova, E.V. Savinkina. Cu(II)-Complexes for the purification of industrial 2-(acyl)-indandiones-1,3. 57
Cu(II)-complexes with 2(diphenylacetyl)indandione-1,3 and relative (2-phenylethylphenyl)indandione-1,3 (isomers mixture) are synthesized and studied by various methods. These compounds may be employed for the purification of industrial samples.
- Ju.O. Lagunova, A.F. Seliverstov, E.E. Yakimova. Photochemical and photo-oxidative destruction of EDTA in aqueous solutions of radiochemical factories, containing ^{60}Co . 60
The article is dedicated to the investigation of preliminary purification methods for liquid radioactive wastes from organic admixtures. This impurities complicate localization, concentration and recycling radioactive wastes. Conditions of practically qualitative precipitation ^{60}Co from technological solutions have been founded.
- A.M. Hort, E.A. Shelonin, D.S. Nikulin, A.G. Yakovenko. Research of formation of photoluminescing porous silicon with characterization its porosity. 63
In the article necessity of use of the specified parameter of porosity for characterization of PL layers of the porous silicon having more complex structure in comparison with usual porous mediums is shown. The provided parameter of porosity is used for comparison of properties of the porous silicon to it PL characteristics.
- A. Bykov, Y. Pautova, E. Kartashov. Beltrami-Mitchell's compatibility equations in the problem of dinamic thermoelasticity. 68
The article is delicated to deduction of the generalized equation of dynamic thermoelasticity in thermal stresses.
- V.I. Bozhko, The automated fuzzy control system of film thickness on calendaring. 74
Synthesis of the automated fuzzy control system of film thickness on calendaring, based on management by difference principle and fuzzy control algorithm, is revealed in this article. The algorithm of fuzzy outlet and working of the system of film thickness on calendaring is considered.
- E.M. Kartashov, V.A. Lomovskoy, V.V. Sar, , V.P. Voloshin, A. E. Chalyh. The Thermo-mechanical reaction of the joint – sinovial liquid system on the recurrent influence in the limits of the Maxwell reologic model. 79
The mechanism of the interaction of the surface layers of the human joint and synovial liquid under the recurrent influence is investigated. The tension distribution in the cartilage thickness and its influence on the physico - mechanical characteristics of the mentioned system is qualitatively described.

Вестник МИТХТ

Журнал выходит один раз в два месяца и публикует обзоры и статьи по актуальным проблемам химической технологии и смежных наук. Журнал основан в 2006 году. Учредителем журнала является Московская государственная академия тонкой химической технологии им. М.В. Ломоносова (МИТХТ)

- К публикации принимаются материалы, содержащие результаты оригинальных исследований, в виде полных статей, кратких сообщений, а также авторские обзоры и прогнозно-аналитические статьи по актуальным вопросам химической науки, в том числе по:

1. Теоретическим основам химической технологии
2. Химии и технологии органических веществ
3. Химии и технологии лекарственных препаратов и биологически активных соединений
4. Синтезу и переработке полимеров и композитов на их основе
5. Химии и технологии неорганических материалов
6. Химии и технологии редких и рассеянных элементов
7. Математическим методам и информационным технологиям в химии и химической технологии
8. Эколого-экономическим проблемам химических технологий.

- Электронная версия журнала (CD-ROM и Интернет) выходит с февраля 2006 г.

- Хорошо подготовленные статьи выходят в свет не более чем через 4 месяца после поступления в редакцию.

Журнал в розничную продажу не поступает. Он распространяется на территории Российской Федерации и стран СНГ по каталогу агентства «Роспечать», индекс **36924**. Подписка на журнал принимается в любом почтовом отделении.