

Программа-тезисы Мини-Симпозиума "Бутлеровское наследие – 17-18" (БН-17-18)

г. Казань. Казанский национальный исследовательский технологический университет.

27 февраля 2018 г.

8.00-9.00 **Регистрация участников БН-17-18** (ауд. Б-315, корпус "Б" КНИТУ,
ул. Карла Маркса, 72)

ОТКРЫТИЕ БН-17-18

(Конференц-холл корпуса "Б" КНИТУ, ул. Карла Маркса, 72)

9.00-9.05 **Бардовское посвящение Бутлеровскому наследию**

1) 9.05-9.20

Юшко Сергей Владимирович – и.о. ректора КНИТУ, д.т.н., проф., член-корр. АН РТ.

Приветственная речь

2) 9.20-9.35

Барабанов Вильям Петрович – почётный председатель РХО им. Д.И. Менделеева Татарстана, член правления Научного фонда имени А.М. Бутлерова, д.х.н., проф. КНИТУ, председатель Совета по историко-мемориальной деятельности КНИТУ.

Приветственная речь

3) 9.35-10.00

Курдюков Александр Иванович – директор Научного фонда имени А.М. Бутлерова, к.х.н., начальник отдела центра новых информационных технологий КНИТУ, исполнительный редактор химического журнала Бутлеровские сообщения.

Курдюков Александр Иванович, Офицеров Евгений Николаевич. Современные задачи и достижения фундаментальной науки и химической технологии в мире и в КНИТУ. Краткая информация о развитии журнала "Бутлеровские сообщения" и перспективных проектах Научного фонда имени А.М. Бутлерова.

ПЛЕНАРНЫЕ ВЫСТУПЛЕНИЯ

(Конференц-холл корпуса "Б" КНИТУ, ул. Карла Маркса, 72)

Сопредседатель пленарной сессии – член.-корр. РАН Антипин Игорь Сергеевич

4) 10.00-10.30

Офицеров Евгений Николаевич – председатель правления Научного фонда имени А.М. Бутлерова, д.х.н., проф., декан РХТУ им. Д.И. Менделеева.

А.М. Бутлеров и Д.И. Менделеев. Переплетение судеб. Развитие теории Бутлерова в наши дни

К 25-летию несостоявшейся революции в химии

Мы привыкли рассматривать жизненные пути, отмечать жизненные вехи двух гигантов мировой химии несвязанными и независимыми друг от друга. На самом деле их жизненные пути переплетались начиная с 1850 года, когда Дима Менделеев из-за препон чиновников не стал студентом Казанского университета. Это стартовая дата общения этих учёных, которая продолжалась вплоть до смерти А.М. Бутлерова (и место смерти Бутлерова было связано с Менделеевым). Не смотря на все перипетии их отношений (достаточно вспомнить злополучную

комиссию по спиритизму) они всю жизнь поддерживали друг друга в принципиальных вопросах. Вот об этих контактах, о тесных взаимоотношениях и оценки их значимости в России и в мире речь пойдёт в докладе.

За последние 60 лет после доклада Полинга на юбилейном конгрессе, посвящённом столетию теории строения органических соединений и юбилею А. Кекуле, как ни странно, не предпринимались попытки оценить состояние современной теоретической органической химии как этапа эволюционного развития теории Бутлерова. В настоящее время в рамках санкций на Западе теорию **химического** строения органических соединений (ТХСОС) Бутлерова свели к структурной теории, где место Бутлерову не осталось. В докладе предпринята попытка оценки современного состояния теоретической органической химии как тупика в развитии вследствие отхода от основных постулатов ТХСОС Бутлерова.

5) 10.30-11.00

Мионов Владимир Фёдорович – председатель РХО им. Д.И. Менделеева Татарстана, член правления Научного фонда имени А.М. Бутлерова, д.х.н., проф., зав. лабораторией фосфорсодержащих аналогов природных соединений, гл.н.с. ИОФХ им. А.Е. Арбузова, член-корр. РАН, член правления Научного фонда имени А.М. Бутлерова.

Современные аспекты химии пентокоординированных соединений фосфора

=====

11.00-11.30 **Кофе-брейк** (ауд. Б-315, корпус "Б" КНИТУ, ул. Карла Маркса, 72)

=====

27 февраля 2018 г.

11.00-11.30 **СТЕНДОВАЯ СЕССИЯ** (холл возле ауд. Б-315)

- б) ***Васильева Элина Алексеевна, Мухамедзянов Ринат Рустамович, Ахмедьянова Раиса Ахтямовна, Петухов Александр Александрович, Бескровный Дмитрий Валерьевич, Ситмуратов Тулкинбек Сабирбаевич, Зевакина Анастасия Олеговна. Окисление этилбензола кислородом воздуха в присутствии гомогенных и гетерогенных Mn(II)-содержащих катализаторов***

Кафедра технологии синтетического каучука КНИТУ

Исследован процесс окисления этилбензола кислородом с образованием в качестве первичного промежуточного продукта соответствующего гидропероксида. Процесс проводился окислением кислородом воздуха в стеклянном реакторе барботажного типа при температуре 120 °С и атмосферном давлении в присутствии гомогенного и гетерогенного марганецсодержащих катализаторов. Показано, что использование в качестве катализатора марганецсодержащих соединений, нанесенных на поверхность инертного носителя $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$, приводит к более полному распаду гидропероксида этилбензола с минимальным индукционным периодом. В связи с этим, количество катализатора, требуемого для получения и полного распада соответствующих гидропероксидов до спиртов и кетонов, в случае использования нанесенного на инертную поверхность, будет значительно меньшим, чем для гомогенного. В качестве методов оценки качественного и количественного анализа полученных продуктов использованы йодометрическое титрование, газовая хроматография с масс-селективным детектором и метод НПВО ИК-спектроскопии.

- 7) **Дулмаев Сергей Эдуардович, Сазонов Олег Олегович, Каюмов Мударрис Нафисович, Давлетбаева Ильсия Муллаяновна. Исследование гиперразветвленных аминокэфиров борной кислоты**

Кафедра технологии синтетического каучука КНИТУ

На основе борной кислоты, триэтаноламина и гидроксилсодержащих соединений различной молекулярной массы получены гидролитически стабильные гиперразветвленные аминокэфиры борной кислоты (АЭБК), содержащие терминальные гидроксильные группы. С использованием ЯМР ¹¹B спектроскопии и динамического светорассеяния были получены сведения о строении и реакционной способности АЭБК. Было установлено, что аминокэфиры борной кислоты образуют межмолекулярные комплексы и имеют наряду с гидроксильными реакционноспособные связи В-ОН. Установлено распределение по размерам кластеров АЭБК.

- 8) **Иванов Дмитрий Борисович, Шарафиева Зия Фаритовна, Иванова Ирина Андреевна, науч. рук. Ибрагимова Дина Абдулрафиковна. Исследование растворимости АСПО в узких фракциях прямой перегонки нефти**

Кафедра химической технологии переработки нефти и газа КНИТУ

Образование отложений асфальтенов, смол и парафинов (АСПО) является очень серьезной проблемой в мировой нефтяной промышленности. Эти отложения осаждаются на внутренней поверхности эксплуатационных скважин и нефтетрубопроводов и вызывают уменьшение внутреннего диаметра и, как следствие, снижение пропускной способности НКТ и скважин. Так как высокомолекулярные парафины в больших или малых количествах почти всегда присутствуют в добываемой нефти, образуя «решетку», состоящую из связанных друг с другом парафиновых кристаллов и делая нефть более вязкой, удаление парафинов является актуальной и очень важной проблемой. Существует несколько способов, из которых наиболее распространенным является удаление химическое удаление с использованием различных органических растворителей. Моющая, растворяющая и диспергирующая способности обеспечивают эффективность растворителя парафиновых отложений. АСПО – очень сложная, структурированная система асфальтенов, смол и парафинов. Поэтому эффективность различных удаляющих реагентов зависит не только от состава растворителя, но и от сложности строения и состава отложений. С практической точки зрения, экономически выгодно использовать в качестве растворителей фракции прямой перегонки нефти, полученные из той же нефти, что и образовавшиеся отложения.

- 9) **Шарафиева Зия Фаритовна, Иванова Ирина Андреевна, Харитонова Ольга Сергеевна, науч. рук. Ибрагимова Дина Абдулрафиковна. Статистические методы анализа в применении к многокомпонентным нефтяным системам**

Кафедра химической технологии переработки нефти и газа КНИТУ

Цель исследования: проанализировать массив экспериментальных данных по составу и свойствам проблемных нефтей и выявить весомые факторы, влияющие на их свойства и структурную организацию. Объекты исследования: 20 нефтей месторождений РФ, осложненные проблемами выпадения асфальто-смоло-парафиновых соединений в скважинном оборудовании и в трубопроводах. Методы исследования: калориметрия, газожидкостная хроматография, определение физико-химических свойств нефти по стандартным методикам (плотность, вязкость, температура застывания, содержание фракций до 200 °С, компонентный состав). Результаты эксперимента: определены два фактора, которые определяют формирование макроскопических свойств нефтяных дисперсных систем, сделаны выводы о влиянии высокомолекулярных твердых n-алканов на изменение структуры нефти.

27 февраля 2018 г. Продолжение работы Пленарной сессии

Сопредседатель пленарной сессии – член.-корр. РАН Миронов Владимир Фёдорович

10) 11.30-12.00

Антипин Игорь Сергеевич – член правления Научного фонда имени А.М.

Бутлерова, д.х.н., проф., зав. кафедрой органической химии КФУ, член-корр. РАН, член правления Научного фонда имени А.М. Бутлерова.

*Антипин Игорь Сергеевич, Коновалов Александр Иванович, Соловьёва Светлана Евгеньевна. **Функциональные производные тиокаликсаренов: технологическая платформа для дизайна наноматериалов***

11) 12.00-12.30

Гумеров Фарид Мухамедович – член правления Научного фонда имени А.М.

Бутлерова, д.т.н., проф., зав. кафедрой теоретических основ теплотехники КНИТУ

Сверхкритические флюидные среды в технологических процессах

12) 12.30-13.00

Курдюков Александр Иванович, Гумеров Фарид Мухамедович, Габитова Асия Радифовна.

О роли ассоциатной парадигмы в развитии фундаментальных аспектов теории реакционной способности применительно к различным физическим условиям. Становление нового научного направления – Препаративной спиновой химии

13) 13.00-13.30

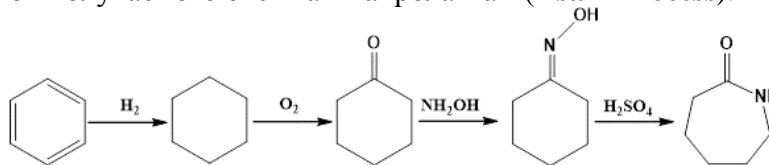
Эльдар Мусаевич Дахнави – д.х.н., вед.н.с. Лаборатории каталитических

исследований Томского государственного университета, директор ООО "ГУТЭКСИ".

!!!!НАШ СПОНСОР!!!!

Современное состояние производства капролактама: проблемы, перспективы и практические взгляды

Современное производство капролактама является многотоннажным (6.880 млн. тонн по данным 2016 г.*) и многостадийным процессом, который базируется на промежуточном образовании циклогексанона из циклогексана или фенола, с его дальнейшим оксимированием и перегруппировкой получаемого оксима в капролактаме (**Asahi Process**):



* «Евразийский химический рынок» – международный деловой журнал №154(07)/2017

Доля использования бензольного сырья в производстве капролактама составляет около 78 %, фенольного – 19%, остальное приходится на толуол. В настоящее время около 95% мирового производства капролактама базируется на классической технологии – **Asahi Process**, а менее 5% – на технологии прямого синтеза циклогексаноксима из циклогексана фотонитрозированием (**Toray Process**) и на технологии прямого синтеза из толуола последовательными реакциями окисления, восстановления и нитрозирования (**SNIA – Viscosa Process**).

Практически все мировые лидеры по производству капролактама, такие как, BASF (с долей мирового производства 11.5 %), Sinopet (10.6 %), Fibrant (10.1 %), Shandong Nail (5.8 %), CPDC (5.8 %), Honeywell (5.8 %) и ряд других испытывают трудности в кардинальном изменении используемых ими технологий. Несмотря на некоторые достижения в области

усовершенствования, производство капролактама все еще остается очень энергоемким с высокими расходными нормами сырья и с образованием большого количества побочных и сопутствующих продуктов. Некоторые производства находятся на грани остановки по причине несовершенства используемой технологии и нерентабельности производства, а существуют, благодаря собственной переработке капролактама в более маргинальный продукт – искусственное волокно.

Один из лицензиаров технологии капролактама – компания DSM (Голландия) – декларирует разработку революционной технологии под названием **Altam process**. Новая технология разработана совместно с компаниями DuPont и Shell, она полностью отличается от традиционного способа, так как основана на использовании доступного и относительно дешевого вида сырья, включающего бутadiен, CO, NH₃ и H₂. **Altam process** находится на завершающей стадии разработки и, по мнению специалистов, может стать доминирующим мировым технологическим процессом получения капролактама.

Анализ патентной литературы и других открытых источников информации за последних 20 лет показал, что интерес к развитию производства капролактама в основном связан с необходимостью повышения эффективности ключевой стадии, а именно, процесса окисления циклогексана. Наибольшее количество найденных документов приходится на заявки/патенты Китая, США, Японии, России, а также на международные заявки. Несмотря на отлаженную технологию и длительный опыт эксплуатации, эффективность превращения циклогексана в промежуточный продукт капролактама – циклогексанон – остается низкой. Стадия окисления циклогексана характеризуется наибольшими энергозатратами из-за низкой конверсии – 4÷6% и необходимости рецикла циклогексана, а также образованием большого количества побочных продуктов (селективность – 75÷85%).

В работе приводятся сведения о крупных мировых производителях капролактама, сравнительные показатели существующих технологий, результаты усовершенствования отдельных стадий, преимущественно по стадиям окисления циклогексана и выделения циклогексанона из оксидата. Более подробно рассказывается о существующих проблемах и о потенциале улучшения производственных показателей на примере конкретного производства.

Особое место в данной работе уделено обсуждению результатов лабораторных исследований и вопросам селективного окисления циклогексана в присутствии различных каталитических систем, моделирования и масштабирования ключевых стадий, а также показаны пути достижения высоких показателей производства капролактама.

=====
13.30-14.40 Обеденный перерыв

Рекомендуемые обеденные заведения: Кафе "Молодежное", ул. Л. Толстого, 8;
Столовая при корпусе "А" КНИТУ, ул. К. Маркса, 68

=====

27 февраля 2018 г.

СЕКЦИОННЫЕ ВЫСТУПЛЕНИЯ

Секция 1: Фундаментальные основы химии. Электромагнитные поля и реакционная способность. Фотокатализ. Квантово-химическое и компьютерное моделирование. Исследование кинетики и механизмов каталитических и радикальных процессов.

(Конференц-холл корпуса "Б" КНИТУ, ул. Карла Маркса, 72)

Председатель секции – проф. Офицеров Е.Н.

14) 14.40-15.00

Храповский Григорий Михайлович – д.х.н., проф. Кафедры катализа, нач. научно-исследовательского отдела компьютерной химии КНИТУ

Теоретическое изучение механизма термического разложения энергонасыщенных соединений

15) 15.00-15.20

Урядов Владимир Георгиевич – к.х.н., с.н.с., доцент Кафедры органической химии КНИТУ

Активация движения молекул реагентов в жидкой фазе

Рассмотрены формы движения молекул в газовой и жидкой фазе. Сопоставлены формы движения молекул и условия получения от окружающей среды энергии, необходимой для прохождения потенциального барьера в ходе химической реакции. Приведены сравнительные данные по кинетике реакции диенового синтеза, в условиях термически инициируемой реакции и инициации микроволновым излучением в серии ароматических растворителей для антрацена и 9-метилантрацена с малеиновым ангидридом, а также инданоциклона со стиролом. Показано, что в случае термически инициируемой реакции реакционная способность аддендов изменяется симбатно значению потенциала ионизации молекул растворителя. В случае инициации микроволновым излучением реакционная способность аддендов изменяется симбатно значению дипольного момента молекул растворителя и полярности аддендов. Полученные результаты соответствуют представлению о механизме передачи энергии предреакционному комплексу для реакций в жидкой фазе путем соударения комплекса реагентов с молекулами растворителя сольватной оболочки.

16) 15.20-15.40

Самуилов Александр Яковлевич – к.х.н., доц. Кафедры технологии синтетического каучука КНИТУ

Самуилов Александр Яковлевич, Самуилов Яков Дмитриевич. Реакционная способность комплексов с водородными связями в реакциях присоединения и замещения

17) 15.40-16.00

Маслий Алексей Николаевич – к.х.н., доц. Кафедры неорганической химии КНИТУ

Квантово-химическое исследование включения аква- и аминоккомплексов меди(II) в кукурбит[6,8]урил

Обсуждаются результаты квантово-химического DFT исследования структуры и термодинамике образования соединений включения на основе аква и аминоккомплексов Cu(II) и кукурбит[6,8]урила. Термодинамика формирования комплексов в кавитанах оценивается с учетом того, что этот процесс рассматривается как реакция замещения, в которой гостевой комплекс частично или полностью перемещает молекулы воды, которые существуют внутри полости. Показано, что молекулы воды играют важную роль в фиксации гостевого комплекса внутри полости из-за водородных связей с атомами кислорода в порталах кавитанда. Включение иона Cu(II) в CB[6] приводит к образованию соединения включения $\{[Cu(H_2O)_4]^{2+} \cdot 2H_2O\} @CB[6]$, а в CB[8] структура $\{[Cu(H_2O)_6]^{2+} \cdot 4H_2O\} @CB$

[8]. Показано, что в СВ[8] возможны как прямое включение тетрааминокомплекса Cu(II), так и по механизму, когда молекулы аммиака замещают молекулы воды в аквакомплексе Cu(II), ранее включенном в кавтанд. В случае СВ[6] возможен только второй механизм.

18) 16.00-16.20

Хаматгалимов Айрат Раисович – д.х.н., с.н.с., зам. рук. коллективного спектроскопического центра физико-химических исследований строения, свойств и состава веществ и материалов (ЦКП-САЦ) ИОФХ им. А.Е. Арбузова.

Хаматгалимов Айрат Раисович, Коваленко Валерий Игнатьевич.

Полимерные формы радикальных фуллеренов C₇₄(D_{3h}) и C₇₆(T_d)

Работа посвящена теоретическому обоснованию экспериментально обнаруженных, но не объясненных фактов образования полимерных форм фуллеренов C₇₄(D_{3h}) и C₇₆(T_d). Нами убедительно показано, что движущей силой образования в ходе электродугового синтеза фуллеренов линейных и циклического олигомеров C₇₄(D_{3h}) и C₇₆(T_d) является радикальная природа этих фуллеренов. Выявлена общая закономерность распределения спиновых плотностей фуллеренов C₇₄(D_{3h}) и C₇₆(T_d), имеющих соответственно две и четыре феналенил-радикальные субструктуры молекул. При переходе от димеров фуллерена C₇₄(D_{3h}) к цепочкам тримеров, тетрамеров и пентамеров, во всех случаях триплетные конфигурации остаются энергетически более выигрышными. Отмечено, что в олигомерах межфуллереновые углеродные связи слабые, что позволяет легко переходить от полимерных форм к индивидуальным молекулам радикальных C₇₄(D_{3h}) и C₇₆(T_d). Можно ожидать, что в полимерном состоянии такие реакционноспособные фуллерены могут сохраняться определенное время и при необходимости легко переводиться в радикальные состояния либо их нагреванием, либо растворением в пиридине, анилине, и подобных растворителях. Таким образом, полученные нами результаты открывают неожиданные пути химической модификации радикальных фуллеренов и получения новых важных производных на их основе.

19) 16.20-16.40

Воробьев Алексей Станиславович – аспирант Института высокотемпературной электрохимии УрО РАН, г. Екатеринбург

Воробьев Алексей Станиславович, Галашев Александр Евгеньевич.

Квантово-механический расчет характеристик силицевого анода для Na-ионных батарей

Натриевое электрохимическое устройство в отличие от литиевого не является пожароопасным. Переход от литий-ионных к натриевым батареям приведет к увеличению мощности электрохимических источников тока и скорости их зарядки. Натрий-ионные элементы могут обеспечивать более высокий заряд и разрядный ток, что является явным преимуществом для применения в электрических транспортных средствах. Силицен имеет большой потенциал для использования в качестве анода как в литий-ионных батареях, так и в натрий-ионных источниках тока, но до сих пор не получил внимания в отношении ионных аккумуляторов. На основе первых принципов теории функционала плотности изучено взаимодействие атомов Na и Li с автономным силиценом. Такие расчеты позволяют сравнивать поведение ионов Na или Li на кремниевых пленках. Сначала мы определили наиболее устойчивые места адсорбции и их соответствующие энергии связи для одного Na или Li адатома на рассматриваемых мембранах. Затем мы постепенно увеличиваем концентрацию этих атомов до достижения полного насыщения поверхностей. Помимо энергии адсорбции рассчитаны также длины связей Si-Na для разных местоположений адсорбированных атомов щелочного металла. Вычислен спектр плотности электронных состояний для каждой рассматриваемой системы. Интегрирование по энергии этой функции дает число электронов, содержащихся в области, приписываемой атому. В приближении обобщенного градиента рассчитывается зонная структура системы «силицен/Na». Металлическая проводимость возникает в результате полной односторонней адсорбции атомов Na на силицене.

20) 16.40-17.00

Сироткин Ростислав Олегович – к.х.н., доц. Кафедры технологии пластических масс КНИТУ

Сироткин Ростислав Олегович, Сироткин Олег Семенович. О вариантах оценки компонент химической связи и необходимости учета степени металличности связи в химических веществах

В настоящей работе сделан обзор вариантов описания химической связи в рамках классических представлений с учетом ее ковалентной, металлической и ионной компонент. При этом особое внимание уделено степени металличности связи и показана необходимость ее учета для правильной характеристики химической связи.

Авторами работы совместно с соавторами разработана методика определения двух или трех компонент гомо- и гетероядерной химической связи, соответственно, используя электроотрицательность. Показано влияние соотношения компонент связи на конкретные свойства веществ и материалов. Проведенная количественная оценка металличности гомо- и гетероядерных связей с использованием квантово-химических расчетов показала определенное совпадение данных с результатами, полученными через электроотрицательность.

21) 17.00-18.50

Григорьев Евгений Иванович – к.х.н., доц. Кафедры технологии синтетического каучука КНИТУ

Экскурсия в Комнату-музей академика А.Е. Арбузова, в Музей истории КНИТУ (Б-314) и научные лаборатории Кафедры технологии синтетического каучука КНИТУ

22) 19.00-22.00

Романова Светлана Ивановна – и.о. директора Учебно-научно-производственного "Комбината студенческого питания" КНИТУ (ул. Л. Толстого, 8)

Товарищеский вечер в Кафе "Молодежное"

28 февраля 2018 г.

ДИСКУССИОННЫЙ СТОЛ

9.00-10.00 (Конференц-холл корпуса "Б" КНИТУ, ул. Карла Маркса, 72)

Председатели совещания:

**и.о. ректора КНИТУ проф. Юшко Сергей Владимирович
и проф. Офицеров Евгений Николаевич**

Обсуждаемые вопросы:

23) 9.00-9.20

Инициаторы дискуссии – Юшко С.В. и Курдюков А.И.

Обсуждение проблематики адаптации к новым условиям теории и практики современных химических разработок и технологий. Роль и место фундаментальных исследований в КНИТУ.

24) 9.20-9.40

Инициаторы дискуссии – Офицеров Е.Н. и Курдюков А.И.

Обсуждение научной проблематики и перспектив развития ассоциатной парадигмы и теории радикалов. Акцентирование значения новейших передовых технологий в лабораторной и промышленной практике, выработка предложений по их практическому внедрению.

25) 9.40-10.00

Инициатор дискуссии – Юшко С.В.

Обсуждение перспектив развития КНИТУ.

28 февраля 2018 г.

Секция 2: Спектральные методы исследования и анализа. Электрохимия и электрохимический анализ. Аналитическая и физическая химия. Исследование равновесий в гомогенных и гетерогенных системах. Методы формирования и исследования поверхности твердых тел.

(Конференц-холл корпуса "Б" КНИТУ, ул. Карла Маркса, 72)

Председатель секции – проф. Юсупов Рафаил Акмалович

26) 10.00-10.20

Доломатов Михаил Юрьевич – д.х.н., проф. кафедры физической электроники и нанофизики. Физико-технический институт Башкирского государственного университета; и кафедры технологии нефти и газа. Технологический факультет Уфимского государственного нефтяного технического университета.

Новые методы исследования электронной структуры и физических свойств сложных молекулярных систем и наночастиц

27) 10.20-10.40

Латыпов Камил Фаридович – аспирант кафедры физической электроники и нанофизики. Физико-технический институт Башкирского государственного университета.

Латыпов Камил Фаридович, Паймурзина Наталья Халитовна, Доломатов Михаил Юрьевич. Новый метод определения потенциалов ионизации и средства к электрону молекул и наночастиц по оптическим спектрам

28) 10.40-11.00

Юсупов Рафаил Акмалович – д.х.н., проф. Кафедры аналитической химии, сертификации и менеджмента качества КНИТУ

Юсупов Рафаил Акмалович, Бахтияев Саид Алиевич, Халилова Алина.

Обеспечение достоверности моделирования равновесий в водных растворах в условия образования твёрдой фазы.

=====

11.00-11.40 **Кофе-брейк** (ауд. Б-315, корпус "Б" КНИТУ, ул. Карла Маркса, 72)

=====

28 февраля 2018 г.

Секция 1: Фундаментальные основы химии. Электромагнитные поля и реакционная способность. Фотокатализ. Квантово-химическое и компьютерное моделирование. Исследование кинетики и механизмов каталитических и радикальных процессов.

(Конференц-холл корпуса "Б" КНИТУ, ул. Карла Маркса, 72)

Председатель секции – проф. Офицеров Евгений Николаевич

29) 11.40-12.00

Сироткин Олег Семенович – д.х.н., проф., зав. Кафедрой Материаловедение и технологии материалов Казанского государственного энергетического университета.

Сироткин Олег Семенович, Сироткин Ростислав Олегович.

Фундаментальные основы нового этапа развития теории химического строения органических соединений А.М. Бутлерова

В 1860 году в Карлсруэ (Германия) химическим сообществом было принята двухуровневая модель строения вещества в виде атомно-молекулярного учения. А уже в 1861 г. А.М. Бутлеров впервые заложил основы теории химического строения вещества, которая нашла наибольшее применение в органической химии (теория химического строения органических соединений). Это было связано, прежде всего, с тем, что органические вещества являются преимущественно ковалентными соединениями элементов, то есть существуют в виде индивидуальных химических частиц – молекул. Однако со временем стало ясно, что помимо молекулярных химических соединений значительная часть химических соединений элементов с преимущественно металлическим или ионным типом связи не образует молекул.

Целью настоящей работы является обобщение фундаментальных основ, обеспечивших эволюционное развитие теории химического строения органических соединений А.М. Бутлерова.

30) 12.00-12.20

Бунтин Артем Евгеньевич – ст. преп. в Казанском государственном энергетическом университете

Бунтин Артем Евгеньевич, Сироткин Ростислав Олегович, Сироткин Олег

Семенович. Особенности химического строения, свойств и технологий неорганических продуктов на основе оксидов

В работе впервые в рамках развиваемого системного химико-теоретического подхода предложено использование методики расчета компонент химической связи для установления комплексного влияния состава и соотношения компонент химической связи (степень ковалентности – СК, металличности – СМ и ионности – СИ) на структуру (молекулярная и немолекулярная и т.д.), агрегатное состояние, специфику свойств и технологии неорганических веществ на основе оксидов. Установлено, что преимущественно ковалентный тип связи элемент-элемент (СК>СМ) и элемент-кислород (СК>СМ+СИ) исходных сырьевых и промежуточных веществ, определяет окислительно-восстановительный, экзотермический, каталитический характер химических реакций соединения в технологии получения оксидов и кислот. Ионно-ковалентный тип связи элемент-кислород (СК>СИ>СМ) определяет большую номенклатуру используемых технологических операций: высокотемпературные химические процессы силикатообразования и обжига, физико-химических (плавление, аморфизация) и механических процессов (приготовление шихты, различные способы формования) в технологии получения силикатов. Преимущественно металлический тип связи элемент-элемент (СМ>СК) и ионный тип связи элемент-кислород (СИ>СМ>СК) исходных веществ определяет эффективность и преобладающую роль эндотермических реакций разложения при получении оксидов и физико-химических (электрохимических) операций (электролиз водных растворов и расплавов) при получении щелочей и т.д. Установлено, что по мере роста ковалентности и снижении ионности связи в оксидах происходит закономерное изменение их структуры из немолекулярной ионной в трехмерную, двумерную, одномерную (линейную) и низкомолекулярную, агрегатного состояния (из твердого в жидкое и газообразное) и свойств (из основных в амфотерные и далее кислотные и

др.), определяя специфику технологических процессов (разновидность, совокупность, параметры) получения из них кислот, солей, щелочей и других неорганических веществ (электролиз, силикатообразование, аморфизация, окислительно-восстановительные процессы, абсорбция).

28 февраля 2018 г.

Секция 3: Современные препаративные методы в элементоорганической, неорганической и органической химии. Сверхкритические флюидные технологии. Супрамолекулярная химия. Нанотехнология. Синтез и изучение свойств природных соединений, как потенциальных лекарственных препаратов. Тонкая органическая и неорганическая биохимия. Токсикология. Экология. Химические особенности биологических систем.

(Конференц-холл корпуса "Б" КНИТУ, ул. Карла Маркса, 72)

Председатель секции – проф. Гумеров Фарид Мухамедович

31) 12.20-12.50

Миндубаев Антон Зуфарович – к.х.н., с.н.с. Института органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, доц. Кафедры химической кибернетики КНИТУ

*Миндубаев Антон Зуфарович, Волошина Александра Дмитриевна, Бабынин Эдуард Викторович, Валидов Шамиль Завдатович, Сапармырадов Керемли Ашырмухаммедович, Хаяров Хасан Рафаэлевич, Бадеева Елена Казимировна, Барсукова Татьяна Александровна, Минзанова Салима Тахиятулловна, Миронова Любовь Геннадьевна, Акосах Йав Абайе, Яхваров Дмитрий Григорьевич. **Обезвреживание белого фосфора посредством микробиологического разложения***

Впервые показана возможность деградации белого фосфора (P₄) под действием осадка сточных вод (ОСВ) водоочистных сооружений. Показано, что белый фосфор угнетает рост микроорганизмов за счет образования токсичных промежуточных продуктов его деградации. Установлено, что снижение концентрации P₄ обратно пропорционально продолжительности лаг-фазы роста и активности метаболических процессов микрофлоры. Проведен поиск метаболитов белого фосфора и предложен путь его метаболизма. Впервые произведены посевы микроорганизмов различных таксономических групп (грибов, стрептомицетов и бактерий) в синтетические культуральные среды, содержащие белый фосфор в качестве единственного источника фосфора. В данных средах микроорганизмы росли и не испытывали фосфорного голодания. Это первый известный пример включения белого фосфора в биосферный круговорот элемента фосфора. Самая высокая концентрация, примененная в данном исследовании, соответствует превышению ПДК белого фосфора в сточных водах в 5000 раз. Впервые показан рост устойчивости культур в результате направленной селекции. Сравнение последовательностей рибосомных генов гриба, устойчиво метаболизирующего белый фосфор, с последовательностями базы данных GenBank, позволило идентифицировать данный микроорганизм, как новый штамм *Aspergillus niger*, которому был присвоен номер *A.niger* AM1. Белый фосфор не проявляет токсических свойств в отношении этого штамма. Замедленный рост последнего в среде с белым фосфором объясняется не токсичностью P₄, а труднодоступностью его в качестве источника биогенного элемента фосфора. Наличие генотоксических свойств при исследованиях белого фосфора с использованием теста Эймса ранее не подтверждалось. Для этой цели необходимо использовать батарею тестов, включая SOS-lux тест на ДНК-повреждающую активность. В представленной работе SOS-lux тест с использованием индикаторного штамма *Salmonella typhimurium* впервые продемонстрировал генотоксичность белого фосфора при отсутствии токсичности по тесту Эймса. По предварительным данным, устойчивость к белому фосфору у *A.niger* AM1 закреплена в геноме. Дано морфологическое описание устойчивых штаммов.

32) 12.50-13.20

Колсанов Вячеслав Сергеевич – аспирант Кафедры теоретических основ теплотехники КНИТУ

Колсанов¹ Вячеслав Сергеевич, Максудов¹ Рашид Наилевич, Егоров² Владислав Иванович, Валиуллин² Ленар Рашитович, Рагинов² И.С.

Получение высокоочищенного композитного материала для замещения дефектов кости в среде сверхкритического флюида

¹ Казанский национальный исследовательский технологический университет

² Федеральный центр токсикологической и радиологической безопасности

Средняя потребность в костном матриксе для проведения хирургических вмешательств по исправлению дефектов костной ткани составляет от 10 до 30 граммов на операцию. Высокая потребность в высокоочищенном костном матриксе очевидна.

Настоящая работа направлена на решение этой задачи методами селективной сверхкритической очистки и импрегнации. Осуществляется очистка исходного материала сверхкритической экстракцией жиров и липидов с последующей импрегнацией деминерализованного костного матрикса стимуляторами, цитостатиками и антибиотиками. В качестве растворителя используется диоксид углерода при сверхкритических параметрах состояния (СК СО₂, P_{кр} = 7.3 МПа; T_{кр} = 304.2 К). Его преимуществами для решения этой задачи являются невысокие критические параметры, инертность, доступность и дешевизна.

33) 13.20-13.40

Симонова Надежда Николаевна – с.н.с. кафедры химии и технологии переработки эластомеров КНИТУ

Симонова Надежда Николаевна, Гужова Светлана Владимировна, Романова Наталья Константиновна, Хакимуллин Юрий Нуриевич, Гадельшин Раиль Наилевич, Черезова Елена Николаевна, Яруллин Рафинат Саматович.

Идентификации веществ, мигрирующих из медицинских резиновых пробок, с использованием методов масс-спектрометрии и особенности при их исследованиях

Медицинские резиновые пробки, производимые и используемые как в России, так и за рубежом для укупорки инфузионных и инъекционных препаратов, согласно проведенным исследованиям специалистами КНИТУ по идентификации их составов показали, что все они производятся на основе бутил- и галобутилкаучуков с использованием канцерогенных ускорителей вулканизации.

=====

13.40-14.40 Обеденный перерыв

Рекомендуемые обеденные заведения: Кафе "Молодежное", ул. Л. Толстого, 8;
Столовая при корпусе "А" КНИТУ, ул. К. Маркса, 68

=====

28 февраля 2018 г.

*Продолжение работы **Секции 3***

(Конференц-холл корпуса "Б" КНИТУ, ул. Карла Маркса, 72)

34) 14.40-15.00

Готлиб Елена Михайловна – д.т.н., проф. Кафедры технологии синтетического каучука КНИТУ

Готлиб Елена Михайловна, Нгуен Тхи Лан Ань, Ха Тхи Нья Фьонг, Милославский Дмитрий Геннадьевич, Ахмедьянова Раиса Ахтямовна.

Масло каучукового дерева - перспективный модификатор эпоксидных полимеров

Нами обоснована эффективность использования, с экологической и экономической точки зрения, масла каучукового дерева, в качестве, полученного на основе возобновляемого растительного сырья, модификатора эпоксидных материалов. Описаны преимущества применения масла каучукового дерева (МКД) по сравнению с соевым маслом, как более дешевого в странах произрастания *Hevea brasiliensis*, являющегося побочным продуктом получения натурального каучука, извлекаемого из зерен с более высоким маслосодержанием, не употребляемым человеком в пищу, и не используемым в производстве кормов для животных, из-за содержания цианогенных гликозидов, которые под действием специфического фермента превращаются в цианид.

Показано, что модификация МКД обуславливает рост износостойкости и улучшение антифрикционных характеристик эпоксидных композиций. Совместное использование коммерчески доступного соевого масла и высших жирных кислот обеспечивает высокий модифицирующий эффект в эпоксидных композициях. Водостойкость эпоксидных покрытий, модифицированных МКД и соевым маслом остается на достаточном для их эффективной эксплуатации уровне. Оба типа исследованных растительных масел снижают содержание гелефракции эпоксидных композиций, то есть уменьшают степень их поперечного сшивания. Кроме того они выполняют функции активных разбавителей, увеличивающих жизнеспособность эпоксидных композиций.

35) 15.00-15.20

Барановский Николай Викторович – к.ф.-м.н., доц. Энергетического института Национального исследовательского Томского политехнического университета
Барановский Николай Викторович, Кузнецов Гений Владимирович, Янкович Елена Петровна. Использование математических моделей переноса нагретых частиц на слой лесного горючего материала и его последующего воспламенения для проектирования геоинформационных систем

Лесные пожары могут возникать в результате как природных, так и антропогенных причин. Один из источников повышенной температуры, характерный для антропогенного фактора, это нагретые до высоких температур частицы металлов и неметаллов. Такие частицы могут образоваться при пожаре на промышленном объекте и быть вынесены на слой лесного горючего материала, если такой объект расположен на лесопокрытой территории. Численное моделирование транспорта нагретой частицы от очага возгорания описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений. Разработана группа математических моделей зажигания лесного горючего материала нагретой до высоких температур металла или неметалла с учетом испарения влаги, пиролиза сухого органического вещества, мгновенного транспорта газообразных продуктов пиролиза в пристенную область частицы, химического реагирования в газовой фазе и диффузионного переноса массы в газовой фазе. Также рассмотрен вариант выпадения нескольких нагретых до высоких температур частиц на слой лесного горючего материала. Проведена оценка быстродействия различных программных реализаций на базе разработанных математических моделей зажигания лесного горючего материала нагретой частицей. Оптимальные программные реализации могут быть использованы при проектировании программных инструментов на встроенном языке в геоинформационных системах прогноза, оценки и мониторинга лесных пожаров, обусловленных антропогенными причинами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований. Грант № 17-29-05093

36) 15.20-15.40

Барановский Николай Викторович, Кузнецов Гений Владимирович, Янкович Елена Петровна. *Использование математических моделей физико-химических процессов воспламенения деревьев наземным грозовым разрядом при проектировании геоинформационных систем*

Лесные пожары наносят колоссальный ущерб государству и загрязняют атмосферу. Последнее особенно заметно ввиду переноса поллютантов в атмосферу, в том числе, в результате трансграничного переноса загрязняющих веществ. Природной причиной возникновения лесных

пожаров являются наземные грозовые разряды, которые могут приводить к воспламенению лесных горючих материалов в условиях сухих гроз. Разработана группа физических и математических моделей зажигания деревьев хвойных и лиственных пород в результате воздействия электрического тока наземного грозового разряда, который проходит по влагонепроводящим путям ствола дерева. В результате выделения Джоулева тепла происходит разогрев древесины ствола дерева. При определенных условиях происходит воспламенение ствола, которое может служить первичной причиной возникновения вторичных источников повышенной температуры (нагретых до высоких температур частиц древесины). Такие частицы выпадают на напочвенный покров и приводят к возгоранию лесного горючего материала. Разработаны математические модели с учетом инертного прогрева древесины, испарения влаги, пиролиза сухого органического вещества, химического реагирования в газовой фазе, диффузионных процессов массопереноса. Проведена оценка быстродействия различных программных реализаций на базе разработанных математических моделей зажигания деревьев. Оптимальные программные реализации могут быть использованы при проектировании программных инструментов на встроенном языке в геоинформационных системах прогноза, оценки и мониторинга лесных пожаров, обусловленных грозовой активностью.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и администрации Томской области. Грант № 16-41-700831.

28 февраля 2018 г.

Секция 4: Новые методы синтеза и прикладные исследования полимеров, полимерных, композитных и других материалов. Промышленная химия, нефте- и нефтегазовая химия, химия синтез-газа. Сверхкритические технологии. Физико-химия энергоёмких процессов, энергетических веществ и материалов. Специальная техническая химия.

(Конференц-холл корпуса "Б" КНИТУ, ул. Карла Маркса, 72)

Председатель секции – проф. Зенитова Любовь Андреевна

37) 16.00-16.20

Ради Ганев – к.т.н., инженер, доц. Университета строительной техники и архитектуры (София, Болгария)

Ради Ганев, Илиян Хутов. Структурные изменения при многолетнем старении одноосновного пороха из трех конфигураций

В докладе предлагаются результаты наблюдения за структурными изменениями одноосновного пороха в случайно обнаруженных боеприпасах, естественно устаревших в военных хранилищах, с установленной печатью на гильзе датой производства 1905-го года. Наблюдение произведено сканированием электронной спектроскопией.

38) 16.20-16.40

Зенитова Любовь Андреевна – д.т.н., проф., и.о. зав. Кафедрой технологии синтетического каучука, директор Казанского научно-исследовательского института полимеров и спецкаучуков КНИТУ

Зенитова Любовь Андреевна, Янов Владислав Владимирович, Даутова Алсу Нуретдиновна, Алексеев Евгений Иванович, Юсупов Р. Обоснование и реализация нового подхода к созданию биodeградируемых полимерных композиционных материалов

Представлены обоснования использования натурального каучука в качестве агента, способствующего биodeградации полимерных композиционных материалов на основе термопластичных полимеров. Показано, что некаучуковые компоненты, присутствующие в натуральном каучуке, вызывают повышенную биodeструкцию материалов с его использованием.

39) 16.40-17.00

Харлампиди Харлампий Эвклидович – д.х.н., проф., гл.н.с., зав. Кафедрой общей химической технологии КНИТУ.

Основные способы получения оксида пропилена (гидропероксидный и пероксидный методы)

40) 17.00-17.20

Понкратов Антон Станиславович – ассистент Кафедры химической кибернетики КНИТУ

Понкратов Антон Станиславович, Валеева Рауза Тимуровна, Мухачев Сергей Германович, Понкратова Светлана Алексеевна, Нуртдинов Руслан Минсагирович. Биохимическая конверсия возобновляемого сырья в топливные спирты

За последние годы в Российской Федерации произошла переориентация в использовании сырьевых ресурсов для биотехнологических производств с невозобновляемых источников (синтетические спирты и органические кислоты, полученные из нефти и газа) на возобновляемые сырьевые ресурсы. Сырье, применяемое для получения топлива из возобновляемого сырья, должно ежегодно воспроизводиться в количествах, достаточных для промышленной переработки, иметь высокое содержание перерабатываемых веществ, например, таких как целлюлоза, крахмал, сахара, а также хорошо сохраняться и быть относительно дешевым.

Физические и химические свойства сырья имеют большое значение при исследовании процессов гидролиза и в дальнейшем для получения качественного гидролизата. Такие физические параметры сырья, как структура, влагоемкость, влажность, определяют скорость, степень гидролиза и выход редуцирующих веществ. Для реализации процессов гидролиза с целью получения гидролизатов необходимо учитывать кинетику реакций гидролиза полисахаридного сырья, поскольку выход продуктов гидролиза зависит от соотношения скоростей их синтеза и распада, определяемых физико-химическими условиями (температура, давление, концентрации гидролизующих агентов, гидромодуль, интенсивность перемешивания и др.).

Практический интерес представляет создание кинетической модели гидролиза растительного сырья, так как полученные данные позволяют выбрать оптимальные режимы проведения процесса, спрогнозировать параметры гидролиза, способствующие более высокому выходу и качеству целевого продукта. Математическое моделирование дает возможность выявить основные закономерности процесса и описать кинетику во всем интервале изменений технологических параметров.

Следующей целью является синтез технологической системы для измерения доброкачественности гидролизатов растительных отходов как вторичных материальных ресурсов для производства биоспиртов и разработка алгоритма оценки доброкачественности гидролизатов на основе измерения бродильной активности сахаромикетов.

41) 17.20-17.50

Курдюков Александр Иванович – директор Научного фонда имени А.М. Бутлерова
Подведение итогов Мини-Симпозиума БН-17-18. Награждение. Закрытие.

42) 17.50-18.50

Габитова Асия Радифовна – к.т.н., доц. Кафедры теоретических основ теплотехники КНИТУ

Прощальная экскурсия в научные лаборатории Кафедры теоретических основ теплотехники КНИТУ

1-4 апреля 2018 г. – Научная школа – программа дополнительного образования ПДО

(расписание согласно приказу по КНИТУ №93-о от 19.02.2018)

=====