

Министерство
образования и науки
Российской Федерации

Вестник МИТХТ

6/2012

декабрь

Научно-технический
журнал

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

Учредитель
МИТХТ им. М.В. Ломоносова

Главный редактор:
проф. А.К. Фролова
Зам. главного редактора:
проф. В.В. Фомичев

Редакционная коллегия:
доц. Р.Р. Биглов
проф. Д.В. Дробот
проф. В.Ф. Корнюшко
акад. РАН Н.Т. Кузнецов
акад. РАН А.И. Мирошников
проф. Ю.П. Мирошников
чл.-корр. РАН А.Н. Озерин
проф. Л.А. Серафимов
проф. С.М. Сухорукова
проф. В.А. Тверской
акад. РАН А.Ю. Цивадзе
акад. РАН В.И. Швеиц
доц. В.Д. Юловская

**Международная
редакционная коллегия:**
проф. К.А. Кордона
(Carlos A. Cardona),
Колумбия
проф. Т. Пакканен
(Tapani Pakkanen),
Финляндия
проф. А. Трохимчук
(Andrzej W. Trochimczuk)
Польша

СОДЕРЖАНИЕ

ХИМИЯ И ТЕХНОЛОГИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ И БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Акмурзина В.А., Селищева А.А., Швеиц В.И. От анализа липидов к
липидомике 3

Рукосуева Н.В., Захарова Д.А., Безруков Д.А., Каплун А.П., Швеиц В.И.,
Зигангирова Н.А. Липосомальная форма десферала как эффективный
противохламидийный агент 22

Цаплева М.С., Плявник Н.В., Серебренникова Г.А. Синтез
диглицеридов, содержащих полиненасыщенные жирные кислоты 27

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Кириллов Ю.Б., Клименко Н.М., Тёмкин О.Н. Неэмпирические
расчеты минимальных энергетических путей реакций присоединения
молекул H_2F_2 и H_2Cl_2 к молекулам ацетилена и метилацетилена 32

Коровайцев А.В., Коровайцева Е.А., Ломовской В.А. Решение
прикладных одномерных линейных краевых задач с автоматической
точностью 41

Носов Г.А., Яковлев Д.С., Попов Д.А., Уваров М.Е.
Перекристаллизация веществ из растворов с использованием
выпарной кристаллизации на стадии регенерации растворителя 46

ХИМИЯ И ТЕХНОЛОГИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

Румянцева Ю.Б., Востриков С.В., Нестеров И.А., Курганова Е.А.,
Нестерова Т.Н., Кошель Г.Н. Цимолы. 3. Химическое равновесие
в системе толуол+изопропилтолуолы 51

Кошель Г.Н., Нестерова Т.Н., Румянцева Ю.Б., Курганова Е.А.,
Иванова А.А. Цимолы. 4. Получение крезолов и их применение 56

Николаев А.И., Пешнев Б.В., Трофимова Н.Н. Влияние степени
разложения сырья на выход и характеристики продуктов
электрокрекинга 60

ХИМИЯ И ТЕХНОЛОГИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Быков А.Ю., Селиванов Н.А., Вотинова Н.А., Генералова Н.Б.,
Жижин К.Ю., Кузнецов Н.Т. Методы синтеза металлоработанов
с полиэдрическим остовом $[MB_9H_9]$, где $M = Ni, Pd$ 64

Рукк Н.С., Шамсиев Р.С., Кравченко В.В., Скрыбина А.Ю.,
Замалютин В.В. Спектральное и квантово-химическое исследование
антипириновых производных некоторых комплексных соединений РЗЭ 69

СИНТЕЗ И ПЕРЕРАБОТКА ПОЛИМЕРОВ И КОМПОЗИТОВ НА ИХ ОСНОВЕ

Люсова Л.Р., Селина А.Ю., Наумова Ю.А. О рецептуростроении клеев
с постоянной «липкостью» на основе бутадиен-нитрильных каучуков 75

Петров О.О., Мунькин Н.И., Ганиев Э.Ш., Симонов-Емельянов И.Д.,
Прокопов Н.И., Гервальд А.Ю. Комплексная оценка характеристик
суперконцентратов для окрашивания жестких ПВХ-композиций 78

в процессе высокоскоростной экструзии
Толстов А.М., Юрцев Л.Н., Веселов И.В. Расчет температурно-
временной зависимости вулканизации в производстве 83

резиноармированных гусениц

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Ахмадулина Э.Н., Савин Е.С. Колебание протона в трех-
минимумном потенциале 88

Валишин А.А., Степанова Т.С. Накопление локальных
повреждений в зоне вынужденной эластичности перед фронтом
трещины разрушения в полимерах 92

Шевелев В.В., Осипов Р.А. Аналитическая модель сил сцепления
между берегами трещины 104

Яковенко Я.Я., Сковорцова М.И., Михайлова Н.А. Моделирование
связи между структурой и физико-химическими свойствами органических
соединений на основе оптимальных атомных параметров 110

Vestnik MITHT

6/2012

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

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

Подписано в печать
22.12.2012г. Формат 60×90/8.
Бумага офсетная.
Гарнитура Times.
Печать офсетная.
Уч.-изд. листов 7,3

Заказ № 684.
Тираж 500 экз.

Отпечатано с оригинал-макета
в «ГЕЛИОПРИНТ»
119602, Москва, ул. акад. Анохина, 38, к. 1

CONTENTS

CHEMISTRY AND TECHNOLOGY OF MEDICINAL COMPOUNDS AND BIOLOGICALLY ACTIVE SUBSTANCES

- Akmurzina V.A., Selishcheva A.A., Shvets V.I.* From lipid analysis to lipidomics 3
- Rukosuyeva N.V., Zakharova D.A., Bezrukov D.A., Kaplun A.P., Shvets V.I., Zigangirova N.A.* Liposomal form of desferal as an effective chlamidial agent 22
- Tsapleva M.S., Plyavnik N.V., Serebrennikova G.A.* Synthesis of diglycerides containing polyunsaturated fatty acids 27

THEORETICAL BASES OF CHEMICAL TECHNOLOGY

- Kirillov Yu.B., Klimentko N.M., Temkin O.N.* Non-empirical calculations of minimal energetic ways of addition of H_2F_2 and H_2Cl_2 molecules to acetylene and methylacetylene molecules 32
- Korovaytsev A.V., Korovaytseva E.A., Lomovskoy V.A.* Solution of applied one-dimensional linear boundary-value problems with automatic precision 41
- Nosov G.A., Yakovlev D.S., Popov D.A., Uvarov M.E.* Recrystallization of substances from solutions with the use of evaporative crystallization at the stage of solvent recovery 46

CHEMISTRY AND TECHNOLOGY OF ORGANIC SUBSTANCES

- Rumyantseva Yu.B., Vostrikov S.V., Nesterov I.A., Kurganova E.A., Nesterova T.N., Koshel G.N.* Cymenes. 3. Chemical equilibrium in the toluene+isopropyltoluenes system 51
- Koshel G.N., Nesterova T.N., Rumyantseva Yu.B., Kurganova E.A., Ivanova A.A.* Cymenes. 4. Cresols obtaining and their application 56
- Nikolaev A.I., Peshnev B.V., Trofimova N.N.* Effect of the duration of oil fractions electrocracking on the output and characteristics of the products formed 60

CHEMISTRY AND TECHNOLOGY OF INORGANIC MATERIALS

- Bykov A.Yu., Selivanov N.A., Votinova N.A., Generalova N.B., Zhizhin K.Yu., Kuznetsov N.T.* Methods of synthesis of metallaboranes with polyhedral cage $[MB_9H_9]$, $M = Ni, Pd$ 64
- Rukk N.S., Shamsiev R.S., Kravchenko V.V., Skryabina A.Yu., Zamalyutin V.V.* Spectral and quantum-chemical research of antipyrine derivatives of some rare earth elements complex compounds 69

SYNTHESIS AND PROCESSING OF POLYMERIC COMPOSITES

- Lyusova L.R., Selina A.Yu., Naumova Yu.A.* About formulation of nitrile-butadiene rubber adhesives with a constant stickiness 75
- Petrov O.O., Munkin N.I., Ganiev E.Sh., Simonov-Yemelyanov I.D., Prokopov N.I., Gervald A.Yu.* Integrated assessment of characteristics of color masterbatches for dyeing rigid PVC compositions in the process of high-speed extrusion 78
- Tolstov A.M., Yurtsev L.N., Veselov I.V.* Calculation of time-temperature dependence of vulcanization in manufacture of rubber-reinforced tracks 83

INFORMATION TECHNOLOGIES AND APPLIED MATHEMATICS

- Akhmadulina E.N., Savin E.S.* Proton oscillation in a three-minimum potential 88
- Valishin A.A., Stepanova T.S.* Accumulation of local defects in the zone of forced elasticity before the front of a failure crack in polymers 92
- Shevelev V.V., Osipov R.A.* Analytical model of adhesion forces between the crack sides 104
- Yakovenko Ya.Ya., Skvortsova M.I., Mikhailova N.A.* Modelling the relation between the structure and physicochemical properties of organic compounds on the basis of optimal atomic parameters 110

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 имени 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 доктора (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 следующим разделам:

- Теоретические основы химической технологии
- Химия и технология органических веществ
- Химия и технология лекарственных препаратов и биологически активных соединений
- Синтез и переработка полимеров и композитов на их основе
- Химия и технология неорганических материалов
- Математические методы и информационные технологии в химии и химической технологии
- Эколого-экономические проблемы химических технологий.

- С правилами для авторов можно ознакомиться по адресу: www.mitht.ru/vestnik
 - Электронная версия журнала выходит с февраля 2006 г.
 - Хорошо подготовленные статьи выходят в свет не более чем через 4 месяца после поступления в редакцию.
 - Плата за публикации, в том числе с аспирантов, не взимается.
-

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.