

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ СИНТЕЗА, МОДИФИКАЦИИ И ПЕРЕРАБОТКИ ПОЛИМЕРОВ

Тезисы докладов
IX Всероссийской (заочной)
научной конференции
(г.Уфа, 3 – 4 июня 2024 г.)



**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ**

**ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ СИНТЕЗА,
МОДИФИКАЦИИ И ПЕРЕРАБОТКИ ПОЛИМЕРОВ**

*Тезисы докладов
IX Всероссийской (заочной)
научной конференции
(г. Уфа, 3 – 4 июня 2024 г.)*

Научное электронное издание сетевого доступа

Уфа
РИЦ УУНИТ
2024

УДК 541.6
ББК 24.7
Т33

*Печатается по решению кафедры высокомолекулярных соединений
и общей химической технологии ИХЗЧС УУНиТ.
Протокол № 11 от 18.06.2024 г.*

Редакционная коллегия:

д-р хим. наук, профессор **Е.И. Кулиш** (*отв. редактор*);
канд. хим. наук, доцент **М.В. Базунова** (*отв. секретарь*);
д-р хим. наук, профессор **С.В. Колесов**;
канд. хим. наук, доцент **В.В. Чернова**;
канд. хим. наук, доцент **А.С. Шуршина**

Т33

Теоретические и экспериментальные исследования процессов синтеза, модификации и переработки полимеров: сборник тезисов докладов IX Всероссийской (заочной) научной конференции (г. Уфа, 3 – 4 июня 2024 г.) / отв. ред. Е.И. Кулиш. [Электронный ресурс] / Уфимск. ун-т науки и технологий. – Уфа: РИЦ УУНиТ, 2024. – 118 с. – URL: <https://uust.ru/media/documents/digital-publications/2024/088.pdf> – Загл. с титула экрана.

ISBN 978-5-7477-5918-3

В сборнике обсуждаются такие современные направления, как математическое моделирование процессов синтеза, модификации и переработки полимеров, контролируемая радикальная полимеризация, исследование наноразмерных гетероструктур на основе полимерных и композиционных материалов и создание на их основе солнечных элементов, химических и био- наносенсоров, инновационных полимерных материалов для фармакологии и медицине, теория и практика создания биodeградируемых полимерных материалов на основе возобновляемого сырья, энерго- и ресурсосберегающие технологии при синтезе и переработке высокомолекулярных соединений.

Предназначено для студентов и аспирантов химических направлений вузов, а также для молодых ученых. Тексты воспроизводятся с представленных авторами оригиналов.

УДК 541.6
ББК 24.7

ISBN 978-5-7477-5918-3

© УУНиТ, 2024

СЕКЦИЯ № 1. СИНТЕЗ И МОДИФИКАЦИЯ ПОЛИМЕРОВ

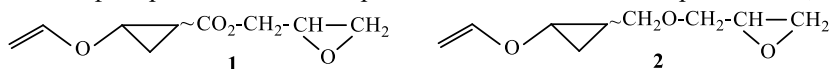
УДК 547-311.326.371

ИССЛЕДОВАНИЕ АНТИМИКРОБНЫХ СВОЙСТВ ЭПОКСИДНЫХ КОМПОЗИЦИЙ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЭПОКСИСОДЕРЖАЩИМИ ВИНИЛОКСИЦИКЛОПРОПАНАМИ

Р.З. Шахназарли

Министерство Науки и Образования Азербайджанской Республики,
Институт Полимерных Материалов, Сумгаит, Азербайджан

Эпоксидные олигомеры (ЭО) – одни из наиболее востребованных в настоящее время классов термореактивных полимеров с уникальными свойствами. Они нашли широкое применение в различных отраслях техники, однако срок службы эпоксидных композиций со временем сокращается по различным причинам. Одна из них – загрязнение микроорганизмами поверхности полимерного изделия. Для улучшения антибактериальных свойств в состав эпоксидных композиций вводят антибактериальные соединения [1, 2]. В представленной работе эпоксидная олигомерная смола ЭД-20 модифицирована эпоксисодержащими винилоксициклопропанами 1,2:



Синтезированные соединения содержат помимо активной винильной группы также эпоксидную и циклопропановую группы. Перечисленные функциональные группы отличаются высокой реакционной способностью и полярностью, а трехуглеродный цикл в структуре соединения придает ему выраженную биологическую активность. Для придания антибактериальных свойств эпоксидным композициям соединения 1 и 2 были введены в состав смолы ЭД-20 в количестве 5–20 мас. %. Отверждение композиций осуществляли в следующем режиме: 10 ч при комнатной температуре, 6 ч при 60°C, 6 ч при 80°C и 2 ч при 120°C. Синтезированные соединения хорошо совмещались с эпоксидной смолой и уменьшали ее вязкость. Спектральные исследования показали участие их в реакции отверждения с сохранением циклопропанового фрагмента в эпоксидной матрице.

Исследование антимикробных свойств отвержденных композиций осуществляли методом диффузии в агар. Для тестов использовали штаммы бактерий *Staphylococcus aureus* и *Escherichia Coli*. Исследования показали, что в отличие от чистой эпоксидной смолы образцы модифицированных композиций проявляли антимикробную активность по отношению как *S. aureus*, так и *E.Coli*, причем ингибирование роста бактерий *S. aureus* соединением 1 было заметным уже при концентрации 5 мас. %.

Список использованных источников

1. Quan X., Wang J., Zhao S. et al. *Prog. Org. Coat.* 2018; 14: 9-17
2. Wu Ch., Yan Y., Wang Y. et al. *e-Polymers.* 2020; 20: 262-271

© Шахназарли Р.З., 2024

**УСЛОВИЯ ПОЛУЧЕНИЯ И СВОЙСТВА
ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОГО ПОЛИМЕРНОГО
НАПОЛНИТЕЛЯ ДЛЯ ЭЛАСТОМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИЙ**

А. Акмырадов, М.А. Ибрагимов, А.П. Рахматуллина

ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», г. Казань, РТ, Россия

Разработка и применение системы «кремнекислотный наполнитель / каплинг-агент» улучшило свойства композитов, но она имеет недостатки: высокий вес наполнителей, выделение летучих органических соединений и специальные требования к оборудованию и технологии производства резиновых смесей. Хорошей альтернативой, в значительной степени, лишённой недостатков упомянутой системы, является применение наноразмерных функционализированных полимеров (ФП) в сочетании с соответствующими каплинг-агентами. Их получают методом эмульсионной и растворной полимеризации. Примером могут служить микрогели Нанопрен, выпускаемые фирмой Ланксес.

В рамках настоящей работы был синтезирован латекс ФП на основе стирола, дивинилбензола и этиленгликольдиметакрилата методом эмульсионной сополимеризации. Получение эмульсии состоит из следующих стадий: приготовление водной и масляной фаз, их смешение и ультразвуковая обработка в течение одной минуты при мощности 50-60 Гц до образования стабильной эмульсии белого цвета с последующей сополимеризацией. Синтез осуществляли при перемешивании со скоростью 500 об/мин, атмосферном давлении и температуре, равной 70 °С, в трехгорлой колбе объемом 0,5 дм³, помещенной в термостат и снабжённой термометром, обратным холодильником и мешалкой, в течение 4 ч.

У полученного латекса определили сухой остаток (30%). Методом динамического рассеяния света установлено, что размеры частиц ФП варьируются в пределах 50-1500 нм в зависимости от соотношения исходных сомономеров.

В ИК-спектре ФП присутствует пик поглощения карбонила (-C=O) с частотой 1731 см⁻¹, характерной для эфиров карбоновых кислот. Таким образом, сополимеры являются функционализированными соединениями.

Элементный анализ ФП, полученный с анализатора 5E-CHN2200 (Китай), содержит элементы (% мас.): С (83,61), Н (7,90) и О (8,49). Динамическая вязкость латекса ФП зависит от температуры. Обнаружено, что при повышении температуры уменьшается вязкость и улучшаются технологические свойства при переработке.

© Акмырадов А. и др., 2024

ПОЛИМЕРЫ С МОЛЕКУЛЯРНЫМ ОТПЕЧАТКОМ ИЗ УГЛЕОТХОДОВ

О.В. Арнт, А.Х. Жакина, Е.П. Василец, А. Әлжанкызы
ТОО Институт органического синтеза и углехимии РК, Караганда,
Казахстан

Твердые отходы добычи и переработки угля составляют значительную часть от общего объема промышленных отходов, образующихся в мире. В нашем богатом углем регионе (Казахстан, Караганда) авторы провели большую работу по использованию окисленных (непригодных) углей для энергетического комплекса [1-3]. В данной работе рассматриваются перспективы переработки угольных отходов в адсорбционные материалы. Адсорбционные материалы были получены методом молекулярного импринтинга, где матрицей является ион Zn^{2+} . Этот метод синтеза сорбционных материалов позволяет сополимеризовать функциональный мономер с заданной молекулой путем сшивания, а затем удалить молекулу матрицы с образованием полимеров с молекулярным отпечатком (рисунок 1).

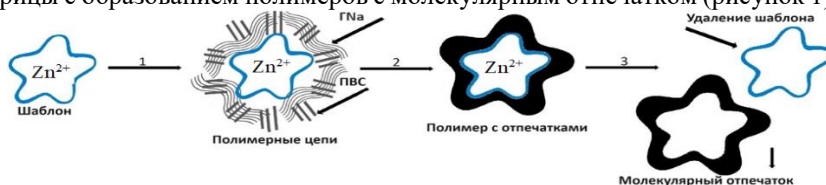


Рис. 1. Схема получения молекулярно-имплантационного полимера.

Схема включает в себя три этапа: 1 – образование комплекса между молекулой матрицы и полимерными цепями в растворе; 2 – образование полимера; 3 – удаление соединениями молекулы матрицы с образованием полостей (отпечатков) в полимере. Распознавание может осуществляться по форме, размеру или специфическим взаимодействиям между функциональными группами молекулы матрицы и полимера.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РК по теме гранта AP19678338 «Фундаментальные основы создания молекулярно-импринтированных полимеров из углеотходов».

Список использованных источников

1. Zhakina, A.Kh.; Arnt, O.V.; Vassilets, Ye.P.; Shur, V.Ya.; Volegov, A.S. Russ. J. Appl. Chem., 2020, 93 (9), 1366.
2. Zhakina, A.Kh.; Rakhimova, B.B.; Vassilets, Ye.P.; Arnt, O.V.; Muldakhmetov, Z. Polymers, 2024, 16 (2), 264.
3. Muldakhmetov, Z.M.; Gazaliev, A.M.; Zhakina, A.Kh.; Vassilets, Ye.P.; Arnt, O.V. Bull. Univ. Karaganda Chem. Ser., 2022, 108 (4), 182.

© Арнт О.В. и др., 2024

УДК 661.71

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ КАТАЛИЗАТОРА НА ВЫХОД ОКСИ ПРОПИЛЕНА В ПРОЦЕССЕ ЭПОКСИДИРОВАНИЯ ПРОПИЛЕНА ГИДРОПЕРОКСИДОМ ИЗОПРОПИЛБЕНЗОЛА

И.М. Багавеев, Н.В. Улитин, М.А. Бочков, Х.Э. Харлампи,

К.А. Терещенко, Д.А. Шиян, С.Н. Тунцева, Т.Л. Пучкова

ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», г. Казань, Россия

Окись пропилена используется для производства простых полиэфиров, полиуретанов, полиэфирполиолов [1]. На ПАО «Нижекамскнефтехим» реализована технология получения окиси пропилена в процессе эпексидирования пропилена гидропероксидом этилбензола. По этой технологии совместно производятся окись пропилена и стирол. Окись пропилена можно также получать в процессе эпексидирования пропилена гидропероксидом изопротпилбензола. В этом процессе не образуется побочный продукт, который может быть далее реализован (как стирол). Здесь в качестве побочного продукта образуется диметилфенилкарбинол, который сначала превращается в изопротпилбензол, а затем – в гидропероксид изопротпилбензола, т.е. реализуется концепция «зеленой» химии [1].

Нами исследовано влияние концентрации молибденового катализатора в процессе эпексидирования пропилена гидропероксидом изопротпилбензола на выход (β) окиси пропилена. Молибденовый катализатор (полученный путем растворения порошка металлического молибдена в смеси изопротпилового спирта и реакционной смеси окисления изопротпилбензола) готовили по методике [2]. Варьировали концентрацию катализатора, меняя содержание молибдена в реакционной смеси (C_{Mo}) от $1 \cdot 10^{-4}$ до $1 \cdot 10^{-3}$ г-атом Mo на 1 моль гидропероксида изопротпилбензола. Процесс проводили в течение 1 часа, в реакторе смешения периодического действия (объем реактора 1 литр, степень заполнения реактора 50 %) с лопастной мешалкой (обороты мешалки 60 об/мин), давление в реакторе 20 атм., температура в реакторе 115°C.

Установлено, что максимальный выход окиси пропилена достигается при содержании молибдена в реакционной смеси $5 \cdot 10^{-4}$ г-атом Mo на 1 моль гидропероксида изопротпилбензола и составляет 83,63% (см. рис). При дальнейшем увеличении концентрации катализатора выход окиси пропилена не увеличивается (см. рис).

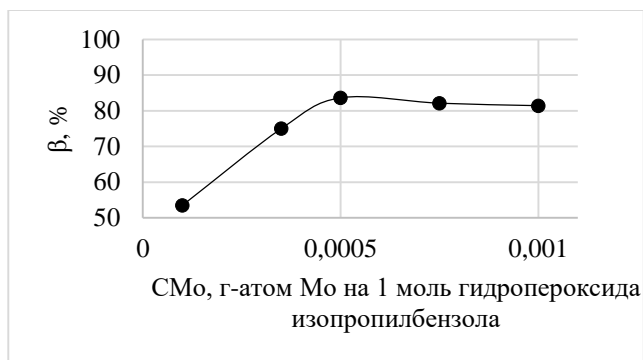


Рис.1. Влияние концентрации катализатора на выход окиси пропилена
Список использованных источников

1. Yamamoto, J., Works, C., Koike, H. and Yoshida, S. Trends and views in the development of technologies for propylene oxide production // Sumitomo Kagaku Report. – 2019. – С. 1-9.

2. Патент № 2683319 С1 Российская Федерация, МПК В01J 37/03, В01J 23/28. Способ получения катализатора для окисления олефинов: № 2018145168: заявл. 18.12.2018: опубл. 28.03.2019 / Х.Э. Харлампиди, А.А. Гайфуллин, Г.Г. Елиманова [и др.].

© Багавеев И.М. и др., 2024

УДК 678

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ СИНТЕЗА НА СВОЙСТВА ПОЛИАМИДА-6 М.В. Баранников

ООО «ПолиКом», г. Иваново, Россия

Методом двухступенчатой низкотемпературной гидролитической полимеризацией капролактама был получен форполимер полиамида-6. Целью работы было изучение влияния температуры полимеризации на свойства получаемого форполимера.

Полученный равновесный гранулят был исследован с помощью ряда физико-химических методов анализа.

Результаты исследований представлены в таблице 1.

Таблица 1

Т, °С/К	[КЛ]р, масс %	[НМС]р, масс %	[ОЛ]р, масс %	η _{отн}
220/493	5,83	7,77	1,94	2,33
215/488	5,59	7,45	1,86	2,38

210/483	5,34	7,12	1,78	2,44
---------	------	------	------	------

Представленные данные показывают, что с уменьшением температуры процесса происходит увеличения вязкости и уменьшение содержания низкомолекулярных соединений в полимере. Таким образом, полученные результаты открывают возможности для разработки новой технологии получения полиамида-6 для переработки его в пластические массы, нити и волокна.

© Баранников М.В., 2024

УДК 667.622.3

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БИОУГЛЯ В КАЧЕСТВЕ ЧЕРНОГО ПИГМЕНТА

Г.М. Бикбулатова, А.Н. Грачев, Ф.С. Шарифуллин

ФГБОУ ВО КНИТУ, г. Казань, Россия

Одним из перспективных методов переработки иловых осадков является пиролиз, который позволяет переработать иловые осадки в углистый остаток (биоуголь). В основе данной технологии лежит замкнутый процесс термической переработки, позволяющий без опасных выбросов получить твёрдый продукт, что позволяет уменьшить объём иловых осадков в десятки раз, а также достигнуть 5-го класса опасности для биоугля. Имеются литературные, а также практические данные о возможности применения биоугля в качестве добавки в почву, в строительных материалах, а также как рекультивант. В тоже время растёт интерес к тому, чтобы сделать лакокрасочный материал более устойчивым и снизить общей углеродный след в лакокрасочной промышленности. В настоящее время в промышленности в основном используется чёрный пигмент – технический углерод (сажа), который считается вредным для здоровья населения: пигменты канцерогенны и образуют большое количество токсичных остатков, которые при попадании в атмосферу увеличивают загрязнение воздуха. Задача данного исследования – доказать возможность замены технического углерода, полученного из ископаемых ресурсов, биоуглем, полученным методом пиролиза иловых осадков сточных вод, что приведёт к более чистому производству красок, а также расширит область применения биоугля, полученного утилизацией иловых осадков.

Были проведены предварительные исследования по возможности применения биоугля, полученного при быстром пиролизе иловых осадков. Образец биоугля предварительно был измельчен на шаровой мельнице в течение 5 минут (начальный размер более 500 мкм). Далее проводилось диспергирование в алкидном лаке с наполнением 30%. По сравнению с красным железистоокисным пигментом (КЖП) измельчение происходит медленнее. По маслосемкости I рода можно утверждать, что критическое

объемное содержание пигмента ниже, чем у КЖП. По укрывистости значения соизмеримы. РН водной вытяжки составила 7,58, массовая доля водорастворимых веществ 2 - 3%. Также были проведены исследования, при котором биоуголь подвергался термической обработке при температуре 600°C для полного удаления летучих компонентов. Результаты показали, что показатели диспергируемости улучшились и понизился уровень агрегации частиц. Проведенные исследования дают основания для подтверждения возможности использования биоугля в качестве пигмента черного цвета.

© Бикбулатова Г.М., Грачев А.Н., Шарифуллин Ф.С., 2024

УДК 541.64

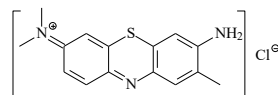
**ФОТОПОЛИМЕРИЗАЦИЯ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА
С УЧАСТИЕМ ФЕНОТИАЗИНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ**
И.Л. Боброва, О.С. Лизякина, Л.Б. Ваганова, Д.Ф. Гришин
ННГУ им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия

Синтетические красители успешно используются в многокомпонентных фотоиницирующих системах для синтеза сшитых полимеров [1]. Примеры получения линейных полимеров с целевыми молекулярно-массовыми характеристиками с участием красителей крайне немногочисленны [2].

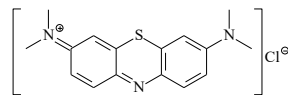
Целью данной работы явилось исследование особенностей полимеризации метилметакрилата (ММА) с участием систем феноптиазиновых красителей / алкилгалогенид / трибутиламин (Bu_3N) в условиях облучения белым светом. Катализаторами служили толуидиновый голубой (ТГ) и метиленовый синий (МС). В качестве инициатора использовали *трет*-бутил хлорид (Bu^tCl) и *трет*-бутил бромид (Bu^tBr).

Установлено, что при облучении растворов мономера в присутствии ТГ или МС в сочетании с используемыми инициаторами и Bu_3N как активатором наблюдается инициирование радикальной полимеризации ММА. При этом состав инициирующей системы и соотношения ее компонентов оказывают существенное влияние на кинетические закономерности процесса и молекулярно-массовые характеристики синтезируемого полиММА.

Так, вне зависимости от строения красителя увеличение его концентрации приводит к снижению общей скорости полимеризации и



Толуидиновый
голубой (ТГ)



Метиленовый синий
(МС)

предельной степени превращения ММА. При этом Bu^tCl как инициатор оказался менее активным, чем Bu^tBg. Несмотря на наблюдающийся в ряде случаев линейный рост среднечисленной молекулярной массы с конверсией мономера, получаемые образцы, как правило, характеризуются коэффициентами полидисперсности на уровне 2.0 и выше, что свидетельствует о низкой степени контроля над процессом.

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект №23-23-00130).

Список использованных источников

1. Fouassier J.-P., Lalevée J. Photoinitiators for Polymer Synthesis. WILEY-VCH, 2021.

2. Corbin D.A., Miyake G.M. // Chem. Rev. 2022. V. 122. I. 2. P. 1830.

© Боброва И.Л. и др., 2024

УДК 544.431: 544.473-039.63-386: 665.939.57

АНАЛИЗ КИНЕТИКИ РАДИКАЛЬНО-КООРДИНАЦИОННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА В ПРИСУТСТВИИ ТИТАНОЦЕНДИХЛОРИДА

**В.П. Бондаренко⁽¹⁾, Д.А. Шиян⁽¹⁾, А.А. Осипов⁽¹⁾, А.В. Беккер⁽¹⁾,
К.А. Терещенко⁽¹⁾, Н.В. Улитин⁽¹⁾, С.В. Колесов⁽²⁾**

⁽¹⁾ Казанский национальный исследовательский технологический университет, г. Казань, Россия

⁽²⁾ Уфимский Институт химии Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, г. Уфа, Россия

Радикально-координационная полимеризация (РКП) метилметакрилата инициируется веществом или светом и протекает в присутствии металлоценов. В РКП в реакционной системе формируется два канала роста цепи (радикальный и координационный). Полученный в ходе данного процесса полиметилметакрилат является макроинициатором, который инициирует полимеризацию при добавлении новых порций мономера. Данное свойство можно использовать, чтобы применять композицию «макроинициатор – метилметакрилат» в качестве акрилового клея. Эта композиция имеет преимущества по сравнению с классическим акриловым клеем: 1) макроинициатор сам по себе является высокомолекулярной добавкой, повышающей вязкость клея и препятствующей свободному истечению клея из соединения; 2) безобрывный координационный рост цепи на макроинициаторе должен приводить к получению более высокомолекулярного и синдиотактического полиметилметакрилата (по сравнению с радикальным ростом цепи), в результате этого клеевое соединение должно сохранять свою прочность в большем температурном диапазоне. В связи с этим актуальной является задача построения кинетической модели РКП метилметакрилата, с помощью которой можно

осуществить поиск оптимальных условий синтеза макроинициатора и отверждения акрилового клея. Важно, чтобы построенная модель имела минимальное количество идентифицируемых параметров (констант скоростей реакций), поскольку с увеличением количества идентифицируемых параметров растет степень неопределенности каждого из них, что снижает прогностическую способность модели. Таким образом, цель данной работы – построение кинетической модели РКП метилметакрилата и анализ единственности найденного решения обратной кинетической задачи. В качестве модельного металлоцена выбрали востребованный в промышленности титаноцендихлорид.

Ранее по результатам квантово-химических расчетов была предложена кинетическая схема РКП метилметакрилата в присутствии титаноцендихлорида [1]. В ней присутствуют реакции классической радикальной полимеризации и реакции еще двух параллельных маршрутов, представленные на рис. 1. Используя эту кинетическую схему, создали кинетическую модель. Ее параметры нашли в результате решения обратной кинетической задачи на основе экспериментальных кинетических кривых РКП метилметакрилата в присутствии титаноцендихлорида и конверсионных зависимостей среднечисленной и среднемассовой молекулярных масс полиметилметакрилата, полученного в процессе РКП.

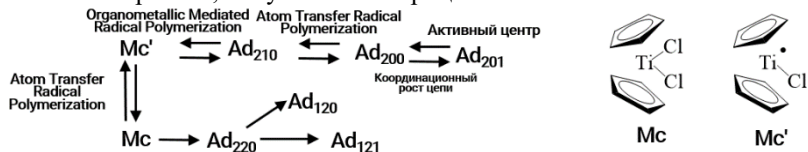


Рис. 1. Формирование аддуктов Ad_{abc} в процессе РКП метилметакрилата; Ad_{abc} – аддукт, содержащий в своем составе титаноцендихлорид или его фрагмент; a – количество циклопентадиенильных колец в составе аддукта; b – количество атомов хлора в составе аддукта; c – количество скоординированных молекул метилметакрилата в составе аддукта.

Провели анализ единственности решения обратной кинетической задачи по методике, описанной в монографии [2]. Показали, что в матрице Якоби кинетической модели (матрице частных производных скоростей реакций по константам скоростей реакций) отсутствуют линейно зависимые вектор-столбцы. Таким образом, показали, что решением обратной кинетической задачи являются не нелинейные параметрические функции параметров модели, а сами параметры модели. Поэтому данный анализ не позволил каким-либо образом упростить кинетическую модель. Однако данная методика позволяет анализировать только формальную структуру уравнений кинетической модели без учета значимости каждой отдельной скорости химической реакции. В дальнейшем планируется оценить интервал

неопределенности каждого параметра кинетической модели в отдельности и на этом основании исключить из модели незначимые слагаемые (и соответственно исключить из кинетической схемы реакции, слабо влияющие на кинетику РКП метилметакрилата).

Список использованных источников

1. Фризен, А.К. Металлокомплексные соединения в радикально инициируемой полимеризации. Квантово-химическое обоснование концепции радикально-координационной полимеризации: дис. ... д-ра хим. наук / А.К. Фризен. – Уфа, 2017. – 336 с.

2. Исмагилова, А.С., Спивак, С.И. Обратные задачи химической кинетики. – Saarbrücken: LAMBERT Academic Publishing, 2013. – 117 с.

© Бондаренко В.П. и др., 2024

УДК 543.544

НЕПОДВИЖНЫЕ ФАЗЫ НА ОСНОВЕ СЕТЧАТЫХ СТРУКТУР Ю.Ю. Гайнуллина

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

На сегодняшний день в мире разделены рацематы практически любого класса соединений: от неполярных до полярных. В литературе имеются сведения о десятках тысяч разделений в нескольких тысячах работ в этой области. Впервые было проведено разделение энантиомеров в условиях газовой хроматографии. В данной работе разработана новая неподвижная фаза для разделения энантиомеров на основе меламина, урацила и его производных.

В настоящей работе в качестве исходного сорбента использовался инертный носитель Inerton NAW. Модификаторами были урацил, меламин и 5-гидрокси-6-метилурацил, синтезированный в УФИЦ РАН. Количество наносимого модификатора составляло 1% от массы инертного носителя. Полученным сорбентом заполнялась металлическая колонка длиной 1 м и внутренним диаметром 3 мм. Аналитами в данной работе были (+) ментол и (-) ментол, (+) камфора и (-) камфора, (+) камфен и (-) камфен, (+) лимонен и (-) лимонен, а также их рацематы. Энантиоселективность полученных неподвижных фаз изучалась методом газовой хроматографии на хроматографе Цвет 500М с пламенно-ионизационным детектором.

Исходя из полученных данных по удерживаемым объемам, было установлено, что все адсорбенты на основе супрамолекулярных сетчатых структур способны разделять энантиомеры. Причём, энантиоселективность наблюдается в широком диапазоне температур. Для камфенов наилучшая селективность была достигнута на колонке с меламином при 60 и 80 °С ($\alpha=2.36$ и 2.67 соответственно). Неподвижная фаза на основе урацила показала высокую энантиоселективность в отношении камфенов при температурах 40-

50 и 60-75 °С. Лимонен на урациле наилучшим образом разделяется при 55 °С. На ГМУ факторы селективности для лимонена имеют меньшие значения, и достигают максимума при 50-55 °С. А наилучшая энантиоселективность по отношению к лимонену наблюдалась на колонке с меламинам при 40-45 °С. В отличие от лимонена, камфора на меламинам наилучшим образом разделяется при 65-80 °С. Однако ещё более высокий фактор селективности наблюдался на адсорбенте на основе супрамолекулярной структуры урацила при 85 °С. По отношению к полярной молекуле ментола наиболее высокие факторы селективности были достигнуты также на урациле при 70 °С ($\alpha=2.35$) и 55 °С ($\alpha=2.04$). Несколько хуже делит ментол неподвижная фаза на основе меламина – наибольший фактор селективности наблюдается при 80 °С и составляет 1.83.

Обнаружено, что супрамолекулярные сетчатые структуры урацила, ГМУ и меламина способны разделять энантиомеры камфена, лимонена, камфоры и ментола с высокими факторами селективности. Явление энантиоселективности не связано с адсорбцией в полости супрамолекулярных структур. Причиной энантиоселективности супрамолекулярных структур урацила, ГМУ и меламина является различие в энергии и энтропии адсорбции энантиомеров на поверхности супрамолекулярной структуры. Для камфена, камфоры и ментола на ГМУ и ментола на меламинам вклад энтальпийного фактора является преобладающим.

© Гайнулина Ю.Ю., 2024

УДК 661.729.542.97

ПРИМЕНЕНИЕ 2-ЭТИЛГЕКСАНОАТОВ 2 и 12 ГРУПП В ОКИСЛЕНИИ ЭТИЛБЕНЗОЛА

**И.Н. Залялиев, Н.А. Новиков, Я.Л. Люлинская, Н.В. Улитин,
К.А. Терещенко, Д.А. Шиян, Н.М. Нуруллина, С.Н. Тунцева,
Т.Л. Пучкова, Х.Э. Харлампи**

ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», г. Казань, Россия

Стирол в основном применяется для производства полистирольных пластиков и синтетических каучуков. Основным способом производства стирола является Халкон-процесс, который включает в себя следующие стадии: жидкофазное некаталитическое окисление этилбензола до гидропероксида этилбензола; эпоксидирование пропилен гидропероксидом этилбензола с образованием окиси пропилен и метилфенилкарбинола; дегидратация метилфенилкарбинола до стирола; гидрирование ацетофенон до метилфенилкарбинола. Из-за протекания большого количества побочных реакций окисление этилбензола (первая стадия Халкон-процесса)

характеризуется низким показателем селективности (85%). В связи с этим процесс ведут при низких значениях конверсии этилбензола (8-10%). Производительность последующих стадий Халкон-процесса зависит от количества получаемого гидропероксида этилбензола на первой стадии. В связи с этим необходимо увеличить конверсию этилбензола при сохранении селективности, что возможно за счет использования катализатора.

В качестве катализатора окисления этилбензола рассмотрели 2-этилгексаноаты 2 и 12 групп (Mg, Ca, Sr, Ba, Zn, Cd), поскольку в работах [1-3] они проявили высокую активность в окислении кумола. Определение наилучшего катализатора для промышленного окисления этилбензола проводили с помощью кинетического моделирования. Для построения кинетической модели провели лабораторные эксперименты окисления этилбензола в присутствии рассматриваемых катализаторов. Определение концентраций целевого и побочного продуктов осуществляли хроматографически. Записали общую кинетическую схему окисления этилбензола в присутствии 2-этилгексаноатов 2 и 12 групп, включающую классические реакции зарождения, продолжения и обрыва цепи, реакции образования и распада промежуточных аддуктов катализатора с компонентами реакционной смеси и молекулярные реакции. Кинетическую модель записали по закону действующих масс в виде системы дифференциальных уравнений. Для записи констант скоростей реакций использовали уравнение Аррениуса. Для определения значений параметров (предэкспоненциальных множителей и энергий активации) уравнений Аррениуса решили обратную кинетическую задачу методом прямого поиска нулевого порядка [4].

С использованием кинетической модели провели вычислительные эксперименты (начальные концентрации этилбензола и гидропероксида этилбензола 8.163 и 0.022 моль/л соответственно, начальные концентрации остальных компонентов реакционной смеси приняли равными нулю), температура реакционной смеси 428 К), по результатам которых показали:

1) 2-этилгексаноат Sr является наиболее эффективным катализатором окисления этилбензола, поскольку он обеспечивает самую высокую скорость распада промежуточных аддуктов катализатора с компонентами реакционной смеси, которые служат дополнительными источниками свободных радикалов;

2) степень влияния 2-этилгексаноата Sr на последующие стадии Халкон-процесса будет наименьшей, так как он быстрее переходит в неактивную форму по сравнению с 2-этилгексаноатами Mg, Ca, Ba, Cd, Zn.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №22-13-00461, <https://rscf.ru/project/22-13-00461/>.

Список использованных источников

1. Ulitin, N.V. The cumene oxidation and cumene hydroperoxide decomposition in the presence of Zn, Cd or Hg 2-ethylhexanoate: kinetic model and analysis of its sensitivity / N.V. Ulitin, Kh.E. Kharlampidi, K.A. Tereshchenko, N.A. Novikov, D.A. Shiyan, T.Sh. Nurmurodov, N.M. Nurullina, N.N. Ziyatdinov, N.P. Miroshkin // *Molecular Catalysis*. – 2021. – V. 515. – Article 111886. <https://doi.org/10.1016/j.mcat.2021.111886>
2. Ulitin, N.V. Prospects for the use of Zn, Cd and Hg 2-ethylhexanoates as catalysts for cumene oxidation / N.V. Ulitin, K.A. Tereshchenko, N.A. Novikov, T.Sh. Nurmurodov, D.A. Shiyan, N.M. Nurullina, Kh.E. Kharlampidi, S.N. Tuntseva, O.V. Stoyanov // *Applied Catalysis A, General*. – 2022. – V. 636. – Article 118584. <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2022.118584>
3. Ulitin, N.V. Catalytic properties of metals of the 2nd and 12th groups in cumene oxidation / N.V. Ulitin, K.A. Tereshchenko, N.A. Novikov, D.A. Shiyan, Y.L. Lyulinskaya, N.M. Nurullina, M.N. Denisova, V.I. Anisimova, T.Sh. Nurmurodov, Kh.E. Kharlampidi // *Applied Catalysis A, General*. – 2023. – V. 653. – Article 119044. <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2023.119044>
4. Dolan, E.D. On the local convergence of pattern search / E.D. Dolan, R.M. Lewis, V. Torczon // *SIAM Journal on Optimization*. – 2003. – V. 14, №2. – P. 567-583. <https://doi.org/10.1137/S1052623400374495>

© Залялиев И.Н. и др., 2024

УДК 541.64

КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ ДЛЯ КОНТРОЛИРУЕМОЙ РАДИКАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ НОВЫХ КАРБОРАНОВЫХ КОМПЛЕКСОВ РУТЕНИЯ С Р-О-Р-ЛИГАНДАМИ Н.А. Князева, А.М. Зимина

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия

Контролируемая радикальная полимеризация по механизму с переносом атома является одной из перспективных методологий проведения синтеза макромолекул заданного состава, молекулярно-массового распределения и топологии. Традиционно катализаторами этого процесса выступают комплексные соединения переходных металлов. В настоящей работе данный метод был применен для оценки каталитической активности недавно синтезированных карборановых комплексов рутения (II) и (III), содержащих в своем составе Р-О-Р-лиганды различного строения – XantPhos, NiXantPhos, дреPhos [1]. Полимеризацию метилметакрилата (ММА) проводили в запаянных ампулах с использованием тетрахлорметана в качестве инициатора процесса. Роль активатора выполнял изопропиламин. Мольное соотношение реагентов составляло $[MMA]:[CCl_4]:[Ru]:[i-PrNH_2] =$

1000:25:1:40. В работе показано, что наилучший контроль над процессом обеспечивается при использовании комплексов 1 и 2 с лигандом XantPhos. Наблюдается соответствие молекулярной массы полимеров теоретически рассчитанным значениям и снижение значений дисперсности с ростом конверсии мономера (рис. 1).

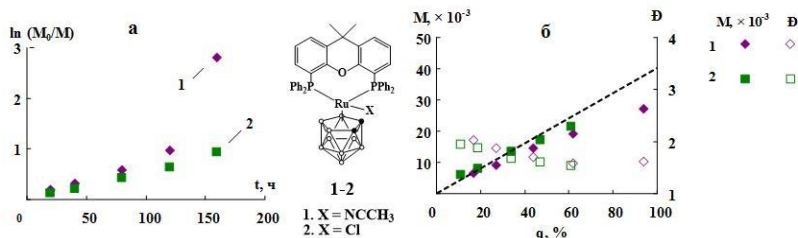


Рис. 1. Кинетические зависимости (а) и зависимости молекулярно-массовых характеристик полимеров от конверсии (б) при полимеризации ММА при 80 °С под действием комплексов 1 и 2 в присутствии 25 об. % толуола

* Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России (базовая часть госзадания, проект № FSWR-2023-0025).

© Князева Н.А. и др., 2024

УДК 541.64:547-38

СИНТЕЗ ПОЛИМЕРНЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ АКРИЛАМИДА

В.Д. Коробова, Н.Л. Печникова, Т.А. Агеева

Ивановский государственный химико-технологический университет,
г. Иваново, Россия

Ионные жидкости (ИЖ) – особый класс органических соединений, представляющих собой легкоплавкие органические соли. В последние годы они все больше привлекают интерес благодаря своим уникальным свойствам, таким как низкая температура плавления, малая летучесть, термическая стабильность [1]. ИЖ активно используются как альтернатива традиционным растворителям в органическом синтезе, в качестве катализаторов, электролитов, адсорбентов, активных фармацевтических ингредиентов [2, 3]. Интересным направлением в органическом синтезе является использование ИЖ для модификации традиционных полимеров, что позволит получить композиты, обладающие свойствами, присущими как ионным жидкостям, так и высокомолекулярным соединениям [4].

В работе рассмотрен синтез полимерных ионных жидкостей на основе акриламида (АА) и 1-бутил-3-винил-1Н-имидазол-3-иум бромид. Реакцию полимеризации проводили в инертной среде в различных органических

растворителях, в качестве инициатора использовали динитрил азобисизомасляной кислоты. Установлено, что выход и свойства полученных соединений зависят от природы реакционной среды и продолжительности реакции полимеризации. Варьирование соотношения исходных мономеров оказывает значительное влияние на влагопоглощение получаемых соединений: при увеличении содержания ИЖ в соотношении АА:ИЖ гигроскопичность синтезированных полимеров увеличивается. При этом отмечено, что даже незначительное введение 1-бутил-3-винил-1Н-имидазол-3-иум бромид в полимер оказывает влияние на его влагопоглощающую способность.

Работа выполнена при финансовой поддержке Госзадания (Проект № FZZW-2023-0009).

Список использованных источников

1. Выгодский Я.С., Лозинская Е.И., Шаплов А.С. Высокомолек. Соед. С. 2001. Т. 43. № 12, с. 2350-2368.
2. Zhang Y., Li S., Xu Y. et al. Nano Res. 2022. V. 15. N 6, p. 5556–5568.
3. Mahrim A.H.B., Aun T.T., Alias Y.B. et al. Ionics. 2024. V. 30, p. 951–970.
4. Ma J., Cao C. J. Therm. Anal. Calorim. 2023.V. 148, p. 12433–12443.

© Коробова В.Д. и др., 2024

УДК 541.64

ПЛАСТИФИКАТОР ДИИЗОНОНИЛАДИПИНАТ, КАК АЛЬТЕРНАТИВА ДИОКТИЛАДИПИНАТУ

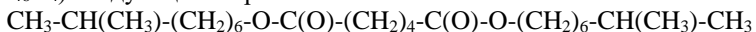
Р.Ф. Нафикова, И.Н. Королев, Р.М. Ахметханов

ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий», г. Уфа, Россия

В настоящее время поливинилхлорид (ПВХ) по объемам производства входит в тройку самых крупнотоннажных термопластов. Основная часть производимого полимера перерабатывается в различные пластифицированные материалы с использованием широкого ассортимента пластификаторов [1].

Часто для повышения морозостойкости пластифицированных ПВХ материалов используют диоктиладипинат (ДОА) добавлением к базовому пластификатору диоктилфталату (ДОФ), либо, когда это необходимо полной заменой ДОФ. Диоктиладипинат, в отличие от ДОФ, включен в список безопасных пластификаторов, разрешенных к применению при контакте с пищевыми продуктами. По этой причине помимо получения специальных материалов с повышенной морозостойкостью ДОА используется в производстве: пленок для пищевых упаковок, обуви, ПВХ профилей, шлангов, искусственной кожи, линолеума, детских игрушек, натяжных потолков, морозо- и светостойких нитролаков, многих других изделий повседневного употребления.

Из других сложных эфиров адипиновой кислоты в качестве замены диоктиладипината можно использовать диизонониладипинат (ДНА, $C_{24}H_{46}O_4$) следующего строения:



Данный пластификатор представляет собой высококипящую жидкость, практически не растворимая в воде, при обычных условиях устойчивая к гидролизу. В сравнении с ДОО диизонониладипинат обладает рядом преимуществ. Он характеризуется меньшей летучестью, меньшей токсичностью и, что не маловажно, меньшей стоимостью.

С целью сравнения свойств диизонониладипината с диоктиладипинатом и диоктилфталатом изучены закономерности термического и термоокислительного дегидрохлорирования соответствующих ПВХ пластификатов.

В условиях термической деструкции ПВХ в присутствии ДНА при $175^{\circ}C$ за счет известного сольватационного эффекта наблюдается снижение скорости дегидрохлорирования полимера, при этом ингибирующий эффект для ДНА меньше, чем у ДОО. При содержании ДНА 10 масс.ч./100 масс.ч. ПВХ скорость дегидрохлорирования полимера достигает предельных значений и сохраняется при дальнейшем увеличении содержания пластификатора.

Установлено, при термоокислительной деструкции ПВХ, пластифицированного ДНА, ДОО и ДОФ в концентрациях до 40 масс. ч. /100 масс. ч. ПВХ все сложные эфиры ускоряют распад ПВХ. По ускоряющему влиянию пластификаторов на скорость дегидрохлорирования полимера их можно расположить в ряд ДНА > ДОО > ДОФ. Очевидно, это связано с более легкой окисляемостью диизонониладипината по сравнению с другими сложными эфирами, а как известно продукты окисления сложных эфиров ускоряют распад ПВХ пластика [2].

Проведена оценка антиокислительной активности элементарной серы и фуллерена C_{60} в условиях термоокислительного разложения ПВХ, пластифицированного ДНА. Показано, что элементарная сера и фуллерен C_{60} значительно замедляют скорость распада ПВХ пластика и по антиокислительной эффективности незначительно уступают промышленному антиоксиданту дифенилолпропану.

Высокую антиокислительную активность элементарной серы и фуллерена C_{60} в отношении распада ПВХ пластификатов можно связать с известным эффектом «эхо стабилизации».

При изучении действия смесей элементарной серы и фуллерена C_{60} на термоокислительную деструкцию ПВХ, пластифицированного ДНА при соотношении компонентов 1:1 выявлен синергизм по показателю скорость элиминирования HCl.

Проявление синергизма при сочетании элементной серы и фуллера C₆₀ при термоокислительной деструкции ПВХ пластика можно объяснить различным механизмом действия каждого из антиоксидантов.

Высокая антиокислительная эффективность серы и фуллера C₆₀ в ПВХ пластикатах подтверждена на модельных рецептурах содержащие термостабилизаторы-акцепторы HCl по показателю «время термостабильности».

Проведена оценка реологических свойств модельных ПВХ – пластикатов по показателю текучести расплава (ПТР). Показано, что в широком интервале концентраций пластифицирующая способность диизонониладипината и диоктиладипинат практически не отличаются и заметно превышают эффективность диоктилфталата.

Таким образом на основании полученных результатов можно констатировать, что ДНА можно использовать для получения пластифицированных материалов на основе ПВХ взамен ДОА.

Список использованных источников

1. Уилки Ч., Саммерс Дж., Даниэлс Ч. Поливинилхлорид. // пер. с англ. под ред. Г.Е. Зайкова. СПб.: Профессия 2007. 728 с
2. Минскер К.С., Абдуллин М.И. Эффект “эхо-стабилизации” при термодеструкции поливинилхлорида. Доклады АН СССР. – 1982. – Т. 263. – № 1. – С. 140-143.

© Нафикова Р.Ф. и др., 2024

УДК 547.458.84:66.09(4.3+2) + 661.882.27:54-183

ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ ТЕТРАХЛОРИДА ТИТАНА НА РАСТИТЕЛЬНЫЕ ПОЛИМЕРЫ

Л.А. Кувшинова

ФГБУН Институт химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, г. Сыктывкар, Россия

Целлюлоза относительно инертный, возобновляемый растительный полимер. Ее основными функциональными группами являются гидроксильные, они способны вступать в реакции с органическими и неорганическими реагентами. Однако этому препятствуют межмолекулярные и внутримолекулярные водородные связи [1]. Установлено, что легкогидролизуемая кислота Льюиса в неполярном растворителе, например, тетрахлорид титана (TiCl₄) в гексане, взаимодействуя с адсорбированными молекулами воды на поверхности целлюлозы (содержащей различное количество лигнина), способна ослабить ее сетку водородных связей [2] и тем самым повысить реакционную способность. Такая обработка позволяет получить на основе растительных полимеров титансодержащий гибридный материал. Взаимодействие TiCl₄ с поверхностью целлюлозы схематически представлено на рис. 1.

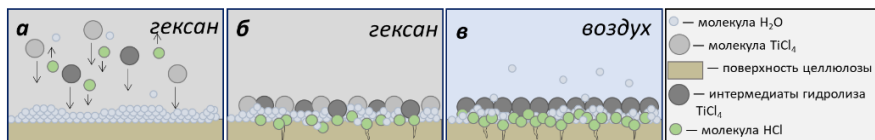


Рис. 1. Условная схема взаимодействия поверхности целлюлозы с $TiCl_4$: суспензия целлюлозы в системе $TiCl_4$ –гексан в начальный момент времени (а), адсорбция $TiCl_4$ на поверхности целлюлозы, частичное взаимодействие с ней и физически связанными молекулами воды (б), дальнейшее превращения на поверхности реакционной массы после ее отделения на фильтре и последующего высушивания в комнатных условиях (в)

В результате целлюлозное волокно распадается на фрагменты, средняя длина которых короче, чем у исходных волокон до 14 раз [3]. Этому способствует образование молекул HCl в процессе постепенного гидролиза $TiCl_4$ до интермедиатов (рис. 1), являющихся предшественниками TiO_2 .

Наряду с процессом деструкции и модифицирования поверхности титаносодержащими соединениями происходит окисление фрагментированных волокон [2], увеличивающееся с повышением содержания $Ti(IV)$ в образцах.

Данные ИК-спектра (рис. 2 а) подтверждают не только изменения, происходящие в сетке водородных связей целлюлозы [2], но и в области, характерной для валентных колебаний функциональных групп $C=O$, $C-O-C$, $-OH$. Для этих групп наблюдается некоторое сужение ширины рефлексов и уменьшение их интенсивности [4].

Отличительной особенностью дифрактограммы целлюлозы, обработанной в системе $TiCl_4$ –гексан (рис. 2 б), является присутствие рефлекса в области малых углов, относящихся к рентгеноаморфным соединениям титана. Аналогичный рефлекс, но несколько смещенный в область больших углов, наблюдается в образце, полученном в отсутствие целлюлозы, путем трансформации $TiCl_4$ в гексани до состояния порошка (подобно тому, что образуется на поверхности растительного полимера).

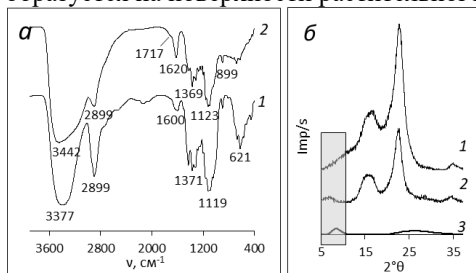


Рис. 2. ИК-спектры (а) и дифрактограммы (б) исходной целлюлозы (1), целлюлозы, обработанной $TiCl_4$ в гексани (2), $TiCl_4$, трансформированный в процессе гидролиза до порошкообразного состояния (3)

Таким образом, $TiCl_4$ оказывает полифункциональное действие на растительные полимеры. Продукты такого взаимодействия представляют собой порошковые тонкодисперсные гибридные материалы, богатые функциональными группами и поверхностно модифицированные соединениями титана, что позволяет в дальнейшем расширить область применения растительных полимеров.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (номер госзадания 12204060027-6).

Список использованных источников

1. Mulinari D.R., Cruz T.G., Cioffi M.O.H., Voorwald H.J.C., Da Silva M.L.C.P., Rocha G.J.M. // Carbohydrate Research. 2010. 345(13), P. 1865–1871. <https://doi.org/10.1016/j.carres.2010.05.011>

2. Kuvshinova L.A., Udoratina E.V., Karaseva Yu.S., Cherezova E.N. // Russian Journal of Applied Chemistry. 2023. Vol. 96. No. 3. P. 281–291. <https://doi.org/10.1134/S1070427223030035>

3. Кувшинова Л.А., Манахова Т.Н. // Химия растительного сырья. 2014. № 2. С. 29–34. <https://doi.org/10.14258/jcrpm.1402029>

4. Никифорова Т.Е., Багровская Н.А., Козлов В.А., Лилин С.А. // Химия растительного сырья. 2009. №1. С. 5–14.

© Кувшинова Л.А., 2024

УДК 541.64

КОНТРОЛИРУЕМАЯ РАДИКАЛЬНАЯ (СО)ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ АКРИЛОНИТРИЛА СО СТИРОЛОМ В УСЛОВИЯХ ARGET ATRP

Ю.А. Кузнецова, А.В. Жигулева, И.Д. Гришин

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия

Интерес к полимерам на основе стирола обусловлен возможностью их применения для получения широкого спектра материалов, характеризующихся ценными и уникальными свойствами, используемыми в медицинской, автомобильной, авиационной и других высокотехнологичных отраслях промышленности. Наиболее эффективным современным подходом к получению различных гомо- и сополимеров в условиях полимеризации с переносом атома основаны на использовании методологии ARGET ATRP, ключевыми компонентами которой являются металлокомплексный катализатор и восстанавливающий агент (рис. 1).

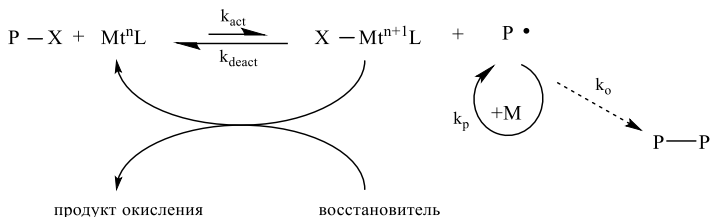


Рис. 1. Схема полимеризации по механизму ARGET ATRP

Использование двух комплексов меди с разной активностью для контролируемой радикальной полимеризации с переносом атома представляет собой инновационный способ повышения эффективности процесса. Активный комплекс, обладающий низким окислительным потенциалом, обеспечивает быструю генерацию радикалов, в то время как комплекс с более высоким окислительным потенциалом способствует быстрому возвращению активных частиц в спящее состояние, сохраняя при этом высокий уровень контроля над процессом полимеризации. Целью данной работы является разработка эффективных методов контролируемого синтеза гомо- и сополимеров стирола с акрилонитрилом с заданными молекулярно-массовыми характеристиками, по механизму с переносом атома в присутствии ряда комплексов меди с азотсодержащими лигандами.

В качестве катализатора предложено использовать комплекс бромид меди (CuBr_2) с трис[(2-пиридил)метил]амином, инициатором служил четыреххлористый углерод, содержащий лабильную связь углерод-галоген, в качестве восстановителей, переводящих неактивную форму катализатора в активную, выступали изопропиламин и сегнетова соль.

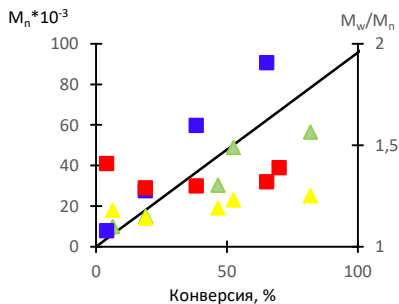


Рис. 2 Зависимость ММ и параметра полидисперсности от конверсии при гомополимеризации стирола.

Восстановитель: ■ – изопропиламин, ▲ - сегнетова соль.

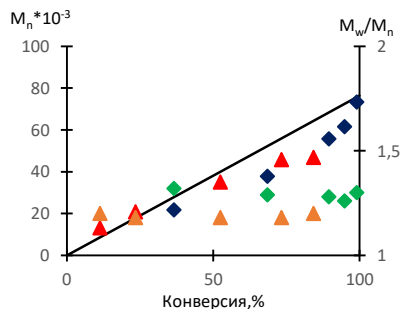


Рис. 3 Зависимость ММ и параметра полидисперсности от конверсии при сополимеризации стирола и АН. Восстановитель: ◆ – изопропиламин, ▲ - сегнетова соль.

Использование предложенных систем позволяет достичь конверсии мономера на уровне 80% за 20-40 часов, что делает их перспективными в плане практического применения. Приведенные на рисунках 2 и 3 зависимости молекулярной массы полимеров от конверсии являются линейными, что характерно для процессов, протекающих по механизму полимеризации с переносом атома. Наблюдаем хорошие корреляции между экспериментально определенными значениями среднечисловой молекулярной массы и их теоретически рассчитанными значениями. Наиболее узкодисперсные образцы были получены при использовании в качестве восстанавливающего агента сегнетовой соли. Применение изопропиламина оказалось менее эффективным.

Установлено, что одновременное введение в систему двух азотсодержащих лигандов позволяет увеличить скорость протекания (со)полимеризации акрилонитрила со стиролом в контролируемом режиме. Достоинством разработанных в ходе проведения исследований каталитических систем является использование медьсодержащего катализатора на уровне сотых долей процента, а также доступных восстанавливающих агентов, что важно с точки зрения их потенциального практического применения для получения функциональных полимеров с заданными молекулярно-массовыми характеристиками.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 23-23-00087).

© Кузнецова Ю.А. и др., 2024

УДК 547.52

СИНТЕЗ ПОЛИМЕРОВ, СОДЕРЖАЩИХ АНИЛИНОВЫЕ И ИНДОЛЬНЫЕ ФРАГМЕНТЫ

Л.Р. Латыпова,¹ Г.С. Усманова,^{1,2} М. Р. Азнабаева²

¹Уфимский Институт химии УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

На сегодняшний день проводящие полимеры продолжают привлекать к себе внимание исследователей в связи с бурным развитием органической электроники. Органические структуры, молекулы которых содержат в основной цепи одновременно различные ароматические и гетероциклические фрагменты, привлекают все большее внимание как компоненты материалов, для создания устройств органической электроники, благодаря возможности в широких пределах варьировать их электрофизические, оптические и другие свойства.

Для решения этой задачи мы синтезировали ряд сополимеров на основе анилина и 2-[2-хлор-1-метилбут-2-ен-1-иланилина] различного состава с последующей циклизацией с образованием полимеров, содержащих в своем

составе фрагменты анилина и индола, что позволит регулировать свойства будущих полимеров (Схема 1).

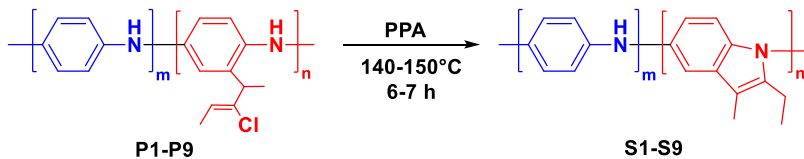
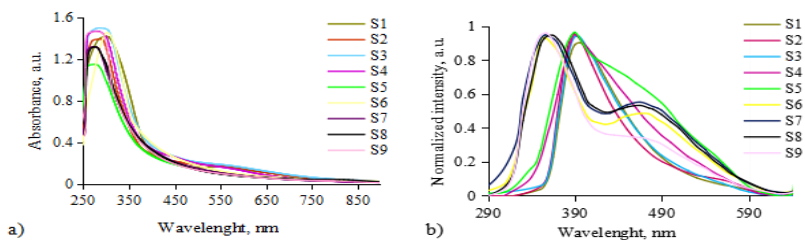


Схема 1. Синтез полимеров S1-S9

Строение полученных высокомолекулярных соединений после циклизации идентифицировали с применением ИК-, УФ- и ЯМР-спектроскопии.

Анализ спектров поглощения показывает, что у сополимеров S1-S9 наблюдается один пик поглощения в области 266-303 нм, что свидетельствует об образовании новых соединений (Рисунок 1а). Исследование фотолюминесцентных свойства сополимеров S1-S9 в растворе ДМСО показало значительное изменение относительно не циклизованных полимерных образцов (Рисунок b-c). Для образцов с большим содержанием звеньев замещенного мономера наблюдается появлением максимумов эмиссии, которые можно отнести к свечению индольного фрагмента около 465 нм. Кроме того, следует отметить, что для всего ряда продуктов циклизации наблюдается гипсохромное смещение максимумов флуоресценции. Таким образом, в результате внутримолекулярной циклизации сополимеров разного строения были получены полииндольные сополимеры, содержащие фрагменты полимерной цепи полианилинового и полииндольного типа, о чем свидетельствуют спектры испускания и возбуждения.



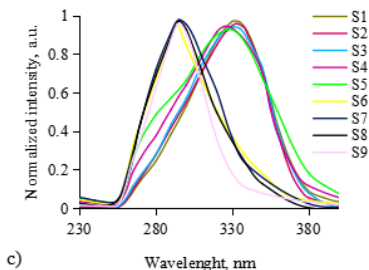


Рис. 1. УФ-спектры (а), спектры эмиссии (б) и возбуждения (с) фотолюминесценции полимеров в ДМСО (10^{-5} г л⁻¹) при 298 К
 Таким образом, химической модификацией сополимеров 2-[2-хлор-1-метилбут-2-ен-1-иланилина] с анилином различного состава синтезированы полимеры, содержащие фрагменты анилина и индола.

Работа выполнена по теме госзадания №122031400278-2.

© Латыпова Л.Р. и др., 2024

УДК 541.64

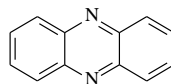
ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА С УЧАСТИЕМ ФЕАЗИНА В УСЛОВИЯХ ОБЛУЧЕНИЯ

О.С. Лизякина, Л.Б. Ваганова, Д.Ф. Гришин

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия

В настоящее время к методам полимеризации с обратимой дезактивацией растущей цепи, которые связаны с применением облучения, проявляется огромный интерес. Особое внимание уделяется способам регулирования кинетических закономерностей процесса и молекулярно-массовых характеристик полимеров с использованием органических катализаторов – полициклических ароматических гетероатомных соединений.

Целью данной работы явилось изучение процессов полимеризации метилметакрилата (ММА) с участием систем феназин (ФЗ) / четырехбромистый углерод (СВr₄) и ФЗ / СВr₄ / трибутиламин (Bu₃N). Полимеризацию проводили без растворителя, а также в среде бензола (БЗ), диоксана (ДО), этилацетата (ЭА) и диметилсульфоксида (ДМСО). Источником света служили УФ-лампы с $\lambda_{\text{макс}} \sim 365$ нм. Процессы проводились без предварительной дегазации реакционной среды.



Феназин (ФЗ)

Установлено, что системы на основе ФЗ способны инициировать полимеризацию ММА в присутствии кислорода воздуха. При этом глубина превращения мономера и время достижения высокой конверсии зависят от

наличия и природы растворителя. Так, в случае ДМСО конверсия мономера достигает ~ 80% за 6 часов, а в случае ДО за 8 часов. Для процессов, проходящих в среде ЭА и БЗ, степень превращения ММА не превышает ~ 50% и ~ 30%, соответственно.

Полимерные образцы, полученные в среде ДМСО, имеют значения среднечисленных молекулярных масс (M_n) выше, чем синтезированные в других использованных нами растворителях. Для образцов полимеров, полученных в ДМСО и ДО, наблюдается рост M_n с конверсией ММА в интервале 20-48 кДа и 11-22 кДа, соответственно, а значения коэффициентов полидисперсности (\bar{D}) снижаются с ~ 2 до ~ 1.6. В случае же ЭА и БЗ значения M_n по ходу процесса не меняются и остаются на уровне 17-19 кДа и 12-15 кДа, соответственно, а параметр \bar{D} ~ 2.0.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект №23-23-00130).

© Лизякина О.С. и др., 2024

УДК 544(42.032+722.3)

ПРИВИТАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ МЕТАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ НА ОБЛУЧЕННУЮ ПЛЕНКУ ПОЛИЭТИЛЕНА

А.С. Обшицер¹, Е.Ю. Швецова², Т.А. Байбурдов^{1,2}

¹Саратовский химический завод акриловых полимеров ООО «АКРИПОЛ», г. Саратов, Россия

²ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский университет имени Н.Г. Чернышевского», г. Саратов, Россия

Полиэтилен (ПЭ) является одним из самых широко распространенных синтетических полимером. Благодаря своей способности выдерживать механические нагрузки, температурное и химическое воздействие, ПЭ часто используется как «основа» для получения материалов различного профиля. Получение композитов на основе ПЭ проводят либо на стадии синтеза, либо последующей «модификацией» сформированного изделия.

Привитая полимеризация, как один из методов модификации может быть инициирована физическими или химическими методами, что оказывает сильное влияние как на полимерный субстрат, так и на свойства полученных сополимеров. Основными параметрами, влияющими на скорость и степень прививания, являются: концентрация мономера и инициатора, температура и время проведения реакции [1,2].

Целью настоящей работы является исследование привитой полимеризации метакриловой кислоты (МАК) на облученную пленку полиэтилена в концентрированных растворах при различных условиях.

Использовали ПЭВД в виде плёнки толщиной 30–35 мкм, предварительно облучённой источником γ -излучения Co^{60} (марка 15303-003, ГОСТ 16337-77), метакриловая кислота, изопропиловый спирт,

метабисульфит натрия, гидроксид калия. Перед проведением реакции пленку ПЭВД обрабатывали изопропиловым спиртом и сушили до постоянной массы. Реакционную смесь продували азотом 30 минут и термостатировали на водяной бане. За время начала реакции брали момент погружения взвешенных образцов пленки в реакционную смесь. Кинетику привитой полимеризации исследовали путем отбора проб из реакционной смеси через заданные промежутки времени. Извлеченные образцы пМАК-ПЭВД тщательно отмывали от гомополимера горячей водой и сушили при комнатной температуре. Исследовали кинетические параметры привитой полимеризации МАК в зависимости от концентраций компонентов реакционной смеси и температуры. Оценку степени прививания P , % и впитывания электролита (40% раствор КОН) W , г/г проводили гравиметрически. Спектральный анализ исходного и модифицированного ПЭВД проводили на ИК-Фурье-спектрометре ФСМ 1201 (ООО «МОНИТОРИНГ», РФ), где наблюдали полосы поглощения при 2923, 2852, 1466 и 720 см^{-1} характерные для CH_2 групп ПЭВД, и 1710 см^{-1} отнесенные к колебаниям группы $\text{C}=\text{O}$ МАК.

Установлено, что степень прививания мономера (кривая 1) возрастает с увеличением содержания мономера (рис. 1) и инициатора (рис.2) в реакционной смеси, а возрастание впитывающей способности электролита (кривая 2) происходит с увеличением количества прививаемой МАК с увеличением содержания мономера (рис. 1) и инициатора (рис.2) [1, 2].

При исследовании влияния температуры на привитую полимеризацию установлено, что наиболее высокая скорость прививки достигается при температуре 50°C выше которой эффективность прививания мономера на пленку ПЭВД снижается, что является следствием усиления процесса гомополимеризации. Расчетное значение энергии активации составило 60 кДж/моль.

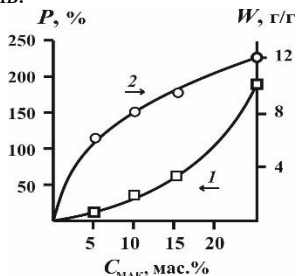


Рис. 1. Влияние концентрации МАК на степень прививания P , % (кривая 1) и степень впитывания электролита W , г/г (кривая 2) при [МБ-

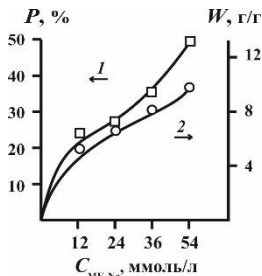


Рис. 2. Влияние концентрации МБ-На на степень прививания P , % (кривая 1) и степень впитывания электролита W , г/г (кривая 2); при

$[Na]=36$ ммоль/л; за $t=90$ мин; при $T_0=30$ °C [МАК]= 10 мас. %; за $t=90$ мин; $T_0=30$ °C

Показано, что начальная скорость, степень прививания МАК на облученную пленку ПЭВД и впитывания электролита пМАК-ПЭВД возрастали с увеличением концентрации мономера, инициатора и температуры. Энергия активации привитой полимеризации МАК на ПЭВД составила 60 кДж/моль.

Список использованных источников

1 T. Sehgal, S. Rattan. Synthesis, Characterization and swelling characteristics of graft copolymerized isotactic polypropylene film // International journal of polymer science. – 2010. – Vol. 2010. – P. 1 – 9. doi:10.1155/2010/147581

2 С.А.В. Nava-Ortiz, G. Burillo, E. Bucio, C. Alvarez-Lorenzo. Modification of polyethylene films by radiation grafting of glycidyl methacrylate and immobilization of β -cyclodextrin // Radiation physics and chemistry. – 2009. – Vol. 78. – P. 19–24. DOI: 10.1016/j.radphyschem.2008.07.005

© Обшицер А.С. и др., 2024

ВЛИЯНИЕ ТИПА ИНИЦИАТОРА НА КИНЕТИКУ РАДИКАЛЬНО-КООРДИНАЦИОННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА В ПРИСУТСТВИИ ЦИРКОНОЦЕНДИХЛОРИДА

**А.А. Осипов⁽¹⁾, В.П. Бондаренко⁽¹⁾, Д.А. Шиян⁽¹⁾, Сабитова Э.М.⁽¹⁾,
К.А. Терещенко⁽¹⁾, Н.В. Улитин⁽¹⁾, С.В. Колесов⁽²⁾**

⁽¹⁾ Казанский национальный исследовательский технологический университет, г. Казань, Россия

⁽²⁾ Уфимский Институт химии Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, г. Уфа, Россия

Метилметакрилат (ММА) – основа для акриловых клеев, применяющихся в автомобилестроении, судостроении и машиностроении [1]. Перспективными модификаторами акриловых клеев являются металлоорганические соединения. Они выступают как ускорители отверждения, но некоторые из них, такие как металлоцены, еще и воздействуют на молекулярную структуру полиметилметакрилата (ПММА). Металлоцены переводят отверждение акрилового клея из режима радикальной полимеризации в режим радикально-координационной полимеризации, где наблюдается параллельное функционирование радикального и координационного каналов роста цепей. Координационный рост цепи приводит к получению синдиотактического ПММА. Такой ПММА имеет более высокую температуру стеклования (и, следовательно, лучше сохраняет жесткость при повышенных температурах) по сравнению с

атактическим ПММА, получаемым радикальной полимеризацией. Пропорция между радикальным и координационным каналами роста цепей определяется не только активностью металлоценов, но и скоростью распада инициаторов отверждения. Поэтому целью данной работы стала оценка влияния типа инициатора на кинетику отверждения акриловых клеев по радикально-координационному механизму.

Оценку осуществили с помощью кинетической модели. Сравнивали 3 инициатора: пероксид бензоила (ПБ), гидропероксид этилбензола (ГПЭБ) и аддукт гидропероксида этилбензола с 2-этилгексаноатом кадмия (ГПЭБ·Cd(ЭГ)₂), модельный металлоцен – цирконоцандихлорид (ЦЦ). Параметры температурных аррениусовских зависимостей констант скоростей элементарных реакций (далее кинетических параметров) определили, решив обратную кинетическую задачу. Для ее решения использовали временные зависимости конверсии ММА, конверсионные зависимости средних молекулярных масс ПММА и значения доли синдиотактических триад в составе ПММА при отверждении клея в присутствии иницирующей системы «ПБ + ЦЦ». Для идентификации кинетических параметров скоростей распада ГПЭБ и ГПЭБ·Cd(ЭГ)₂ построили кинетическую модель окисления этилбензола и разложения ГПЭБ в присутствии Cd(ЭГ)₂.

Рассчитали временные зависимости конверсии ММА в процессе отверждения клея (рис. 1) и доли синдиотактических триад в ПММА (табл. 1).

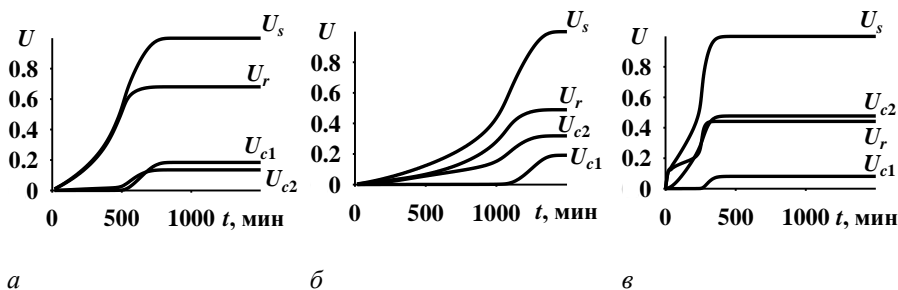


Рис. 1. Расчетные временные зависимости конверсии ММА U при отверждении клея в присутствии иницирующих систем ПБ+ЦЦ (а), ГПЭБ+ЦЦ (б), ГПЭБ·Cd(ЭГ)₂+ЦЦ (в), $T = 333$ К, $[\text{инициатор}]_0 = [\text{ЦЦ}]_0 = 1$ ммоль/л, $[\text{ММА}]_0 = 9.4$ моль/л; s – суммарная конверсия; r – вклад радикального роста цепи; $c1$ и $c2$ – вклад координационного роста цепи на активных центрах 1-го и 2-го типов соответственно

Таблица 1. Доли синдиотактических триад в ПММА, $U = 0.95$; условия и расшифровка – см. рис. 1

T, K	S_r	S_{c1}^*	S_{c2}^*	$S_s(\text{ПБ}+$ $\text{ЦЦ})$	$S_s(\text{ГПЭБ}+$ $\text{ЦЦ})$	$S_s(\text{ГПЭБ} \cdot \text{Cd}(\text{ЭГ})_2$ $+ \text{ЦЦ})$
323	0.64	0.84	0.72	0.68	0.70	0.69
333	0.62	0.79	0.73	0.66	0.69	0.68
343	0.6	0.74	0.73	0.64	0.66	0.68

В результате вычислительных экспериментов (рис. 1 и табл. 1) показали, что наибольшая скорость отверждения наблюдается при применении инициатора – ГПЭБ·Cd(ЭГ)₂. Он быстрее остальных инициаторов распадается самопроизвольно. Однако при увеличении скорости отверждения клея наблюдается снижение доли синдиотактических триад в составе ПММА, что должно негативно отражаться на теплостойкости клеевого соединения. Для улучшения физико-механических свойств клеевого соединения можно рекомендовать проводить отверждение акрилового клея в присутствии ГПЭБ. Он медленнее остальных инициаторов распадается самопроизвольно.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-13-00461, <https://rscf.ru/project/22-13-00461/>.

Список использованных источников

1. Aronovich, D.A. Structural acrylic adhesives: a critical review. / D.A. Aronovich, L.B. Boinovich // Progress in Adhesion and Adhesives. – 2021. – V. 6 (15). – P. 651-708.

© Осипов А.А. и др., 2024

УДК 544.773.432

СИНТЕЗ АКРИЛОВОГО ГИДРОГЕЛЯ С КОМПЛЕКСОМ ОРТОБОРНАЯ КИСЛОТА-ГЛИЦЕРИН

А.В. Скорлуханова, П.О. Кушев

Воронежский государственный университет, г. Воронеж, Россия

В настоящее время ведутся активные исследования в области синтеза и применения полимерных гидрогелей. Такое внимание обусловлено особыми свойствами этих материалов, благодаря которым данные гидрофильные сетчатые вещества нашли широкое применение во многих областях жизни человека, начиная от добычи нефти и заканчивая медициной и сельским хозяйством.

Гидрогели на основе акриловой кислоты и акриламида активно используются в сельском хозяйстве в качестве аккумуляторов влаги благодаря высокой водопоглощающей способности и относительно низкой стоимости. Использование гидрогелей именно такого состава целесообразно

в качестве источника влаги и необходимого растениям микроэлемента бора, поэтому целью данной работы было исследование процесса синтеза в присутствии комплекса ортоборной кислоты и ее высвобождения.

Ортоборная кислота способствует увеличению завязей плодово-ягодных культур во время цветения, стимулирует образование новых точек роста, увеличивает содержание сахара и витаминов в выращиваемых культурах, повышает устойчивость растений к неблагоприятным метеорологическим условиям во время роста.

Ортоборная кислота достаточно плохо растворима в воде (растворимость при 20°C 4,72 г/100 мл воды), поэтому для достижения необходимой концентрации бора в растворе, кислоту растворяли в глицерине, в следствие чего образовывался комплекс бора с глицерином [1].

Синтез гидрогеля проводился по известной методике, описанной в патенте [2] с добавлением комплекса ортоборная кислота-глицерин.

Исследование процесса высвобождения показало, что изготовленный сополимер способен высвобождать весь загруженный на этапе синтеза бор в водную среду.

Список использованных источников

1.Дорошенко Т.Н., Чумаков С.С., Захарчук Н.В. Влияние микроэлементов на повышение заморозкоустойчивости яблони // Энтузиасты агрономной науки. В.12. Краснодар. 2010. С. 100-101.

2.Кузнецов В.А., Селеменев В.Ф., Семенов В.Н., Бакалова М.В. Способ получения гидрофильно сшитого полимера со свойствами суперабсорбента. Патент РФ № 2574722. Оpubл. 10.02.2016. Б.И. № 4.

© Скорлуханова А.В. и др., 2024

УДК 664.881.88

ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА УПАКОВОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ С АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫМИ СВОЙСТВАМИ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА И НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА

Б.Р. Таусарова, М.Ш. Сулейменова

АО Алматинский технологический университет, г. Алматы,
Республика Казахстан

Пищевая упаковка играет ключевую роль в предложении потребителям безопасных и качественных пищевых продуктов, обеспечивая защиту и продлевая срок хранения. Упаковка пищевых продуктов — это многогранная область, основанная на пищевой науке и технике, микробиологии и химии, каждая из которых вносит значительный вклад в сохранение физико-химических свойств, таких как цвет, вкус, содержание влаги и текстура пищевых продуктов, обеспечивает отсутствие окисления и микробного разрушения. Большинство полимеров, которые используются в упаковочной

промышленности, представляют собой небiorазлагаемые пластиковые полимерные материалы на основе нефти, которые представляют огромную опасность для окружающей среды. В последние годы наблюдается значительный интерес к разработке биоразлагаемых полимеров из возобновляемых ресурсов для решения проблем экологической безопасности. В различных исследованиях основное внимание уделялось применимости биodeградируемых полимеров в пищевой упаковке, таких как использование крахмальных производных с полиэфиром, целлюлозы, полисахаридов, крахмала, казеина [1-2]. Наиболее широко используемым в настоящее время полимером является полилактид, который сегодня производится в больших масштабах. Полилактид является 100% биоразлагаемым полимером, полученным на основе молочной кислоты, нетоксичным для организма человека и животных [3-4].

Одним из инновационных способов влияния на безопасность продуктов питания является ввод в упаковочный материал добавок, обладающих антимикробной и антиоксидантной активностью. Антимикробные системы упаковки пищевых продуктов, помимо функции обычной упаковки пищевых продуктов, предназначены для остановки роста микробов на поверхностях пищевых продуктов. Наночастицы металлов привлекли широкое внимание в качестве альтернативного добавочного материала благодаря биосовместимости, превосходными механическими, барьерными и антимикробными свойствам широкого спектра действия [5-6]. Биоразлагаемые пленки, включающие наночастицы, имеют большой потенциал для активной упаковки с увеличенным сроком годности и эффективного хранения упакованных пищевых продуктов [7-8]. Наночастицы серебра обладают бактерицидной и антивирусной активностью, поэтому они могут быть использованы для придания упаковочным материалам биоцидных свойств.

Целью работы является получение упаковочных материалов с антимикробными свойствами на основе полилактида и наночастиц серебра.

Наночастицы серебра синтезированы путем восстановления нитрата серебра глюкозой. В качестве стабилизатора поливиниловый спирт. Установлено, что при восстановлении глюкозой образуются наночастицы серебра размером до 50 нм. Водный раствор наночастиц серебра наносился на упаковочный материал распылением. Образцы полилактидной пленки, обработанные различными концентрациями наночастиц серебра, исследовались на низковакуумном растровом электронном микроскопе в комплексе с энергодисперсионным рентгеновским спектрометром. Согласно электронно-сканирующей микроскопии и микроанализу, после модификации на поверхности обработанной образуются наночастицы серебра в пределах 4,64% - 8,24%. Антимикробное действие оценивали по степени угнетения роста бактерий через разное время инкубации по

сравнению с контрольными образцами. Разработанная антимикробная композиция на основе наночастиц серебра для упаковочных материалов из полилактида предотвращает порчу пищевых продуктов, подавляя развитие микроорганизмов, что в конечном итоге позволяет увеличить срок хранения пищевых продуктов

Список использованных источников

1. Zhong Y., Godwin P., Jin Y., Xiao H. Biodegradable polymers and green-based antimicrobial packaging materials: A mini-review. *Advanced Industrial and Engineering Polymer Research*. 2020. V.3. P.27-35.
2. Agarwal A., Shaida B., Rastogi M., Singh N.B. Food Packaging Materials with Special Reference to Biopolymers-Properties and Applications. *Chemistry Africa*. 2023. V. 6. P.117–144
3. Swetha A., Bora A., Mohanrasu K. et. al. A comprehensive review on polylactic acid (PLA) – Synthesis, processing and application in food packaging. *International Journal of Biological Macromolecules*. 2023. V. 234. 123715.
4. Arrieta M.P., Samper M.D., Aldas M., Juan López J. Review On the Use of PLA-PHB Blends for Sustainable Food Packaging Applications. *Materials*. 2017. 10. 1008.
5. Khaneghah A.M., Hashemi S.M.B., Limbo S. Antimicrobial agents and packaging systems in antimicrobial active food packaging: An overview of approaches and interactions. *Food and Bioproducts Processing*. 2018. V.111. P.1-19.
6. Kumar A., Choudhary A., Kaur H. et. al. Metal-based nanoparticles, sensors, and their multifaceted application in food packaging. *J Nanobiotechnol*. 2021. V.19. P.256.
7. Taussarova B. R., Suleimenova M. Sh., Baimakhanov G.A. Development and Research of Packaging Paper Modified by Titanium Dioxide Nanoparticles. *Nanotechnologies in Russia*. 2019. V. 14, P. 565–571
8. Wang C., Gong C., Qin Y. et al. Bioactive and functional biodegradable packaging films reinforced with nanoparticles. *Journal of Food Engineering*. 2022. V. 312. 110752.

© Таусарова Б.Р. и др., 2024

УДК 665.45:665.66

ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАТОРОВ НЕФТЯНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ НА ПРОЦЕСС ТЕРМОЛИЗА КРЕКИНГ-ОСТАТКА

Р.Н. Ширяева, А.А. Амангельда, С.У. Ягудина

Уфимский государственный нефтяной технический университет, г. Уфа,
Россия

Известно, что модифицирование нефтяных остатков индивидуальными углеводородами позволяет улучшить качество кокса [1-3]. Но учитывая стоимость и доступность индивидуальных углеводородов, следует отдать предпочтение модифицированию нефтяных остатков более дешевым сырьем.

Поэтому практический интерес представляют модификаторы, полученные на основе нефтяного сырья.

Целью данной работы являлось изучение кинетических закономерностей газообразования при термической деструкции крекинг-остатка в присутствии нефтяных модификаторов и определение качества получаемого кокса. Модификаторами служили оксидат (ОЭД) и деструктированный оксидат (ДОЭД) экстракта дуосол-процесса (ЭД), которые были получены окислением и деструктированием ЭД. Окисление проводили при 250⁰С и скорости подачи воздуха 3 л/ч в течение 30 мин. Окисленное сырье предварительно деструктировали в инертной среде при температуре 350⁰С. Модификаторы вводили в крекинг-остаток в соотношениях 95:5; 90:10; 80:20; 75:25.

Установлено, что окисление и дальнейшая деструкция экстракта- дуосол процесса приводит к уменьшению содержания ароматических углеводородов и увеличению содержания смол и асфальтенов. Наблюдается снижение суммарного газообразования в присутствии ОЭД. Видимо, за счет кислорода происходит дегидрирование углеводородов с образованием валентно-ненасыщенных фрагментов, способных к конденсации. Накопление CH_4 и H_2 происходит по реакции первого порядка. Газы ΣC_2 и C_3H_8 в присутствии ЭД и ОЭД образуются с индукционным периодом, т.е. являются продуктами последовательного превращения. Введение ДОЭД привело к увеличению их выхода за счет возрастания роли вторичных реакций.

Оптимальную концентрацию для получения кокса улучшенной структуры выбрали по результатам рентгеноструктурного анализа. ДОЭД с концентрацией 5% масс. приводит к улучшению структуры полученного кокса. Снижение межплоскостного расстояния в присутствии ДОЭД связано с удалением в результате термоокислительной деструкции значительной части метиленовых групп, препятствующих плотной упаковке структуры. Добавки ОЭД увеличивают межплоскостное расстояние и уменьшают размеры частиц кристаллитов кокса.

Таким образом, на основании проведенных исследований можно сделать вывод о том, что введением малых количеств деструктированного оксидата экстракта процесса –дуосол (5%) можно повысить выход кокса и улучшить его структуру.

Список использованных источников

1. Кривцов Е.Б. Влияние добавок стирола на кинетику крекинга компонентов высокосернистого гудрона. // Нефтехимия. 2020. Т. 60. № 3.
2. Бояр С.В., Копытов М.А. Кинетика термического разложения нефтяного остатка и его SARA- фракций в присутствии растительного масла. Химиятвердого топлива. 2023. № 2-3

3. Ширяева Р.Н., Сагитова Ч.Х., Бадикова А.Д., Цадкин М.А. Состав и структурные особенности асфальтенов тяжелой нефти // Вестник Башкирского университета. 2020. Т.25. № 1.

© Ширяева Р.Н. и др., 2024

УДК 541.124:542.952.6:547.313

ОЦЕНКА УРОВНЯ СОДЕРЖАНИЯ АММИАКА ЗА СЧЁТ ИЗМЕНЕНИЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Т.Б. Терегулов

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Оценка электропроводности тонкопленочных материалов на основе полисахаридов и наночастицы йодида серебра является актуальной задачей для использования в сенсорных приборах, способных преобразовывать физико-химические показатели свойств состава среды в сигнал [1].

Принцип работы сенсоров базируется на явлениях изменения электропроводности среды в результате адсорбции аммиака.

Детектирование газа сенсором осуществляется при реакции присоединения аммиака к AgI (I):



Нами были использованы композитные плёнки на основе СХТЗ, ХТЗ, КМЦ и коллоидных частиц AgI, образующихся при смешении исходных растворов KI и AgNO₃ с концентрацией 0,01 моль/л при объёмном соотношении равном 7: 10, входящих в структуру полимеров [2, 3].

Исследования проводились в воздушной среде аммиака различной концентрации, что приводило к взаимодействию газа с плёночными материалами с изменением его электропроводности в процессе происходящих химических превращений.

Результаты проведенного эксперимента показали, что образцы проявляли резкие падения сопротивления в начале эксперимента с последующим уменьшением динамики роста электропроводности в течение эксперимента, что скорее всего говорит об насыщении сенсором аммиаком.

Данное применение композитного материала как сенсора в воздушной среде является перспективным подходом и в определение оценки уровня аммиака.

Список использованных источников

1. Патент РФ 2038590 Россия МПК G 01 N 27/12 Датчик концентрации аммиака. / Крутоверцев С.А. и др. - Заявл. 24.09.92. Опубл. 27.06.95;
2. Bazunova M.V., Mustakimov R.A., Salikhov R.B., Mullagaliev I.N. Film materials based on polymer mixtures of the sodium salt of N-succinyl chitosan with

poly-N-vinylpyrrolidone. Journal of Applied Chemistry. 2022. V. 95. № 6. P. 741-749. DOI: 10.31857/S004446182206007X

3. Shurshina A.S., Bazunova M.V., Chernova V.V., Galina A.R., Lazdin R.Y. Kulish Influence of supramolecular organization on some characteristics of chitosan succinamide films produced from aqueous solutions Polymer Science, Series. 2020. V. 62. № 4. P. 422-429. DOI: 10.1134/S0965545X20040100

© Терегулов Т.Б., 2024

УДК 547.458+615.273.53

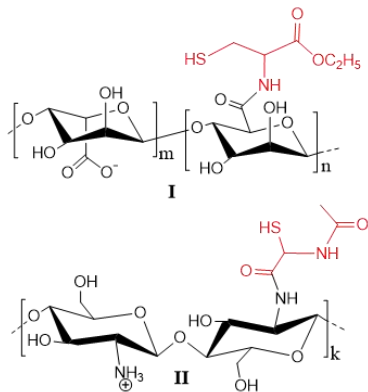
ПЛЁНКИ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА И АЛЬГИНАТА МОДИФИЦИРОВАННЫХ ФРАГМЕНТАМИ ТИОЛОВ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ГЕМОЛИЗ ЭРИТРОЦИТОВ ЧЕЛОВЕКА *IN VITRO*

М.А. Торлопов¹, Н.Н. Дрозд², Е.В. Удоратина¹

¹ Институт химии ФИЦ Коми научного центра Уральского отделения РАН,
г. Сыктывкар, Россия

² ФГБУ “Национальный медицинский исследовательский центр
гематологии” Министерства здравоохранения Российской Федерации, г.
Москва, Россия

Среди жителей развитых стран до 15% обращений за медицинской помощью связано с ранами различного генеза, а на их лечение приходится до 10% от бюджета здравоохранения. Характер течения раневого процесса и



потенциальный риск осложнений – основные факторы, влияющие на продолжительность и стоимость лечения, а также последующую реабилитацию. Биополимерные материалы предпочтительны при разработке плёнок для раневых покрытий. Клетки животных и человека способны распознавать отдельные структурные особенности строения как самих полисахаридов, так и их надмолекулярных комплексов, и в зависимости от этого формировать тот или иной функциональный ответ.



Плёнки для раневых покрытий на основе альгината и хитозана активно внедряются в медицинскую практику; альгинатные плёнки способны поддерживать нужный обмен жидкостью и газами, а плёнки хитозана, кроме того, характеризуется высокой антимикробной активностью.

Модификация этих полисахаридов-плёнокообразователей алкилтиолами преследует цель повысить уровень управления процессами ранозаживления, поскольку тиолы представляют собой один из наиболее активных классов соединений в отношении воспалительных цитокинов и опосредованного ими патогенного окислительного стресса [1].

Синтез тиолсодержащих производных альгиновой кислоты (I) и хитозана (II) осуществляли в водных средах, применив реакцию активированных карбодиимидом карбоксильных групп с аминогруппами. Содержание фрагментов цистеина в модифицированных полимерах составило 0,10 (степень замещения, определение методом Элмана). Формирование плёнок производили из водных растворов - получены гибкие, устойчивые в водных растворах (рН 5 – 8) ксерогели (фото) со средней толщиной до 20-30 мкм.

Одной из оценок совместимости биополимерных плёнок с компонентами крови является определение наименьшей степени разрушения мембраны эритроцитов при контакте с материалом. Для оценки влияния плёнок на гемолиз эритроцитов, стабилизированную кровь доноров (получали на станции переливания крови ФГБУ “НМИЦ гематологии”) и фракционировали; пленки (0,25 см²) помещали в пробирки с физиологическим раствором на 30 мин. Затем добавляли взвесь эритроцитов и через 1 час (37 °С) центрифугировали пробирки при 250 g 15 мин, после чего измеряли оптическую плотность надсадочной жидкости. Степень гемолиза рассчитывалась по значениям оптической плотности растворов, полученных в результате центрифугирования взвеси эритроцитов после инкубирования с пленками, фосфатным буфером и дистиллированной водой, согласно методу [2]. В качестве контроля использовали аналогичные пленки изготовленные из исходных, не модифицированных альгината и хитозана.

Показано, что значение оптической плотности растворов после инкубирования с пленками не отличаются от контроля (инкубирование с фосфатным буфером). Степень гемолиза эритроцитов при взаимодействии с пленками была незначительна и не превышала 1.5%.

Полученные результаты свидетельствуют о высокой гемосовместимости SH-модифицированных полисахаридов с данной структурой и перспективности дальнейших работ в области получения новых раневых покрытий на их основе.

Работа выполнена в рамках госзадания Института химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН (номер госзадания 122040600027-6).

Список использованных источников

1. Coppo L, Ghezzi P. // Biochem Soc Trans. 2011;39(5):1268-72.
2. В. Dash, G. Rethore, M. Monaghan, K. Fitzgerald, W. Gallagher, A. Pandit //Biomaterials. 2010. V. 31(32): 8188–97.

© Торлопов М.А. и др., 2024

УДК 691.175

О ВЛИЯНИИ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА ТЕМПЕРАТУРУ СТЕКЛОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ГОМОПОЛИМЕРОВ

Г.Р. Шадрина, А.А. Балдинов, Н.В. Улитин, В.И. Анисимова,
А.Д. Лифанов, Д.А. Шиян, К.А. Терещенко, И.С. Родионов,
М.Г. Казанская, Е.С. Воробьев, И.А. Суворова

Казанский национальный исследовательский технологический университет,
г. Казань, Россия

Методы машинного обучения получили широкое распространение в области моделирования «структура-свойство» (Quantitative Structure-Property Relationship, или QSPR) для химических соединений, в том числе полимеров. Основным достоинством моделей QSPR является возможность описания сколь угодно сложных зависимостей для оценки интересующих свойств химических соединений без привязки к какой-либо теории. Это не дает возможность проводить теоретическую интерпретацию полученных результатов.

Одним из возможных способов решения данной проблемы является объединение методов машинного обучения с прогностическими методами, построенными на теоретических предпосылках. Данная концепция была реализована нами для решения задачи прогнозирования температуры стеклования (T_g) органических гомополимеров. Наша идея заключалась в использовании алгоритма случайного леса в комбинации с методом инкрементов [1]. Это позволило нам оценить не непосредственно значения T_g , а значения параметров, характеризующих факторы, которые влияют на T_g . Для описания структуры повторяющегося звена полимера использовали молекулярные отпечатки (Morgan fingerprints) [2-5], а прогнозируемыми параметрами являлись A – параметр, характеризующий собственный объем повторяющегося звена (по смыслу близок к ван-дер-ваальсовому объему), Å^3 , B – параметр, характеризующий межмолекулярные взаимодействия (включая и сильные специфические, и слабые), $\text{Å}^3/\text{К}$, и C – параметр, характеризующий плотность молекулярной упаковки, $\text{Å}^3/\text{К}$. На основании этих параметров T_g рассчитывали как $T_g = A/(B + C)$. Точность прогноза T_g составила $R^2 = 0,95$ (база данных включала 823 органических гомополимера).

Для подтверждения работоспособности предложенной идеи необходимо было подтвердить наличие связи между значениями параметров A , B , C и значениями определяющих их факторов. Прежде всего интерес представлял параметр B , для которого можно достаточно точно, в отличие от других параметров, установить корреляции с факторами, его определяющими: в частности, с дипольным моментом μ (как характеристикой сильных специфических взаимодействий) и поляризуемостью α (как характеристикой слабых дисперсионных взаимодействий). В свою очередь, μ и α можно

количественно оценить с использованием квантово-химического моделирования. Для этого методом B3LYP/6-31G(d, p) [6-8] оптимизировали структуры полистирола с различными заместителями в ароматическом кольце (хлор-, бром-, фтор-, метил- и этил-) в 2-, 3-, 4- положениях. Исследуемые изомерные ряды полистирола представляют интерес для анализа, поскольку небольшое отличие в их структуре заметно сказывается на значении T_g . (см. таблицу). Модель полимера задавали в виде одного звена полимерной цепи, в которой открытую валентность концевых групп закрывали атомами водорода. Минимум на поверхности потенциальной энергии для построенных структур подтверждали отсутствием отрицательных частот колебаний в матрице Гессе.

Полимер	T_g , К (эксперимент [1])	T_g , К (расчет)	Дипольный момент μ , Д	Поляри- зуемость α , а.е.	B , $\text{Å}^3/\text{К}$
поли(2-хлорстирол)	392	397	1,65	89,56	-71,40
поли(3-хлорстирол)	363	387	2,28	90,43	-67,42
поли(4-хлорстирол)	388-401	397	2,51	90,88	-63,41
поли(2-бромстирол)	-	398	1,57	96,55	-95,48
поли(3-бромстирол)	-	398	2,19	97,81	-85,22
поли(4-бромстирол)	414-430	422	2,42	98,43	-55,28
поли(2-фторстирол)	-	384	1,07	78,95	-70,59
поли(3-фторстирол)	-	388	1,67	79,11	-75,83
поли(4-фторстирол)	368	379	1,85	79,14	-60,39
поли(2-метилстирол)	409	399	0,67	90,45	- 128,33
поли(3-метилстирол)	370	380	0,36	91,33	-94,43
поли(4-метилстирол)	366, 374, 382	375	0,14	91,81	-92,60
поли(2-этилстирол)	376	366	0,75	101,72	-89,22
поли(3-этилстирол)	303	331	0,48	102,64	-80,00
поли(4-этилстирол)	300, 351	335	0,08	103,18	-82,40

В результате квантово-химического моделирования для исследуемого производного полистирола получили значения дипольного момента μ (как характеристики сильных специфических взаимодействий) и поляризуемости α (как характеристики слабых дисперсионных взаимодействий). Значения коэффициента корреляции Пирсона μ и α с параметром В составили -0,86 и 0,67 соответственно, что подтвердило выдвинутую нами гипотезу о наличии связи между рассматриваемыми величинами.

Все расчеты были проведены на оборудовании Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МЦЦ РАН), г. Москва.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-13-00461, <https://rscf.ru/project/22-13-00461/>.

Список использованных источников

1. Askadskii, A.A. Computational materials science of polymers / A.A. Askadskii. – Cambridge: Cambridge International Science Publishing Ltd, 2003. – 650 p.
2. Morgan H.L. The Generation of a Unique Machine Description for Chemical Structures-A Technique Developed at Chemical Abstracts Service. Journal of Chemical Documentation. – 1965. – V. 5(2). – P. 107-113.
3. Durant J.L., Leland, B.A., Henry D.R., Nourse, J.G. Reoptimization of MDL Keys for Use in Drug Discovery. J. Chem. Inf. Comput. Sci. – 2002. – V. 42, Is. 6. – P. 1273-1280.
4. Todeschini, R.; Consonni, V. The Handbook of Molecular Descriptors. In The Series of Methods and Principles in Medicinal Chemistry. Eds. Mannhold, R.; Kubinyi, H., Timmerman, H. New York: Wiley-VCH, 2000.
5. Dunham, K.R., Faber, J.W.H., Vandenberghe, J., Fowler, W.F. Polystyrene modifications. II. Ring-substituted polystyrenes. Journal of Applied Polymer Science. – 1963. – V.7(3). – P. 897-908.
6. Becke, A.D. Density functional thermochemistry. III. The role of exact exchange / A.D. Becke // Journal Chemical Physics. – 1993. – V. 98. – P. 5648-5652.
7. Lee, C. Development of the colle-salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density / C. Lee, W. Yang, R. Parr // Physical Review B. – 1988. – V. 37. – P. 785-789.
8. Frisch M.J. Selfconsistent molecular orbital methods 25. Supplementary functions for Gaussian basis sets / M.J. Frisch, J.A. Pople, J.S. Binkley // Journal Chemical Physics. – 1984. – V. 80. – P. 3265-3269.

© Шадрина Г.Р. и др., 2024

УДК 544(42.032+722.3)

ВЛИЯНИЕ СПИРТОВ НА ПРИВИВКУ АКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ НА ОБЛУЧЕННУЮ ПОЛИЭТИЛЕНОВУЮ ПЛЕНКУ

Е.Ю. Швецова¹, А.С. Обшицер², Т.А. Байбурдов^{1,2}

¹ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», г. Саратов, Россия

²Саратовский химический завод акриловых полимеров ООО «АКРИПОЛ», г. Саратов, Россия

Ионообменные мембраны являются одним из наиболее распространенных типов мембран в химических источниках тока. Используя полиэтилен как субстрат можно осуществлять радикальную полимеризацию винилового мономера при излучении [1]. Низкое электрическое сопротивление у ионообменных мембран обеспечивается равномерным распределением мономера по толщине полимера матрицы во время прививания. Известно, что для этой цели используют органические растворители [2], поэтому для данной работы были выбраны модификаторы реакции - ряд многоатомных спиртов.

Целью работы данной работы являлось исследование прививки акриловой кислоты (АК) на плёнки полиэтилена при вводе различных многоатомных спиртов в реакционную массу.

В синтезе качестве матрицы были использованы облученные (на источнике γ -излучения Co^{60}) пленки полиэтилена марки 15813-020 (ГОСТ 16337-77) из ПЭВД, инициаторы - бензолсульфокислота (БСК) и $Fe(NH_4)_2(SO_4)_2$. В качестве модификаторов реакции были использованы этиленгликоль (ЭГ), глицерин, фруктоза и глюкоза. Степень прививки (Р, %) и равновесное набухание (W, г/г) у образцов определяли гравиметрически по стандартным методикам.

Было показано, что добавление этиленгликоля увеличивает, как и степень прививки, так и набухание в щелочи (КОН 40%) при стандартной температуре синтеза $97 \pm 1^\circ C$ (рис 1). При добавлении ЭГ повышается степень прививки при стандартной температуре $97 \pm 1^\circ C$ в сравнении с образцами, полученными в водной среде (кривая 2, рис.2), а также становится возможно проведение синтеза при более низкой температуре $93 \pm 1^\circ C$.

В таблице приведены значения степени прививки и равновесного набухания в электролите с использованием различных модификаторов в одинаковых условиях синтеза.

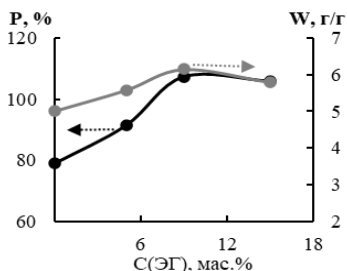


Рис. 1. Кривые изменения степени прививки и равновесного набухания в КОН при различной С (ЭГ) ([АК]= 35 мас. % [Fe⁺²]=0,036 моль/л; [БСК]= 1 мас. %, Т=97±1°С, t=90 мин)

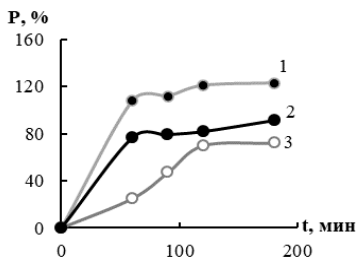


Рис. 2. Кинетические кривые степени прививки в присутствии С(ЭГ)=9 мас. % при температуре 97±1°С (1), 97±1°С без ЭГ (2), 93±1°С (3). ([АК]= 35 мас. % [Fe⁺²]=0,036 моль/л; [БСК]= 1 мас. %)

Таблица

Модификатор	(Т=97±1°С)		(Т=93±1°С)	
	P, %	W, г/г	P, %	W, г/г
Этиленгликоль*	137,2	7,6	82,0	5,3
Глицерин*	158,2	7,8	80,5	5,6
Фруктоза*	149,7	8,2	95,2	7,0
Глюкоза*	132,1	8,9	39,8	7,4
Вода	115,1	7,1	<i>р-ция не идет</i>	

* (при С[модификатора]=9 мас. %, [АК]= 35 мас. % [Fe⁺²]= 0,036 моль/л; [БСК]= 1 мас. %, t=90 мин)

При сравнении данных следует, что при стандартной температуре (97±1°С) добавление глицерина эффективнее влияет на степени прививки, увеличивая её на ~40%. При пониженной температуре 93±1°С образцы с использованием фруктозы показывают максимальный привес (~95%).

Таким образом введение многоатомных спиртов в реакционную массу позволяет увеличивать степень прививки, степень равновесного набухания в щелочи и позволяет проводить синтез при более низкой темпера туре.

Список использованных источников

1. Kitaeva, N.K. Radiation graft post-polymerization of sodium styrene sulfonate onto polyethylene / N.K Kitaeva, V.R. Duflot, N.S. Ilicheva // Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry. – 2013. – Т. 298. – № 2. – С.1041–1047.
2. Sehgal, T. Synthesis, characterization and swelling characteristics of graft copolymerized isotactic polypropylene film / T. Sehgal, S. Rattan // International Journal of Polymer Science. – 2010. – Т. 2010. – Р. 9.

© Швецова Е.Ю. и др., 2024

СЕКЦИЯ №2. СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ПРИРОДНЫХ И СИНТЕТИЧЕСКИХ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

УДК 541.64

ИЗУЧЕНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПЛЁНОК НА ОСНОВЕ ПЕКТИНА

С.В. Саликаева, Е.И. Кулиш

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

В последние годы материалы на основе полисахаридов активно изучаются в связи с перспективой их использования в пищевой, косметической, фармацевтической и медицинской отраслях. Среди полисахаридов, используемых для выполнения функций внеклеточного матрикса и обеспечения защиты при заживлении ран, содействия регенерации и росту новых тканей, возможным вариантом стал пектин, представляющий собой полисахарид растительного происхождения, обладающий превосходными гелеобразующими свойствами и способным к контролируемому высвобождению молекул лекарственных веществ. Эти свойства пектина послужили основой для его сочетания с различными соединениями (антибиотиками, гемостатиками и др.) с целью получения материалов, характеризующихся широким спектром действий, например, антибактериальным или антимикробным действием.

В настоящей работе были исследованы растворы на основе полисахарида – пектина цитрусового происхождения производства SIGMA-ALDRICH с содержанием галактуроновой кислоты 74,0 г/дл. На основе водных растворов пектина были получены пленочные покрытия. С целью придания пленочным покрытиям способности не растворяться в водных средах, в процессе приготовления раствора пектина к нему добавлялся лактат кальция в количестве от 0,02 до 0,08 моль на моль полимера.

Введение в раствор пектина лактата кальция, действительно, приводит к потере растворимости пленок в воде. Однако, введение лактата кальция приводит и к уменьшению значений разрывного удлинения пленок пектина, т.е. понижает их эластичность. Данная проблема была решена с помощью введения в раствор пектина с лактатом кальция 0,5 моль глицерина. Пленки, полученные из таких модифицированных глицерином растворов, характеризуются повышенными значениями разрывного удлинения, т.е. повышенной эластичностью пленок.

Таким образом, были подобраны концентрации лактат кальция и глицерина, позволяющие получить нерастворимые в воде эластичные пленки пектина.

© Саликаева С.В. и др., 2024

ФЛОКУЛИРУЮЩИЕ СВОЙСТВА МАГНИТНЫХ ФЛОКУЛЯНТОВ

А.А. Алексеева, Л.Р. Дюкина, Е.И. Жданова, Э.Б. Цатурян,

В.Е. Проскурина

ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», г. Казань, Россия

Флокуляция является одним из удобных, экономичных и эффективных методов очистки воды, который широко используется в качестве основного способа при селективном разделении многокомпонентных дисперсных систем (ДС). На сегодняшний день перспективным является применение магнитных флокулянтов для избирательной очистки, удаления токсичных компонентов и примесей в малотоннажных процессах получения биопродуктов. Результатом этого становится широкое потенциальное приложение процессов флокуляции к области биологии, медицины, нанотехнологии и необходимость разработки высокоэффективных флокулирующих агентов. Цель настоящего исследования – синтез магнитных флокулянтов и оценка их флокулирующих свойств на реальной ДС – суспензии бентонитовой глины.

Первоначально наноразмерные частицы магнетита Fe_3O_4 синтезировали методом соосаждения солей. Синтез проводили в атмосфере азота при температуре 333К [1]. Флокулирующим агентом был выбран хитозан (К) с $M = 3,8 \cdot 10^4$ и степенью деацетилирования 80%. Далее в водный раствор хитозана добавляли заданную массу наночастиц Fe_3O_4 и перемешивали в течение 6ч. Размеры магнитных наночастиц и магнитного флокулянта (МФ) определяли с помощью динамического светорассеяния. Морфология поверхности и химические структуры МФ подтверждены методами ИК-спектроскопии и рентгеноструктурным анализом. Оценку флокулирующего эффекта анализируемых реагентов проводили в режиме стесненного оседания на реальной ДС – суспензии бентонитовой глины со средним размером частиц $R_{cp} = 0,55 \cdot 10^{-6}$ м и электрокинетическим потенциалом $\zeta = -33,5$ мВ. Для создания магнитного поля использовали неодимовые магниты: N38 (12,5 кГс) диаметром 60 мм и толщиной 30 мм, которые были установлены на середине высоты измерительного цилиндра в горизонтальной плоскости.

На рис. 1 показаны кривые седиментации суспензии бентонитовой глины, иллюстрирующие характер влияния концентрации образца магнитного флокулянта на основе магнетита и хитозана (МФК) на седиментационную устойчивость суспензии бентонитовой глины при расстоянии от стенки измерительного цилиндра до магнита $L = 1$ см. Сопоставительный анализ кривых свидетельствует об ускорении процесса флокуляции с ростом концентрации образца МФК.

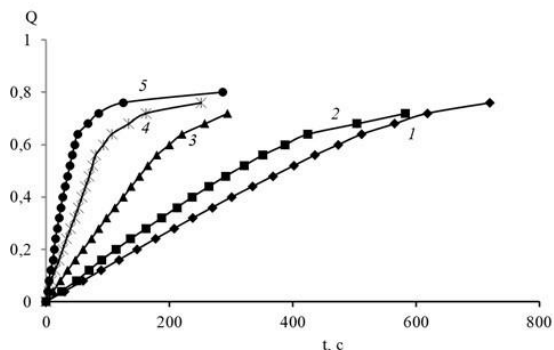


Рис. 1. Кривые седиментации суспензии бентонитовой глины с участием образца МФК при $C \cdot 10^4$, %: 0(1), 4 (2), 12 (3), 28 (4), 60 (5).

Высокие значения флокулирующего эффекта установлены для образца МФК по сравнению с индивидуальной добавкой хитозана. При наложении внешнего магнитного поля осаждение агрегатов, состоящих из частиц бентонитовой глины и магнитного флокулянта, завершалось в течение более короткого времени, чем в отсутствии магнитного поля. Выявлены некоторые технологические аспекты регулирования устойчивости дисперсных систем.

Отметим, что степень функционализации магнитных наночастиц природными полисахаридами может существенно изменить их свойства и обеспечить новые сферы применения. Таким образом, магнитная флокуляция представляет собой экологически устойчивое решение проблем флокуляции и может использоваться для устранения загрязнения наночастицами, обезвреживания водорослей, для разделения биоконпонентов и очистки биосистем различной природы.

Список использованных источников

1.Проскурина В.Е., Кашина Е.С., Рахматуллина А.П. // Коллоидный журнал. 2023. Т. 84. №1. С. 1-8.

© Алексеева А.А. и др., 2024

УДК541.69:697:544.165

О РЕОЛОГИЧЕСКОМ ПОВЕДЕНИИ СМЕСЕЙ N-СУКЦИНИЛХИТОЗАНА И КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ В ПРИСУТСТВИИ ГЛИЦЕРИНА

М.В. Базунова, Б.Ф. Алмаев

ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий»,
г. Уфа, Россия

В настоящее время актуальна проблема поиска новых ранезащитных материалов, которые обладали бы хорошей влагопоглощающей способностью, паро- и газопроницаемостью, биосовместимостью с тканями

организма, бактериостатичностью, биоразлагаемостью, а также прозрачностью, достаточной прочностью и эластичностью, устойчивостью к стерилизации и удобством в применении для больного и медперсонала. Этим свойствам удовлетворяют материалы, полученные из биосовместимых природных или искусственных полимеров, а также их композиций. Очень перспективным является хитозан и его производные, например натриевая соль N-сукцинилхитозана (СХТЗ), преимуществами которого являются растворимость в нейтральных средах и возможность формования материалов из растворов, что снижает затраты на производство, биосовместимость с тканями организма, бактериостатичность, способность к биодеградации. Вместе с тем, большинство применяемых на данный момент полимерных материалов на основе СХТЗ не обладают достаточными для эффективной и удобной эксплуатации физико-механическими характеристиками. Одним из путей решения данной проблемы является использование полимерных смесей СХТЗ с другими биоразлагаемыми полимерами, например, натриевой солью карбоксиметилцеллюлозы (КМЦ), которая обладает большей механической прочностью, а также проявляет биоадгезивные свойства. Также перспективным методом улучшения деформационного поведения полимерных материалов является добавление к смесям низкомолекулярных модифицирующих добавок, таких как многоатомные спирты. В данной работе в качестве пластифицирующей добавки выбран глицерин, т.к. он смешивается с водой в любых соотношениях, может быть введён в систему на стадии растворения полимерной смеси, а также имеет достаточно высокую температуру кипения и не удаляется из материала при его сушке.

Вследствие того, что получение материалов из ряда водорастворимых полисахаридов и их смесей осуществляется через стадию растворения, то в процессе приготовления, хранения и подачи растворов на формование при аппаратурном оформлении данных операций необходимо учитывать реологические свойства перерабатываемых систем [1, 2].

Целью работы было изучение реологического поведения смесей СХТЗ с КМЦ и глицерином для определения оптимального состава ранезаживляющих пластин на их основе.

Как следует из данных, представленных на рисунке 2, растворы смесей СХТЗ-КМЦ, содержащие более 1% масс. КМЦ характеризуются существенным повышением вязкости как в случае нестерилизованных растворов, так и после стерилизации, что может свидетельствовать об усилении интерполимерного взаимодействия и степени структурированности растворов. Об этом же свидетельствуют и данные о величинах пределов текучести. При этом, при содержании КМЦ от 1,5% предел текучести растворов резко возрастает, как для индивидуального КМЦ, так и для смесей СХТЗ:КМЦ. Следовательно, содержание КМЦ в формовочных растворах должно быть, с одной стороны, не менее 1% масс., чтобы растворы имели

достаточно высокую степень структурированности, а с другой стороны – не более 1,5%, чтобы системы оставались достаточно текучими для транспортировки и дозирования. Стерилизованные растворы смесей СХТЗ-КМЦ характеризуются меньшими значениями вязкости и пределов текучести, чем нестерилизованные, в то время, как для растворов индивидуального КМЦ наоборот, вязкость и пределы текучести после стерилизации увеличиваются. Это можно объяснить тем, что макромолекулы СХТЗ в основном деструктурируют при стерилизации, а макромолекулы КМЦ, в основном, сшиваются. Введение глицерина снижает значения пределов текучести, что может быть связано с тем, что глицерин сольватирует полярные группы КМЦ и СХТЗ, тем самым уменьшая интенсивность межмолекулярного взаимодействия, что наиболее выражено проявляется в области высоких концентраций КМЦ. Данные результаты коррелируют с зависимостью вязкости смесей СХТЗ-КМЦ от содержания глицерина.

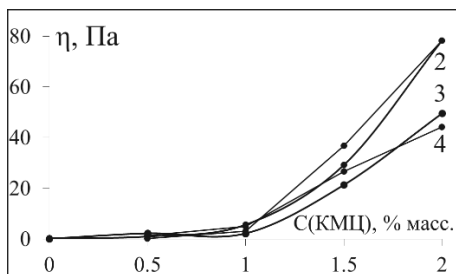


Рис. 1. Зависимость вязкости раствора от содержания КМЦ: стерилизованные растворы индивидуального КМЦ (1) и смеси КМЦ и 3% масс. СХТЗ (3); нестерилизованные растворы индивидуального КМЦ (4) и смеси КМЦ и 3% масс. СХТЗ (2)

Из реологических исследований в сдвиговом режиме следует, что с целью возможности сохранения текучести системы оптимальное содержание КМЦ не должно превышать 1,5 %, а содержание глицерина должно находиться в пределах 1-1,5 %.

Список использованных источников

1. Базунова М.В., Шуршина А.С., Лаздин Р.Ю., Кулиш Е.И. // Химическая физика. 2020. Т. 39. № 7. С. 49-55.
2. Лаздин Р.Ю., Чернова В.В., Базунова М.В., Захаров В.П., Кулиш Е.И. Журнал прикладной химии. 2020. Т. 93. № 1. С. 74-80.

© Базунова М.В., Алмаев Б.Ф., 2024

АНАЛИЗ РАЗЛОЖЕНИЯ ЭНЕРГИИ ПАРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СИСТЕМАХ ТЕРМОПЛАСТ-АЛЮМИНИЙ

В.И. Анисимова, А.А. Балдинов, И.С. Родионов, Н.В. Улитин,

И.А. Суворова, А.В. Полищук, К.А. Терещенко, Д.А. Шиян,

И.А. Старостина, О.В. Стоянов, А.О. Софьин

Казанский национальный исследовательский технологический университет,
г. Казань, Россия

Адгезионные взаимодействия в системе термопласт-алюминий представляют большой промышленный интерес, так как металл придает высокую прочность, а полимер способствует уменьшению веса изделия и возрастанию коррозионной стойкости оборудования и трубопроводов. Для прогнозирования прочности систем термопласт-алюминий необходимо определить их энергетические характеристики, зависящие от наличия функциональных групп у термопласта.

Методом V3LYP-GD3/6-31G(d,p) получены оптимизированные структуры систем полиэтилентерефталата (ПЭТФ), полиметилметакрилата (ПММА), полистирола (ПС), полипропилена (ПП) с поверхностью алюминия.

Анализ разложения энергии парного взаимодействия (pair interaction energy decomposition analysis, PIEDA) проводили для определения энергетических составляющих адгезионного взаимодействия.

Таблица 1. Вклад энергетических компонентов (в мДж/м²) в адгезионное взаимодействие при образовании систем термопласт-алюминий

Термопласт	ΔE_{es}	ΔE_{ex}	ΔE_{ct}	ΔE_{disp}	ΔE_{int}
ПЭТФ	-13.9	18.8	-14.8	-0.4	-10.2
ПММА	-6.8	9.0	-6.5	-0.2	-4.8
ПС	-6.7	10.8	-7.9	-0.3	-4.5
ПП	-2.9	4.0	-3.0	-0.1	-2.3

Анализ PIEDA показал, что во всех изучаемых системах термопласт-алюминий основной вклад в общую энергию адгезионного взаимодействия вносят компоненты ΔE_{ct} и ΔE_{es} , которые характеризуют донорно-акцепторные (кислотно-основные) и электростатические взаимодействия соответственно.

Все расчеты были проведены на оборудовании Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСЦ РАН), г. Москва.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-13-00461, <https://rscf.ru/project/22-13-00461/>.

© Анисимова В.И. и др., 2024

УДК 544:[547.917+ 544.275.5]

ВИСКОЗИМЕТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИСТЕМЫ КСАНТАН– ПОЛИВИНИЛОВЫЙ СПИРТ

Д.А. Антипов, О.Н. Малинкина, А.Б. Шиповская

ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский
государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», г. Саратов,
Россия

Разработка составов смесей на основе полимеров природного и синтетического происхождения позволяет получать пленочные, сшитые гидро- и криогелевые структуры со сбалансированными и улучшенными свойствами (газообменные, морфологические, адгезивные, механические и др.) для применения в качестве биоразлагаемых упаковочных, фильтрационных, косметологических и биомедицинских материалов. Одной из перспективных таких полимерных смесей является сочетание анионногенного экзополисахарида разветвленного строения ксантана (ХГ) и поливинилового спирта (ПВС) – нейтрального полимера линейного строения [1–4].

В настоящей работе проведена оценка влияния состава смесевых систем ХГ–ПВС на гидродинамические свойства в водно-солевых растворах.

Использовали ксантан (ХГ, ООО «Успех», РФ) со средневязкостной молекулярной массой 1.63 МДа (определена по уравнению Куна-Марка-Хаувинка, $XG - 0.1 \text{ N NaCl}$, $K=1.7 \cdot 10^{-4}$ и $a=1.14$ [5]), поливиниловый спирт со степенью гидролиза 92 мольн. % (ПВС, ООО «Титан», РФ); хлорид натрия ч.д.а. (NaCl, ЗАО «База №1 Химреактивов», РФ); 96% этиловый спирт (EtOH, ЗАО «РФК», РФ); дистиллированную воду.

Исходные водно-солевые растворы ХГ с концентрацией полимера $C_{ХГ} = 0.025$ г/дл получали добавлением воды при интенсивном перемешивании к навеске полимера, равномерно распределенной в небольшом количестве этилового спирта, с последующим нагревом СВЧ-излучением при мощности 800 Вт в течение 30–45 с до $80 \pm 5^\circ\text{C}$. К полученному водному раствору ХГ добавляли NaCl ($C_{\text{NaCl}} = 0.7$ г/дл), выдерживали 20 мин при $20 \pm 5^\circ\text{C}$ и фильтровали через стеклянный фильтр Шотта 160. Исходные водно-солевые растворы ПВС с $C_{\text{ПВС}} = 0.2$ г/дл получали аналогичным образом за исключением стадии предварительной обработки этиловым спиртом. Исследуемые системы получали смешением исходных водно-солевых растворов ХГ и ПВС во всем диапазоне массовых соотношений.

Определение числа вязкости водно-солевых растворов проводили на капиллярном вискозиметре Уббелодде с диаметром капилляра 0.56 мм при $25 \pm 0.3^\circ\text{C}$. Предельное число вязкости ($[\eta]$, дл/г) находили согласно уравнению Хаггинса экстраполяцией прямолинейной концентрационной зависимости $\eta_{\text{уд}}/C_{\text{ХГ+ПВС}} = f(C_{\text{ХГ+ПВС}})$ к условию $C_{\text{ХГ+ПВС}} \rightarrow 0$. Оптимальная

концентрация индифферентного электролита NaCl в разбавителе и исходных водно-солевых растворах XG для полной нейтрализации совокупного заряда макромолекул составила 0.7 г/дл.

Установлено, что предельное число вязкости во всем диапазоне исследуемых смесевых систем меньше аддитивного значения, что позволяет предположить сильные межмолекулярные взаимодействия XG–ПВС и формирование взаимопроникающих макроклбков (табл.1).

Таблица 1. Влияние состава смеси XG–ПВС на предельное число вязкости

Соотношение XG–ПВС	$C_{XG}/C_{ПВС}$	[η], дл/г	
		Аддитивное значение	Экспериментальное значение
100:0	–	17.13	17.13
90:10	1.13	15.54	11.24
80:20	0.50	13.93	4.11
50:50	0.13	9.11	0.79
20:80	0.03	4.30	0.88
10:90	0.01	2.69	0.74
0:100	–	1.08	1.08

В диапазоне составов $C_{XG}/C_{ПВС}$ 0.13–0.01 обнаружено наибольшее отклонение от аддитивности. Полученные данные позволяют прогнозировать оптимальный состав для формирования смесевых пленок XG–ПВС.

Список использованных источников

1. Raschip I.E., Dinu M.V., Fifere N., Darie-Nita R., Pamfil D., Popirda A., Logigan C. Thermal, mechanical and water sorption properties of xanthan-based composite cryogels //Cellulose Chem. Technol. – 2020. – Т. 12. – №. 29. – С. 30.
2. Chen J., Zheng M., Tan K.B., Lin J., Chen M., Zhu Y. Polyvinyl alcohol/xanthan gum composite film with excellent food packaging, storage and biodegradation capability as potential environmentally-friendly alternative to commercial plastic bag //Int. J. Biol. Macromol. – 2022. – Т. 212. – С.402-411.
3. Saranya P., Vanitha D., Sundaramahalingam K., Nandhinilakshmi M., Samad S.A. Structural and electrical properties of cross-linked blends of Xanthan gum and polyvinylpyrrolidone-based solid polymer electrolyte //Ionics. – 2023. – Т. 29. – №. 12. – С. 5147-5159.
4. Raschip I.E., Fifere N., Varganici C.D., Dinu M.V. Development of antioxidant and antimicrobial xanthan-based cryogels with tuned porous morphology and controlled swelling features // Int. J. Biol. Macromol. – 2020. – Т. 156. – С.608-620.
5. Miles M., Rinaudo M., Finland B. The Viscosity dependence on concentration, molecular weight and shear rate of xanthan solutions //Polymer Bulletin. – 1985. – Vol. 14. – P. 157.

© Антипов Д.А. и др., 2024

УДК 541.69:697:544.165

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ ПОРИСТЫХ ПЛАСТИН НА ОСНОВЕ СМЕСЕЙ НАТРИЕВЫХ СОЛЕЙ N-СУКЦИНИЛХИТОЗАНА И КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ

М.В. Базунова, Б.Ф. Алмаев

ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий»,
г. Уфа, Россия

На данный момент, разработано большое количество альтернатив традиционным ранозаживляющим повязкам, например, материалы на основе полисахаридов, таких как хитозан и его производные. Однако применение подобных материалов ограничено из-за множества проблем, возникающих в ходе их производства и эксплуатации, а именно недостаточной механической прочности и пластичности материала. Это приводит к нарушению целостности пластины в ходе транспортировки и эксплуатации, что, в свою очередь, нарушает равномерность контакта пластины с заживляемой поверхностью, создает дополнительную возможность попадания патогенов в рану и негативно сказывается на удерживании пластины на ране. Очень перспективным при создании ранезаживляющих покрытий является натриевая соль N-сукцинилхитозана (СХТЗ), преимуществами которого являются, с одной стороны – растворимость в нейтральных средах и возможность формования материалов из растворов, что снижает затраты на производство, а с другой - биосовместимость с тканями организма, бактериостатичность, способность к биодеградации. Вместе с тем, большинство применяемых на данный момент полимерных материалов на основе СХТЗ не обладают достаточными для эффективной и удобной эксплуатации физико-механическими характеристиками. Одним из путей решения данной проблемы является использование полимерных смесей СХТЗ с другими биоразлагаемыми полимерами, например, натриевой солью карбоксиметилцеллюлозы (КМЦ), которая обладает большей механической прочностью, а также проявляет биоадгезивные свойства. Также перспективным методом улучшения деформационного поведения полимерных материалов является добавление к смесям низкомолекулярных модифицирующих добавок, таких как многоатомные спирты. В данной работе в качестве пластифицирующей добавки в материалы на основе СХТЗ выбран глицерин. Кроме того, для того, чтобы ранезащитные материалы не препятствовали восстановлению или замещению повреждённые ткани и органы, они должны иметь определенную пористость и шероховатость.

В связи с этим, целью работы явилось изучение морфологии и физико-механических свойств пористых материалов на основе смесей СХТЗ и КМЦ в присутствии глицерина.

Пористые материалы на основе СХТЗ, КМЦ и их смесей получали методом лиофилизации формовочных растворов в лиофильной сушке. Условия сушки оставались постоянными для всех образцов.

Для оценки морфологии поверхности использован электронный микроскоп, снимки с которого обрабатывали методом статического анализа изображений. Установлено, что размерные характеристики пор зависят от состава формовочных растворов и средний эквивалентный радиус входных отверстий образцов, полученных из растворов 3% СХТЗ, 1,5% КМЦ и 1 % глицерина составляет от 54 мкм до 357 мкм. Полученные пластины, таким образом, представляют собой макропористые материалы, которые не будут препятствовать формированию живой ткани в процессе ее регенерации.



Рис. 1.
Микрофотография
поверхности пластины,
полученной из
растворов 3% СХТЗ,
1,5% КМЦ и 1 %
глицерина

При изучении физико-механических свойств пластин было обнаружено, что введение глицерина способствует улучшению совместимости компонентов, т.е. межмолекулярное интерполимерное взаимодействие преобладает над внутримолекулярной гомоассоциацией. Наблюдаемое усиление разрывного напряжения пластин, полученных из растворов смесей по сравнению с пластинами из индивидуального СХТЗ, можно рассматривать как хорошо известную ситуацию повышения разрывного напряжения в наполненных системах. Т.е. причиной некоторого усиления прочности пластин, в нашем случае, является образование агрегатов макромолекул, представляющих собой узлы флуктуационной сетки зацеплений. Значение разрывного удлинения также увеличиваются. При введении глицерина с концентрацией 1% масс. наблюдается резкий рост эластичности материалов (т.е. увеличение разрывного удлинения). Вместе с тем, физико-механические свойства находящегося в свободной продаже аналога уступают полученным в данной работе пластинам.

Список использованных источников

1. Бабунова М.В., Шуршина А.С., Лаздин Р.Ю., Кулиш Е.И. // Химическая физика. 2020. Т. 39. № 7. С. 49-55.

2. Лаздин Р.Ю., Чернова В.В., Бабунова М.В., Захаров В.П., Кулиш Е.И. // Журнал прикладной химии. 2020. Т. 93. № 1. С. 74-80.

© Бабунова М.В. и др., 2024

УДК 532.5.032

ОСОБЕННОСТИ ПРЕПОДАВАНИЯ РАЗДЕЛА «МОЛЕКУЛЯРНАЯ ФИЗИКА» СТУДЕНТАМ НАПРАВЛЕНИЯ 18.03.01 «ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ», ПРОФИЛЬ ПОДГОТОВКИ «ТЕХНОЛОГИЯ И ПЕРЕРАБОТКА ПОЛИМЕРОВ»

М.В. Базунова, Г.И. Заманова

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Известно, что одной из особенностей Федеральных образовательных стандартов нового (4-го) поколения является переход на новую модель обучения по системе 2+2+2, в которой первые два года студенты изучают общие дисциплины, вторые два года — углубленно свою специализацию, а последние два года — магистратура. Модель предполагает смену направления, если обучающийся во время первых двух лет поймет, что хочет изучать другую специальность. В связи с этим, при составлении рабочих программ дисциплин естественно-научного и инженерного блока необходимо делать упор на усиление межпредметных связей.

Рассмотрим один пример: явления переноса. Эти явления (диффузия, вязкость и теплопроводность), являются фундаментальным компонентом учебной программы раздела физики «Молекулярная физика» направления 18.03.01 «Химическая технология», направленность «Технология и переработка полимеров», связанных с изучением механики жидкости, теплопередачи и массообмена. Сейчас это считается также и частью инженерной науки, а также термодинамики, механики и электромагнетизма, и, несомненно, физики и механики полимеров. Особенно четко прослеживается общность и взаимосвязь раздела «Молекулярная физика» с такими дисциплинами ОП 18.03.01 «Химическая технология», направленность «Технология и переработка полимеров», как «Процессы и аппараты химической технологии» и «Основы реологии». Все инженерные процессы включают в себя передачу энергии — это нагрев и охлаждение технологических потоков, фазовые переходы, перегонка и т.д. Если значения физических параметров термодинамической системы отличаются в разных точках объёма среды, т.е. когда система находится в неравновесном состоянии, то возникают термодинамические потоки, связанные с переносом вещества, энергии или импульса из одной части среды в другую, т.е. система стремится к равновесию.

При кинетическом описании потоков исследуются зависимости от времени статистических характеристик или функций распределения, описывающих движение частиц. Полученные функции используются для нахождения локальных значений параметров среды и термодинамических потоков. При гидродинамическом описании рассматривается поток некоторой физической величины F , численно равный количеству этой

физической величины, переносимой за 1 сек через выбранную поверхность. Для этого вводят понятие вектор плотности термодинамического потока физической величины F_j .

Рассмотрим диффузию как процесс самопроизвольного выравнивания концентраций веществ в смесях (например, в смеси двух газов). В этом случае отсутствие перемешивания возможно при постоянном суммарном давлении смеси газов. По закону Дальтона давление: $p_1 + p_2 = p = n_1 kT + n_2 kT = \text{const}$ соответственно и концентрации смеси: $n_1 + n_2 = n = \text{const}$. Относительная концентрация молекул одного из газов $F_1 = \frac{n_1}{n}$, тогда плотность потока концентрации

$$j_{n_1} = -\frac{1}{3} \langle v_1 \rangle n \lambda_1 \frac{d}{dx} \left(\frac{n_1}{n} \right) = -\frac{1}{3} \langle v_1 \rangle \lambda_1 \left(\frac{dn_1}{dx} \right) = -D_1 \frac{dn_1}{dx}$$

$D_1 = \frac{1}{3} \langle v_1 \rangle \lambda_1$ – коэффициент диффузии. Если m_1 – масса молекулы, то плотность газа $\rho_1 = m_1 n_1$, поэтому для потока плотности получается уравнение

$$J_{\rho_1} = -\frac{1}{3} \langle v_1 \rangle n \lambda_1 \frac{d}{dx} \left(\frac{n_1}{n} \right) = -D_1 S \frac{d\rho_1}{dx},$$

которое называется первым законом Фика для стационарной диффузии: диффузионный поток от более высокой концентрации к более низкой концентрации пропорционален градиенту концентрации вещества и коэффициенту диффузии вещества в среде.

Процесс нестационарной диффузии подчиняется второму закону Фика:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}.$$

Молекулы газа, находясь в постоянном хаотическом движении и при упругих соударениях обмениваются кинетической энергией поступательного движения, что приводит к выравниванию температуры. Теплопроводность – процесс выравнивания температуры в различных точках среды.

Если ввести обозначение: $\frac{1}{3} \langle v \rangle \rho C_{уд} \lambda = \alpha$ – коэффициент

теплопроводности, то плотность потока теплоты можно записать в виде:

$$j_Q = -\alpha \frac{dT}{dx}, \text{ а поток теплоты: } J_Q = -\alpha S \frac{dT}{dx}.$$

Таким образом, ориентирование на усиление межпредметных связей позволит облегчить переход на новую модель обучения по системе 2+2+2.

Список использованных источников

1. Harris, J., Jones, R.O. The surface energy of a bounded electron gas // J. Phys. F Metal Phys., 1974, v. 4, pp. 1170-1186.

2. Базунова М.В., Заманова Г.И. Сборник материалов VII Всероссийской научно-методической конференции Проблемы современного физического образования. Уфа: УУНиТ, 2023. С. 31.

© Базунова М.В. и др., 2024

УДК 541.6

ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОМПОЗИЦИЙ ПОЛИЛАКТИД-ЛЕКАРСТВЕННОЕ ВЕЩЕСТВО

Э.Р. Бакирова, А.Б. Сунаргулов, Л.Г. Гарипова

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Бактериальные инфекции являются серьезной проблемой в медицине из-за высокого риска возникновения многочисленных инфекционных осложнений, сопровождающих травмы и хирургические вмешательства. Цефтриаксон (ЦФТ) – известный антибиотик широкого спектра действия против грамположительных и грамотрицательных аэробных и некоторых анаэробных бактерий. Основными механизмами, контролирующими высвобождение лекарственного средства из биоразлагаемых синтетических носителей, являются диффузия, деградация, набухание и механизмы, основанные на сродстве. Полилактид (ПЛ) широко используется при доставке лекарств, поскольку ПЛ биоразлагаемый, хорошо адаптируется к биологической среде и не оказывает неблагоприятного воздействия на кровь и ткани. Цель данной работы заключается в изучении зависимости физико-механических свойств композиций на основе ПЛ-ЦФТ от количества введенного лекарственного вещества.

В работе использовали: образец ПЛ марки bio-101 (Китай). В качестве модельного лекарственного вещества использовали цефтриаксона натриевую соль (ПАО «Биосинтез», Россия). Получение композиций на основе ПЛ осуществляли на лабораторном пластографе. Выбор условий переработки обусловлен проведенной ранее оптимизацией процесса [1]. Содержание ЦФТ варьировалось от 2.5 до 10.0% от общей массы полимеров в смеси. Испытания получаемых материалов на разрыв проводили на универсальной испытательной машине «Shimadzu AGS-X» (Япония).

На основании данных полученных в ходе работы были установлены зависимости модуля упругости, разрывного удлинения и разрывного напряжения от количества введенного ЦФТ в пленочные материалы на основе ПЛ. Установлено, что введение ЦФТ в композиции на основе ПЛ приводит к незначительному уменьшению модуля упругости (E (ПЛ)=2998 МПа, E (ПЛ-ЦФТ 10%)=2732 МПа); уменьшению разрывного напряжения (σ (ПКЛ)=55.0 МПа, σ (ПКЛ-ЦФТ 10%)= 34.9 МПа и уменьшению разрывного удлинения (l (ПКЛ) = 5.0%, l (ПКЛ-ЦФТ 10%)= 1.9%).

Список использованных источников

1.Бакирова Э.Р., Лаздин Р.Ю., Чернова В.В., Кулиш Е.И. Влияние условий переработки на некоторые характеристики полилактида // Бутлеровские сообщения. 2022. Т. 69. № 4. С. 59-64.

© Бакирова Э.Р. и др., 2024

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ КОМПОЗИЦИЙ ПОЛИЛАКТИД- ЛЕКАРСТВЕННОЕ ВЕЩЕСТВО

А.Б. Сунаргулов, Э.Р. Бакирова, Л.Г. Гарипова

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Разработка новых лекарственных форм является приоритетной задачей биомедицины и экспериментальной фармакологии. Системы доставки лекарств нового поколения позволяют пролонгировать высвобождение лекарств, повысить их биодоступность, направить их к месту патологического процесса и снизить возможные побочные эффекты лекарств. Наиболее широко используемыми материалами для создания таких форм являются полиэфиры, такие как полимолочная кислота (ПЛ). Цефтриаксон (ЦФТ) представляет собой цефалоспорин третьего поколения, который эффективен против широкого спектра микроорганизмов с благоприятным проникновением в ткани, используется при различных серьезных инфекциях. Цель данной работы заключается в изучении зависимости комплексной вязкостисмесей на основе ПЛ-ЦФТ от количества введенного лекарственного вещества.

В работе использовали: образец ПЛ марки bio-101 (Китай). В качестве модельного лекарственного вещества использовали цефтриаксона натриевую соль (ПАО «Биосинтез», Россия). После процесса получения смесей ПЛ и ЦФТ на лабораторном пластографе образцы композитов помещались в автоматический гидравлический пресс для формирования пленок. Выбор условий переработки обусловлен проведенной ранее оптимизацией процесса [1]. Содержание ЦФТ варьировалось от 2.5 до 10.0% от общей массы полимеров в смеси. Реологические измерения проводили на модульном динамическом реометре «HaakeMars III» (Япония).

На основании данных, полученных в ходе работы, были установлены зависимости значений комплексной вязкости от количества ЦФТ. Выявлена следующая закономерность: чем больше количества ЦФТ в пленочных композициях на основе ПЛ, тем больше значения комплексной вязкости.

Список использованных источников

1. Бакирова Э.Р., Лаздин Р.Ю., Чернова В.В., Кулиш Е.И. Влияние условий переработки на некоторые характеристики полилактида // Бутлеровские сообщения. 2022. Т. 69. № 4. С. 59-64.

© Сунаргулов А.Б. и др., 2024

УДК 544.18+539.612

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
АДГЕЗИОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СИСТЕМАХ
ТЕРМОПЛАСТ-АЛЮМИНИЙ: КИСЛОТНО-ОСНОВНЫЕ
СВОЙСТВА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ**

**А.А. Балдинов, В.И. Анисимова, И.С. Родионов, Н.В. Улитин,
И.А. Суворова, А.В. Полищук, Д.А. Шиян, К.А. Терещенко,
И.А. Старостина, О.В. Стоянов, А.О. Софьин**

Казанский национальный исследовательский технологический университет,
г. Казань, Россия

При покрытии алюминия термопластами адгезионное взаимодействие между ними играет ключевую роль в создании прочных антикоррозионных систем термопласт-алюминий. Для оценки прочности таких систем необходимо определить энергетические характеристики и кислотно-основные (донорно-акцепторными) свойства термопласта и алюминия. Мерой кислотно-основных свойств поверхности является параметр кислотности D ($(\text{мДж}/\text{м}^2)^{1/2}$), определяемый экспериментально по методу Э. Бергер. Значение этого параметра зависит от наличия функциональных групп в структуре термопласта.

Поверхность полиэтилентерефталата (ПЭТФ), полиметилметакрилата (ПММА) и полистирола (ПС) обладает основными свойствами ($D < 0$), а поверхности полипропилена (ПП) и алюминия – кислотными ($D > 0$). Для систем ПЭТФ- γ - Al_2O_3 , ПММА- γ - Al_2O_3 , ПС- γ - Al_2O_3 , ПП- γ - Al_2O_3 определен приведенный параметр кислотности $\Delta D = |D_{\text{термопласт}} - D_{\text{алюминий}}|$, который является мерой кислотно-основного взаимодействия.

Методом квантовой химии V3LYP-GD3/6-31G(d,p) найдены энергии адгезионного взаимодействия ($\Delta E_{\text{адг}} = E_{\text{термопласт}} + E_{\text{алюминий}} - E_{\text{(термопласт+алюминий)}}$, кДж/моль) в системах термопласт-алюминий, согласующиеся с ΔD , которые позволили расположить их по прочности адгезионного взаимодействия в следующий ряд: ПЭТФ- γ - Al_2O_3 ($\Delta E_{\text{адг}} = 270.0$) > ПММА- γ - Al_2O_3 ($\Delta E_{\text{адг}} = 200.0$) > ПС- γ - Al_2O_3 ($\Delta E_{\text{адг}} = 170.0$) > ПП- γ - Al_2O_3 ($\Delta E_{\text{адг}} = 64.9$). Значения $\Delta E_{\text{адг}}$, найденные методом V3LYP-GD3/6-31G(d,p), хорошо согласуются со значениями ΔD исследуемых систем термопласт-алюминий, полученных по методу Э. Бергер.

Все расчеты были проведены на оборудовании Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСЦ РАН), г. Москва. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-13-00461, <https://rscf.ru/project/22-13-00461/>.

© Балдинов А.А. и др., 2024

ДЕКОНВОЛЮЦИЯ ММР ПОЛИИЗОПРЕНА

А.И. Ершова

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Провели деконволюцию ММР полиизопрена, синтезированного в присутствии полицентрового гадолиниевого катализатора [1], с целью определения числа типов активных центров полимеризации (АЦ), массовых долей продуцируемого полимера Y^j и парциальных среднечисленных масс \overline{M}_n^j . При деконволюции [2-4] экспериментальных ММР $W(M) \equiv \frac{dwt}{d \log M}(\log M)$ для каждого ММР, полученного при определенном времени полимеризации, минимизировали функционал

$$F(Y^j, \overline{M}_n^j) = \sum_i \left[W(M_i) - \ln 10 \sum_{j=1}^N Y^j \cdot \left(\frac{M_i}{\overline{M}_n^j} \right)^2 \cdot \exp \left(- \frac{M_i}{\overline{M}_n^j} \right) \right]^2$$

Установили, что для корректной деконволюции необходимо и достаточно 4 типа АЦ. Типичный пример деконволюции приведен на рис. 1.

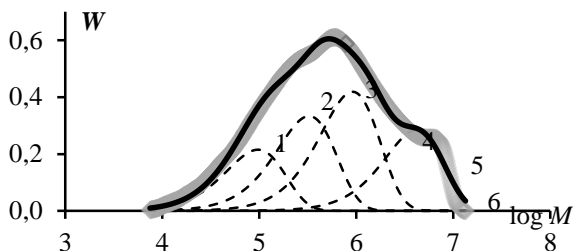


Рис. 1. Деконволюция при $N=4$: 1-4 – парциальные распределения Флори, 5 – экспериментальное ММР, 6 – суперпозиционное ММР ПИ при 60 мин.

Для 4-х типов АЦ определили Y^j и \overline{M}_n^j в различные моменты полимеризации. Выяснили, что \overline{M}_n^j практически одинаковы, поэтому сделали вывод, что в системе осуществляется передача цепи только на мономер.

Список использованных источников

1. Д.В. Стяжкин, Н.В. Плотникова, В.М. Янборисов, Е.М. Захарова, В.З. Мингалеев, С.В. Колесов, В.П. Захаров Кинетическое обоснование низкой активности катализаторов на основе изопропанольных сольватов хлорида гадолиния в полимеризации изопрена // Кинетика и катализ. 2022. Т. 63. № 5. С. 552-558.

2. Янборисов В.М., Стяжкин Д.В., Мингалеев В.З., Захаров В.П. Моделирование полимеризации бутадиена под действием полицентрового титанового катализатора на основе инверсного алгоритма метода Монте-Карло // Высокомолекулярные соединения. Серия Б. 2023. Т. 65. № 2. С. 151-160.

3. Янборисов В.М. Янборисов Э.В. Спивак С.И. Формирование молекулярно-массового распределения при полимеризация диенов в присутствии полицентровых каталитических систем // Уфа: Уфимск. гос. академия экономики и сервиса, 2012. – 116с.

4. Chen K., Mehdiabadi S., B. Liu, J.B.P. Soares Estimation of Apparent Kinetic Constants of Individual Site Types for the Polymerization of Ethylene and α -olefins with Ziegler–Natta Catalysts // Macromol. React. Eng. 2016. V. 10. № 6. P. 551-566.

© Ершова А.И., 2024

УДК 541.64

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ЦЕФАЗОЛИНА НА ВЯЗКОСТЬ ПЕКТИНА

А.А. Минагина, Р.Ю. Лаздин

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

В последнее время активно исследуется применение полисахаридов, таких как пектин, в различных отраслях промышленности, включая пищевую, косметическую, фармацевтическую и медицинскую. Пектин, как растительный полисахарид, обладает различными полезными свойствами, такими как биосовместимость, биodeградируемость, противовоспалительные и антимикробные свойства. В связи с этим, пектин может использоваться в создании различного рода лекарственных форм, например, гелей или пленок с биологически активными соединениями, такими как антибиотики или обезболивающими препаратами. Однако при этом необходимо учитывать возможные взаимодействия пектина с введенными лекарственными веществами, которые могут влиять, например, на реологические свойства лекарственных форм. Таким образом, целью данного исследования является изучение влияния лекарственных веществ на вязкость растворов пектина.

В данной работе в качестве объектов исследования был выбран пектин цитрусового происхождения производства SIGMA-ALDRICH и антибиотик аминогликозидного ряда – натриевая соль цефазолина производства «Биосинтез». Растворы пектина получали путем растворения в бидистиллированной воде.

В ходе исследований было показано, что введение цефазолина в раствор пектина приводит к целому ряду изменений, так же как это наблюдалось ранее при введении другого антибиотика – амикацина. Также, имеет место

повышение вязкости вследствие введения лекарственного вещества, наблюдается рост упругой составляющей вязкости и имеет место увеличение предела текучести. При этом, чем выше концентрация пектина в растворе, тем сильнее наблюдаемый эффект.

Таким образом, можно утверждать, что цефазолин, так же, как и амикацин, выполняет роль модификатора полимерной матрицы. Однако, можно отметить, что влияние цефазолина на реологические свойства растворов пектина существенно меньше, чем в случае использования амикацина. По всей вероятности, это связано с тем, что цефазолин представляет собой натриевую соль одноосновной цефазолиновой кислоты, а амикацин – многозарядный катион.

© Минагина А.А. и др., 2024

УДК 541.64:547.567

ИЗУЧЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ГЕНЕРИРОВАНИЯ И ГИБЕЛИ РАДИКАЛОВ ПРИ ОКИСЛЕНИИ СООЛИГОМЕРА П-БЕНЗОХИНОНА С 4-ВИНИЛПИРИДИНОМ

М.К. Мирмехтиева, Г.С. Гусейнова, Б.А. Мамедов, М.Р. Рагимова, М.М. Ибрагимова

Институт полимерных материалов Министерства науки и образования Азерб. Республики, Сумгайыт, Азербайджан

Путем взаимодействия п-бензохинона (п-БХ) и 4-винилпиридина (4-ВП) в среде этанола в присутствии триэтиламина (ТЭА) при $303\div 323^\circ\text{K}$ были синтезированы новые сополимеры. Продукты сополимеризации п-БХ и 4-ВП состоят из гидрохинонных и винилпиридиновых звеньев с молекулярной массой $M_w = 1800$ и $M_n = 1400$.

Поскольку полученные сополимеры содержат гидроксильные группы, то представляло интерес изучение продуктов и кинетических закономерностей окисления этих сополимеров (СООГХВП). Выявлено, что окисление этих сополимеров – сложный, многостадийный процесс и протекает с участием промежуточных радикалов.

Кинетические закономерности генерирования радикальных центров при окислении СООГХВП были изучены методом ЭПР. Для снятия ЭПР-спектров промежуточных продуктов окисления СООГХВП, окисление было осуществлено непосредственно в резонаторе спектрометра ЭПР. Обнаружено, что сразу после добавления раствора КОН к раствору СООГХВП фиксируются ЭПР-сигналы. Выявлено, что концентрации радикальных центров окисления СООГХВП концентрация радикальных центров очень быстро достигает максимального значения и потом происходит резкое ее снижение. С ростом концентрации анионов гидрохинонных звеньев увеличиваются значения концентрации радикальных

центров. При этом также растет скорость гибели радикальных центров. Например, при начальных концентрациях гидрохинонных звеньев, равных 0.02, 0.03 и 0.08 моль/л, максимальные значения концентрации радикальных центров составляет $1.1 \cdot 10^{-4}$, $1.5 \cdot 10^{-4}$ и $2 \cdot 10^{-4}$ моль/л, а W_0 гибели радикалов равняется $3.4 \cdot 10^{-6}$, $6.4 \cdot 10^{-6}$ и $11 \cdot 10^{-6}$ моль/(л·с). По уравнению $W_0 = k \cdot [R^\cdot]_0^2$ определяли значения начальной скорости гибели радикалов: $W_0 = (3.44 \div 34.8) \cdot 10^{-6}$ моль/(л·с). Как значение W_0 , так и величины констант скорости (k) гибели радикалов являются заметно высокими: $k = (284 \div 455) \cdot 10^{-3}$ л/(моль·с). Выявлено, что стадия гибели радикалов при окислении обладает заметно низкой величиной энергии активации ($E = 20$ кДж/моль), что характерно для гибели феноксильных и семихинонных радикалов.

© Мирмехтиева М.К. и др., 2024

УДК 541.6

О ВЛИЯНИИ ПРИСУТСТВИЯ ЛЕКАРСТВЕННОГО ВЕЩЕСТВА ЭЛЕКТРОЛИТНОЙ ПРИРОДЫ НА АГРЕГАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В РАСТВОРАХ ПОЛИСАХАРИДОВ И ИХ СМЕСЕЙ

К.В. Набутова, М.В. Базунова, Г.С. Яхина

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

На сегодняшний день создание современных полимерных материалов биомедицинского назначения является важной задачей. Причиной ограниченного использования полимеров в медицине заключается в том, что к материалам, вводимым в организм, предъявляются высокие требования, обусловленные тем, что они в растворенном виде поступают в кровь, лимфу и ткани [1].

Поэтому для материалов биомедицинского назначения перспективным является использование аминополисахарида хитозана и его производных, например, натриевой соли N-сукцинила хитозана (СХТЗ), обладающих комплексом уникальных свойств.

Смешение друг с другом растворов двух полимеров приводит к усилению агрегационных процессов. Таким образом, введение в растворы полимеров высокомолекулярных модификаторов позволяет регулировать процесс структурообразования и варьировать свойства получаемых материалов.

В данной работе в качестве высокомолекулярного модификатора раствора СХТЗ выбрана натрийкарбоксиметилцеллюлоза (КМЦ). Целесообразность использования КМЦ обусловлена тем, что это доступный полимер, имеющий полиэлектролитную природу и применяющийся в биомедицине.

Использование полимерной матрицы при применении лекарственных веществ (ЛВ) решает огромное количество проблем. Одно из главных

достоинств полимерных лекарственных форм – возможность пролонгирования действия лекарственных препаратов.

В связи с вышесказанным, целью данной работы явилось изучение влияния содержания (ЛВ) (цефатоксима в виде натриевой соли) на структурообразование и размер надмолекулярных образований в растворах СХТЗ, КМЦ и их смесей и на сорбционные свойства полученных на основе растворов ранозаживляющих пленок.

Таблица 1. Размер агрегатов г, нм, в растворах СХТЗ (0,5%), КМЦ (0,5%) и их смесей в присутствии ЛВ

№ пп	Вид полимерной матрицы	Содержание ЛВ в формовочном растворе, моль/л				
		-	0,025	0,05	0,075	0,1
1	СХТЗ	165	110	83	69	234
2	КМЦ	1703	1086	548	270	308
3	СХТЗ-КМЦ	853	234	195	110	220

Как следует из данных, представленных в таблице 1, зависимость размеров агрегатов от содержания ЛВ в разбавленных растворах полисахаридов и их смесей имеет экстермальный вид: до концентрации ЛВ 0,05-0,075 моль/л он понижается, что объясняется сжатием макромолекулярных клубков из-за увеличения ионной силы раствора; при более высоких концентрациях ЛВ эффект подавления полиэлектролитного набухания не проявляется.

По характеру зависимости вязкости более концентрированных растворов СХТЗ, КМЦ и их смесей от содержания ЛВ (рис. 1) видно, что во первых, при смешении СХТЗ с КМЦ меняется степень структурированности раствора, а во-вторых степень структурированности раствора зависит от содержания ЛВ. Так, увеличение ионной силы раствора за счет введения ЛВ качества растворителя приводит к изменению конформации макромолекул и изменению степени агрегации макромолекул полисахаридов в растворе. Первое приводит к снижению вязкости, а второе - к ее повышению. В результате выявлено, что в разбавленных растворах размер надмолекулярных образований уменьшается при увеличении ионной силы, а в более концентрированных – больше.

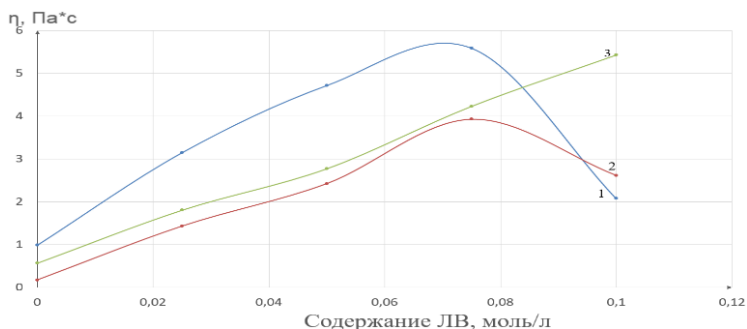


Рис. 1. Зависимость вязкости растворов КМЦ концентрацией 0,5 % (1), СХТЗ концентрацией 1 % (2) и их смесей (3) от содержания ЛВ

Различия в степенях структурированности растворов полисахаридов и их смесей в отсутствии и в присутствии ЛВ должны сохраняться и при переходе к конденсированным системам (пленкам). Например, изменения, происходящие в структуре полимера, могут отражаться на процессе сорбции паров воды.

Список использованных источников

1. Bazunova M.V., Lazdin R.Yu., Elinson M.R., Sharafutdinova L.A., Mustakimov R.A., Kulish E.I. On the possibility of obtaining the elastic and biocompatible film materials based on chitosan and N-Succinyl Chitosan. *Chimica Techno Acta*. 2022. Т. 9. № 1. С. 20229108.

© Набутова К.В. и др., 2024

УДК 678.632

КОГЕЗИОННАЯ ПРОЧНОСТЬ ПОЛИМЕРОВ

А.И. Нигматуллина, И.В. Тришкина, Е.О. Пуганова

ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», г. Казань, Россия

По мере совершенствования новых полимерных композиционных составов важной и актуальной задачей является прогнозирование механических свойств получаемого композиционного материала [1, 2]. Эта становится возможным при знании энергии когезии исследуемых полимеров, что позволяет существенно уменьшить количество экспериментов и провести целенаправленный подбор полимеров и расширить возможность их применения. В связи с этим возникает необходимость ее оценки. Зная химическое строение полимера можно рассчитать величину когезии данного полимера. Энергия когезии полимера равна сумме энергии когезии всех атомных групп, входящих в состав молекулярной цепи полимера, умноженных на их количество:

$$W_k = \sum W_i \cdot n_i, \quad (1)$$

где W_k – энергия когезии полимера, кДж/моль;
 W_i – энергия когезии атомных групп, кДж/моль [3];
 n_i – количество.

Как видно из приведенной формулы (1), энергия когезии полимера зависит от энергии когезии и количества атомных групп, входящих в состав цепи полимера. По данным авторов [3], энергия когезии различных атомных групп в полимерах зависит от их полярности. В качестве примера рассмотрим расчет энергии когезии хлоропренового каучука, молекулы которого имеют в цепи две группы $-\text{CH}_2-$ с молекулярной когезией, равной по 2,8 кДж/моль каждая, одну $-\text{Cl}$ группу с молекулярной когезией 11,7 кДж/моль и одну группу $-\text{CH}=\text{C}$ с молекулярной когезией 3,8 кДж/моль. Энергия когезии хлоропренового каучука составляет:

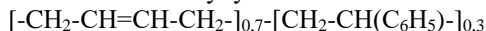
$$W_k = 2,8 \cdot 2 + 11,7 + 3,8 = 21,1 \text{ кДж/моль.}$$

При смешении полимеров образуются несколько типов звеньев цепи. Энергия когезии смеси полимеров определяется по формуле:

$$W_{\text{см}} = w_{1к} \cdot c_1 + w_{2к} \cdot c_2 \quad (2)$$

где $W_{\text{см}}$ – энергия когезии смеси полимеров, кДж/моль;
 $w_{1к}, w_{2к}$ – энергия когезии первого и второго полимера, кДж/моль;
 c_1, c_2 – объемные доли первого и второго полимера.

В качестве примера приводим расчет энергии бутадиен-стирольного каучука СКС-30 при соотношении каучуков 70:30:



Бутадиеновый каучук содержит две группы $-\text{CH}_2-$ с молекулярной когезией 2,8 кДж/моль и одну группу $-\text{CH}=\text{CH}-$ с молекулярной когезией 7,13 кДж/моль. Звено цепи стирольного каучука состоит из одной группы $-\text{CH}_2-$ и группы $-\text{CH}(\text{C}_6\text{H}_5)-$ с молекулярной когезией 18 кДж/моль. Энергия когезии СКС-30 составляет:

$$W_{\text{см}} = (2,8 \cdot 2 + 7,13 \cdot 1) \cdot 0,7 + (2,8 \cdot 1 + 18 \cdot 1) \cdot 0,3 = 15,2 \text{ кДж/моль}$$

В таблице приведены расчетные значения энергии когезии некоторых полимеров и сополимеров.

Таблица – Когезионная прочность некоторых полимеров и сополимеров

Полимер	Энергия когезии, W_k , кДж/моль
Полиэтилен	5,6
Полиизобутилен	10,8
Изопреновый каучук	15,6
Поливинилацетат	17,5
Полиметилакрилат	17,5
Полибутилметакрилат	29,2
Полиакриламид	40

Бутадиен-стирольный каучук, СКС-30	15,2
Полиацетилен	7,1
Поливиниламин	17,4-19,1
Полиамид-6	32
Полибутилен (Полибутен-1)	14,3
Хлоропреновый каучук	21,1
Сополимер этилена и винилацетата (Сэвилен, массовая доля винилацетата 10% (СЭВА – 10))	6,8
Сэвилен (СЭВА –22)	8,2
Полиуретан СКУ-8А	58,7-63,7
Метилцеллюлоза	49-59
Ацетилцеллюлоза	59-62
Полиэтилен оксид	9,8-12,3
Полиметиленфторид	3,2
Полисульфид	50,5-55
Поликарбонат	69,3-71,8

Список использованных источников

1. Тагер А.А. Физикохимия полимеров/ Под ред. А.А. Аскадского – М.: Научный мир, 2007 – 576 с.
2. Гуль В.Е., Кулезнев В.Н. Структура и механические свойства полимеров – М.: Лабиринт, 1994 – С. 332.
3. Энциклопедия полимеров. Т.1. Под ред. В.А. Кабанова – М.: Советская энциклопедия, 1972, с. 1046.

© Нигматуллина А.И. и др., 2024

УДК 544.18+536.912

ИССЛЕДОВАНИЕ АДГЕЗИОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В СИСТЕМЕ ТЕРМОПЛАСТ-АЛЮМИНИЙ: МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА

**А.В. Полищук, И.А. Суворова, В.И. Анисимова, А.А. Балдинов,
И.С. Родионов, Н.В. Улитин, Д.А. Шиян, К.А. Терещенко,
И.А. Старостина, О.В. Стоянов, А.О. Софьин**

Казанский национальный исследовательский технологический университет,
г. Казань, Россия

Коррозия – процесс самопроизвольного разрушения металлического объекта в результате его химического взаимодействия с окружающей средой. Для решения этой проблемы применяются покрытия из термопластов, которые обладают высокой коррозионной стойкостью. Одной из

определяющих характеристик при выборе наносимого термопласта является прочность адгезионного взаимодействия на границе раздела фаз системы термопласт-алюминий, зависящая от наличия и структуры поверхностных функциональных групп.

С использованием молекулярной динамики оптимизировали структуры термопластов полиэтилентерефталата (ПЭТФ), полиметилметакрилата (ПММА), полистирола (ПС), полипропилена (ПП) в виде полимерных цепей в силовом поле OPLS-AA. Поскольку поверхность алюминия легко окисляется, в качестве модели поверхности алюминия рассматривали оксид алюминия Al_2O_3 . Поверхность Al_2O_3 моделировали с использованием силового поля CLAYFF. В результате молекулярно-динамического моделирования найдены энергии адгезионного взаимодействия ($\Delta E_{адг} = E_{термопласт} + E_{алюминий} - E_{(термопласт+алюминий)}$, Дж/м²) в системах термопласт-алюминий, которые позволили расположить их по прочности адгезионного взаимодействия в следующий ряд:

ПЭТФ- γ - Al_2O_3 ($\Delta E_{адг} = 36.25$) > ПММА- γ - Al_2O_3 ($\Delta E_{адг} = 21.04$) > ПП- γ - Al_2O_3 ($\Delta E_{адг} = 6.22$).

Анализ полученных результатов показал, что наличие функциональных групп в структуре термопластов оказывает сильное влияние на адгезионное взаимодействие в системах термопласт- γ - Al_2O_3 .

Все расчеты были проведены на оборудовании Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МЦЦ РАН), г. Москва.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-13-00461, <https://rscf.ru/project/22-13-00461/>.

© Полищук А.В. и др., 2024

УДК 544:[547.917+ 544.275.5]

ВИСКОЗИМЕТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИСТЕМЫ ХИТОЗАН– ГЛЮКОМАННАН

Д.В. Приданкина, О.Н. Малинкина, А.Б. Шиповская

ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского», г. Саратов, Россия

Среди многообразия гидрогелей – «мягких» покровных материалов для косметологии и регенеративной медицины особое внимание заслуживают гидрогели на основе биосовместимых полимеров, в частности полисахаридов, а также их смесей [1, 2]. Использование полисахаридов разной природы – катионогенного аминополисахарид хитозана и нейтрального глюкоманнана позволяет сочетать преимущества в одном материале [3]. Так, полученные нами глюкоманнан-хитозансодержащие глицеро-гидрогели обладают муко- и дермоадгезией и

проявляют выраженные антибактериальные и ранозаживляющие свойства [4–6].

Цель работы – исследование гидродинамических свойств смесевых систем хитозан – глюкоманнан.

Использовали глюкоманнан со средневязкостной молекулярной массой 1400 кДа (ГМ, ООО «Успех», РФ); гидрохлорид хитозана со средневязкостной молекулярной массой 38 кДа (ГХ·ХТЗ, ЗАО «Биопрогресс», РФ); ледяную уксусную кислоту (CH_3COOH , ЗАО «Химреактив», РФ); ацетат натрия ч.д.а. ($\text{CH}_3\text{COONa}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$, ЗАО «База №1 Химреактивов», РФ); 96% этиловый спирт (ЗАО «РФК», РФ); дистиллированную воду.

Исходные водные растворы ГМ с концентрацией полимера $C_{\text{ГМ}} = 0.0375$ г/дл получали добавлением воды при интенсивном перемешивании к навеске полимера, равномерно распределенной в небольшом количестве этилового спирта, с последующим нагревом СВЧ-излучением при мощности 800 Вт в течение 30–45 с до $80\pm 5^\circ\text{C}$. Исходные водные растворы ГХ·ХТЗ с $C_{\text{ГХ·ХТЗ}} = 0.5$ г/дл получали добавлением воды к навеске полимера при интенсивном перемешивании с последующим выдерживанием в течение 1 сут. Для получения Na-ацетатных буферных растворов полисахаридов навеску полимера заливали расчетным количеством буфера (0.33 М CH_3COOH + 0.2 М CH_3COONa , $\text{pH}=4.4$) и перемешивали на магнитной мешалке. Полученные растворы полисахаридов фильтровали через стеклянные фильтры Шотта 160. Исследуемые системы получали смешением исходных водных или Na-ацетатных буферных растворов ГХ·ХТЗ и ГМ во всем диапазоне массовых соотношений.

Гидродинамические свойства смесевых систем ГХ·ХТЗ–ГМ определяли методом капиллярной вискозиметрии на капиллярном вискозиметре Уббелоде с диаметром капилляра 0.54 мм при $25\pm 0.3^\circ\text{C}$. В случае использования в качестве растворяющей смеси Na-ацетатного буфера предельное число вязкости ($[\eta]$, дл/г) находили экстраполяцией прямолинейной концентрационной зависимости $\eta_{\text{уд}}/C_{\text{П}} = f(C_{\text{П}})$ к условию $C_{\text{П}} \rightarrow 0$ согласно уравнению Хаггинса. В случае водных растворов $[\eta]$ определяли из построения $C_{\text{П}}/\eta_{\text{уд}} = f(\sqrt{C_{\text{П}}})$ согласно уравнению Фуосса.

Показано, что предельное число вязкости во всем диапазоне исследуемых смесевых систем меньше аддитивного значения, что позволяет предположить сильные межмолекулярные взаимодействия ГХ·ХТЗ–ГМ (табл. 1).

Таблица 1. Влияние состава смеси ГХ·ХТЗ–ГМ на предельное число вязкости

Состав		$[\eta]$, дл/г			
Соотношение растворов ГХ·ХТЗ:ГМ	$C_{\text{ГХ·ХТЗ}}/C_{\text{ГМ}}$	H_2O		Na-ацетатный буфер	
		Аддитивн.	Эксп.	Аддитивн.	Эксп.

0:10	–	13.70	13.70	8.87	8.87
1:9	2.22	13.06	6.15	8.04	5.52
3:7	8.57	11.79	6.73*	6.37	1.99
1:1	20.00	10.51	4.50*	4.71	1.14
7:3	46.67	9.24	3.38*	3.05	0.72
9:1	180.00	7.96	2.98*	1.38	0.74
10:0	–	7.33	7.33*	0.55	0.55

* определено в координатах Фуосса

С повышением содержания ГХ·ХТЗ в водных смесевых системах обнаружено наибольшее отклонение от аддитивности при $C_{ГХ·ХТЗ}/C_{ГМ} > 20$, что способствует оптимизации состава наших глицерогидрогелей ($C_{ГХ·ХТЗ}/C_{ГМ} < 20$).

Список использованных источников

1. Zhou N. et al. Konjac glucomannan: A review of structure, physicochemical properties, and wound dressing applications //J. Appl. Polym. Sci. 2022. V. 139. P. 51780.

2. Thirupathi K. et al. Update on chitosan-based hydrogels: preparation, characterization, and its antimicrobial and antibiofilm applications //Gels. 2022. V. 9. P. 35.

3. Jiang Y. et al. Controlled release of silver ions from AgNPs using a hydrogel based on konjac glucomannan and chitosan for infected wounds //Int. J. Biol. Macromol. 2020. V. 149. P. 148.

4. Ушакова О.С., Малинкина О.Н., Шиповская А.Б., Калиничева М.А., Приданкина Д.В. Жидкий гидрогелевый пластырь и способы его получения. Патент №2799938 РФ от 14.07.2023. А61К 31/722 (2006.01). 2023. – Бюл. № 20.

5. Малинкина О.Н., Приданкина Д.В., Астанкова А.С., Ушакова О.С., Шиповская А.Б. Формирование и свойства Si-глюкоманнан-хитозансодержащих глицерогидрогелей // Сб. матер. XVI Всерос. конф. «Современные перспективы в исследовании хитина и хитозана». Владивосток: ДФУ. 2023. С. 144.

6. Приданкина Д.В., Астанкова А.С., Малинкина О.Н. Антибактериальные и ранозаживляющие свойства кремний-полисахаридсодержащих гидрогелей //Сб. мат. Всерос. конф. «Фундаментальная и прикладная медицина “Biomeeting”», Саратов: Амирит. 2023. С. 89.

© Приданкина Д.В. и др., 2024

РОЛЬ САЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ ПРИ ДЕЙСТВИИ МЕДИ, ЦИНКА И КАДМИЯ НА РАСТЕНИЯ ПШЕНИЦЫ

С.Р. Рахматуллина

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

С развитием промышленности изучение последствий загрязнения окружающей среды тяжелыми металлами актуально и всегда изучаемо, поскольку они природные токсиканты и стресс-факторы. Медь, цинк и кадмий являются необходимыми элементами питания, но в повышенных концентрациях они способствуют развитию окислительного стресса, что приводит к различным повреждениям. Цинк в допустимой концентрации микроэлемент, являющийся кофактором ферментов, участвующих в метаболизме азота, фотосинтезе, синтезе нуклеиновых кислот, белков. Кадмий приводит к изменениям транспирации и водного режима. Тяжелые металлы могут оказывать токсическое действие на разнообразные физиологические процессы, что может приводить к нарушению роста и морфогенеза растений. С целью снижения токсического действия тяжелых металлов на растения рассматривается Салициловая кислота (СК). СК оказывает регуляторное действие на морфофизиологические и биохимические процессы в растениях и выступает в качестве стимулятора роста растений и модулятора про- и антиоксидантной системы. Данные о протекторной роли салициловой кислоты при действии на растения тяжелых металлов имеются.

В ходе проделанной работы выявлено снижение массы побегов и корней растений пшеницы - на среде с медью на 16% и 17%, на среде с цинком на 14% и 13%, на среде с кадмием на 11% и 10%. Салициловая кислота увеличивала накопление массы как надземной, так и подземной частей растений пшеницы: на меди на 15% и 14%, на цинке на 11% и 7%, на кадмии на 15% и 2%. Действие тяжелых металлов приводило к снижению длины надземной и подземной частей растений пшеницы - на среде с медью на 9% и 7%, на среде с цинком на 6% и 2%, на среде с кадмием на 14% и 17%. Действие салициловой кислоты стимулировало рост в длину: у побегов на 2% и корней на 7% на меди, у побегов на 2% и корней на 6% на цинке, у побегов на 2% и корней на 3% на кадмии.

Таким образом, медь, цинк и кадмий вызывали снижение ростовых показателей, на фоне развития окислительного стресса. СК оказывала протекторное действие как в побегах, так и в корнях растений пшеницы.

© Рахматуллина С.Р., 2024 г.

УДК 544.18+539.612

ПАРЦИАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ ОРБИТАЛЕЙ В СИСТЕМАХ ТЕРМОПЛАСТ-АЛЮМИНИЙ

И.С. Родионов, В.И. Анисимова, А.А. Балдинов, Н.В. Улитин

И.А. Суворова, А.В. Полищук, Д.А. Шиян, К.А. Терещенко,

И.А. Старостина, О.В. Стоянов, А.О. Софьин

Казанский национальный исследовательский технологический университет,
г. Казань, Россия

Покрытия из термопластов на алюминий используются для защиты металлического оборудования от коррозии в химической и нефтехимической промышленности. Адгезионное взаимодействие между термопластом и алюминием определяется наличием функциональных групп в структуре термопласта. Поверхность алюминия легко окисляется, поэтому в качестве модели поверхности алюминия рассматривали γ -оксид алюминия (γ - Al_2O_3).

Для оценки реакционной способности различных функциональных групп в термопластах по отношению к γ - Al_2O_3 выбраны следующие термопласты: полиэтилентерефталат (ПЭТФ), полиметилметакрилат (ПММА), полистирол (ПС). Также был выбран термопласт, не содержащий в своей структуре функциональных групп полипропилен (ПП).

Методом квантовой химии B3LYP-GD3/6-31G(d,p) получены оптимизированные структуры систем ПЭТФ- γ - Al_2O_3 , ПММА- γ - Al_2O_3 , ПС- γ - Al_2O_3 , ПП- γ - Al_2O_3 .

Для анализа распределения электронов по молекулярным орбиталям при взаимодействии термопластов с γ - Al_2O_3 использовали парциальную плотность состояний (partial density of states, PDOS). Смещение пиков PDOS для ПЭТФ (1.23-3.25 эВ), ПММА (1.01-2.76 эВ) и ПС (0.86-2.20 эВ) указывает на адгезионное взаимодействие функциональных групп с атомами поверхности γ - Al_2O_3 . Смещение пиков PDOS в ПП (0.22-0.55 эВ) незначительное.

Значения сдвигов пиков в область меньших энергий в PDOS позволяет расположить адгезивы по прочности адгезионного взаимодействия с γ - Al_2O_3 в следующий ряд:

ПЭТФ- γ - Al_2O_3 > ПММА- γ - Al_2O_3 > ПС- γ - Al_2O_3 > ПП- γ - Al_2O_3 .

Все расчеты были проведены на оборудовании Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МЦЦ РАН), г. Москва.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-13-00461, <https://rscf.ru/project/22-13-00461/>.

© Родионов И.С. и др., 2024

УДК 543.544

ВЛИЯНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ СВЕРХСШИТОГО ПОЛИСТИРОЛА НА УДЕРЖИВАНИЕ ПРОИЗВОДНЫХ ХИНОЛИНА В ОФ ВЭЖХ

С.А. Рыжкин, С.В. Курбатова

Самарский национальный исследовательский университет имени академика
С.П. Королева, г. Самара, Россия

Технологический прогресс в области хроматографии неразрывно связан с поиском и созданием новых механически прочных сорбентов с заданными физико-химическими параметрами, поскольку природа сорбента определяет возможность разделения сложных смесей веществ, скорость и точность проведения анализа. В последние годы широкое распространение в сорбционных технологиях получили нанопористые полимерные сорбенты на основе сверхсшитого полистирола (ССПС), обладающие такими преимуществами перед традиционными сорбентами, как высокоразвитая поверхность и пористая структура, совместимость с органическими, водно-органическими и водными подвижными фазами, высокая механическая прочность и пр. Уникальные сорбционные характеристики ССПС обусловлены его ажурной молекулярно-дисперсной структурой, большой площадью поверхности и возможностью сорбции на его поверхности за счет дополнительных π - π , π - d и π - n взаимодействий между сорбатом и ароматическими фрагментами полимерного сорбента, что позволяет удерживать соединения практически любой структуры [1].

Целью настоящей работы явилось исследование особенностей сорбции производных хинолина на поверхности ССПС из водно-ацетонитрильных растворов.

Хроматографический анализ проводили на жидкостном хроматографе Милихром А02, оснащенный УФ-спектрометрическим детектором при длине волны 254 нм. В качестве сорбента использовали монодисперсный сверхсшитый полистирол со степенью сшивки 150%; размер частиц 3.2 мкм; размеры колонки 150×3 мм. Элюирование осуществляли в изократическом режиме в диапазоне температур 298 – 328К. В качестве подвижной фазы использовали смеси ацетонитрил – вода с объемным содержанием ацетонитрила 50, 60 и 80%. Объектами исследования были 22 впервые синтезированных производных хинолина с различными функциональными группами и заместителями в положениях 2,4 и 6 хинолинового ядра.

Из полученных экспериментальных данных следует, что в целом сорбция всех исследованных производных хинолина на поверхности ССПС оказывается весьма существенной и несопоставимо большей по сравнению с сорбцией на октадецилсиликагеле, что указывает на реализацию межмолекулярных взаимодействий с поверхностью ССПС, дополнительных

к дисперсионным. Структура ССПС, как известно, представляет собой трехмерную сетку, основным элементом которой является неплоский цикл, образованный сшивающими мостиками и короткими сегментами, ограниченными точками разветвления, поэтому вся внутренняя поверхность частиц ССПС доступна для молекул сорбатов, взаимодействующих с сорбентом за счет дисперсионных и π - π -связей, что в некоторых случаях может приводить к практически необратимой сорбции.

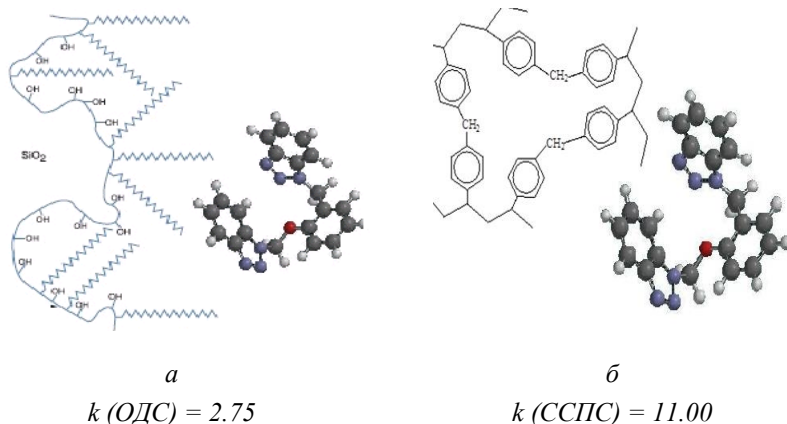


Рис. 1. Сопоставление значений фактора удерживания производных хинолина на октадецилсиликагеле (а) и сверхшитом полистироле (б)

Вероятно, именно в связи с указанными обстоятельствами значения фактора удерживания производных хинолина на сверхшитом полистироле оказываются в 4-5 раз большими по сравнению со значениями для октадецилсиликагеля практически для всех сорбатов, что указывает на значимость π - π -взаимодействий в исследованных системах [2]. Состав раствора, из которого осуществляется сорбция, несомненно, влияет на значения сорбционных характеристик. Тем не менее, при общем уменьшении значений фактора удерживания с ростом концентрации ацетонитрила в растворе сорбируемость производных хинолина на ССПС остается более значительной по сравнению с сорбцией на ОДС.

Список использованных источников

1. Davankov V.A., Tsyurupa M.P. // React. Polymer. 1990. Vol. 13. P. 27–42.
2. Рыжкин С.А., Курбатова С.В., Земцова М.Н. // Журн. физич. химии. 2022. Т. 96, № 10. С. 1506–1512.

© Рыжкин С.А. и др., 2024

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПЕКТИНОВЫХ ПОЛИСАХАРИДОВ И АРАБИНОГАЛАКТАНОВЫХ БЕЛКОВ ИЗ ДРЕВЕСНОЙ ЗЕЛЕНИ (*PINUS SYLVÉSTRIS*)

Е.Н. Макарова, Е.Г. Шахматов

Институт химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, г. Сыктывкар, Россия

Первичная стенка растительной клетки (PCW) - представляет собой универсальную, сложную и динамичную структуру, обладающую уникальными свойствами и функциями в жизни растения. PCW состоит из различных биополимеров: целлюлозы, гемицеллюлозы (или связующие гликаны), пектина и структурных белков, обеспечивающих ее целостность и регулирующих жизненные процессы в ней. Наиболее распространенная структурная модель клеточной стенки представляет собой целлюлозно-гемицеллюлозную сеть, встроенную в пектиновый матрикс. Способы организации вышеуказанных компонентов PCW друг с другом относительно ограничены и являются предметом постоянных исследований. Вопросы вокруг молекул матрицы клеточной стенки включают в себя то, какой диапазон потенциальных связей между доменами HG/RG-I и другим клеточными полимерами, такими как арабиногалактан-протеины, ксилоглюканы, ксиланы и целлюлоза.

Хвойные породы древесины имеют широкое применение в лесохимической промышленности. Древесная зелень хвойных – это огромная биомасса, которая является одним из крупнейших побочных продуктов деревоперерабатывающей промышленности, в связи с чем, изучение ее химического состава и строения может сыграть важную роль в правильном и рациональном использовании древесинных пород. Эта стратегия требует хорошего понимания химического состава древесной зелени и глубокого знания макромолекулярной структуры ее отдельных компонентов. Сосна обыкновенная (*Pinus sylvéstris*) — вечнозеленое хвойное дерево, широко распространённый вид рода Сосна семейства Сосновые (Pinaceae). В естественных условиях растёт в Европе и Азии.

Целью данной работы было извлечение водорастворимых арабиногалактанов и пектиновых полисахаридов из древесной зелени сосны обыкновенной *P. sylvéstris*, изучение их структурных особенностей и идентификация связей между ними. Полученные биополимеры были изучены с помощью фракционирования ионообменной хроматографией (АЕС), деградации кислотным гидролизом, а также методом АЕС, с предварительным омылением и ферментативным расщеплением экзо- и эндо-1,4- α -D-полигалактуроназой,

В данной работе представлено первое экспериментальное подтверждение наличия водоекстрагируемых арабиногалактановых белков (AGPs) (основной компонент) и пектиновых полисахаридов в древесной зелени *Pinus sylvéstris*,

которая считается неиспользуемым отходом. Потенциальные способы организации взаимодействия между этими полимерами были изучены. Настоящая работа описывает подробную структуру комплекса пектин-AGP с помощью спектроскопии 1D/2D ЯМР. По результатам анализа ЯМР водорастворимые полимеры *Pinus sylvestris* были идентифицированы как арабиногалактан (AG) типа II и имели β -(1 \rightarrow 3) – галактановый кор, к которому через O-6 присоединены боковые цепи из β -(1 \rightarrow 6) – связанных остатков галактозы. Мы обнаружили ряд боковых β -(1 \rightarrow 6) – связанных галактоолигосахаридов, разветвленных в положении O-6, и содержащих как кислотные остатки β -D-GlcpA и/или 1,4- β -D-GlcpA, так и нейтральные остатки T- β -Galp, T- α -L-Rhap и T- α -L-Fucp. По 3-му положению β -(1 \rightarrow 6)-галактан боковые цепи частично замещены остатками T-Araf, 1,3- и/или 1,5-linked α -L-Araf: α -L-Araf-(1 \rightarrow 3)- β -D-Galp(1 \rightarrow ..., α -L-Araf-(1 \rightarrow 3)- α -L-Araf-(1 \rightarrow 3)- β -D-Galp(1 \rightarrow ..., α -L-Araf-(1 \rightarrow 5)- α -L-Araf-(1 \rightarrow 3)- β -D-Galp(1 \rightarrow ... и/или α -L-Araf-(1 \rightarrow 5)- α -L-Araf-(1 \rightarrow 3)- α -L-Araf-(1 \rightarrow 3)- β -D-Galp(1 \rightarrow ...

Анализ ЯМР спектроскопии выявил уникальное гликозилирование AGP-подобных гликопротеинов *Pinus sylvestris*. Самым выдающимся было подтверждение присутствия 4-O-метил-фукозы, которая была описана ранее только в AGPs из хвойных растений. L-Fuc группы были локализованы на боковых ветвях и присоединены к 1,4-linked β -D-GlcpA в виде последовательности 4-O-Me- α -L-Fucp-(1 \rightarrow 4)- β -D-GlcpA-(1 \rightarrow ... Исключительная структура AGPs из хвойных растений существенно расширяет знания о структурных особенностях растительных полисахаридов и предполагает специализированную адаптацию и может дать новое представление об эволюции клеточной стенки растений.

В спектрах ROESY и HMBC были обнаружены сегменты RG-I и HG: α -GalpA^D-(1 \rightarrow 2) - α -Rhap-(1 \rightarrow 4)- α -GalpA^C-(1 \rightarrow 2)- α -Rhap-(1 \rightarrow 4)- α -GalpA^C-(1 \rightarrow и α -Rhap-(1 \rightarrow 4)- α -GalpA^G-(1 \rightarrow 2)- α -Rhap-(1 \rightarrow 4)- α -GalpA^E-(1 \rightarrow 4)- α -GalpA-(1 \rightarrow свидетельствующие о присутствии пектиновых полисахаридов.

Во фрагментах, полученных деградацией частичным кислотным гидролизом, а также методом АЕС, с предварительным ферментативным расщеплением экзо- и эндо-1,4- α -D-полигалактуроназой, основными полимерами являлись AGPs и RG-I. Можно заключить, что значительная доля AGPs прочно ассоциируется с RG-I, это говорит о том, что они непосредственно связаны между собой, что имеет важное значение для понимания структурно-функциональных взаимодействий этих молекул.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (госзадание № 122040600027-6), с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Химия» Института химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН.

© Макарова Е.Н. и др., 2024

**АНАЛИЗ ФАКТОРОВ, ВЛИЯЮЩИХ НА ТЕМПЕРАТУРУ
СТЕКЛОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ГОМОПОЛИМЕРОВ,
С ПРИВЛЕЧЕНИЕМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ****Г.Р. Шадрина, Н.В. Улитин, А.Д. Лифанов, К.А. Терещенко,
Д.А. Шиян, М.Г. Казанская, А.А. Балдинов, И.С. Родионов,
Е.С. Воробьев**Казанский национальный исследовательский технологический университет,
г. Казань, Россия

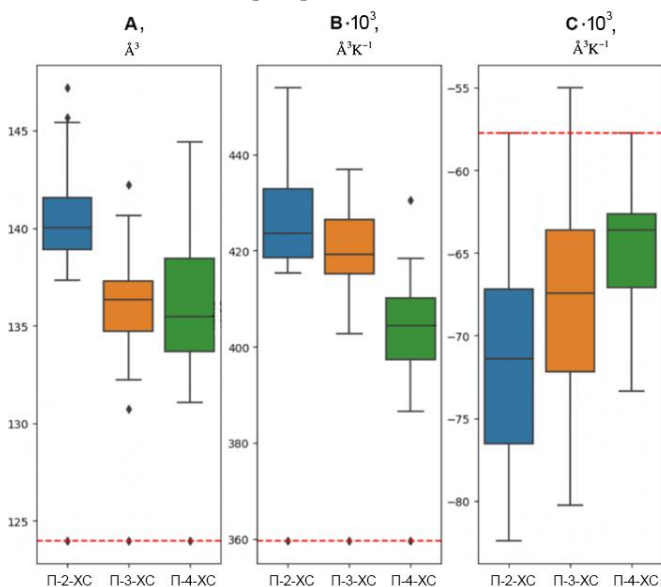
К факторам, влияющим на температуру стеклования полимеров (T_g), относятся гибкость основной цепи, межмолекулярные взаимодействия (сильные специфические [диполь-дипольные, квадрупольные и др.] и слабые [дисперсионные, ориентационные]) и плотность молекулярной упаковки, которая в значительной степени определяется стерическими факторами. В данной работе на примере T_g органических гомополимеров реализована модель, построенная на теоретической основе метода инкрементов [1] с применением метода случайного леса как метода машинного обучения [2]. Для описания структуры повторяющегося звена полимера использовали молекулярные отпечатки (Morgan fingerprints) [3-5], а прогнозируемыми параметрами являлись A – параметр, характеризующий собственный объем повторяющегося звена (по смыслу близок к ван-дер-ваальсовому объему), Å^3 , B – параметр, характеризующий межмолекулярные взаимодействия (включая и сильные специфические, и слабые), $\text{Å}^3/\text{К}$, и C – параметр, характеризующий плотность молекулярной упаковки, $\text{Å}^3/\text{К}$. На основании этих параметров T_g рассчитывали как $T_g = A/(B + C)$.

Возможности модели для анализа факторов, влияющих на T_g полимеров, продемонстрировали на примере изомерного ряда поли-2-хлорстирола (П-2-ХС), поли-3-хлорстирола (П-3-ХС), поли-4-хлорстирола (П-4-ХС) – см. рис. Несмотря на незначительные структурные различия, экспериментальные значения T_g для этих изомеров существенно отличаются и составляют 392, 363 и 388-401 К соответственно [6]. Следует отметить, что метод инкрементов [1] не учитывает структурных различий в подобного рода изомерах (расчетное значение T_g по методу инкрементов составляет 409 К для всех трех изомеров).

В нашем исследовании база данных состояла из 823 органических гомополимеров и при моделировании делилась на обучающие и тестовые выборки с помощью процедуры генерации случайных выборок. Изменение комбинаций гомополимеров, попавших в обучающую выборку, влияет на обучение модели, и, как следствие, на результаты, полученные при моделировании. В рамках данной работы для анализа прогностической способности модели нами было проведено 50 вычислительных

экспериментов, по результатам которых были получены 50 наборов прогнозируемых параметров А, В, С.

Распределение полученных значений параметров А, В, С представлено на рис. в виде диаграммы размаха («ящика с усами», англ. Box and Whisker Plot). Диаграмма размаха представляет собой ящик, верхняя граница которого соответствует верхнему квантилю (75% значений ниже данного уровня), нижняя граница – нижнему квантилю (25% значений выше данного уровня), горизонтальная линия – медиане, а усы, выходящие из ящика вверх и вниз, отражают полную дисперсию значений. В качестве итоговых значений, полученных моделью по результатам 50 вычислительных экспериментов, принимались значения медианы [7, 8].



Модель дала различные значения параметров А, В, С для рассматриваемых изомеров (см. рис.). Это позволило проанализировать вклады различных факторов в T_g поли-2-хлорстирола, поли-3-хлорстирола, поли-4-хлорстирола (рассчитанные значения T_g составили 397, 387 и 397 К соответственно). В ряду поли-2-хлорстирола, поли-3-хлорстирола, поли-4-хлорстирола параметр В, характеризующий межмолекулярные взаимодействия, уменьшается, а параметр С, характеризующий плотность молекулярной упаковки, увеличивается (см. рис.).

Предположительно параметры В и С могут быть связаны с факторами, которые они характеризуют, обратной зависимостью: то есть уменьшение параметра В говорит об увеличении межмолекулярных взаимодействий

(например, в самом простом варианте их можно количественно оценить с помощью дипольного момента), а увеличение параметра C – об уменьшении плотности молекулярной упаковки. В дальнейшем планируется проверить это предположение по результатам количественной оценки (методами квантовой химии и молекулярной динамики) факторов, связанных с параметрами B и C , и анализа корреляции между ними.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №22-13-00461, <https://rscf.ru/project/22-13-00461/>.

Список использованных источников

1. Askadskii, A.A. Computational materials science of polymers, Cambridge, 2003.

2. Svetnik, V. Random Forest: A Classification and Regression Tool for Compound Classification and QSAR Modeling. Journal of Chemical Information and Computer Sciences. – 2003. – V. 43(6). – P. 1947-1958.

3. Morgan H.L. The Generation of a Unique Machine Description for Chemical Structures-A Technique Developed at Chemical Abstracts Service. Journal of Chemical Documentation. – 1965. – V. 5(2). – P. 107-113.

4. Durant J.L. Reoptimization of MDL Keys for Use in Drug Discovery / J.L. Durant, B.A. Leland, D.R. Henry, J.G. Nourse // J. Chem. Inf. Comput. Sci. – 2002. – V. 42, Is. 6. – P. 1273-1280.

5. Todeschini, R.; Consonni, V. The Handbook of Molecular Descriptors. In The Series of Methods and Principles in Medicinal Chemistry. Eds. Mannhold, R.; Kubinyi, H., Timmerman, H. New York: Wiley-VCH, 2000.

6. Dunham, K.R., Faber, J.W.H., Vandenberghe, J., Fowler, W.F. Polystyrene modifications. II. Ring-substituted polystyrenes. Journal of Applied Polymer Science. – 1963. – V.7(3). – P. 897-908.

7. Kuenneth, C., Schertzer, W., Ramprasad, R. Copolymer informatics with multitask deep neural networks. Macromolecules. – 2021. – V. 54. Article 59575961.

8. Tropsha, A. Best Practices for QSAR Model Development, Validation, and Exploitation. Mol. Inf. – 2010. – V. 29 (6-7) – P. 476- 488.

© Шадрина Г.Р. и др., 2024

УДК: 544.773.432

ПОГЛОЩЕНИЕ И ВЫСВОБОЖДЕНИЕ СУЛЬФАТА И БИСГЛИЦИНАТА МАРГАНЦА АКРИЛОВЫМ ГИДРОГЕЛЕМ

А.И. Юткина, П.О. Кушев

Воронежский государственный университет, г. Воронеж, Россия

Использование суперабсорбентов (СА) для повышения эффективности методов орошения представляет интерес, поскольку они сочетают в себе способности поглощать большие объемы водных растворов удобрений,

биопрепаратов и микроэлементов в виде комплексных органических соединений.

Таким образом, целью данной работы было изучение процессов поглощения и высвобождения акриловым гидрогелем, синтезированным по методике, описанной в работе [1], таких соединений, как бисглицинат марганца и сульфат марганца, и сравнение полученных результатов.

Для изучения процессов поглощения и высвобождения соединений марганца гидрогелем пользовались методом ограниченного объема. Поглощение проводилось в динамических условиях (при перемешивании 600 оборотов/мин), высвобождение – в статических условиях (без перемешивания).

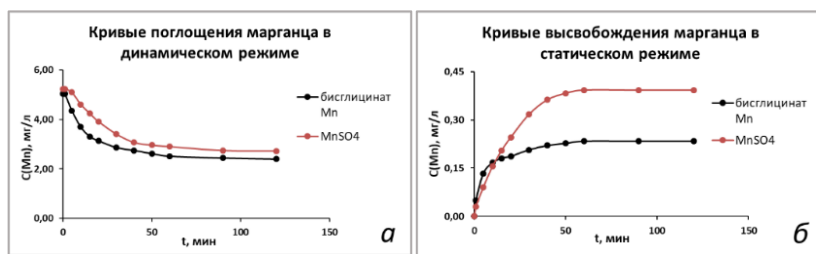


Рис.1. График зависимости количественного поглощения (а) и высвобождения (б) марганца гидрогелем от времени в динамических условиях.

Было установлено, что гидрогель поглотил 64,4% (3,25 мг Mn из 5,05 мг) для раствора бисглицината Mn и 60,1% (3,18 мг Mn из 5,23 мг) для раствора MnSO_4 (рис.1а); высвободил 7,1% (0,23 мг Mn из 3,25 мг) для раствора бисглицината Mn и 12,3% (0,39 мг Mn из 3,18 мг) для MnSO_4 (рис.1б).

Из полученных результатов видно, что в одинаковых условиях процесс поглощения для растворов бисглицината и сульфата марганца протекает идентично, а процесс высвобождения для сульфата марганца протекает интенсивнее.

Список использованных источников

1. Зенищева А.В., Семенов В.Н., Кузнецов В.А., Куцев П.О. Синтез и гидратационные свойства суперабсорбента «Твердая вода» // Текст: электронный. 2020. Vol. 22, № 1.

© Юткина А.И. и др., 2024

СЕКЦИЯ №3. ПЕРЕРАБОТКА ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ И ПОЛИМЕРНЫЕ КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ

УДК 541.64

ИЗУЧЕНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА С АМИКАЦИНОМ И ХИТОЗАНОМ

А.И. Казыргалин, М.Р. Якупов, Э.Р. Бакирова

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Разработка систем контролируемого высвобождения и доставки активных веществ на основе биоразлагаемых полимеров является одним из наиболее актуальных, перспективных и быстро растущих направлений химической технологии. Эффективность данной систем во многом определяется свойствами материалов, используемых в качестве матрицы. Одним из наиболее перспективных материалов для получения систем с контролируемой доставкой активных веществ является высокомолекулярный полилактид (ПЛ). К преимуществам ПЛ относятся биосовместимость, разложение без токсичных побочных продуктов и относительно недорогое производство. Однако материалы, изготовленные исключительно из ПЛ, имеют определенные ограничения, в том числе жесткость, невысокая скорость биодеструкции, что затрудняет их использование. Чтобы противодействовать этим проблемам, можно использовать смеси ПЛ с другими наполнителями, которые будут улучшать его характеристики. В этой связи интерес вызывает использование хитозана (ХТЗ). ХТЗ обладает такими качествами, как высокая прочность, биоразлагаемость, антимикробные свойства. В качестве лекарственного вещества был использован амикацин (АМК). АМК – это полусинтетический бактерицидный антибиотик широкого спектра действия, действует бактерицидно. Целью данной работы является изучение реологических свойств композиций на основе полилактида с амикацином и хитозаном.

Получение материалов на основе ПЛ-ХТЗ-АМК осуществляли на лабораторном пластографе с дальнейшим прессованием. Выбор параметров получения обусловлен ранее проведенными исследованиями [1]. Реологические исследования композитов ПЛ - ХТЗ - АМК проводились на лабораторном реометре Haake RheoWin Mars III в режиме осцилляции в диапазоне при частоте осцилляции от 0.1 до 100 Гц при температуре 190°C.

В ходе исследования было выявлено, что введение ХТЗ в композицию приводит к росту вязкости во всем диапазоне изученных частот осцилляции.

Список использованных источников

1.Бакирова Э.Р., Лаздин Р.Ю., Чернова В.В., Кулиш Е.И. Влияние условий переработки на некоторые характеристики полилактида // Бутлеровские сообщения. 2022. Т. 69. № 4. С. 59-64.

© Казыргалин А.И. и др., 2024

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИКАПРОЛАКТОНА С АМИКАЦИНОМ И ХИТОЗАНОМ**М.Р. Якупов, А.И. Казыргалин, Э.Р. Бакирова**

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Разработка новых методов лечения глубоких ожогов, язв и пролежней с использованием полимерных раневых покрытий с заданными свойствами одно из быстро развивающихся и востребованных направлений биомедицины. Первостепенная задача – подобрать материал, который будет обладать оптимальными характеристиками для лечения подобного рода ран. Перспективным вариантом решения данной проблемы является применение покрытий на основе биodeградируемых и биосовместимых синтетических полиэфиров, таких как поликапролактон (ПКЛ). Однако, ПКЛ очень гидрофобный, поэтому в композицию на основе ПКЛ можно добавлять гидрофильные природные полисахариды, такие как хитозан (ХТЗ). Уникальные свойства ХТЗ - биосовместимость с тканями организма, бактериостатичность, способность усиливать регенеративные процессы при заживлении ран, прекрасная хелатирующая способность, а также способность к пленкообразованию определяют возможность использования ХТЗ в качестве композиционных пленочных покрытий для защиты и лечения глубоких ран. В качестве модельного лекарственного средства был использован амикацин (АМК). АМК – полусинтетический аминогликозидный антибиотик широкого спектра действия, в основном используемый против инфекций, вызванных грамотрицательными бактериями. Целью данной работы является изучение реологических параметров композиций на основе поликапролактона с амикацином и хитозаном.

Пленочные материалы на основе ПКЛ-ХТЗ-АМК получали на лабораторном платографе, далее образцы помещались в автоматический гидравлический пресс [1]. Реологические исследования проводились на модульном динамическом реометре Haake RheoWin MarsIII в режиме осцилляции в диапазоне частот от 0.1 до 100 Гц при температуре 190°C. В процессе исследования оценивалось влияние содержания ХТЗ и АМК в пленочных образцах на основе ПКЛ. В результате проделанной работы можно сделать вывод о том, что введение ХТЗ в полимерную композицию сопровождается ростом вязкости.

Список использованных источников

1. Влияние условий переработки на некоторые характеристики поликапролактона / Э.Р. Бакирова, Р.Ю. Лаздин, Е.М. Гизбуллина, Е.И. Кулиш // Бутлеровские сообщения. – 2023. – Т. 74, № 4. – С. 72-76. – DOI 10.37952/ROI-jbc-01/23-74-4-72.

© Якупов М.Р. и др., 2024

ОБ ОПТИМИЗАЦИИ СПОСОБА ПОЛУЧЕНИЯ МАГНИТОПЛАСТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНА НИЗКОЙ ПЛОТНОСТИ И СПЛАВА Nd-Fe-B

Б.Ф. Алмаев, В.В. Калеева, М.В. Базунова

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Магнитопласты представляют собой термопластичный полимерный материал, содержащий в качестве наполнителя частицы магнитного порошка, например, быстрозакаленного сплава (БЗС) Nd-Fe-B. Традиционными способами совмещения компонентов композиции и формования магнитопластов являются литье под давлением и прессование. У магнитопластов, изготовленных литьем под давлением, магнитные параметры материала ниже, чем у изготовленных прессованием, но выше механическая прочность. Для изготовления литых магнитопластов требуется более (в 3-10 раз) более дорогая оснастка. Следовательно, исследование возможностей получения магнитопластов другими принятыми в производстве полимерных композиционных материалов методами, в том числе экструзией, является актуальным [1, 2].

Для обеспечения достаточно высокой механической прочности и хорошего состояния поверхности материала содержание связующего вещества должно составить не менее 24-26% объема [2]. Этим объясняются относительно невысокие значения индукции магнитопластов, так как неферромагнитные прослойки действуют аналогично порам в металлокерамических магнитах. Вследствие этого в качестве связующего перспективно использование полиэтилена низкой плотности (ПЭНП) с размерами частиц в исходном порошке от 60 до 220 нм. Малый размер частиц исходного пресс-порошка обеспечивает равномерное распределение компонентов в композите [3, 4].

Таким образом, проведена разработка способа получения таблетированных магнитопластов на основе БЗС Nd-Fe-B с ПЭНП в качестве связующего методом экструзии. Истечение смеси через экструдер не начинается до определенных значений градиента давлений в экструдере. При достижении давлением определенных величин, которые зависят от многих параметров, давление на смесь порошка и полимера становится больше силы трения экструдированной массы о стенки экструдера. Происходит истечение и формирование шнура. За счет относительно быстрого остывания при выходе из экструдера на воздух, полимерное связующее твердеет, в результате чего полученный образец сохраняет приданную форму и плотность.

Давление начала экструдирования смеси зависит от: 1) содержания связующего в массе, 2) типа и размеров частиц порошка-наполнителя, 3) типа и вязкости связующего при температуре экструдирования, 4) диаметра

формирующего канала экструдера. Давление начала истекания массы тем больше, чем меньше диаметр экструдера и больше его длина.

Для получения в результате экструзии образца высокой плотности и, соответственно, высоких магнитных параметров, необходимо чтобы при формировании прикладывались достаточно высокие давления, которые бы обеспечивали одновременность истекания смеси и достаточное компактирование и уплотнение массы. Но при очень малых диаметрах экструдера и высокой жесткости формуемых масс, при недостатках связки, давление, при котором начиналась бы экструзия материала, превышает стойкость материала прессформы. Следовательно, проведено определение оптимальных значений соотношения содержания связующего и параметров экструдирования. Прессмасса экструдировалась при температуре плавления ПЭНП.

Таблица 1. Зависимость плотности образцов от диаметра и высоты канала экструдера

№ п/п	Содержание связующего (ПЭНП), % масс	d канала экструдера, мм	h канала экструдера, мм	$\rho_{\text{прак}}, \text{г/см}^3$	$\rho_{\text{теор}}, \text{г/см}^3$	P, МПа
1	4,0	4	25	5,52	6,02	24,5-58,8
2	4,5	2,8	20	5,66	5,89	78,4-156,8
3	6,0	2,8	20	5,00	5,51	19,6-49,0

Данные о плотности образцов магнитопластов и объёмной доле связующего позволяют сделать вывод о том, что наноразмеры частиц полимера обеспечивали равномерное распределение наполнитель-связующее при смешивании его с порошком БЗС механическим путем, и, как следствие, полученные образцы магнитоластов проявляли удовлетворительные механические и электромагнитные свойства.

Как следует из данных по экспериментальным и теоретически рассчитанным значениям о свойствах, полученных образцов магнитоластов в зависимости от параметров экструдирования, представленных в таблице 3, остаточная намагничённость образцов зависит от содержания связующего (ПЭНП) параметров экструдирования и, несомненно, от плотности полученных образцов, причем наибольшие значения остаточной намагничённости достигаются при содержании связующего 3,5 % масс. и давлении 78 МПа. Также, следует отметить, что значения остаточной намагничённости, в целом, не уступают значениям данного показателя для магнитоластов, полученных прессованием и литьем под давлением. Данный факт, вероятно, можно объяснить тем, что именно экструзионный способ формирования обеспечивает минимальную адгезионную связь частиц магнитного порошка с полимерной матрицей.

Прочность образцов магнитоластов, измеренная на автоматическом прочномере катализаторов ПК-1, находится в диапазоне 39,4-47,7 МПа, что сопоставимо с значениями прочности применяемых магнитоластов, причем наибольшее значение прочности достигается при давлении 127 кПа. Однако, как следует из приведенных данных, наибольшие значения остаточной намагниченности достигаются при содержании связующего 3,5 % масс. и давлении 78 МПа.

Таблица 2. Зависимость свойств образцов магнитоластов на основе БЗС Nd-Fe-B с ПЭНП в качестве связующего от параметров экструдирования

Содержание ПЭНП, % масс.	тип экструзии d=4мм	P, МПа	ρ , г/см ³	V _{геор} , Тл	V _{прак} , Тл
3,5	прямая	78	5,52	0,52	0,72
5,0	прямая	49	4,92	0,45	0,72
10,0	прямая	-	4,31	0,38	0,72
3,5	боковая	147	5,72	0,68	0,92
5,0	боковая	117	5,04	0,48	0,72

Таким образом, определены оптимальные условия получения методом экструзии и состав полимерных композитов с высокой степенью наполнения магнитным порошком БЗС Nd-Fe-B (магнитоласты) с нанодисперсным порошком ПЭНП в качестве связующего. Показано, что к преимуществам экструзионного метода получения магнитоластов можно отнести возможность получения образцов с высокими степенями наполнения магнитным порошком с минимальной адгезионной связью частиц дисперсной фазы и полимерного связующего, что обеспечивает удовлетворительные значения остаточной намагниченности.

Список использованных источников

1. Лилеев А.С., Викторов В.Н., Старикова А.С. Магнитотвердые материалы на основе наночастиц железа. Известия Российской академии наук. Серия физическая. 2013. Т. 77. № 10. С. 1426. DOI: 10.7868/S0367676513100244
2. Цветкова Е.А., Гольдаде В.А., Ухарцева И.Ю., Зотов С.В., Кадолич Ж.В., Сильвистрович В.И., Кикинева Е.Г. Полимерные композиционные материалы с магнитными наполнителями (обзор). Вестник Технологического университета. 2020. Т. 23. № 12. С. 27-37.
3. Хуснуллин А.Г., Базунова М.В., Лаздин Р.Ю., Кулиш Е.И., Захаров В.П. Изучение перерабатываемости композиций на основе первичных и вторичных полипропилена и полиэтилена и лужи подсолнечника. Вестник Башкирского университета. 2019. Т. 24. № 2. С. 311-317.
4. Ахметханов Р.М., Минскер К.С., Заиков Г.Е. О механизме тонкого диспергирования полимерных продуктов при упруго-деформационном воздействии // Пластические массы, 2006, № 8, С. 6-9

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ СООЛИГОМЕРОВ 1-НАФТИЛАМИНА С 2-НАФТОЛОМ И ИХ КОМПОЗИЦИИ С ТЕРМОПЛАСТАМИ И БУТИЛКАУЧУКОМ

Г.Н. Абасзаде, Р.А. Ахмедова, Д.Н. Алиева, Ч.О. Исмаилова,
Б.А. Мамедов

Институт Полимерных Материалов Министерства Науки и Образования
Азербайджанской Республики, Сумгаит, Азербайджан

Различные типы электропроводящих или антистатических полимерных материалов обычно получают путем введения в состав промышленных полимеров электропроводящих наполнителей. Учитывая это, синтезированы соолигонафтиламиннафтолы, включающие реакционноспособные аминные и гидроксильные группы (СОНАНф), а также макрорадикалы нафтоксильного типа на основе СОНАНф. Солигонафтиламиннафтолы получены путем окислительной сополиконденсации 1-нафтиламина с 2-нафтолом в присутствии NaOCl. Стабильные макрорадикалы нафтоксильного типа получены путем окисления олигонафтиламиннафтолов кислородом в щелочной среде.

Синтезированные соолигомеры хорошо растворяются в полярных органических растворителях и способны к размягчению под нагрузкой при 383-408 К в зависимости от условий синтеза. Состав и структура СОНАНф установлены методами элементного, химического и ИК-спектрального анализов, а молекулярно-массовые показатели – методом гель – проникающей хроматографии. Выявлено, что синтезированные соолигомеры состоят из нафтиламиновых и гидроксинафтиленовых звеньев. Эти соолигомеры могут быть использованы в качестве антистатических добавок к термопластам и эластомерам. Введение этих соолигомеров в количестве ~ 5-10% позволяет снижать значения ρ_v термопластов до $\sim 10^8$ - 10^7 Ом·см.

Образцы СОНАНф были также использованы в качестве активной добавки для бутильного каучука (БК). При этом резиновые смеси на основе БК подготовлены по стандартной рецептуре ингредиентов с той лишь разницей, что взамен сажи (частично или полностью) применены соолигонафтиламиннафтолы. Использование СОНАНф с электропроводящей сажой позволяет получить резины с $\sigma_v \sim 10^{-8}$ - 10^{-6} Ом⁻¹·см⁻¹. Причем рост содержания соолигомера взамен сажи, приводит к увеличению удельной электропроводности, относительного удлинения, термостойкости, предела прочности и снижению модуля упругости полученных резин.

**ВЛИЯНИЕ ЦИНКСОДЕРЖАЩИХ НАНОЧАСТИЦ НА СВОЙСТВА
КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ИЗОТАКТИЧЕСКОГО
ПОЛИПРОПИЛЕНА, СОДЕРЖАЩЕГО СМЕСЬ ФУЛЛЕРЕНОВ C₆₀/C₇₀**

А. И. Дунямалиева¹, Н. И. Курбанова¹, Э.Б.Зейналов²

Институт Полимерных Материалов Министерства Науки и Образования
Азербайджанской Республики, Сумгаит, Азербайджан

Институт Катализа Неорганической Химии Министерства Науки и
Образования Азербайджанской Республики Сумгаит, Азербайджан

Полипропилен (ПП) в настоящее время является наиболее распространенным синтетическим полимером, который, благодаря своим свойствам, широко применяется во многих сферах жизнедеятельности человека. В последнее время широкое развитие получил подход к повышению термостабильности и огнестойкости ПП, основанный на использовании полимерных нанокомпозитов [1].

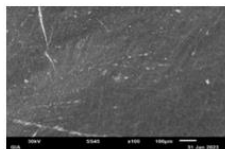
В настоящее время созданию композиционных материалов на основе различных полимерных матриц с углеродными наноразмерными объектами уделяется особое внимание.

Работа посвящена получению и исследованию свойств композитов на основе изотактического полипропилен, содержащего наночастицы оксида цинка H₄ZnO и смесь фуллеренов C₆₀/C₇₀.

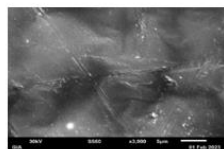
Нанокомпозитные полимерные материалы получены путем смешения ПП в присутствии нанонаполнителей: смеси фуллеренов C₆₀/C₇₀ и H₄ZnO на лабораторных вальцах при температуре 160-165° С в течение 15 минут, полученные смеси прессовали в виде пластин толщиной 1мм при 190°С и давлении 10 МПа в течение 10 минут.

Соотношение исходных компонентов (масс. %): ПП/ZnO = 100/(0.5), ПП/C₆₀/C₇₀= 100/(0.02) и ПП/C₆₀/C₇₀/H₄ZnO=100/ 0.02/ 0.5.

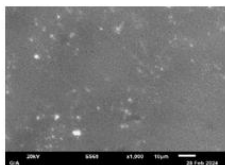
СЭМ анализы образцов полученных нанокомпозитов проведены на приборе Scanning Electron Microscope (SEM_EDX JSM-IT200LA, Jeol, Japan



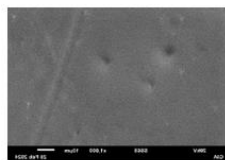
1a



1б



1в



1д

Рис. 1. Микрофотографии композитов: 1а - изотактический ПП; 1б- изотактический ПП / $C_{60/70}$, 1в - изотактический ПП / $HfZnO$; 1д- изотактический ПП / $C_{60/70}$ / $HfZnO$

Показано, что введение наночастиц оксидов цинка в композицию на основе изотактического полипропилена, содержащую смесь фуллеренов $C_{60/70}$, способствует увеличению прочности на разрыв с 31,44 до 33,28 МПа теплостойкости по Вика со 165 до 175°C, при сохранении удлинения при разрыве.

Используемые в работе наночастицы ZnO , располагаясь в межфазном слое структурных элементов ПП, способствуют формированию в расплаве композиции гетерогенных центров зародышеобразования, которые в процессе ступенчатого охлаждения нанокompозита, способствуют увеличению центров кристаллизации, приводящих в целом к улучшению процесса кристаллизации и формированию относительно мелкосферолитной структуры и тем самым улучшению его свойств.

Список использованных источников

1. В.С. Систер, Е.А. Иванникова, С.М. Ломакин. Сравнительный анализ термостабильности полимерных нанокompозитов на основе полипропилена, *Наноматериалы и нанотехноогии*, 2012, (3), 13 – 28.

© Дунямалиева А.И. и др., 2024

УДК 678.742.3:678.82

**ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ ВУЛКАНИЗУЮЩЕЙ СИСТЕМЫ
НА УПРОЧНЯЮЩЮЮ ЭФФЕКТИВНОСТЬ НАНОРАЗМЕРНОГО
ОКСИДА КРЕМНИЯ В ТЕРМОПЛАСТИЧНОМ ВУЛКАНИЗАТЕ
НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА И ЭТИЛЕНПРОПИЛЕНОВОГО
КАУЧУКА**

А.Е. Заикин

Казанский национальный исследовательский технологический университет,
г. Казань, Россия

Термопластичные эластомеры и в том числе термопластичные вулканизаты (ТПВ) сочетают в себе свойства вулканизированной резины и технологичность термопластов, что определяет ускоренные темпы роста их потребления. Наибольшее применение среди ТПВ нашли материалы на основе смеси полипропилена (ПП) и этиленпропилендиенового каучука (ЭПДМ) благодаря доступностью этих компонентов. Однако рассматриваемые ТПВ имеют относительно невысокую прочность, что существенно сужает область их использования. Поэтому задача повышения прочностных свойств ТПВ на основе ПП и ЭПДМ является весьма актуальной. Самым известным приемом повышения прочностных свойств эластомерных материалов является введение в их состав твердых наноразмерных порошков, таких как технический углерод, оксид кремния, углеродные нанотрубки и др. Особый интерес вызывает упрочнение ТПВ наноразмерным оксидом кремния, поскольку позволяет получить неокрашенные материалы, которым можно придавать любую окраску. Проблема заключается в том, что большинство углеводородных полимеров имеют низкую адгезию к поверхности оксида кремния, поэтому упрочнение резин и ТПВ этим наполнителем возможно только в присутствии специального связующего агента, повышающего адгезию между наполнителем и матрицей.

Известно, что на свойства ТПВ значительное влияние оказывает тип вулканизирующей системы. Очень вероятно, что природа вулканизирующей системы будет оказывать влияние на упрочняющую эффективность диоксида кремния в ТПВ на основе ПП и ЭПДМ. В данной работе было проведено сравнение двух вулканизирующих систем – фенолоформальдегидной и гидридсилоксановой (по реакции гидросилилирования).

ТПВ получали из смеси ПП марки Бален 01130, ЭПДМ марки Vistalon 5601, диоксида кремния марки Росил-175 и белого минерального масла марки МХ-200. В качестве вулканизирующих агентов использовали фенолоформальдегидную смолу (ФФС) марки SP-1045, активированную двуххлористым оловом, или полигидридметилсилоксан (ПГМС) марки МН1107, катализируемый комплексом платина (0)-1,3-дивинил-1,1,3,3-

тетраметилдисилоксан марки PC072 производства фирмы UST. Процесс получения ТПВ вели в лабораторном смесителе закрытого типа фирмы «Brabender» при температуре 170°C.

Эксперимент показал, что при вулканизации полигидридметилсилоксаном Росил-175 сильнее повышает прочность ТПВ, чем при вулканизации фенолоформальдегидной смолой (рис. 1).

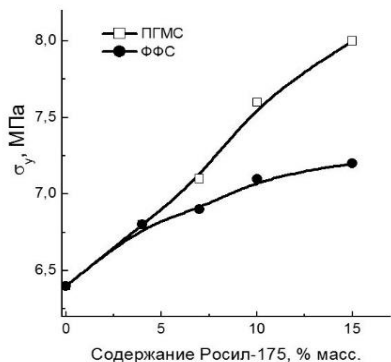


Рис. 1. Зависимость условной прочности при растяжении (σ_y) ТПВ на основе ПП/ЭПДМ/масло = 40/60/75 от концентрации диоксида кремния Росил-175. Тип вулканизирующего агента указан на рисунке. Концентрация вулканизирующих компонентов: ФФС – 3 % масс.; $\text{SnCl}_2 \times 6\text{H}_2\text{O}$ – 2,5 % масс.; ПГМС – 2 % масс; катализатор PC072 – 8,5 ppm в пересчете на платину.

С помощью сканирующего зондового микроскопа показано, что при вулканизации ПГМС качество диспергирования диоксида кремния в полимерной матрице лучше – количество агломератов диоксида кремния в ТПВ, вулканизированной ПГМС, значительно меньше, чем при вулканизации фенолформальдегидной смолой. Наиболее вероятной причиной лучшего диспергирования диоксида кремния является большая энергия взаимодействия полимерной матрицы с поверхностью наполнителя. По-видимому, в процессе вулканизации макромолекулы ПГМС реагируют не только с макромолекулами ЭПДМ, но и с поверхностью диоксида кремния. В результате этого образуются дополнительные связи ЭПДМ матрицы с поверхностью диоксида кремния через ПГМС. Известно [1], что в присутствии платины полигидридметилсилоксан реагирует с гидроксильными группами, которых много на поверхности диоксида кремния.

Таким образом, повышенная прочность ТПВ, вулканизированного полигидридметилсилоксаном, обусловлена более высокой энергией взаимодействия полимерной матрицы с поверхностью диоксида кремния и лучшим диспергированием частиц диоксида кремния.

Список использованных источников

1.W. Fortuniak, J. Chojnowski, S. Slomkowski, P. Pospiech, J. Kurjata //Polymer, 2013, V. 54, N 13, P. 3156-3165.

© Заикин А.Е., 2024

УДК 546.47:678-1:53

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ НАНОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ СМЕСИ ПОЛИЭТИЛЕНОВ ВЫСОКОГО И НИЗКОГО ДАВЛЕНИЯ С КОБАЛЬТСОДЕРЖАЩИМИ НАНОПОЛНИТЕЛЯМИ

¹Г.Г.Мамедова, ²Н.И. Курбанов

¹Азербайджанский Государственный Университет Нефти и Промышленности, г. Баку

²Институт Полимерных Материалов Министерства Науки и Образования Азербайджанской Республики, г. Сумгайыт

Известно, что использование наночастиц d- металлов (меди, цинка, кобальта, никеля и др.) в полимерах позволяет получать принципиально новые материалы, которые широко используются в радио- и оптоэлектронике в качестве магнитных, электропроводящих и оптических сред. [1,2].

В работе использованы: -Полиэтилен высокого давления марки (ПЭВД) 15803-020, $\rho = 0,917 - 0,921 \text{ г/см}^3$, ПТР $1,5 - 2,5 \text{ г} \cdot 10^{-1} \text{ мин}$ ($T=190^\circ\text{C}$, нагрузка 2,16 кг); -Полиэтилен низкого давления марки(ПЭНД) ХМ0349ПЭ, $\rho = 0,949 \text{ г/см}^3$, ПТР $8,3 \text{ г} \cdot 10^{-1} \text{ мин}$ ($T=190^\circ\text{C}$, нагрузка 21,6 кг). В качестве нанонаполнителя использованы наночастицы оксид кобальта (CoO), стабилизированные матрицей полиэтилена высокого давления (ПЭВД), полученные механохимическим способом в расплаве полимера без использования растворителей. В качестве наполнителя использован гидроксид алюминия - $\text{Al}(\text{OH})_3$. Соотношение полимерных компонентов композиции (мас%): ПЭВД/ПЭНД=50/50.

Наноккомпозитные полимерные материалы получены путем последовательного смешения ПЭВД и ПЭНД с кобальтсодержащими нанонаполнителями и гидроксидом алюминия на лабораторных вальцах при температуре 150°C в течение 15 мин. Для проведения механических испытаний полученные смеси прессовали в виде пластин толщиной 1 мм при температуре 190°C и давлении 10 МПа в течение 10 мин. Исследованы физико-механические свойства полученных наноккомпозитов.

В результате проведенных исследований выявлено, что раздельное введение наночастиц оксида кобальта и алюминий гидроксида в состав композиции на основе смеси полиэтиленов высокого и низкого давления не приводит к существенному улучшению показателей предела прочности при разрыве и относительного удлинения. В то же время, совместное введение наночастиц оксида кобальта (1.0 мас%) и алюминий гидроксида (1.0 мас%) в состав композиции способствует значительному повышению механических и деформационных свойств полученного наноккомпозита: увеличению показателя прочности от 16.69 до 18.48 МПа, величины деформации при разрыве композита от 590 до 885 % (в 1,5 раза), что, по-видимому, обусловлено межфазным взаимодействием кобальтсодержащих наночастиц,

стабилизированных матрицей ПЭВД и алюминий гидроксида с компонентами смеси полиэтиленов высокого и низкого давления.

Список использованных источников

1. Николайчик, Ю.А., Куис Д.В., Свидунович Н. А., Ровин С.Л. Общие проблемы разработки и внедрения наноматериалов и нанотехнологий // Литье и металлургия, 2020, № 4, с. 152–162.

2. Mamedova G.G., Kurbanova N. I., Guliyeva T. M. Obtaining and studying the properties of nanocomposites based on a mixture of polyethylenes of high and low pressure with metalcontaining nanofillers //PPOR, 2023, V.24, N.2, pp.360-370.

© Мамедова Г.Г. и др., 2024

УДК 541.64:678.8

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ МЕТАЛЛУГЛЕРОДНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНА НИЗКОГО ДАВЛЕНИЯ

Н.А.Мирзоева, Н.И. Курбанова

Институт полимерных материалов Министерства Науки и Образования
Азербайджанской Республики, Az 5004, г. Сумгаит, Азербайджан

В современном мире различные виды полимерных композиционных материалов на основе нанонаполнителей активно вытесняют традиционные материалы. Благодаря уникальности свойств современных наноматериалов многие компании конструируют сложные электронные устройства, которые используются в авиационной и космической сферах, для сборки мощных компьютеров, видеотехники, помогают диагностировать различные заболевания, а также быстро передавать информацию. Такие наноструктурированные материалы получают путем внедрения наночастиц в различные полимерные матрицы [1,2].

Представленная работа посвящена получению и исследованию свойств нанокompозитов на основе полиэтилена низкого давления (ПЭНД) с использованием в качестве нанонаполнителей (НН) металлсодержащих наночастиц (НЧNiO), стабилизированных полимерной матрицей, и многостенных углеродных нанотрубок (МСУНТ). Нанокompозитные полимерные материалы получены путем смешения ПЭНД с металлсодержащими нанонаполнителями и МСУНТ на лабораторных вальцах при температуре 130-135°C в течение 15 минут. Для проведения механических испытаний полученные смеси прессовали в виде пластин толщиной 1мм при 170°C и давлении 10 МПа в течение 10 минут. Исследованы физико-механические, теплофизические и термические свойства полученных нанокompозитов. Необходимым условием получения наилучших свойств углеродных наноматериалов в полимерном композите является достижение максимальной степени диспергирования наполнителя и его оптимальная ориентация в матрице полимера. Найдено оптимальное соотношение компонентов для получения улучшенных физико-механических и термических свойств исследуемых нанокompозитов

(масс.%): ПЭНД/НЧNiO/МСУНТ(100/1.0/0.05). Энергия активации (E_a) термоокислительной деструкции ПЭНД/НЧNiO /МСУНТ увеличивается от 201 до 275.28 кДж/моль. Выявлено улучшение прочностных и деформационных показателей, а также термоокислительной стабильности полученных нанокompозитов, что может быть отнесено к эффектам структурной и химической стабилизации полимерной матрицы.

Многочисленные экспериментальные данные по механическим, прочностным, релаксационным и др. свойствам смесей полимер-полимер, полимер-наполнитель находят объяснение в рамках представлений о наличии межфазного слоя. На свойства полимерных композитов заметно влияет надмолекулярная структура полимера (размер сферолитов, степень кристалличности, наличие С=О групп и разных разветвлений и т.п.) и межфазное взаимодействие на границе раздела.

Результаты физико-механических и термических свойств подтверждаются данными СЭМ. СЭМ - анализ полученных нанокompозитов показал, что совместное использование металл-углеродных наночастиц, приводит к улучшению диспергирования нанопополнителей в полиэтиленовой матрице и формированию новой трёхмерной мелкокристаллической надмолекулярной структуры, что положительно влияет на физико-механические и термические свойства нанокompозитов. Используемые в работе металлсодержащие наночастицы и МСУНТ, располагаясь в межфазном слое структурных элементов ПЭНД способствуют формированию в расплаве композиции гетерогенных центров зародышеобразования, которые в процессе ступенчатого охлаждения нанокompозита способствуют увеличению центров кристаллизации, приводящих в целом к улучшению процесса кристаллизации и формированию относительно мелкосферолитной структуры. Полученные результаты свидетельствуют о том, что небольшие количества нанопополнителей, вводимые в полимер, очевидно, играют роль структурообразователей - искусственных зародышей кристаллизации, что способствует возникновению в полимере мелкосферолитной структуры, характеризующейся улучшенными физико-механическими и термическими свойствами полученного нанокompозита.

Список использованных источников

1. E.B.Zeynalov, N. Allen, N.I. Kurbanova, N.A. Mirzoyeva, A.I. Dunyamaliyeva. Overview on MWCNT polymeric composites and novel properties of MWCNT HDPE composite containing nanoparticle cobalt oxide. Current Trends of Polymeric Science, 2021, Vol.21, pp. 17-25.
2. Ю.А. Николайчик, Д.В. Куис, Н.А. Свидунович, С.Л.Ровин. Общие проблемы развития и внедрения наноматериалов и нанотехнологий. Литье и металлургия, 2020, № 4, сс. 152–162.

© Мирзоева Н.А. и др., 2024

ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ МОДИФИЦИРОВАННОГО АМИННОГО ОТВЕРДИТЕЛЯ ХТ-104Б НА ЭЛЕКТРЕТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И ТВЕРДОСТЬ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ DER-331

Т.Т. Мусаев, Е.Н. Мочалова, М.Ф. Галиханов

ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», г. Казань, Россия

Полимерные материалы, полученные на основе эпоксидных олигомеров, нашли широкое применение в различных отраслях промышленности благодаря возможности модификации их пространственной структуры. В последнее время наряду с химической, широко применяется физическая модификация. Получение материалов проводилось при совмещении процесса физической модификации (поляризации в постоянном электрическом поле при следующих условиях: напряжение поляризации 5 кВ, температура 90 °С, продолжительность 2 часа) с отверждением полимерного материала. Соотношение модифицированного аминного отвердителя ХТ-104Б варьировалось от 40 до 60 масс. % по отношению к олигомеру DER-331.

Изменение содержания модифицированного аминного отвердителя ХТ-104Б в составе композиции оказывает незначительное влияние на электретные характеристики и твердость материалов, полученных на основе DER-331. Электретные характеристики (потенциал поверхности V_3 , эффективная поверхностная плотность заряда $\sigma_{эф}$ и напряженность электростатического поля электрета E) хемозлектретов на основе DER-331 на 60 сутки хранения образцов составили при содержании ХТ-104Б 40 масс.% $V_3=1,7$ кВ, $\sigma_{эф}=0,9$ мкКл/м² и $E=68$ кВ/м и $V_3=1,8$ кВ, $\sigma_{эф}=0,92$ мкКл/м² и $E=70$ кВ/м при содержании ХТ-104Б 60 масс.% соответственно.

С увеличением содержания отвердителя ХТ-104Б в составе композиции твердость по Шору D хемозлектретов изменяется от 79,3 усл. ед (40 масс.%) до 80,7 усл. ед (60 масс.%) с максимумом 82,5 усл. ед при содержании ХТ-104Б 50 масс.%. Для неполяризованных образцов изменение твердости по Шору D в зависимости от содержания отвердителя имеет аналогичный характер (от 76,8 усл. ед (40 масс.%) до 80,0 усл. ед (60 масс.%) с максимумом 80,7 усл. ед при содержании ХТ-104Б 50 масс.%.). Совмещение процесса поляризации с процессом синтеза полимера приводит к увеличению твердости по Шору D для хемозлектретов по сравнению с неполяризованными образцами, связанному с ориентацией групп атомов, способных к дипольной поляризации.

Список использованных источников

1. Мочалова Е.Н., Галиханов М.Ф., Микрюкова Я.К. Электретные и прочностные свойства полимерных материалов на основе эпоксидного олигомера и аминных отвердителей. Журнал прикладной химии. 2019. Т. 92. № 11. С. 1394-1400.

© Мусаев Т.Т. и др., 2024

УДК 678.01:541.68

ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТАТИСТИЧЕСКОГО СОПОЛИМЕРА ПОЛИПРОПИЛЕНА НАПОЛНЕННОГО ГИДРОКСИДОМ АЛЮМИНИЯ

Ф.А. Мустафаева, Н.Т. Кахраманов

Институт Полимерных Материалов Министерства Науки и Образования
Азербайджанской Республики, г. Сумгаит, Азербайджан

Гидроксид алюминия является наиболее широко используемым и экономически эффективным неорганическим антипиреном-наполнителем в промышленности пластмасс [1-3]. Для достижения желаемой огнестойкости необходимо значительное количество гидроксида алюминия с концентрацией более 50 масс. %, что приводит к ухудшению механических свойств. Предпринимались многочисленные попытки улучшить механические свойства композитов на основе гидроксида алюминия без снижения их огнестойкости. Целью наших исследований было улучшение механических свойств за счет уменьшения количества гидроксида алюминия в композите с использованием различных природных минералов. Для достижения поставленной цели было изучено физико-механические свойства композиций полипропилена, содержащих гидроксид алюминия.

В исследовании был использован статистический сополимер полипропилена марки Topilene® R200P производства Кореи (HYOSUNG CHEMICAL CORPORATION) с индексом текучести расплава 0,2 г/10 мин. Размер частиц гидроксида алюминия оценивали с помощью лазерного анализатора размера частиц Mastersizer 3000 (Malvern Instruments, Англия) с диапазоном измерений от 0,01 до 3500 мкм. Благодаря кривой распределения частиц по размерам, представленной на рис. 1, средний размер частиц гидроксида алюминия составил 0.0559 мкм. (рис. 1)

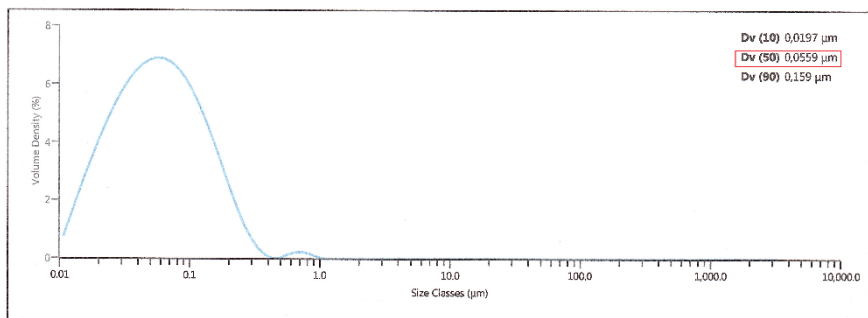


Рис. 1. Размер частиц гидроксида алюминия.

Композиты с разной концентрацией гидроксида алюминия (1, 3, 5, 10, 20, 30 и 50 масс. %) получали путем смешивания компонентов на горячих вальцах. После расплавления полипропилена на вальцах гидроксид алюминия вводили по частям. На основе полученного полимерного композита были спрессованы пластины. Для исследования физико-механических свойств были получены стандартные образцы в виде лопаток.

Анализ полученных результатов показал, что наиболее оптимальным для повышения основных механических свойств полипропилена является содержание гидроксида алюминия в количестве 5 масс. %. При введении в систему тонкодисперсного гидроксида алюминия более 5 масс. % зарегистрировано снижение показателей разрушающего напряжения и относительного удлинения. Ухудшение характеристик, скорее всего, связано с агломерацией наполнителя.

Методом дилатометрии установлено, что плотность композитов увеличивается с увеличением количества наполнителя, а изменения значения температуры начала кристаллизации не наблюдается.

Список использованных источников

1. Amariei G., Henriksen M.L., Klarskov P., Hinge M. Quantification of aluminium trihydrate flame retardant in polyolefins via in-line hyperspectral imaging and machine learning for safe sorting // *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 2024. –V. 311. –ID 123984.
2. Parida M.R., Mohanty S., Biswal M., Nayak S.K., Rai S. Influence of aluminum trihydrate (ATH) particle size on mechanical, thermal, flame retardancy and combustion behavior of polypropylene composites // *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. 2023. –V. 148. –P. 807–819.
3. Qin Z., Li D., Li Q., Yang R. Effect of nano-aluminum hydroxide on mechanical properties, flame retardancy and combustion behavior of intumescent flame retarded polypropylene // *Materials & Design*. 2016. –V. 89. –P. 988–995.

**ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА
ОСНОВЕ СИНТЕТИЧЕСКОГО КАУЧУКА
ЭТИЛЕН-ПРОПИЛЕНОВОГО ТРОЙНОГО**

А.А. Раслан, Т.Р. Просочкина, Э.Р. Атнабаева

Уфимский государственный нефтяной технический университет
г. Уфа, Россия

Композиционные материалы на основе синтетического триэтилен-пропиленового каучука (СКЭПТ) - это материалы, которые были смешаны с СКЭПТ для улучшения их свойств, таким образом, получают новые материалы, обладающие многими свойствами [1], такими как высокая термостойкость и устойчивость к озону, низкая стоимость [2], коррозионная стойкость [3] и электрическая изоляция [4].

В качестве примера улучшения электрических и физических свойств СКЭПТ используется при изготовлении изоляторов, а также в силовых кабелях. Эксперименты показали, что предел прочности при растяжении изоляторов и кабелей увеличивается до тех пор, пока коэффициент СКЭПТ не достигнет 30 Phg но при превышении этого значения предел прочности при растяжении снижается [4].

Измельченные шины не закапываются в землю, а перерабатываются для производства ценных шин, поэтому измельченные шины комбинируются с СКЭПТ для получения недорогих гибких магнитных композиций на основе комбинации СКЭПТ и порошка из использованных шин.

Электропроводность составляет до 4-10 сек/см при соотношении СКЭПТ 40%. Кроме того, смесь может быть пригодна для создания магнитомягких материалов, которые имеют множество применений [5].

Благодаря особенностям СКЭПТ его смешивание является эффективным способом значительно улучшить эксплуатационные характеристики материалов для удовлетворения потребностей промышленности, но из-за его нестабильной морфологии большинство смесей не смешиваются и имеют слабые граничные свойства, поэтому для облегчения процесса смешивания пришлось добавлять наполнители. Большинство наполнителей являются неорганическими, и их поверхности несовместимы с полимерами.

Модификация поверхности наполнителей - отличный способ улучшить дисперсионные свойства и поверхностную активность. Размер, тип и концентрация наполнителя также влияют на механические свойства, набухание и электрическую изоляцию смеси этилен-пропилендиенового каучука тройного (СКЭПТ)/бутадиен-стирольного каучука (БСК), наполненной наночастицами оксида алюминия [6].

Поэтому, благодаря отличительным свойствам СКЭПТ, он используется во многих областях, где спрос на него в последние годы возрос.

Список использованных источников

- 1 T. Jallivtt, C. Peyrac, F. Lefebvre. Damage of Composite Materials. Procedia Engineering, V66, 2013, P 746-758.
- 2 Shafiq R. Qureshi, Waqar A. Khan and Waqas Sarwar. The Scientific World Journal. No. 2014 (2014), P 1-6.
- 3 R. H. Farzad, A. Hassan, M.A.M. Haj. Jawaid Polymer Engineering and Science, 2014, vol 54, P 493-498.
- 4 A. Alber, L. Nasrat, H. Ismail, M. Hassan. South Asian Research Journal of Engineering and Technology, V4, Issue 5, 2022.
- 5 E. S. Shafik. A. M. Labeeb. D. A. Wissa. S. L. Abd-El-Messiah, A.A. Ward. Research Square, Cost-Effective and Environmentally Friendly Flexible Magnetic EPDM rubber Composites Based on Ground Waste Tires (GRW) and Waste Iron Powder. 2023.
- 6 A.A. Abdelsalam, A.A. Ward, G. Abdel-Naeem, W.S. Mohamed, S.H. El-Sabbagh. Effect of Alumina Modified by Silane on the Mechanical, Swelling and Dielectric Properties of Al₂O₃/EPDM/SBR Blend Composites. Springer Nature. V15, P 3609–3621, 2023.

© Раслан А.А. и др., 2024

УДК 541.64

РАЗРАБОТКА ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ СУКЦИНИЛА ХИТОЗАНА В КАЧЕСТВЕ БИОЧЕРНИЛ ДЛЯ 3D-ПЕЧАТИ

Д.Е. Рыбченко, Е.И. Кулиш

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Биочернила – это специализированный материал, используемый в области биопечати, представляющей собой процесс создания трехмерных структур путем наслаивания клеток, биоматериалов и биомолекул. Обеспечивая высокую воспроизводимость и точный контроль над изготавливаемыми конструкциями автоматизированным способом, этот новый подход позволяет производить продукцию с высокой производительностью. Биочернила являются важнейшим компонентом биопечати, так как они служат средой, с помощью которой клетки и другие биоматериалы наносятся на подложку для создания сложных тканевых структур. Несмотря на широкое развитие методов печати (лазерная биопечать, струйная биопечать и биопечать на основе экструзии), их применение ограничено отсутствием подходящих биочернил, которые должны соответствовать определённым требованиям и обладать достаточной биологической активностью различных типов клеток.

Существует несколько различных типов биочернил, адаптированных к конкретным применениям в биопечати. Некоторые биочернила специально разработаны для печати на определенных типах тканей, таких как кости, хрящи или кожа, тогда как другие более универсальны и могут использоваться на различных типах тканей. Кроме того, биочернила можно настроить в соответствии со свойствами целевой ткани: ее механическая прочность, эластичность и клеточный состав. Многими свойствами, подходящими для использования в качестве тканевых каркасов, обладают гидрогели. Они, в первую очередь, биосовместимы, биологически разлагаемы, а некоторые из них могут быть легко сшиты. Матрица гидрогеля обеспечивает необходимый каркас для роста и дифференцировки клеток, а также позволяет точно наносить биочернила во время процесса печати. К материалам, используемым в качестве биочернил, можно отнести альгинат, желатин, коллаген, хитозан и его производные, шёлк и другие.

В нашей работе исследована возможность получения биочернил на основе сукцинила хитозана. С этой целью изучены реологические свойства водных растворов этого полимера в широком диапазоне концентраций с целью поиска реологических характеристик полимера в растворе, соответствующих вязкостным требованиям, предъявляемых к гидрогелям, выступающих в качестве биочернил.

© Рыбченко Д.Е. и др., 2024

УДК 678.86

МОДИФИКАЦИЯ НАПОЛНИТЕЛЕЙ И ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ ИОННЫМИ ЖИДКОСТЯМИ

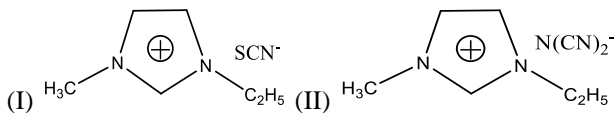
О.И. Сидоров, А.Н. Осавчук, Д.А. Федоров

ФГУП «Федеральный центр двойных технологий «Союз»,
г. Дзержинский, Россия

Ионные жидкости (ИЖ) перспективны для применения в различных отраслях химической промышленности благодаря наличию у них ряда специфических свойств: высокой удельной электропроводности, низкой температуры плавления, каталитической активности, хорошей растворяющей способности, нелетучести и других. [1] Цель работы – исследование комплекса свойств ИЖ различными методами и применение их для модификации различных неорганических и органических наполнителей и полимерных материалов.

Методом ИК-спектроскопии установлено, что каталитическая активность ИЖ, применяемых для ускорения отверждения эпоксиангидридной композиции зависит от химического строения аниона ИЖ. [2]

Показано, что удельное объемное сопротивление ИЖ 1-этил-3-метилимидазолий тиоционат (I) и 1-этил-3-метилимидазолий дицианамид (II) зависит от температуры. Характерной особенностью ИЖ (1) и ИЖ (2) является снижение удельного объемного сопротивления с увеличением температуры.



Температура, °С	-40	+25	+50
Удельное объемное сопротивление, кОм*м	4,3	2,05	2,1

Нанесение ИЖ (2) в количестве 3 и 5 % от массы наполнителя на неорганический и органический наполнители позволяет снизить их удельное объемное сопротивление на 3 и 9 порядков соответственно. Введение в полимерный материал на основе ненасыщенного поликетона ИЖ (1) в количестве 3 и 6 % масс. снижает удельное объемное сопротивление полимерного материала на 1 и 3 порядка соответственно. [3] Установлено, что температуры стеклования ИЖ (1) и (2) составляют -98°С и -96°С соответственно. Термическое разложение ИЖ (1) сопровождается эндотермическими эффектами, а разложение ИЖ (2) экзотермическим эффектом.

Список использованных источников

1. Логинов Д.Г., Никешин В.В. Применение ионных жидкостей в химической промышленности // Вестник казанского технологического университета. 2012, т.15, № 22, с. 53-54
2. Сидоров О.И., Выгодский Я.С., Лозинская Е.И., Милехин Ю.М., Матвеев А.А., Поисова Т.П. Ферапонтов Ф.В., Соколов В.В. Ионные жидкости как катализаторы отверждения эпоксидсодержащих композиций // Клеи. Герметики. Технологии. 2016, № 9, с.16-24
3. Сидоров О.И., Осавчук А.Н., Рогозина А.А., Федоров Д.А., Дубков К.А. Ионные жидкости как модификаторы электрофизических характеристик наполнителей и полимерного материала // Все материалы. Энциклопедический справочник.2023, № 11, с. 29-32

© Сидоров О.И. и др., 2024

УДК 678.01.53

ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ОБРАБОТКИ НА ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ И РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИОЛЕФИНОВЫХ СМЕСЕЙ

И.С. Тверитникова, И.А. Кириш, Д.Д. Каплуненко, М.Д. Сонина,

К.В. Гладкова

ФГБОУ ВО «Российский биотехнологический университет»,

г. Москва, Россия

На сегодняшний день актуальным вопросом является сохранение экологии страны и экономии природных ресурсов, в связи с этим одним из перспективных решений – это вторичная переработка отходов. С каждым годом возрастает потребление полимерной упаковки, особенно из многослойных и комбинированных материалов, это связано с тем, что они являются высокобарьерными пленками, которые сохраняют срок годности пищевых продуктов. Многослойные и комбинированные полимерные упаковки утилизируются плохо на стадии сортировки и идентификации, поскольку в своем составе имеют термодинамические несовместимые полимерные материалы различной химической природы, например, полиэтилен, полиамид, полистирол, сополимеры и многие другие. При совместной переработке таких материалов вторичное сырье получается плохого качества, имеют низкие эксплуатационные характеристики. Для устранения таких недостатков используют разные способы модификации полимеров такие, как химическая, физическая и физико-химическая модификация. Модификация ультразвуком обеспечивает переработку смешанных полимерных материалов. Проведя литературный анализ [1-9] было установлено, что воздействие ультразвука на расплавы полимерных композиций при вторичной переработке ведет к снижению вязкости смесей, наблюдается диспергирование одного компонента в другом. Это приводит к увеличению интервала технологической совместимости полимерных композиций, состоящих из несовместимых полимерных материалов. Для подтверждения данных было решено проделать серию экспериментов, которые направлены на модификацию ультразвуком на полимерные смеси, состоящих из разных полимеров. Поэтому целью работы было исследование влияния ультразвуковой обработки на смешанные полимерные композиции.

В качестве объектов были выбраны полимерные смеси на основе полиэтилена низкой плотности и полипропилена в различном соотношении. Полимерные образцы получали на одношнековом экструдере с ультразвуковой виброприставкой. Полученные полимерные смеси исследовали на деформационно-прочностные характеристики, реологические свойства и на процессы изменения структуры. В результате проведенных исследований было получено, что обработка ультразвуком

расплавов смесей приводит к расширению интервала совместимости компонентов композиций, увеличивает деформационно-прочностные характеристики. В результате мы можем получить вторичное сырье удовлетворительного качества из смешанных полимерных смесей.

Список использованных источников

1. Кочнев, А.М. Модификация полимеров: конспект лекций / А.М. Кочнев, С.С. Галибеов. – Казань: – Изд. Казан. гос. технол. ун-та, 2002. – 180 с.
2. Сирота, А.Г. Модификация структуры и свойств полиолефинов / А.Г. Сирота. – Л.: Химия, 1974. – 175 с.
3. Назаров, В.Г. Поверхностная модификация полимеров: монография / В.Г. Назаров. – М.: МГУП, 2008. – 474 с.
4. Бергмен, Л. Ультразвук и его применение в науке и технике / Л. Бергмен. – М.: Изд-во Иностранная литература, 1957. – 726 с.
5. Носов, В.А. Интенсификация химикотехнологических процессов ультразвуком. Ультразвук в процессах химической технологии / В.А. Носов. - Киев: Общество «Знание» Украинской ССР Киевский дом научно-технической пропаганды, 1965. – 24 с.
6. Барамбойм, Н.К. Механохимия высокомолекулярных соединений / Н.К. Барамбойм. – Москва: Химия, 1978. – 384 с.
7. Кестельман, В.Н. Физические методы модификации полимерных материалов / В.Н. Кестельман. – Москва: Химия, 1980. – 224 с.
8. Симионеску, К. Механохимия высокомолекулярных соединений / К. Симионеску, К. Опра. – Москва: Мир, 1970. – 360 с.
9. Казале, А. Реакции полимеров под действием напряжений / А. Казале, Р. Портер. – Ленинград: Химия, 1983. – 440 с.

© Тверитникова И.С. и др., 2024

УДК 541.64

ПОДХОДЫ К РЕГУЛИРОВАНИЮ УПРУГИХ СВОЙСТВ ГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ПЕКТИНА

М.Е. Брызгалова, М.А. Афанасьева, Р.Ю. Лаздин

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

На современном этапе развития получения биоматериалов большое значение приобретает разработка биodeградируемых материалов, получаемых на основе биосовместимого сырья. Среди них можно выделить гидрогели на основе полиэлектrolитных биополимеров, обладающих комплексом ценных свойств, например, таких как пектин. Преимуществами полимерных гидрогелей является контролируемая доставка лекарственного препарата непосредственно в орган-мишень и снижение его токсичности за счет постепенного высвобождения из гидрогеля. Одним из самых простых

способов получения гидрогелей в отсутствие сшивающих агентов является добавление модифицирующих агентов в процессе приготовления раствора полимера. В данной работе, в качестве модифицирующего агента был использован многоатомный спирт глицерин. Ранее, способность глицерина усиливать процесс гелеобразования был установлен на примере другого полисахарида –натриевой соли сукцинила хитозана [1]. Пектин растворяли в смеси вода: глицерин с объемным содержанием глицерина 10%, 20% и 30%. Концентрация пектина в растворе варьировалась от 3 до 20 г/дл. Установлено, что введение глицерина в раствор пектина приводит к резкому росту значений модулей накоплений и потерь, и более раннему формированию упругих гелей. Например, в отсутствие глицерина, 5% раствор пектина в воде представлял собой вязкую жидкость, а не упругий гель, так как у него при малых значениях частот осцилляции модуль накоплений был меньше модуля потерь. В присутствии глицерина, взятого в количестве 30% от объема растворителя, он становится упругим не текучим гелем, так как значения модуля накоплений больше модуля потерь во всем диапазоне исследуемых частот. Таким образом, полученные композиции пектин-вода-глицерин могут найти свое применение при получении мягких лекарственных форм, таких как пленки, гели или суппозитории.

Список использованных источников

1. Шуршина А.С., Галина А.Р., Лаздин Р.Ю., Чернова В.В., Кулиш Е.И. Влияние модифицирующих добавок на процесс высвобождения лекарственных веществ из жидких лекарственных форм//Химическая физика. 2021. Т. 40. № 7. С. 58-66.

© Брызгалова М.Е. и др., 2024

УДК 542.973

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОКАТАЛИТИЧЕСКОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ СМЕСИ ПОЛИПРОПИЛЕНА И МОТОРНОГО МАСЛА В ПРИСУТСТВИИ КАТАЛИЗАТОРОВ, ПОЛУЧЕННЫХ НА ОСНОВЕ ГЛИНИСТОГО МАТЕРИАЛА ПУТЕМ МЕХАНОАКТИВАЦИИ

Л.В. Фурда, О.Г. Исакулов, Д.Е. Смальченко, О.Е. Лебедева
ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный
исследовательский университет», г. Белгород, Россия

Вопросами утилизации полимерных отходов с целью получения жидких моторных топлив занимаются ведущие ученые различных стран. Однако существует проблема обеспечения контакта полимеров с поверхностью катализатора. Данный фактор оказывает непосредственное влияние на скорость протекания процесса, выход и состав получаемых продуктов. В настоящей работе в качестве растворителя полимеров предложено

использовать моторное масло. Также решалась задача поиска дешевых и доступных катализаторов, соответствующих принципам «зеленой химии».

Образцы катализаторов были получены на основе глинистого материала месторождения «Поляна» Белгородской области помолом в лабораторной мельнице в течение 1, 2, 4 и 8 ч (скорость вращения барабана – 80 об/мин, мелющая загрузка от рабочего объема барабана – 35%). В качестве образца вторичного полипропилена были выбраны одноразовые полипропиленовые стаканы ГОСТ 50962-96. Моторное масло (плотность при 15°C – 873 кг/м³, вязкость при 40°C – 96,81 мм²/с, индекс вязкости – 160) использовали как растворитель. Реакционную смесь готовили в виде твердых пленок. Массовое соотношение полипропилен: моторное масло: катализатор во всех опытах составило 1:1:1. Термокаталитическое превращение проводили в каталитической установке с использованием реактора проточного типа с неподвижным слоем катализатора и реагента в инертной атмосфере аргона с изотермической выдержкой при 300°C. Жидкие продукты собирали в приемник, установленный на выходе из реактора. Выход жидких продуктов рассчитывали с учетом суммарной массы полимера и растворителя.

Наибольшее количество жидких углеводов фиксировали в опытах с использованием катализаторов, полученных после 2 и 8 ч помола (выход 45 и 53 масс. % соответственно). Результаты хроматографического анализа (газовый хроматограф Agilent 7890A) показали, что компонентный состав целевых продуктов неодинаков для всех исследуемых катализаторов. Наиболее узкое распределение углеводов по числу углеродных атомов отмечено в продуктах деструкции с использованием в качестве катализатора глинистого материала после 8 ч помола.

© Фурда Л.В. и др., 2024

СЕКЦИЯ № 4. ДИЗАЙН ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

УДК 541.64

ОСОБЕННОСТИ ВЫСВОБОЖДЕНИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ ИЗ ЖИДКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ

Л.Д. Бадыркеева, А.С. Шуршина

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Современное развитие химии полимеров способствует их широкому применению в различных областях промышленности, медицины, фармации и народного хозяйства. Особенно важна их роль в фармации, где они используются как вспомогательные вещества при производстве твердых, жидких и мягких лекарственных форм.

Использование в фармацевтической технологии полимеров, которые способны сами проявлять физиологическую активность, позволяет создавать новые, более эффективные лекарственные формы: эмульсий и суспензий для инъекций, препаратов направленного и пролонгированного действия, глазных и стоматологических лекарственных пленок, лекарств в аэрозольной упаковке, трансдермальных и липосомальных лекарственных форм. Оценка высвобождения лекарственных веществ (ЛВ) является ключевым этапом в разработке лекарственных форм (ЛФ). В настоящее время существует множество методов для оценки высвобождения и всасывания ЛВ в составе ЛФ. Однако «золотого» стандарта не существует, и выбор метода зависит от конкретной ситуации. Например, для трансдермальных систем могут проводиться исследования *in vivo* на различных видах животных. Также были разработаны новые модели и методы *in vitro*, которые становятся все более популярными. Один из таких методов – диффузия в агаре, широко используемая для исследования высвобождения ЛВ из мягких ЛФ.

Другой метод оценки высвобождения ЛВ – это прямая диффузия, или метод диализа через полупроницаемую мембрану. В качестве мембраны часто используется целлофановая пленка, которая инертна и не взаимодействует с субстанцией или компонентами лекарственной формы, а ее толщина оказывает незначительное влияние на диффузию ЛВ.

Важным аспектом исследований высвобождения ЛВ является выбор рецепторной среды. Она должна обладать способностью солубилизировать исследуемое вещество, хорошо перемешиваться и поддерживать стабильную температуру на протяжении всего исследования. Состав рецепторной среды должен быть подобран так, чтобы не ограничивать диффузию ЛВ и имитировать физиологические среды, такие как желудочный и кишечный сок. Наиболее часто используемыми рецепторными средами для водорастворимых лекарственных средств являются очищенная вода, буферные растворы и изотонический раствор натрия хлорида.

© Бадыркеева Л.Д. и др., 2024

УДК 541.64

**ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ХИТОЗАНА НА ПРОЦЕСС
ВЫСВОБОЖДЕНИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ
ИЗ ЖИДКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ**

Л.Р. Валиахметова, А.С. Шуршина, Р.Ю. Лаздин

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Одним из перспективных полимеров для создания систем с контролируемым высвобождением является хитозан. Он представляет собой полимер искусственного происхождения, обладающий рядом ценных свойств: отсутствие токсичности, бактериостатичность, биоразлагаемость, биосовместимость. Преимуществом использования хитозана является то, что на его основе можно получить различные лекарственные формы: растворы, наночастицы, пленки, нетканые материалы, гидрогели и т.д.

Целью данной работы является изучение влияния концентрации хитозана (ХТЗ) на процесс высвобождения диоксида (ДО) из жидких лекарственных форм (ЖЛФ).

В ходе изучения высвобождения ДО из ЖЛФ на основе ХТЗ через полупроницаемую мембрану в широком концентрационном диапазоне были выявлены следующие закономерности. Во-первых, пролонгирующее влияние от вводимого в раствор ДО ХТЗ имеет место только в определенной области концентраций $C < C_e$ (до 0,45 г/дл), т.е. в области разбавленных растворов. Это может быть связано как с незначительным повышением вязкости раствора ХТЗ, так и с возможным взаимодействием между ХТЗ и ДО.

Во-вторых, повышение концентрации ХТЗ в растворе до значений $\approx C_e$ и выше приводит к увеличению скорости высвобождения ДО. Это объясняется тем, что полуразбавленный раствор ХТЗ представляет собой взаимодействующие между собой молекулы, а дальнейшее повышение содержания полимера в растворе сопровождается резким усилением процессов агрегации и соответственно уменьшением количества ДО, прочно закрепленного на макромолекуле.

Таким образом, в ходе исследования установлено, что эффект пролонгирования выхода ДО из ЖЛФ на основе ХТЗ может проявляться только в том случае, если полимер находится в концентрационной области, соответствующей разбавленному раствору. При переходе в область полуразбавленного раствора, имеет место сжатие макромолекулярных клубков и усиление внутримолекулярного взаимодействия между звеньями полимера, что в свою очередь, приводит к существенному уменьшению количества аддукта реакции полимер-лекарственное вещество и ускоренному высвобождению лекарственного вещества из жидкой лекарственной формы.

© Валиахметова Л.Р. и др., 2024

СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ ПРОТИВОЯЗВЕННОГО КОМПЛЕКСА НА ОСНОВЕ 5-АМИНОСАЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ И ОКИСЛЕННОЙ ФРАКЦИИ ЯБЛОЧНОГО ПЕКТИНА

Ю.А. Васильева

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Научный поиск в области создания новых лекарственных форм определяется потребностью населения и фармацевтической промышленности в эффективных, нетоксичных препаратах. В связи с этим в настоящей работе предложен способ получения противоязвенного средства, основанного на комплексообразовании 5-аминосалициловой кислоты (5-АСК) с полимерным носителем (окисленной фракцией яблочного пектина). Комплексообразование - удобный способ модификации лекарственных соединений, позволяющий улучшать их фармакологические свойства (см. [1-3] и цитируемую там литературу).

Известно, что 5-АСК обладает противовоспалительной и антиоксидантной активностями. Данные факты дают основания полагать, что названная кислота и ее комплексы с окисленным пектином (ОП) могут оказывать положительное влияние на лечение язвенной болезни.

Ранее [4] было показано комплексообразование 5-АСК с ОП. Комплексное соединение 5-АСК...ОП получали смешением эквимольных количеств компонентов в воде, перемешивая реакционную смесь в течение 24 часов, с последующим удалением растворителя и выделением продукта.

Противоязвенную активность полученного комплекса изучали на белых крысах в ФБУН «Уфимский НИИ медицины труда и экологии человека». Язвы вызывали диклофенаком. В качестве исследуемых соединений использовали 5-АСК, ОП и комплекс 5-АСК-ОП. Референтным препаратом выступил «Де-Нол». Осмотр слизистых оболочек желудков животных показал, что противоязвенная эффективность комплексного соединения 5-АСК...ОП сопоставима с препаратом сравнения (Де-Нол, используемого в той же дозе, и существенно выше, чем у моносоединений (5-АСК и ОП).

Список использованных источников

1. Кутлугильдина Г.Г., Рамазанова З.Ф., Зимин Ю.С. // Бутлеровские сообщения. 2019. Т. 58, № 4. С. 77-84.
2. Ibrakova N.F., Kutlugildina G.G., Zimin Yu.S. // Periodico Tche Quimica. 2020. Vol. 17, No. 36. Pp. 302-314.
3. Кутлугильдина Г.Г., Зимин Ю.С., Гимадиева А.Р., Репина Э.Ф., Кудояров Э.Р. // Химико-фармацевтический журнал. 2024. Т. 58, № 2. С. 3-7.
4. Борисова Н.С., Тимербаева Г.Р., Зимин Ю.С., Мустафин А.Г. // Бутлеровские сообщения. 2013. Т. 34, № 4. С. 59-64.

© Васильева Ю.А., 2024

УДК 674.8:747.012

ЦВЕТОВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛАСТИКОВ БЕЗ ПРИМЕНЕНИЯ СВЯЗУЮЩИХ ВЕЩЕСТВ НА ОСНОВЕ ДРЕВЕСИНЫ БУКА

А.И. Гомзиков, А.В. Артёмов

Уральский государственный университет путей сообщения,
г. Екатеринбург, Россия

Уральский государственный лесотехнический университет,
г. Екатеринбург, Россия

Ранними исследованиями [1] было установлено, что цветовой тон древесины различных пород изменяется незначительно и находятся в оранжево-желтой (ближе к желтой) области видимых лучей света.

В работах [2, 3] показано, что применение пьезотермической обработки древесного сырья и термомодификации самой древесины (как и материалов на ее основе) приводит к изменению ее цветовой окраски.

При получении пластиков без применения связующих веществ (ПБС) в идентичных условиях прессования из древесного сырья (сосновые и березовые опилки) делается вывод о том, что цвет получаемого материала зависит от исходного сырья, которое и будет обуславливать его декоративные характеристики [4].

Целью данной работы являлось в изучение цветовых характеристик ПБС на основе опилок бука. Бук является древесиной, которая применяется в качестве отделочного материала из-за своего красноватого оттенка.

Образцы ПБС были получены методом горячего компрессионного прессования [4]. Исследование цветовых характеристик образцов ПБС осуществлялось с помощью микрофотографий. Микрофотографии были получены с помощью микроскопа «Микромед 3» при увеличении 1:400. Микрофотографии были получены с разрешением 300 dpi.

Обработка (трассировка растровых изображений) и анализ цветовых характеристик, полученных микрофотографий, осуществлялся с применением графического редактора CorelDRAW, а также с помощью онлайн сервисов для обработки растровых изображений (<https://whatcolor.ru>, <https://encucolorpedia.ru>). Размер точки анализа принимался 50 px.

Микрофотографии исходного сырья и полученного ПБС представлено на рис.1. Результаты трассировки микрофотографий представлены на рис.2.



а)

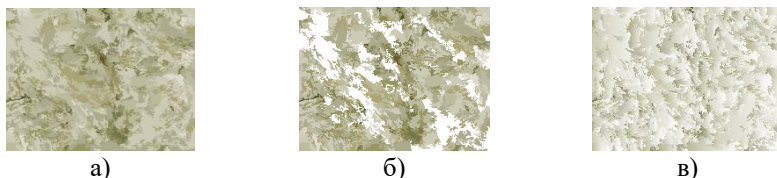


б)

Рис.1. Микрофотографии: а) опилки бука, б) ПБС на их основе

Для сырья в виде опилок бука наблюдается преобладание (64,1 %) средне темного с оттенком коричневого цвета «Какао с сильными оттенками кирпичного и ржавчины» (шестнадцатеричный код цвета HEX #966432). В модели цвета RGB составляет 58,8 % красного, 39,2 % зеленого и 19,6 % синего. Этот цвет имеет приблизительную длину волны в 584,72 нм.

Для полученного ПБС наблюдается преобладание (58,9 %) средне светлого оттенка желто-зеленого цвета «Кабачковый с сильными оттенками капустного и пшеничного» (HEX #c8c896). В модели цвета RGB составляет 78,4 % красного, 78,4 % зеленого и 58,8 % синего. Этот цвет имеет приблизительную длину волны в 570,47 нм.



а) однородная заливка, б) двуцветная заливка, в) фонтанная заливка

Использование данной цветовой композиции может быть разнообразной, например, в качестве декоративно-отделочных материалов. Из-за большого цветового спектра применение может быть универсальным, здесь преобладают как теплые, так и холодные оттенки.

Список использованных источников

1. Рыбин, Б. М. К вопросу определения цвета различных пород древесины / Б. М. Рыбин, И. А. Завражнова, Д. Б. Рыбин // Лесной вестник. Forestry Bulletin. – 2017. – Т. 21, № 2. – С. 55-60.
2. Sikora, A., Kačík, F., Gaff, M. et al. Impact of thermal modification on color and chemical changes of spruce and oak wood. J Wood Sci 64, 406-416 (2018).
3. Математическая модель прогнозирования цветовых характеристик древесно-наполненных композитов на основе PLA / Г.А. Сабирова, Н.Р. Галяветдинов, Р.З. Хайруллин, Ш.Р. Мухаметзянов // Деревообрабатывающая промышленность. – 2021. – № 1. – С. 82-89.
4. Декоративная оценка пластиков без связующего на основе древесного сырья / А.Б. Якимова, А.В. Артемов, А.И. Гомзиков, О.О. Гришанов // Эффективный ответ на современные вызовы с учетом взаимодействия человека и природы, человека и технологий: Материалы XV Международной научно-технической конференции. – Екатеринбург: УГЛТУ, 2024. – С. 776-782.

© Гомзиков А.И. и др., 2024

УДК 541.64

**ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ПОЛИМЕРА НА ПРОЦЕСС
ВЫСВОБОЖДЕНИЯ ЛИДОКАИНА ИЗ ЖИДКИХ
ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ НА ОСНОВЕ НЕКОТОРЫХ
ПОЛИСАХАРИДОВ**

А.В. Исаева, А.С. Шуршина

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Использование природных и искусственных полимеров для создания жидких лекарственных форм имеет долгую историю. С развитием современной фармацевтики, исследования в области использования природных и искусственных полимеров для создания жидких лекарственных форм стали более систематическими. Одними из наиболее известных полимеров, используемых в этой области, является целлюлоза, хитозан и пектин.

Целью данной работы стало изучение влияния концентрации полимера на процесс высвобождения лидокаина (ЛД) из жидких лекарственных форм на основе некоторых полисахаридов. В качестве полисахарида был выбран пектин (ПК), который характеризуется биосовместимостью, бактериостатичностью, биодеградируемостью и т.д.

Методами ИК- и УФ-спектроскопии было показано, что ЛД с ПК образует аддукт реакции посредством водородных связей. Определенное методом мольных отношений значение константы равновесия свидетельствует о том, что полученные аддукты ЛД-ПК могут быть отнесены к соединениям со средней устойчивостью, и, следовательно, могут обеспечить определенный уровень пролонгирования действия лекарственных препаратов за счет закрепления их на полимерной матрице.

Изучение диализ ЛД в водную среду показало, что высвобождение ЛД происходит в течение нескольких часов со скоростью 0,74 %/мин. Добавление ПК в раствор ЛД в воде приводит к уменьшению скорости прохождения ЛД через полупроницаемую мембрану. Пролонгирование высвобождения ЛД в присутствии растворов ПК связана с одной стороны с незначительным повышением вязкости раствора полимера, а с другой - с увеличением количества лекарственного вещества, прочно закрепленного на макромолекулярной цепи. Естественно, что высвобождение ЛД из комплекса с ПК происходит с меньшей скоростью, чем ЛД, не закрепленного на полимерной цепи. Но пролонгирующее влияние вводимого полимера на скорость высвобождения ЛД из раствора имеет место только в определенной области концентраций, а именно в области разбавленных растворов, когда полимерные клубки не соприкасаются друг с другом и не взаимодействуют. В данной концентрационной области повышение содержания полимера в растворе приводит к росту количества комплекса полимер-ЛД.

© Исаева А.В. и др., 2024

УДК 541.64

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА НА ПРОЦЕСС ВЫСВОБОЖДЕНИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ ИЗ ЖИДКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ

Э.Ш. Исмагилова, А.С. Шуршина

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Повышение эффективности и безопасности лекарственных форм, содержащих как новые, так и уже доказавшие свою значимость в клинической практике фармацевтические субстанции, является одним из основных направлений современных исследований в фармацевтической технологии. Наиболее часто применяемой лекарственной формой являются жидкие лекарственные формы (ЖЛФ). Одним из компонентов ЖЛФ выступают полимерные соединения. Применение полимерных производных позволяет на более длительное время задержать лекарство в организме, т. е. пролонгировать его действие; селективно направить в определенные органы или ткани; получить новые лекарственные формы веществ, например, нерастворимые вещества перевести в растворимые или наоборот и т.д. Пролонгирование выхода лекарственного препарата достигается вследствие повышенной вязкости раствора полимера. Более того, используя полимеры с функциональными группами, можно добиться образования соединений полимер-лекарственное вещество типа комплексов или солей. В этом случае, пролонгирующий эффект влияния полимера будет однозначно усилен.

В связи с этим целью данной работы явилось изучение процесса высвобождения лекарственных веществ из ЖЛФ на полимерной основе в области разбавленных растворов. В качестве полимерной основы был выбран поливиниловый спирт, который обладает высокой биосовместимостью и гидрофильностью и отсутствием токсичности. В качестве лекарственных веществ использовали антибиотик I поколения, обладающий широким спектром микробного действия – цефазолин (ЦФЗ).

В ходе изучения процесса высвобождения ЦФЗ из ЖЛФ через полупроницаемую мембрану было показано, что при постоянном молярном соотношении 1:1 скорость высвобождения уменьшается с увеличением концентрации полимера. Это может быть объяснено, во-первых, увеличением вязкости раствора полимера и возникающими, в связи с этим диффузионными затруднениями в выходе ЛВ, а во-вторых, увеличением количества ЦФЗ, закрепленного на полимерной матрице.

Таким образом, установлено, что, если ЖЛФ представляет собой разбавленный раствор полимера, повышение концентрации полимера в растворе сопровождается уменьшением скорости высвобождения лекарственного вещества.

© Исмагилова Э.Ш. и др., 2024

**ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОКСИМЕТИЛАРАЦИЛА
С ЦИКЛОДЕКСТРИНАМИ****А.Р. Латыпова**

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Известно, что оксиметиурацил (ОМУ) обладает разными видами биологической активности и малой токсичностью. Однако данное соединение плохо растворяется в воде и имеет ряд побочных действий, что ограничивает возможность его использования в медицине. Решением этой проблемы может стать комплексообразование оксиметиурацила с циклодекстринами (ЦД) [1-3].

Методом УФ-спектроскопии установлено, что в интервале температур 296 – 321 К в разбавленных водных растворах ОМУ образует устойчивые комплексные соединения с α - (I), β - (II) и γ - (III) ЦД (константы равновесия $K \sim 10^3 \div 10^4$ л/моль). Изучено влияние температуры на устойчивость образующихся соединений и определены термодинамические параметры комплексообразования.

О взаимодействии оксиметиурацила с ЦД свидетельствуют и данные ИК-спектроскопии. Спектр исходного ОМУ характеризуется полосами поглощения в области 1712 – 1226 см^{-1} , которые относятся к колебаниям связей пиримидинового кольца и деформационным колебаниям метильной группы. В области 3280 – 2790 см^{-1} наблюдается уширенная полоса поглощения валентных колебаний N – H и O – H связей. В ИК-спектрах ЦД стоит выделить полосы валентных колебаний гидроксильных групп и связей C – O фрагмента C – OH, способных участвовать в комплексообразовании с оксиметиурацилом (α -ЦД: 3356 и 1026 см^{-1} ; β -ЦД: 3361 и 1031 см^{-1} ; γ -ЦД: 3310 и 1018 см^{-1}). В спектрах комплексов I – III наблюдается смещение данных полос на 7 – 38 и 2 – 7 см^{-1} , соответственно. Полосы, отвечающие валентным колебаниям карбонильных групп молекулы ОМУ, в комплексных соединениях I – III смещаются на 6 – 12 см^{-1} . Данные изменения в спектрах вызваны появлением межмолекулярных водородных связей при взаимодействии 5-гидрокси-6-метиурацила с α -, β - и γ -циклодекстринами.

Список использованных источников

1. Jansook P., Ogawa N., Loftsson T. // Int. J. Pharm. 2018. Vol. 535, No. 1. Pp. 272-284.
2. Ibrakova N.F., Kutlugildina G.G., Zimin Yu.S. // Periodico Tche Quimica. 2020. Vol. 17, No. 36. Pp. 302-314.
3. Borisova N.S., Gimadieva A.R., Zimin Yu.S., Murzakova L.I. BIO Web of Conferences 2023, 65.

© Латыпова А.Р., 2024

**ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ПОЛИМЕРА НА ПРОЦЕСС
ВЫСВОБОЖДЕНИЯ ДИОКСИДИНА ИЗ ЖИДКИХ
ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ НА ОСНОВЕ НАТРИЕВОЙ СОЛИ
КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ**

Э.С. Уельданова, А.С. Шуршина, Е.И. Кулиш

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Пролонгировать действие лекарственных веществ (ЛВ) возможно несколькими известными методами: физиологическим, физическим, технологическим, химическим и др.

Физиологический метод основан на использовании веществ, замедляющих всасывание, инактивацию и выделение ЛВ из организма. Физический метод пролонгирования ЛВ основан на покрытии оболочками кристаллических частиц ЛВ, гранул, таблеток, образовании нерастворимых основ, микрокапсулировании и т.д.

Технологический метод пролонгирования является наиболее изученным. В средние века пилюли покрывали золотом или серебром, добиваясь более продолжительного эффекта активного начала. Принцип пролонгирования заключается в изменении скорости растворения и скорости диффузии, добиться которого можно используя полимерные производные ЛВ и варьируя параметры полимерной матрицы.

В нашей работе использовался технологический прием, заключающийся в повышении концентрации полимера в растворе. В качестве полимера использовалась натриевая соль карбоксиметилцеллюлозы (КМЦ), лекарственное вещество – диоксидин (ДО).

С одной стороны, повышение концентрации КМЦ в растворе приводит к повышению вязкости, что должно вызывать диффузионные затруднения для высвобождения ДО, и как следствие, уменьшение скорости высвобождения. Но в зависимости от концентрационного режима (разбавленный или полуразбавленный) макромолекулы по-разному себя ведут в растворе, что не может не сказаться на взаимодействии в системе КМЦ-ДО.

В ходе выполнения работ было показано, что увеличение концентрации КМЦ в растворе в области разбавленных растворов позволяет снизить скорость высвобождения ДО в 16 раз. При переходе к полуразбавленным растворам с увеличением концентрации КМЦ наблюдается и увеличение скорости высвобождения ДО.

Таким образом, варьируя концентрацию полимера в растворе можно управлять скоростью высвобождения ЛВ в широком интервале (как ускорять, так и замедлять).

© Уельданова Э.С. и др., 2024

СОДЕРЖАНИЕ

СЕКЦИЯ № 1. СИНТЕЗ И МОДИФИКАЦИЯ ПОЛИМЕРОВ

Исследование антимикробных свойств эпоксидных композиций, модифицированных эпоксисодержащими винилоксициклопропанами (Р.З. Шахназарли) 3

Условия получения и свойства функционализированного полимерного наполнителя для эластомерных композиций (А. Акмырадов, М.А. Ибрагимов, А.П. Рахматуллина) 4

Полимеры с молекулярным отпечатком из углеотходов (О.В. Арнт, А.Х. Жакина, Е.П. Василец, А. Элжанкызы) 5

Влияние концентрации катализатора на выход окиси пропилена в процессе эпоксидирования пропилена гидропероксидом изопропилбензола (И.М. Багавеев, Н.В. Улитин, М.А. Бочков, Х.Э. Харлампиди, К.А. Терещенко, Д.А. Шиян, С.Н. Тунцева, Т.Л. Пучкова)..... 6

Влияние температуры синтеза на свойства полиамида-6 (М.В. Баранников) 7

Использование биоугля в качестве черного пигмента (Г.М. Бикбулатова, А.Н. Грачев, Ф.С. Шарифуллин) 8

Фотополимеризация метилметакрилата с участием фенотиазиновых красителей (И.Л. Боброва, О.С. Лизякина, Л.Б. Ваганова, Д.Ф. Гришин) 9

Анализ кинетики радикально-координационной полимеризации метилметакрилата в присутствии титаноцендихлорида (В.П. Бондаренко, Д.А. Шиян, А.А. Осипов, А.В. Беккер, К.А. Терещенко, Н.В. Улитин, С.В. Колесов) 10

Неподвижные фазы на основе сетчатых структур (Ю.Ю. Гайнуллина). 12

Применение 2-этилгексаноатов 2 и 12 групп в окислении этилбензола (И.Н. Залылиев, Н.А. Новиков, Я.Л. Люлинская, Н.В. Улитин, К.А. Терещенко, Д.А. Шиян, Н.М. Нуруллина, С.Н. Тунцева, Т.Л. Пучкова, Х.Э. Харлампиди) 13

Каталитические системы для контролируемой радикальной полимеризации на основе новых карборановых комплексов рутения с р-о-р-лигандами (Н.А. Князева, А.М. Зимина).....	15
Синтез полимерных ионных жидкостей на основе акриламида (В.Д. Коробова, Н.Л. Печникова, Т.А. Агеева)	16
Пластификатор диизонониладипинат, как альтернатива диоктиладипинату (Р.Ф. Нафикова, И.Н. Королев, Р.М. Ахметханов).....	17
Полифункциональное воздействие тетрахлорида титана на растительные полимеры (Л.А. Кувшинова).....	19
Контролируемая радикальная (со)полимеризация акрилонитрила со стиролом в условиях <i>ARGET ATRP</i> (Ю.А. Кузнецова, А.В. Жигулева, И.Д. Гришин).....	21
Синтез полимеров, содержащих анилиновые и индольные фрагменты (Л.Р. Латыпова, Г.С. Усманова, М. Р. Азнабаева).....	23
Полимеризация метилметакрилата с участием феназина в условиях облучения (О.С. Лизякина, Л.Б. Ваганова, Д.Ф. Гришин).....	25
Привитая полимеризация метакриловой кислоты на облученную пленку полиэтилена (А.С. Обищцер, Е.Ю. Швецова, Т.А. Байбурдов).....	26
Влияние типа инициатора на кинетику радикально-координационной полимеризации метилметакрилата в присутствии цирконоцандихлорида (А.А. Осипов, В.П. Бондаренко, Д.А. Шиян, Э.М. Сабитова, К.А. Терещенко, Н.В. Улитин, С.В. Колесов)	28
Синтез акрилового гидрогеля с комплексом ортоборная кислота-глицерин (А.В. Скорлуханова, П.О. Куцев)	30
Получение и свойства упаковочных материалов с антибактериальными свойствами на основе полилактида и наночастиц серебра (Б.Р. Таусарова, М.Ш. Сулейменова).....	31
Влияние модификаторов нефтяного происхождения на процесс термолитиза крекинг-остатка (Р.Н.Ширяева, А.А.Амангельда, С.У.Ягудина)	33

Оценка уровня содержания аммиака за счёт изменения электропроводности тонкопленочных материалов (*Т.Б. Терезулов*) 35

Плѐнки на основе хитозана и альгината модифицированных фрагментами тиолов и их влияние на гемолиз эритроцитов человека *in vitro* (*М.А. Торлопов, Н.Н. Дрозд, Е.В. Удоротина*) 36

О влиянии межмолекулярных взаимодействий на температуру стеклования органических гомополимеров (*Г.Р. Шадрина, А.А. Балдинов, Н.В. Улитин, В.И. Анисимова, А.Д. Лифанов, Д.А. Шиян, К.А. Терещенко, И.С. Родионов, М.Г. Казанская, Е.С. Воробьев, И.А. Суворова*)..... 38

Влияние спиртов на прививку акриловой кислоты на облученную полиэтиленовую пленку (*Е.Ю. Швецова, А.С. Обишцер, Т.А. Байбурдов*)..... 41

СЕКЦИЯ № 2. СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ПРИРОДНЫХ И СИНТЕТИЧЕСКИХ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Изучение физико-механических свойств плѐнок на основе пектина (*С.В. Саликаева, Е.И. Кулиш*)..... 43

Флокулирующие свойства магнитных флокулянтов (*А.А. Алексева, Л.Р. Дюкина, Е.И. Жданова, Э.Б. Цатурян, В.Е. Проскурина*) 44

О реологическом поведении смесей *n*-сукцинилхитозана и карбоксиметилцеллюлозы в присутствии глицерина (*М.В. Базунова, Б.Ф. Алмаев*)..... 45

Анализ разложения энергии парного взаимодействия в системах термопласт-алюминий (*В.И. Анисимова, А.А. Балдинов, И.С. Родионов, Н.В. Улитин, И.А. Суворова, А.В. Полищук, К.А. Терещенко, Д.А. Шиян, И.А. Старостина, О.В. Стоянов, А.О. Софьин*) 48

Вискозиметрические свойства системы ксантан–поливиниловый спирт (*Д.А. Антипов, О.Н. Малинкина, А.Б. Шиповская*)..... 49

Изучение структуры пористых пластин на основе смесей натриевых солей *n*-сукцинилхитозана и карбоксиметилцеллюлозы (*М.В. Базунова, Б.Ф. Алмаев*)..... 51

Особенности преподавания раздела «Молекулярная физика» студентам направления 18.03.01 «Химическая технология», профиль подготовки «Технология и переработка полимеров» (М.В. Базунова, Г.И. Заманова).... 53

Физико-механические характеристики композиций полилактид-лекарственное вещество (Э.Р. Бакирова, А.Б. Сунаргулов, Л.Г. Гарипова)..... 55

Реологические параметры композиций полилактид-лекарственное вещество (А.Б. Сунаргулов, Э.Р. Бакирова, Л.Г. Гарипова)..... 56

Экспериментальное и теоретическое исследование адгезионного взаимодействия в системах термопласт-алюминий: кислотно-основные свойства и квантовая химия (А.А. Балдинов, В.И. Анисимова, И.С. Родионов, Н.В. Улитин, И.А. Суворова, А.В. Полищук, Д.А. Шиян, К.А. Терещенко, И.А. Старостина, О.В. Стоянов, А.О. Софьин) 57

Деконволюция ммр полиизопрена (А. И. Ершова) 58

Изучение влияния цефазолина на вязкость пектина (А.А. Минагина, Р.Ю. Лаздин)..... 59

Изучение закономерностей генерирования и гибели радикалов при окислении соолигомера п-бензохинона с 4-винилпиридином (М.К. Мирмехтиева, Г.С. Гусейнова, Б.А. Мамедов, М.Р. Рагимова, М.М. Ибрагимова)..... 60

О влиянии присутствия лекарственного вещества электролитной природы на агрегационные процессы в растворах полисахаридов и их смесей (К.В. Набутова, М.В. Базунова, Г.С. Яхина)..... 61

Когезионная прочность полимеров (А.И. Нигматуллина, И.В. Тришкина, Е.О. Пуганова) 63

Исследование адгезионных взаимодействий в системе термопласт-алюминий: молекулярная динамика (А.В. Полищук, И.А. Суворова, В.И. Анисимова, А.А. Балдинов, И.С. Родионов, Н.В. Улитин, Д.А. Шиян, К.А. Терещенко, И.А. Старостина, О.В. Стоянов, А.О. Софьин)..... 65

Вискозиметрические свойства системы хитозан–глюкоманнан (Д.В. Приданкина, О.Н. Малинкина, А.Б. Шиповская)..... 66

Роль салициловой кислоты при действии меди, цинка и кадмия на растения пшеницы (С.Р. Рахматуллина) 69

Парциальная плотность состояний орбиталей в системах термопласт-алюминий (И.С. Родионов, В.И. Анисимова, А.А. Балдинов, Н.В. Улитин, И.А. Суворова, А.В. Полищук, Д.А. Шиян, К.А. Терещенко, И.А. Старостина, О.В. Стоянов, А.О. Софьин) 70

Влияние сорбционных свойств сверхсшитого полистирола на удерживание производных хинолина в оф вэжх (С.А. Рыжкин, С.В. Курбатова) 71

Структурные исследования водорастворимых пектиновых полисахаридов и арабиногалактановых белков из древесной зелени (pinus sylvéstris) (Е. Н. Макарова, Е. Г. Шахматов) 73

Анализ факторов, влияющих на температуру стеклования органических гомополимеров, с привлечением машинного обучения (Г.Р. Шадрина, Н.В. Улитин, А.Д. Лифанов, К.А. Терещенко, Д.А. Шиян, М.Г. Казанская, А.А. Балдинов, И.С. Родионов, Е.С. Воробьев) 75

Поглощение и высвобождение сульфата и бисглицината марганца акриловым гидрогелем (А.И. Юткина, П.О. Куцев) 77

СЕКЦИЯ № 3. ПЕРЕРАБОТКА ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ И ПОЛИМЕРНЫЕ КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ

Изучение реологических свойств композиций на основе полилактида с амикацином и хитозаном (А.И. Казыргалин, М.Р. Якупов, Э.Р. Бакирова) .. 79

Реологические параметры композиций на основе поликапролактона с амикацином и хитозаном (М.Р. Якупов, А.И. Казыргалин, Э.Р. Бакирова) .. 80

Об оптимизации способа получения магнитопластов на основе полиэтилена низкой плотности и сплава $nd-fe-b$ (Б.Ф. Алмаев, В.В. Калеева, М.В. Базунова) 81

Получение и исследование свойств соолигомеров 1-нафтиламина с 2-нафтолом и их композиции с термопластами и бутилкаучуком (Г.Н. Абсазде, Р.А. Ахмедова, Д.Н. Алиева, Ч.О. Исмайлова, Б.А. Мамедов) 84

Влияние цинксодержащих наночастиц на свойства композитов на основе изотаксического полипропилена, содержащего смесь фуллеренов C _{60/70} (А. И. Дунямалиева, Н. И. Курбанова, Э.Б.Зейналов)	85
Влияние природы вулканизирующей системы на упрочняющую эффективность наноразмерного оксида кремния в термопластичном вулканизате на основе полипропилена и этиленпропиленового каучука (А.Е. Заикин)	87
Исследование свойств нанокompозитов на основе смеси полиэтиленов высокого и низкого давления с кобальтсодержащими наноапполннителями (Г.Г.Мамедова, Н. И. Курбанов)	89
Получение и исследование свойств металлуглеродных нанокompозитов на основе полиэтилена низкого давления (Н.А.Мирзоева, Н.И. Курбанова)	90
Влияние содержания модифицированного аминного отвердителя хт-1046 на электретьные характеристики и твердость материалов на основе deg-331 (Т.Т. Мусаев, Е.Н. Мочалова, М.Ф. Галиханов).....	92
Физико-механические свойства статистического сополимера полипропилена наполненного гидроксидом алюминия (Ф.А. Мустафаева, Н.Т. Кахраманов).....	93
Изучение свойств композиционных материалов на основе синтетического каучука этилен-пропиленового тройного (А.А. Раслан, Т.Р. Просочкина, Э.Р. Атнабаева).....	95
Разработка гидрогелей на основе сукцинила хитозана в качестве биочернил для 3d-печати (Д.Е. Рыбченко, Е.И. Кулиш)	96
Модификация наполнителей и полимерных материалов ионными жидкостями (О.И. Сидоров, А.Н. Осавчук, Д.А. Федоров)	97
Влияние ультразвуковой обработки на физико-механические и реологические свойства полиолефиновых смесей (И.С. Твeрeтннкова, И.А. Кириш, Д.Д. Каплуненко, М.Д. Сонина, К.В. Гладкова).....	99
Подходы к регулированию упругих свойств гелей на основе пектина (М.Е. Брызгалова, М.А. Афанасьева, Р.Ю. Лаздин)	100

Исследование термокаталитического превращения смеси полипропилена и моторного масла в присутствии катализаторов, полученных на основе глинистого материала путем механоактивации (*Л.В. Фурда, О.Г. Исакулов, Д.Е. Смальченко, О.Е. Лебедева*) 101

СЕКЦИЯ № 4. ДИЗАЙН ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Особенности высвобождения лекарственных веществ из жидких лекарственных форм (*Л.Д. Бадыркеева, А.С. Шуришина*) 103

Влияние концентрации хитозана на процесс высвобождения лекарственных веществ из жидких лекарственных форм (*Л.Р. Валиахметова, А.С. Шуришина, Р.Ю. Лаздин*)..... 104

Способ получения противоязвенного комплекса на основе 5-аминосалициловой кислоты и окисленной фракции яблочного пектина (*Ю.А. Васильева*) 105

Цветовые характеристики пластиков без применения связующих веществ на основе древесины бука (*А.И. Гомзигов, А.В. Артёмов*)..... 106

Влияние концентрации полимера на процесс высвобождения лидокаина из жидких лекарственных форм на основе некоторых полисахаридов (*А.В. Исаева, А.С. Шуришина*) 108

Влияние концентрации поливинилового спирта на процесс высвобождения лекарственных веществ из жидких лекарственных форм (*Э.Ш. Исмаилова, А.С. Шуришина*) 109

Изучение взаимодействия оксиметилурацила с циклодекстринами (*А.Р. Латылова*) 110

Влияние концентрации полимера на процесс высвобождения диоксидина из жидких лекарственных форм на основе натриевой соли карбоксиметилцеллюлозы (*Э.С. Уельданова, А.С. Шуришина, Е.И. Кулиш*)..... 111

При подготовке электронного издания использовались следующие программные средства:

- Adobe Acrobat – текстовый редактор;
- Microsoft Word – текстовый редактор.

Все права защищены. Книга или любая ее часть не может быть скопирована, воспроизведена в электронной или механической форме, в виде фотокопии, записи в память ЭВМ, репродукции или каким-либо иным способом, а также использована в любой информационной системе без получения разрешения от издателя. Копирование, воспроизведение и иное использование книги или ее части без согласия издателя является незаконным и влечет уголовную, административную и гражданскую ответственность.

Научное издание

**ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ СИНТЕЗА,
МОДИФИКАЦИИ И ПЕРЕРАБОТКИ ПОЛИМЕРОВ**

*Тезисы докладов
IX Всероссийской (заочной)
научной конференции
(г. Уфа, 3 – 4 июня 2024 г.)*

Электронное издание сетевого доступа

*За достоверность информации, изложенной в статьях,
ответственность несут авторы.*

Статьи публикуются в авторской редакции

Подписано к использованию 16.07.2024 г.
Гарнитура «Times New Roman». Объем 7,83 Мб.
Заказ 88.

*ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий»
450008, Башкортостан, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.*

Тел.: +7-908-35-05-007
e-mail: ric-bdu@yandex.ru