

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. Швец  
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., Швец В.И.* От анализа липидов к  
липидомике 3  
*Рукосуева Н.В., Захарова Д.А., Безруков Д.А., Каплун А.П., Швец 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., Воинова Н.А., Генералова Н.Б.,  
Жижин К.Ю., Кузнецов Н.Т.* Методы синтеза металлоработанов  
с полиэдрическим остовом  $[M_6H_9]$ , где  $M = Ni, Pd$  64

*Рукк Н.С., Шамсиев Р.С., Кравченко В.В., Скрябина 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., Скворцова М.И., Михайлова Н.А.* Моделирование  
связи между структурой и физико-химическими свойствами органических  
соединений на основе оптимальных атомных параметров 110

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., Klimenko N.M., Temkin O.N.* Non-empirical calculations of minimal energetic ways of addition of H<sub>2</sub>F<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 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., Votina N.A., Generalova N.B., Zhizhin K.Yu., Kuznetsov N.T.* Methods of synthesis of metallaboranes with polyhedral cage [MB<sub>9</sub>H<sub>9</sub>], 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](http://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.