

Федеральное агентство  
по образованию

**Вестник  
МИТХТ**

4/2008

август

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**

- А.Д. Кирилин, Л.О. Белова, А.В. Гаврилова, Е.А. Коробова. Алкоксисиланы – Синтез и применение. II. «Прямой синтез», свойства и области прикладного использования. 3
- Р.Г. Галлиев, А.И. Луганский, В.Ф. Третьяков, И.В. Мороз, Н.А. Французова, А.Н. Ермаков. Механизм иницирования термокрекинга гудрона кислородом воздуха. 17
- Л.В. Дашко, В.В. Медведев, Д.В. Дмитриев, В.Р. Флид. Вопросы селективности альдольной гомо- и кросс-конденсации низших альдегидов в присутствии различных солей аминов. 23
- Ю.О. Кирилина, В. Ван Камп, И.В. Бакеева, Ф.Е. Дюпре, В.П. Зубов. Синтез новых амфифильных блок-сополимеров методом ATRP. 32
- Ю.А. Трегер. Сбалансированные технологические схемы в промышленном хлорорганическом синтезе. 39

- В.Р. Флид, С.В. Леонтьева, И.Е. Эфрос, О.С. Манулик, М.В. Цодиков, Л.И. Лахман. Восстановительная дегидратация биоспиртов – перспективный путь получения моторных топлив. 44

### **ХИМИЯ И ТЕХНОЛОГИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ И БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ**

- В.Н. Лузгина, В.А. Ольшевская, А.В. Макаренко, А.Ф. Миронов, В.Н. Калинин. Синтез борированных производных 5,10,15,20-тетракис-(*n*-метоксифенил)порфирина. 49
- С.Г. Романова, В.Г. Романов, Н.В. Плявник, Г.А. Серебренникова, А.А. Штиль. Синтез бесфосфорных пиридинсодержащих глицеролипидов с простой эфирной связью. 53
- И.В. Фатеев, И.Д. Константинова, В.И. Швеи. Биотехнологический способ синтеза новых аналогов рибавирина. 58

### **ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

- А.С. Абдуллаева, Е.А. Тимашова, Е.Ю. Букина, И.В. Ошанина, Л.Г. Брук, О.Н. Темкин. Сопреженные процессы на основе реакции окисления оксида углерода (II). 63
- М.К. Захаров, А.Ю. Комков, Д.М. Павленко. Анализ структуры потоков при совместном течении двух пленок взаимнонерастворимых жидкостей по вертикальной поверхности с учетом воздействия газового потока. 70
- А.Г. Лощев, Е.А. Глушаченкова, Ю.А. Писаренко, А.Ю. Закгейм. Оптимизация реактора гидрирования дихлоруксусной кислоты. 75

### **МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

- Е.В. Бурляева, П.А. Ушаков. Прогнозирование активности органических соединений с использованием искусственных нейронных сетей. 79
- Э.М. Карташов. Модификация задачи И.К. Волкова о «сосредоточенной емкости» при исследовании термической реакции диска с круговым вырезом. 84
- В.М. Комаров, А.В. Рим, Б.В. Пятеников. Обобщенная олигомерная система. 88
- Т.В. Стольникова, К.Ю. Колыбанов, В.В. Арбенина. База данных по свойствам и технологическим характеристикам полупроводниковых материалов. 93

### **ХИМИЯ И ТЕХНОЛОГИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ**

- Т.М. Буслаева, Д.А. Лапшин, Г.М. Вольдман, Н.М. Боднарь. Взаимодействие хлорокомплексов родия(III) с формальдегидом в сульфатно-хлоридных растворах. 100
- Ф.Н. Карачевцев, В.А. Кутвицкий, О.В. Сорокина. Статистическая оптимизация процесса синтеза стекловидных образцов сравнения. 105
- Abstract 113

# Review MITHT

4/2008

## Редакция:

И.М. Агаянц  
Ю.А. Наумова  
Л.Г. Семерня  
Г.Д. Середина

## Адрес редакции:

119571, г. Москва,  
пр. Вернадского, 86,  
к. Л-119  
телефон: (495) 936-82-88  
E-mail - vestnik@mitht.ru

Подписано в печать  
13.08.2008 г. Формат 60х90/8.  
Бумага офсетная.  
Гарнитура Times.  
Печать офсетная.  
Уч. изд. листов 4,4.  
Заказ № 178.  
Тираж 500 экз.

Отпечатано с оригинал-макета в  
«ГЕЛИОПРИНТ»

119602, Москва, Ак. Анохина, 38, к. 1

## CONTENTS

### CHEMISTRY AND TECHNOLOGY OF ORGANIC MATERIALS

- A.D. Kirilin, L.O. Belova, A.V. Gavrilova, E.A. Korobova. The alkoxy-silanes – synthesis and application. II. The «direct synthesis», the properties and the application. 3
- R.G. Galliev, A.I. Luganskii, V.F. Tret'nikov, I.V. Moroz, N.A. Frantsuzova, A.N. Ermakov. Mechanism of tar thermoc cracking triggering caused by ambient oxygen. 17
- L.V. Dashko, V.V. Medvedev, D.V. Dmitriev, V.R. Flid. Questions on selectivity of homo- and crossaldol condensation of lower aldehydes at presence of different salts of amines. 23
- Yu.O. Kirilina, W. Van Camp, I.V. Bakeeva, F.E. Du Prez, V.P. Zubov. Synthesis of novel amphiphilic block-copolymers by means of ATRP. 32
- Yu.A. Treger. Balanced processes in industrial organochlorine synthesis. 39
- V.R. Flid, S.V. Leont'eva, I.E. Efros, O.S. Manulic, M.V. Tsodikov, L.I. Lakhman. Reduction dehydration of bioalcohols – perspective way for receiving engine fuel. 44

### CHEMISTRY AND TECHNOLOGY OF MEDICAL PRODUCTS AND BIOLOGICALLY ACTIVE SUBSTANCES

- V.N. Luzgina, V.A. Ol'shevskaya, A.V. Makarenkov, A.F. Mironov, V.N. Kalinin. Synthesis of boronated derivatives of 5,10,15,20-tetrakis-(*p*-methoxyphenyl)porphyrin. 49
- S.G. Romanova, V.G. Romanov, N.V. Pliavnik, G.A. Serebrennikova, A.A. Shnil. Synthesis of non-phosphorus ether glycerolipids containing a pyridinium ring. 53
- I.V. Fateev, I.D. Konstantinova, V.I. Shvets. Biotechnological method of the synthesis of new ribavirin structural analogs. 58

### THEORETICAL BASED OF CHEMICAL TECHNOLOGY

- A.S. Abdulaeva, E.A. Timashova, E.U. Bukina, I.V. Oshanina, L.G. Bruk, O.N. Temkin. Conjugated processes based on oxidation of carbon monoxide reaction. 63
- M.K. Zakharov, A.U. Komkov, D.M. Pavlenko. Flow pattern analyzes of a two thin films of insoluble in each other liquids flow on a vertical surface subject to influence of a gas stream. 70
- A.G. Loshchev, E.A. Glushachenkova, Yu.A. Pisarenko, A.Yu. Zakgeim. Optimization of dichloroacetic acid hydrogenation reactor. 75

### INFORMATION TECHNOLOGIES AND APPLIED MATHEMATICS

- E.V. Burljaeva, P.A. Ushakov. Prediction of complex organic compounds activity with artificial neural networks. 79
- E.M. Kartashov. The modification of I.Volkov's problem about «the concentrated capacity» when the thermal reaction of a disk with a circular cut is investigated. 84
- V.M. Komarov, A.V. Rim, B.V. Piaterikov. Generalized oligomeric system. 88
- T.V. Stol'nikova, K.Yu. Kolybanov, V.V. Arbenina. Database on properties and technical characteristics of semiconductor materials. 93

### CHEMISTRY AND TECHNOLOGY OF INORGANIC SUBSTANCES

- T.M. Buslaeva, G.M. Voldman, D.A. Lapshin, N.M. Bondar. Interaction of rhodium(III) chloride complexes with formaldehyde into the sulphate and chloric solutions. 100
- F.N. Karachevtsev, V.A. Kutvitsky, O.V. Sorokina. The statistical optimization of synthesis process of glassy comparison sample. 105
- Abstract 113

## ABSTRACT

- A.D. Kirilin, L.O. Belova, A.V. Gavrilova, E.A. Korobova. The alkoxysilanes – synthesis and application. II. The «direct synthesis», the properties and the application. 3  
*The review summarizes studies on the «direct synthesis» of alkoxysilanes. Their properties and areas of practical use are considered.*
- R.G. Galliev, A.I. Luganskii, V.F. Tretiakov, I.V. Moroz, N.A. Frantsuzova, A.N. Ermakov. Mechanism of tar thermocracking triggering caused by ambient oxygen. 17  
*Article contains data on ambient oxygen influence on tar cracking dynamics change.*
- L.V. Dashko, V.V. Medvedev, D.V. Dmitriev, V.R. Flid. Questions on selectivity of homo- and crossaldol condensation of lower aldehydes at presence of different salts of amines. 23  
*Reactions of homo- and crossaldol condensation of formaldehyde and acetaldehyde were studied at presence of primary, secondary and tertiary amine salt of linear structure in N,N-dimethylacetamide, water and toluene. It was found that in all solvents conversion of reagent is increased with increase of basicity of amine, but selectivity on cross-reaction became lower because of formation side products of acetaldehyde homo-condensation. The conversion of acetaldehyde is also increased with increase of solvent polarity.*
- Yu.O. Kirilina, W. Van Camp, I.V. Bakeeva, F.E. Du Prez, V.P. Zubov. Synthesis of novel amphiphilic block-copolymers by means of ATRP 32  
*By means of ATRP the amphiphilic block-copolymers of polyisobornylacrylate-polyacrylic acid were produced. Kinetics of polymerization was investigated. Synthesized samples of polymers were characterized with molecular weight and polydispersity.*
- Yu.A. Treger. Balanced processes in industrial organochlorine synthesis. 39  
*Approaches and methodology for development of the balanced technological process are considered at the certain examples of the large tonnage plants of organochlorine synthesis (vinyl chloride, chloromethanes, perchloroethylene) with the maximum efficient raw materials (chlorine and hydrocarbons) utilization, waste recirculation, and heat recovery for products separation.*
- V.R. Flid, S.V. Leont'eva, I.E. Efros, O.S. Manulic, M.V. Tsodikov, L.I. Lakhman. Reduction dehydration of bioalcohols – perspective way for receiving engine fuel. 44  
*The reaction of reduction dehydration of aliphatic alcohols into the hydrocarbons is the perspective approach for receiving liquid fuel. It opens ways to the industrial method of one-study receiving linear and cyclic alkanes, being high-energy components of aviation fuel, from bioalcohols (ethanol, butanols, pentanols). It has been found that combined systems based on hydrides of intermetallic compounds are sufficiently effective catalysts and lead to the formation mixture of hydrocarbons with considerable content of isoalkanes. It has been appeared synergetic effect in formation of alkanes in the presence of two-component composition consisting of hydride intermetallic compound and alumoplatinum catalyst.*
- V.N. Luzgina, V.A. Ol'shevskaya, A.V. Makarenkov, A.F. Mironov, V.N. Kalinin. Synthesis of boronated derivatives of 5,10,15,20-tetrakis-(p-methoxyphenyl)porphyrin 49  
*Synthesis carborancontaining derivatives of copper (II) and palladium (II) complexes of 5,10,15,20-tetrakis-(p-methoxyphenyl)porphyrin is carried out with the purpose of their application in boron neutron capture therapy (BNCT) and photodynamic therapy (PDT) of a cancer.*
- S.G. Romanov, V.G. Romanov, N.V. Pliavnik, G.A. Serebrennikova, A.A. Shnil. Synthesis of non-phosphorus ether glycerolipids containing a pyridinium ring. 53  
*The synthesis of new non-phosphorus ether glycerolipids containing a pyridinium ring in a polar domain is described. Novel compounds possess high cytotoxic activity against human leukemia K562 and colon cancer HCT116 cell lines.*
- I.V. Fateev, I.D. Konstantinova, V.I. Shvets. Biotechnological method of the synthesis of new ribavirin structural analogs. 58  
*Modern effective biotechnological method of the synthesis of new analogues of 1-β-D-ribofuranosyl-1,2,4-triazole-3-carboxamide (ribavirin) from 3-amino-1,2,4-triazole was developed. Gene-engineering enzymes purine- and thymidine phosphorylase were used for biotechnological method of the synthesis ribavirin analogs.*
- A.S. Abdulaeva, E.A. Timashova, E.U. Bukina, I.V. Oshanina, L.G. Bruk, O.N. Temkin. Conjugated processes based on oxidation of carbon monoxide reaction. 63  
*The catalytic systems are proposed to oxidize CO: solutions PdX<sub>2</sub>-organic solvent, where solvent is 1,4-dioxan or tetrahydrofuran, X – Br, I. It was shown that a number of conjugated processes proceed in these systems.*
- M.K. Zakharov, A.U. Komkov, D.M. Pavlenko. Flow pattern analyzes of a two thin films of insoluble in each other liquids flow on a vertical surface subject to influence of a gas stream. 70  
*A downward flow of a two thin films of insoluble in each other liquids subject to influence of a gas counterflow is studied. A velocity profiles in both thin films, an average velocities and a discharges has been found. Dependences for evaluating optimal influence of the gas stream on working film were found.*
- A.G. Loshchev, E.A. Glushachenkova, Yu.A. Pisarenko, A.Yu. Zakgeim. Optimization of dichloroacetic acid hydrogenation reactor 75  
*In this article the optimal operating modes of the dichloroacetic acid hydrogenation reactor by experimental design method have been defined, providing both the high purity of commercial monochloroacetic acid and rational, using of the expensive palladium activated charcoal-based catalyst. The optimal methods of sectioning and additional irrigation of the reactor have been proposed.*

E.V. Burljaeva, P.A. Ushakov. Prediction of complex organic compounds activity with artificial neural networks. <i>The analysis of neural networks applicability for complex organic compounds activity prediction is provided. The regulation algorithm is offered to improve the prediction properties of the networks.</i>	79
E.M. Kartashov. The modification of I.Volkov's problem about «the concentrated capacity» when the thermal reaction of a disk with a circular cut is investigated. <i>The thermal reaction of an infinite disk with a circular cut is investigated. The regularities of the thermoelastic strains when the surface of the cut is heated by the principle of «the concentrated capacity» are found.</i>	84
V.M. Komarov, A.V. Rim, B.V. Piaterikov. Generalized oligomeric system <i>As a result of theoretical and applied researches of system relations and regularities of existing theories and models there were chosen feature-handling parameters of oligomeric system. Therefore one might say that the proposed work's aim is the system analysis realization of oligomers as the complex science objects. and the selection of optimal handling factors affecting the features and structure of oligomeric systems</i>	88
T.V. Stol'nikova, K.Yu. Kolybanov, V.V. Arbenina. Database on properties and technical characteristics of semiconductor materials <i>The structure of the database is developed, allowing to unit in one electronic reference media of data on properties of materials on the basis of semiconductor phases with their simultaneous ordering both necessary for technologists the data on conditions of reception of these materials. The user-friendly interface is created, patterns for reports are made. Serviceability of a database is checked up on an example of A<sup>3</sup>B<sup>5</sup> and A<sup>2</sup>B<sup>6</sup> semiconductor compounds. The database is recommended to introduction in educational process on the direction 551600 « Materiology and technology of new materials».</i>	93
T.M. Buslaeva, G.M. Voldman, D.A. Lapshin, N.M. Bondar. Interaction of rhodium(III) chloride complexes with formaldehyde into the sulphate and chloric solutions. <i>Interaction of Rhodium(III) Chloride complexes with Formaldehyde into the sulphate and chloric solutions has been studied. Probably stages of reducing process that proceeds with metal Rhodium formation has been suggested. Influence of initial Rhodium, Formaldehyde and Hydrochloric acid concentration on the rate of each stage and on the extraction extent of valuable metal into a solid phase has been observed.</i>	100
F.N. Karachevtsev, V.A. Kutvitsky, O.V. Sorokina. The statistical optimization of synthesis process of glassy comparison sample. <i>In this article has been lead statistical optimization of synthesis process of bismuth-boron comparison sample. Have been determined optimal operation factors of synthesis process of glassy comparison sample.</i>	105

## 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).

Журнал входит в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертации на соискание ученой степени кандидата наук.

• 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.