

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АЛЬ-ФАРАБИ
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК



ХИМИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

МАТЕРИАЛЫ
III МЕЖДУНАРОДНОЙ РОССИЙСКО-КАЗАХСТАНСКОЙ
НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ

г. Новосибирск, Россия
27–29 апреля 2017 г.



НОВОСИБИРСК
2017

МРСА и РЭМ синтезированных люминофоров показывает равномерное распределение частиц по поверхности образца. Это важно учитывать при синтезе люминофоров, поскольку от этого зависят люминесцентные характеристики материалов. Люминофоры, полученные при помощи микроволнового воздействия, имеют меньшую интенсивность излучения по сравнению с образцами, полученными с использованием термической сушки геля, кроме того происходит изменение соотношения интенсивности основных полос излучения, что свидетельствует о структурных различиях в синтезированных образцах.

Научный руководитель: Мишеннина Людмила Николаевна, к.х.н., доцент.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ПОВЕДЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ СЕРНОЙ КИСЛОТЫ И СУЛЬФАТА ЖЕЛЕЗА(III) НА ПОВЕРХНОСТИ КЛАСТЕРА СУЛЬФИДНОГО МИНЕРАЛА МЕДИ

Ажигулова Р.Н., Жусупова А.К.

*Казахский национальный университет имени аль-Фараби, г. Алматы, Казахстан
arn19810506@gmail.com*

Извлечение металлов при выщелачивании сульфидных руд происходит медленно, в некоторых случаях продолжительность выщелачивания составляет 2-3 года, так как выщелачивание зависит от условий интенсивного окисления сульфидов. Капитальные затраты на выщелачивание сульфидных руд велики, управление параметрами окисления сложно, дорого и не всегда эффективно. Вследствие этого большую актуальность приобретают исследования закономерностей окисления этих реагентов квантово-химическими методами, поскольку такие исследования, наряду с изучением кинетики их окисления, позволяют выбирать оптимальные режимы их получения с целью улучшения их реакционную способность. Целью настоящей работы было проведение квантово-химического расчета изменения строения молекулы серной кислоты и сульфата железа(III) в процессе адсорбирования на поверхности сульфидных минералов. Геометрическая структура и квантово-химические характеристики реагента-окислителя и комплекса кластер минерал меди – окислителя до настоящего времени не определялись.

Проведен квантово-химический расчет поведения молекулы серной кислоты и сульфата железа(III) на поверхности халькопирита и халькозина в рамках теории функционала плотности (DFT). Определены энергетические минимумы по геометрическим координатам молекулы серной кислоты и сульфата железа(III), соответствующие основным и метастабильным состояниям, построены кластеры сульфидных минералов халькопирита и халькозина. Проведен орбитальный анализ системы окислитель-минерал и показана пере-

стройка орбиталей при взаимодействии молекулы серной кислоты и сульфата железа(III).

Квантово-химические расчеты были произведены с помощью программы Gaussian 09w. Кластер халькопирита и халькозина соответствовал кристаллической решетке, его структура с молекулой H_2SO_4 и $Fe_2(SO_4)_3$ на поверхности была оптимизирована методом DFT (B3LYP) (теория функционала плотности).

С использованием пакета программ рассчитаны характеристики и параметры молекул: теплота образования, полная энергия, потенциал ионизации, энергия высшей, заполненной молекулярной орбитали - HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital), энергия низшей, свободной (незаполненной) молекулярной орбитали - LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital), длины связей между атомами, частичные заряды атомов и молекулярных орбиталей, заселенность электронами; дипольный момент молекул и др.

Геометрические и энергетические характеристики структур молекул окислителей

Окислитель	Теплота образования, ккал/моль	Полная энергия, эВ	Энергия электронов, эВ	Потенциал ионизации, эВ
H_2SO_4	-166,86	-1285,42	-3587,51	11,29
$Fe_2(SO_4)_3$	-224,97	-4661,14	-22123,08	9,71

На основании сравнения длин связей, образующихся при комплексообразовании в системах сульфид меди – окислитель, а также сопоставлением разницы между ВЗМО и НСМО оценен характер новых связей, образующихся в комплексах. Показано, что практически все эти связи в комплексах кластеров сульфидных минералов с окислителями имеют либо ионный характер, либо имеют физическую природу, обусловленную действием вандерваальсовых сил. Наибольшая прочность связей между реакционными центрами участников процесса в случае систем кластера халькопирита с окислителями характерна для его системы с $Fe_2(SO_4)_3$. Поведение молекул в химических реакциях характеризуют потенциал ионизации и сродство к электрону. В соответствии с теоремой Купманса энергия HOMO молекулы приблизительно равна потенциалу ионизации, взятому с обратным знаком, а энергия LUMO – сродству к электрону. Более высокая окислительная активность $Fe_2(SO_4)_3$ по сравнению с серной кислотой может объясняться более высоким частичным зарядом атома железа в молекуле $Fe_2(SO_4)_3$ и возможно менее прочной связью атома железа с атомами кислорода.

Вопросы взаимодействия окислителя с поверхностями минералов занимают видное место ввиду их большой практической значимости, поэтому полученные в данном исследовании результаты позволят углубить знания в об-

ласти механизма действия окислителей и послужит в дальнейшем основой для разработки научных принципов оценки их реакционной способности, а, следовательно, и оптимального их подбора.

4-АЛКИНИЛПИПЕРИДОЛЫ В СИНТЕЗЕ НОВЫХ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Пралнев К.Д.¹, Исакова Т.К.², Жумакова С.С.³,
Бимурзаева Т.Г.⁴, Сейлханов Т.М.⁵

¹Институт химических наук им. А.Б. Бектурова, г. Алматы, Казахстан

²Казахский национальный исследовательский технический университет
им. К.И. Сатпаева, г. Алматы, Казахстан

³Казахстанско-Британский технический университет, г. Алматы, Казахстан

⁴Казахский национальный педагогический университет им. Абая, г. Алматы,
Казахстан

⁵Кокшетауский государственный университет им. Ш. Уалиханова, г. Кокшетау,
Казахстан

tytyshyk53@mail.ru

Одним из важнейших достижений в разработке биологически активных соединений явилась структурная модификация пиперидинового кольца, ставшая основой систематического поиска лекарственных средств среди производных 1-(2-этокситил)пиперидина. Здесь возможны подходы – синтез большого числа производных, или направленный поиск биологически активных соединений, основанный на анализе взаимосвязи структура–активность. Понятно, что оба направления тесно переплетаются, поскольку направленный поиск потенциально биологически активных структур базируется на анализе данных активности синтезированных веществ. На этом принципе функционируют компьютерные программы, прогнозирующие фармакологическую активность соединений. Однако они не могут всесторонне учесть все внутренние связи, имеющие место между веществом и живым организмом.

Для исследования влияния заместителей на фармакологическую активность возникает необходимость разработки методов введения функциональных групп в пиперидиновую систему. Поскольку структура фармакологически активных тесно связана с их обезболивающей активностью, за отправную точку настоящего исследования взяты следующие положения: ацетиленовые соединения проявляют высокую биологическую активность и низкую токсичность и благодаря наличию тройной связи являются синтонами новых полифункциональных веществ с широким спектром практически полезных свойств [1–4].

Конденсацию 1-(2-этокситил)-4-оксопиперидина (1) с алкинилами-1 проводили в присутствии едкого калия в дioxане, после кислой (для удаления