



ХИМИЯ В РОССИИ

В номере:

- Пленум РХО им. Д.И. Менделеева
- План работы РХО им. Д.И. Менделеева на 2010 год
- РХТУ им. Д.И. Менделеева - участник выставки «Химия-2009»
- Первая Международная конференция РХО им. Д. И. Менделеева «Энерго- и ресурсосберегающие технологии в химической и нефтехимической промышленности»
- Премия имени В.Н. Ипатьева
- «Левинтерские чтения-2009»
- Секция «Физическая и коллоидная химия». Отчет о работе в 2009 году

5-6

сентябрь-декабрь
2009

Учредитель:

Российское химическое общество
им Д.И. Менделеева

Зарегистрирован в Министерстве РФ
по делам печати, телерадиовещания
и средств массовых коммуникаций
Свидетельство о регистрации СМИ
ПИ №77-3634 от 09.06.2000

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ:

Председатель:

П.Д. САРКИСОВ, академик РАН
(Президиум Правления РХО),
М.В. АЛФИМОВ, академик РАН,
С.В. ГОЛУБКОВ, профессор (АО «Росхимнефть»),
А.И. КОНОВАЛОВ, академик РАН (Президиум Прав-
ления РХО),
Б.Ф. МЯСОЕДОВ, академик РАН (Президиум РАН),
А.А. СОЛОВЬЯНОВ, профессор (МГУИЭ)
А.Г. СТОППЕ, к.х.н. (Совет безопасности РФ)

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

Главный редактор

В.Н. ПАРМОН, академик РАН (Президиум Правления,
Новосибирское отд. РХО)

В.П. БАРАБАНОВ, чл.-корр. АНТ (Президиум
Правления, РХО Татарстана),

И.Б. БЕСФАМИЛЬНЫЙ,

С.В. ИВАНОВ,

П.В. КЛАССЕН, д.т.н. (НИУИФ),

Н.Р. КОСИНОВА, к.б.н. (Президиум
Правления РХО),

В.Е. КОЧУРИХИН, профессор (Президиум УМО по
образованию в области химической технологии),

И.И. КУЛИКОВ,

Н.Н. КУЛОВ, профессор (Президиум Правления РХО),

Н.З. ЛЯХОВ, чл.-корр. РАН (Президиум
Правления РХО),

Х.А. НЕВМЯТУЛЛИНА, к.т.н. (Ответственный
секретарь)

Б.И. ПОКРОВСКИЙ, к.х.н. (ИЦ химфака МГУ),

А.В. ПУТИЛОВ, профессор,

А.И. РУСАНОВ, академик РАН (Президиум Правления,
Санкт-Петербургское отд. РХО),

Ю.А. УСТЫНЮК, профессор (НП «Содействие

химическому и экологическому образованию»),

В.В. ЩЕРБАКОВ, профессор (Заместитель главного
редактора)

Издатели:

РХТУ им. Д.И. Менделеева,

РХО им. Д.И. Менделеева

Зав. редакцией: М.Ю. Соколова

Адрес для переписки:

105005 Москва, Лефортовский пер., д. 8, стр. 1

Редакция бюллетеня РХО «Химия в России»

e-mail: chemrus@muctr.ru, chem2002@inbox.ru

Телефон / факс: (499) 265-69-57

СОДЕРЖАНИЕ

В РХО ИМ. Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА

Косинова Н.Р. - Пленум РХО им.

Д.И. Менделеева 3

План работы РХО им. Д.И. Менделеева

на 2010 год..... 3

Сиротина М.А. - Российский Химико-технологический
университет им. Д.И. Менделеева -

участник выставки «Химия-2009» 6

Невмятуллина Х.А. - Первая Международная

конференция РХО им. Д.И. Менделеева

«Энерго- и ресурсосберегающие технологии

в химической и нефтехимической промышленности» 8

ПРЕМИИ, ГРАНТЫ

Голосман Е.З. - Премия имени В.Н. Ипатьева..... 12

НАУКА

Мишустин А.И. - Развитие молекулярного

подхода к расчету констант стабильности

внутрисферных комплексов катионов

металлов 14

Моисеев И.К. - «Левинтерские чтения - 2009» 21

В РЕГИОНАЛЬНЫХ ОТДЕЛЕНИЯХ РХО

Вихарев А.В. - В Алтайском отделении РХО..... 23

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ СЕКЦИИ РХО

Смирнова Н.А. - Отчет о работе секции

«Физическая и коллоидная химия»

за 2009 год..... 24

ВЫСТАВКИ, КОНФЕРЕНЦИИ

3rd EuChems chemistry Congress

Chemistry - the Creative Force..... 27

Пленум РХО им.Д.И.Менделеева

17 декабря 2009 г. в Москве состоялся Пленум Российского химического общества им. Д.И. Менделеева. В зале присутствовало более 100 человек, среди них академики Ю.А. Золотов Н.Т. Кузнецов, И.И. Моисеев, П.Д. Саркисов, А.И. Русанов, руководители институтов РАН, ВУЗов, представители региональных отделений Общества: Санкт-Петербургского, Алтайского, Ивановского. Нижегородского, Красноярского, Волгоградского, Бурятского, Новосибирского Чувашского, Татарстана, республики Коми.

Повестка дня Пленума.

1. О проведении Международного года химии в 2011 году. - П.Д. Саркисов.
2. История химической науки в России. - А.И. Русанов.
3. Утверждение плана Общества на 2010 г.
4. О VII отчетно-выборном съезде РХО им. Д.И. Менделеева.
5. Награждение Почетным знаком «За заслуги перед РХО».

Президент Общества академик П.Д. Саркисов выступил с сообщением о проведении объявленного ООН Международного года химии в 2011 году.

В обсуждении приняли участие профессор В.П. Барабанов, профессор Е.З. Голосман, член-корреспондент РАН А. В. Кучин, член-корреспондент

РАН О. И. Койфман, Л.А. Егельская, студенты РХТУ им. Д. И. Менделеева

Пленум утвердил план мероприятий по проведению года химии в России в 2011 г. и обратился к Российскому союзу химиков и Национальному комитету российских химиков внести предложения в план мероприятий.

Участники Пленума с большим интересом выслушали доклад академика А.И.Русанова «История химической науки в России» (доклад будет опубликован в ближайшее время).

Пленум утвердил план работы РХО им. Д.И. Менделеева на 2011 год.

Пленум постановил провести VII отчетно-выборный съезд Российского химического общества им. Д.И. Менделеева в 2011 году, приурочив его к XIX Менделеевскому съезду по общей и прикладной химии.

Пленум завершил свою работу награждением Почетным знаком «За заслуги перед РХО» члена президиума правления Общества член-корреспондента РАН О.И. Койфмана и ученого секретаря РХО им Д.И. Менделеева Н.Р. Косиновой.

*Ученый секретарь РХО
к.б.н. Н.Р. Косинова*

План работы РХО им. Д.И. Менделеева на 2010 год

№ п/п	Наименование мероприятия	Время и место проведения	Организации, ответственные за проведение
1	<i>Мероприятия, посвященные подготовке проведения года химии в 2011 г.</i>		
1.1	Подготовка проведения XIX Менделеевского съезда по общей и прикладной химии в 2011 г.	В течение года	Российское химическое общество им. Д. И. Менделеева, Российская академия наук
1.2	Пленум РХО им. Д.И. Менделеева	ноябрь-декабрь, Москва	Российское химическое общество им. Д. И. Менделеева
1.3	Создание сайта chemistry2011.ru — копии зарубежного chemistry2011.org; освещение проектов, конкурсов, событий в рамках празднования года химии.	В течение года	RCC Group, Российское химическое общество им. Д. И. Менделеева
1.4	Подготовка и издание научно-популярной брошюры «Химия - наша жизнь»		Российское химическое общество им. Д. И. Менделеева
1.5	Подготовка и издание буклета о химической промышленности		Российский союз химиков, Российское химическое общество им.Д.И.Менделеева
2	<i>Научно-техническая деятельность</i>		
2.1	Всероссийская научно-техническая конференция «Приоритетные направления развития науки и технологий»	январь, Тула	Тульское отд. РХО им. Д.И.Менделеева
2.2	66-е Менделеевское чтение	февраль, Санкт-Петербург	С.-Петербургское отд. РХО им. Д.И. Менделеева
2.3	17-е региональные Каргинские чтения	март, Тверь	ТГУ, Тверское отд. РХО им. Д.И. Менделеева
2.4	Научно-практическая конференция учителей химии «Наша новая школа»	март, Самара	СамГТУ, Самарское отделение РХО им. Д.И. Менделеева,

№ п/п	Наименование мероприятия	Время и место проведения	Организации, ответственные за проведение
2.5	Всероссийская конференция-школа «Идеи и наследие А.Е.Фаворского в органической и металлорганической химии XXI века», посвященная 150-летию со дня рождения А.Е.Фаворского	март, Санкт-Петербург	Министерство Образования и Науки Самарской области С.-Петербургское отд.РХО им. Д.И. Менделеева, РАН, СПбГУ
2.6	Международный научно-практический симпозиум «Современные проблемы методического и информационного обеспечения высшего образования»	март, Тула	Тульское отд. РХО им.Д.И.Менделеева
2.7	VII Международная конференция «Покрывтия и обработка поверхности»	март, Москва	РХО им. Д.И. Менделеева, РХТУ им. Д.И. Менделеева
2.8	VIII Региональная научная студенческая конференция с международным участием «Фундаментальные науки - специалисту нового века» (в рамках областного фестиваля «Молодая наука»)	апрель, Иваново	ИГХТУ, Ивановское отд. РХО им. Д.И. Менделеева
2.9	Конкурс научных работ по химии и химической технологии в рамках IX Международной молодежной научно-технической конференции «Будущее технической науки»	май, Н.Новгород	Нижегородское отд. РХО им. Д.И. Менделеева
2.10	IV региональная научно-практическая конференция «Химическая наука и образование Красноярья»	май, Красноярск	
2.11	Всероссийская научно-техническая конференция «Современные наукоемкие технологии: теория, эксперимент и практические результаты»	июнь, Тула	Тульское отд. РХО им. Д.И. Менделеева
2.12	Первая конференция серии ChemWasteChem: «Химия и полная переработка биомассы леса»;	июнь, Санкт-Петербург	С.-Петербургское отд. РХО им. Д.И. Менделеева, РФФИ, Федеральное агентство по образованию, Институт химии Коми НЦ УрО РАН
2.13	VI Всероссийская конференция «Химия и технология растительных веществ»;		
2.14	Симпозиум некоммерческого партнерства институтов РАН «Орхимед»: «Разработка лекарственных и физиологически активных соединений на основе природных веществ»		
2.15	Молодёжная конференция-школа «Физико-химические методы изучения состава отходов химической переработки древесины и растительного сырья»		
2.16	IV Международная научно-практическая конференция «Приоритеты Байкальского региона в азиатской геополитике России»	июнь, Улан-Удэ	Правительство Республики Бурятия, корпорация «Металлы Восточной Сибири», РФФИ, Бурятское отд. РХО им. Д.И.Менделеева, БИП СО РАН
2.17	XIII Международная научно-техническая конференция «Наукоемкие химические технологии-2010»	июнь-июль, Иваново	ИГХТУ, ИХР РАН, Ивановское отд. РХО
2.18	VII Всероссийская конференция «Керамика и композиционные материалы» и школа молодых ученых «Наноструктурированные керамические и композиционные материалы»	июнь, Сыктывкар	Институт химии Коми НЦ УрО РАН, Коми отделение РХО им. Д.И. Менделеева, Сыктывкарский ГУ
2.19	Школа-конференция молодых ученых «Неорганические соединения и функциональные материалы»	июнь, Новосибирск	СО РАН, Новосибирское отд. РХО им. Д.И. Менделеева
2.20	IV Международная конференция «Экстракция органических соединений» ЭОС - 2010	сентябрь, Воронеж	РАН, Воронежское отд. РХО им. Д.И. Менделеева, ВГУ, ВГТА
2.21	Всероссийская научно-техническая конференция молодых ученых «Химия и технология энергонасыщенных материалов»	сентябрь, Казань	КГТУ, Татарское отд. РХО им. Д.И. Менделеева
2.22	2-я конференция РХО им. Д.И. Менделеева	сентябрь, Москва	Российское химическое общество им. Д.И. Менделеева
2.23	XIX Международная Черняевская конференция по химии, аналитике и технологии платиновых металлов	октябрь, Новосибирск,	РАН, Институт катализа СО РАН, МГАТХТ, НГУ, Новосибирское отд. РХО им. Д.И. Менделеева
2.24	Всероссийская конференция «Проблемы моделирования в химической технологии»	октябрь, Волгоград	ВГТУ, Волгоградское отд. РХО им. Д. И. Менделеева

№ п/п	Наименование мероприятия	Время и место проведения	Организации, ответственные за проведение
2.25	Всероссийская научно-техническая конференция «Наноматериалы, нанотехнологии и наноиндустрия»	октябрь, Казань	КГТУ, Татарское отд. РХО им. Д.И. Менделеева
2.26	Региональный смотр-конкурс молодых исследователей Волгоградской области	ноябрь, Волгоград	ВГТУ, Волгоградское отд. РХО им. Д.И. Менделеева
2.27	Постоянно действующий семинар по химии ВУЗов	в течение года, Самара	Самарское отд. РХО им. Д.И. Менделеева
2.28	Постоянно действующий научный семинар по физико-химии и технологии материалов электронной техники	в течение года, Нижний Новгород	Нижегородское отд. РХО им. Д.И. Менделеева
2.29	Постоянно действующий научно-технический семинар. «Катализ. Катализаторы. Охрана окружающей среды»	в течение года, Новомосковск	НИ РХТУ, НИАП, СНИО, Тульское отд. РХО им. Д.И. Менделеева
2.30	Постоянно действующий семинар по вопросам перспективных технологий с представителями промышленных предприятий области	в течение года, Волгоград	Волгоградское отд. РХО им. Д.И. Менделеева
2.31	Постоянно действующий семинар «Модификация ВМС и неорганических соединений»	в течение года, Москва	МГТА им. А.Н.Косыгина, Московское отд. РХО им. Д.И. Менделеева
2.32	Постоянно действующий научно-практический семинар по химии	в течение года, Самара	Самарское отд. РХО им. Д.И. Менделеева
2.33	Российские курсы повышения квалификации: Гальванотехника и гальвано - химическая обработка поверхности металлов Лакокрасочные материалы и их применение Оборотное водоснабжение: оборудование, водоподготовка, очистка сточных вод Производство и применение бензинов, дизельных, судовых и котельных топлив Технология производства, применения и контроля качества нефтепродуктов Методы и средства контроля химического состава материалов и веществ Современные рецептуры резин и технологии изготовления РТИ	6 групп 12 групп 2 группы 4 группы ежемесячно 6 групп 3 группы	РХТУ им. Д.И. Менделеева ОАО НПФ «Спектр ЛК», НИИ ЛКП с ОМЗ «Виктория» МХО им. Д.И. Менделеева ОАО ВНИИ НП 25 ГосНИИ МО РФ МАРЭА МГАТХТ им. М.В. Ломоносова
3	Международная деятельность		
3.1	Рабочие контакты с ИЮПАК, Европейской ассоциацией химических и молекулярных наук, Европейской федерацией инженерной химии и другими международными организациями и национальными химическими обществами	в течение года	
3.2	Участие в работе европейского союза молодых химиков	в течение года	
3.3	Привлечение членов РХО им Д.И. Менделеева к участию в международных мероприятиях по подготовке Международного года химии	в течение года	
3.4	Участие в мероприятиях ИЮПАК по подготовке Международного года химии	в течение года	
3.5	Участие в проекте ИЮПАК по созданию Профессионального кодекса химиков	в течение года	
4	Издательско-информационная деятельность		
4.1	Издание журналов 1. Российский химический журнал 2. Химия в России	в течение года в течение года	РХО, издательство Российского химического журнала РХО
4.2	Деятельность библиотеки Менделеевского центра в г. С.-Петербурге	в течение года	С.-Петербургское отд. РХО
4.3	Деятельность музея-квартиры Д.И.Менделеева в г. С.-Петербурге	в течение года	С.-Петербургское отд. РХО

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева – участник выставки «Химия-2009»

*М.А. СИРОТИНА, к.т.н., доцент, Директор Рекламно-выставочного центра
РХТУ им. Д.И. Менделеева*

С 28 сентября по 2 октября 2009 г. в ЦВК «Экспоцентр» прошла 15-я Международная выставка химической промышленности и науки «Химия-2009».

«Химия-2009» – крупнейшая в России и странах СНГ международная специализированная выставка-форум, в которой приняли участие более 700 участников из России, Украины, Германии, Китая, Тайваня, Южной Кореи, Канады и других стран. Тематика выставки охватывала широкий спектр направлений развития химической и нефтехимической промышленности, таких как сырье и оборудование, основная и неорганическая химия, нефтепереработка и нефтехимия, органический синтез, композиционные материалы, стеклопластики, реактивы, катализаторы, микробиологический синтез, биотехнологии управление химическим производством, химические технологии, научные исследования и др.

Президент Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева, президент РХО им. Д.И. Менделеева П.Д. Саркисов на открытии выставки обратил внимание на то, что выставка собрала научную элиту химической отрасли.

На выставочном стенде РХТУ им. Д.И. Менделеева были представлены научные достижения и образовательные услуги университета. Свои разработки представили кафедры: технологии электрохимических процессов, мембранной технологии, биотехнологии, стекла, нефтехимического синтеза, химии высоких энергий и радио-

экологии, переработки пластмасс, полимерных материалов, редких и рассеянных элементов, компьютерно-интегрированных систем в химической технологии, электротехники и электроники и др.

Наибольший интерес вызвали разработки в области экологии, очистки воды («Электрофлотационные модули очистки воды», «Разработка технологических процессов тонкой очистки водных растворов от взвешенных частиц и изготовление опытных ультрафильтрационных установок»), «Нанофильтрационные керамические мембраны», «Переработка органических отходов техногенного и природного происхождения в нефтепродукты», «Вторичное использование пищевой полимерной тары из полиэтилентерефталата», биотехнологии («Биотехнологическая конверсия углеводсодержащего растительного сырья», «Зеленые» полимеры», «Новая технология хранения плодов и овощей» и др.), полимерных материалов.

Особого внимания заслуживала сопровождающая выставку деловая и научная программа, включающая конференции, семинары, конкурсы.

Большой интерес вызвал Конкурс проектов молодых ученых, организованный «Экспоцентром» совместно с РХТУ им. Д.И. Менделеева и ЗАО «Росхимнефть». Конкурс проводился на международной выставке уже в третий раз и в этом году был посвящен 175-летию со дня рождения великого русского ученого Дмитрия Ивановича Менделеева.



Открытие выставки «Химия»



*Выступление президента РХТУ им. Д.И. Менделеева
П.Д. Саркисова на открытии выставки*

В конкурсе приняли участие молодые ученые из десяти ведущих химических, технических университетов: Московского государственного университета прикладной биотехнологии (МГУПБ), Московской государственной академии тонкой химической технологии им. М.В. Ломоносова (МИТХТ), Московский государственный университет инженерной экологии (МГУИЭ), Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева (РХТУ), химического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова, Белорусского технологического университета (БГТУ), Томского политехнического университета (ТПУ), Томского государственного университета (ТГУ), Волгоградского технического университета (ВГТУ), Ивановского химико-технологического университета (ИГХТУ).

Всего было представлено 20 проектов в области химии, химической технологии, биотехнологии.

В состав жюри конкурса вошли ректор МГУПБ академик РАСХН Е.И. Титов, декан химического факультета МГУ академик РАН В.В. Лунин, ректор МГУИЭ профессор Д.А. Баранов, первый вице-президент ЗАО «Росхимнефть» профессор С.В. Голубков, проректор МГУИЭ профессор М.Г. Беренгартен. Возглавил жюри Президент Российского химического общества им. Д.И. Менделеева академик П.Д. Саркисов. Столь представительное жюри обеспечило высочайший уровень экспертной оценки заявленных проектов.

Экспертная комиссия отметила высокое качество конкурсных проектов в области фундаментальных и прикладных исследований.

Призерами Конкурса стали:

Пичугина Дарья Александровна (химический факультет МГУ). *Квантово-химический подход для изучения структуры и свойств нанокластеров золота.*

Антонова Мария Олеговна (МИТХТ). *Химия для урологии.*

Поручикова Лариса Арсентьевна (МИТХТ). *Сферические аморфные наночастицы на основе лупановых тритерпеноидов бересты как адъюванты.*

Крейкер Алексей Александрович (ТГУ). *Создание производства глиоксаля.*

Гаврилок Андрей Николаевич (БГТУ). *Ресурсосберегающая технология производства новых видов серосодержащих комплексных NPKS удобрений.*

Абинскова Светлана Викторовна (МГУПБ). *Использование молекулярно-генетических методов для определения санитарно-гигиенической безопасности продуктов питания.*



Хабибулина Наталья Викторовна (РХТУ им. Д.И. Менделеева). *Разработка научных основ технологии получения ингибиторов трипсина и химотрипсина из отходов производства изолята белка сои.*

Давыдов Михаил Сергеевич (МГУИЭ). *Энергоэффективность процесса метанового сбраживания с учетом конструктивно-технологических особенностей метантенка.*

Самарь Ольга Борисовна (МГУИЭ). *Биоремедиация почв, загрязнённых нефтепродуктами и тяжёлыми металлами.*

Пластинина Наталья Андреевна (ИГХТУ). *Применение диэлектрического барьерного разряда для снижения уровней воздействия органических соединений на окружающую среду.*

Климова Ирина Юрьевна (ВГТУ) *Колебательные спектры и структурные превращения молекул в гетерогенно-каталитических реакциях.*

РХТУ совместно с РХО также стали организаторами первой международной конференции «Энерго- и ресурсосберегающие технологии в химической и нефтехимической промышленности», прошедшей в рамках выставки.

В обсуждении фундаментальных проблем в области ресурсо- и энергосбережения приняли участие представители Института общей и неорганической химии РАН, Института элементоорганических соединений РАН, МГУ им М.В. Ломоносова, Ереванского института «Пластполимер», Тамбовского государственного технического университета, российских и зарубежных компаний.

Опытом применения принципов энерго- и ресурсосбережения для совершенствования технологических процессов поделились специалисты РХТУ им. Д.И. Менделеева, МГУ им. М.В. Ломоносова, Московского государственного университета инженерной экологии, компаний «Глобал Карбон Рус», «Проф Инжиниринг», FETTE Compacting GmbH (Германия) и других предприятий, имеющих разработки в этой области.

За активное участие в выставке РХТУ им. Д.И. Менделеева был награжден дипломом.

Первая Международная конференция РХО им. Д.И. Менделеева «Энерго- и ресурсосберегающие технологии в химической и нефтехимической промышленности»

Х.А.НЕВМЯТУЛЛИНА, к.т.н. (РХТУ им. Д.И. Менделеева, г. Москва)

1 октября 2008 г. Президиум правления Российского химического общества им. Д.И. Менделеева заявил об учреждении ежегодной Международной конференции РХО. Первую конференцию под названием «Энерго- и ресурсосберегающие технологии в химической и нефтехимической промышленности» было решено провести во время проведения международной выставки «Химия – 2009» в сентябре 2009 г. в Москве.

В оргкомитет под председательством президента РХО академика П.Д.Саркисова вошли ведущие ученые страны: академики Ю.А. Золотов, Г.Ф. Терещенко, А.Ю. Цивадзе, члены-корреспонденты РАН О.И. Койфман, Н.З. Ляхов, В.П. Мешалкин, И.А. Новаков, профессора С.В. Голубков, В.П. Иванов, В.А. Колесников, Н.Н. Кулов, В.С. Тимофеев и другие известные специалисты в области химии и химической технологии.

Конференция прошла 30 сентября 2009 года в Экспоцентре при поддержке Федерального агентства по науке и инновациям РФ, Федерального агентства по образованию РФ, Российского Союза химиков, ЗАО «Росхимнефть» и ЗАО «Экспоцентр».

В работе Международной конференции РХО им. Д.И. Менделеева приняли участие учёные и сотрудники научных подразделений РАН, различных вузов, промышленных компаний из Азербайджана, Армении, Белоруссии, Германии, Казахстана, России, Украины.

С приветственным словом к участникам выступил президент Общества академик П.Д. Саркисов. Он подчеркнул, что конференция посвящена юбилейной дате – 175-летию со дня рождения велико-

го русского ученого Д.И.Менделеева и привел его слова о том, что «Технология – учение о выгодных ... приемах переработки природных продуктов в продукты потребные для применения в жизни людей». «Цель сегодняшнего собрания, сказал оратор, обсудить ключевые вопросы энерго- и ресурсосбережения для того, чтобы определить приоритетные направления исследований и пути реализации имеющихся разработок в промышленности.»

Работа конференции строилась в рамках двух секций.

Заседание секции «Фундаментальные проблемы в области энерго- и ресурсосбережения» открыл её председатель профессор Н. Н. Кулов (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН) докладом «Гибридные процессы разделения смесей как фактор энерго- и ресурсосбережения». Он отметил, что в прогнозах по развитию химии и химической технологии в первой трети 21 века упоминаются три важных области науки и техники – биотехнология, катализ и разделение смесей. Процессы разделения отличаются высокой энергоемкостью, поэтому эффективность разделения смесей во многих случаях определяет уровень энергетических и капитальных затрат для всего процесса в целом. Специфику современного этапа развития химических производств создает технологическая потребность в коллоидных системах наномасштаба, в жидких кристаллах, в материалах для молекулярной электроники. Как метод разделения, очистки и концентрирования этих веществ, кристаллизационные процессы, привлекают все большее внимание. В ИОНХ РАН были разрабо-



Профессор Н.Н.Кулов



Член-корреспондент РАН Э.Е.Нифантьев



Член-корреспондент РАН В.П. Мешалкин

таны физико-химические основы совмещенных процессов, объединяющих в одном случае кристаллизацию из расплава с вакуумной дистилляцией (дистилляционная кристаллизация), а в другом — плавление кристаллов с дистилляцией (дистилляционное плавление). Изучение дистилляционного плавления и кристаллизации для большого количества систем с различными физико-химическими свойствами показало, что эти совмещенные процессы энергетически более выгодны и значительно более эффективны, чем простая дистилляция, сублимация и обычное фракционное плавление. Это дало основание объединить указанные два процесса в гибрид, который открывает возможность повысить эффективность разделения без больших дополнительных затрат энергии. Использование гибридных процессов на основе кристаллизации, по мнению ученого, может оказаться весьма полезным при решении сложной задачи очистки биологически активных материалов, состоящих из хиральных молекул, существующих в виде смеси оптических антиподов — энантиомеров.

С большим интересом аудитория выслушала доклад члена-корреспондента РАН Э.Е. Нифантьева (Институт элементоорганических соединений им.



Обсуждение докладов

А.Н. Несмеянова РАН) «Полная переработка отходов заготовки древесины — перспективный путь создания новых материалов и биорегуляторов». Проблема полной переработки отходов заготовки древесины актуальна: огромная масса корневищ, ветвей, коры и других продуктов остаются невостребованными. Ученым с коллегами разработана и опробована фундаментальная схема полной переработки лиственницы, являющейся основной культурой в сибирской части России. Схема основана на идее дезинтеграции отходов в аппаратах типа «кавитатор». Кратковременный акт дезинтеграции отходов в водной среде приводит к образованию пульпы, которая легко разделяется на твердый продукт, являющийся ценным оригинальным материалом, и водные растворы органических веществ. Полученные органические продукты авторы рассматривают как перспективный фундаментальный ресурс для тонкого органического синтеза.

«Инновационные технологии и оборудование в химико-фармацевтической индустрии» рассмотрел в своем сообщении Себастиан Пфютце (Glatt Ingenieurtechnik GmbH, Germany). Ученый из Германии рассказал об установке ProCell, используемой в технологии струйного псевдооживления



Себастиан Пфютце



Н.Б. Тавакалян

непрерывного действия компании Glatt для получения гранулята в компактной струе. Решающим преимуществом используемой методики является возможность переработки продуктов, которые не могут быть подвергнуты псевдоожигению традиционным способом. Самой важной сферой применения установок ProCell, по мнению автора, являются процессы грануляции распылением. При этом гранулят получается непосредственно из жидкой фазы. Этот способ позволяет, считает ученый, заменить процессы распылительной сушки, когда необходимо получать частицы большего размера.

О новых технологических возможностях в управлении и организации процесса переработки сырья рассказал в своем докладе «Топохимические реакции в гранулах и некоторые технологические возможности при переработке фосфатного минерального сырья» член-корреспондент РАН И.В. Мелихов (МГУ им. М.В. Ломоносова).

Н.Б. Тавакалян (Ереванский Институт «Пластполимер», Республика Армения) выступила с докладом «Энерго- и ресурсосберегающая технология получения водных дисперсий на основе винилацетата». Цель представленного исследования – получение стабильных водных дисперсий на основе винилацетата с использованием низких концентраций защитного коллоида. В результате работы получены водные карбоксилсодержащие дисперсии на основе винилацетата в присутствии низких концентраций защитного коллоида (0,1 – 0,2 %) и в отсутствие защитного коллоида, определены условия получения и свойства стабильных дисперсий с высокими сухими остатками. Получение и применение таких вододисперсионных систем при низком содержании защитного коллоида или его полном отсутствии, подчеркивает автор, важно в экологическом и экономическом аспектах.

И.Г. Болесов (МГУ им. М.В. Ломоносова) рассказал о «Хемо-, стерео- и энантиоселективных синтезах циклопропанов и циклопропен».

Производные названных соединений представляют собой привлекательные строительные блоки, пригодные для синтеза разнообразных соединений. При этом ценным свойством трехуглеродных циклов оказывается их способность селективно реагировать с разнообразными соединениями, сохраняя малый цикл или раскрывая его структурно- и стереоселективно. Ученый подчеркнул, что одно из активно развивающихся в настоящее время направлений химии малых карбоциклов основывается на генерировании высоко реакционноспособных интермедиатов, таких как циклопропил-анионы, -радикалы, циклопропилилены и др., и использовании их в структурно-, хемо-, регио- стерео- и энантиоселективных превращениях. Автор представил разработанные в последние годы в рамках совместных проектов: простые методы получения энантиомерно чистых (или обогащенных) функциональных производных гем-дибромциклопропанов; хемо-, стерео- и энантиоспецифичные переносы ациль-

ных групп в реакциях функциональных производных гем-дибромциклопропанов, инициируемых метиллитием; высокоэнантиоселективный синтез природного метанопролина и его аналогов.

«Цитратный метод получения катализаторов для синтеза углеродных нанотрубок» – тема выступления М.В. Курочкиной (Тамбовский государственный технический университет). Докладчик представил методику синтеза катализаторов типа $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{CoO}/\text{Al}_2\text{O}_3$ путем пиролиза лимоннокислых соединений этих металлов, назвал основные стадии технологического процесса; подробно остановился на результатах тестирования катализаторов, которое проводилось в промышленном реакторе периодического действия для получения углеродных нанотрубок (ООО «НаноТехЦентр», г. Тамбов), привел характеристики проведенных испытаний.

Вторая секция конференции носила название «Применение принципов энерго- и ресурсосбережения для совершенствования технологических процессов». Заседание секции открыл председатель член-корреспондент РАН В.П. Мешалкин (РХТУ им. Д.И. Менделеева) докладом на тему: «Разработка и логистическое управление эксплуатацией ресурсоэнергоэффективных экологически безопасных производств». Понятие ресурсоэнергоэффективности тесно взаимосвязано с понятием «экологической эффективности», или «экоэффективности», промышленных предприятий и любых видов предпринимательской деятельности. Экоэффективность определяется, подчеркнул автор, совокупностью шести основных показателей:

- 1) удельная материалоемкость продукции и услуг;
- 2) удельная энергоемкость продукции и услуг;
- 3) удельные объемы выбросов токсичных веществ и твердых отходов;
- 4) удельные показатели вторичной переработки материалов;
- 5) степень использования возобновляемых ресурсов;
- 6) продление срока службы и повышение интенсивности использования экологически безопасных конечных продуктов.

По мнению докладчика важнейшим организационно-управленческим фактором повышения ресурсоэнергоэффективности и минимизации отходов промышленных предприятий является использование стратегий логистики и передовых методов управления цепями поставок предприятий нефтегазохимического комплекса. В заключении автор привел ряд основополагающих документов, являющихся методическими инструментами практической реализации ресурсоэнергоэффективных химических технологий и методов минимизации отходов на химических предприятиях.

По мнению О. Е. Иванова (ООО «Глобал Карбон Рус») получение прибыли предприятиями возможно не только от роста объема производства, повышения качества продукции и сокращения эксплуатационных затрат, но и в результате проведения таких мероприятий, как:

- замена или модернизация устаревшего оборудования;
- переход на другой вид топлива;
- использование возобновляемых источников энергии и т. д.

В своем докладе «Энергосберегающие мероприятия - прямой источник доходов» он подробно рассказал об опыте реализации проектов представляемой компании на примере ряда промышленных предприятий России.

В. В. Биленький (FETTE Compacting GmbH, Germany) в своем выступлении «Современные технологии таблетирования с использованием роторного пресса в химической промышленности» отметил, что важным параметром таблетирования становится усилие прессования, которое иногда достаточно высоко и приводит к большим энергозатратам. Главным энергосберегающим фактором в этом случае, считает В. В. Биленький, является использование безредукторного двигателя (torque drive), который использует около 50% электроэнергии в сравнении с прессами редукторной группы. Это новшество, введенное компанией «Фетте», перенимают в настоящее время и другие производители роторных прессов.

А.И. Новоселов (МГУ им. М.В. Ломоносова) в докладе « γ -индуцированный одностадийный синтез этиленгликоля из метанол-формальдегидных смесей» привел технологический анализ изучаемой системы и показал рентабельность ее практического использования.

О конструкции новых геликоидно-структурных каплеотбойных устройств типа PKU® рассказал в своем сообщении «Модернизация градириен в системах оборотного водоснабжения» А.С. Рябушенко (ООО «Проф. Инжиниринг»). Каплеотбойные устройства новой модификации существенно сокращают вынос капельной жидкости и вредных веществ из градириен, что позволяет, по мнению докладчика, снизить расходы водных ресурсов на подпитку систем оборотного водоснабжения и минимизировать негативное воздействие испарительных аппаратов на экосистему.

Е.В. Полиенова (Московский государственный университет инженерной экологии) в докладе «Абсорбция газов в волокнистом туманоуловителе» подробно рассказала о разработанном на базе конструкции волокнистого туманоуловителя типа СННК экспериментальном абсорбере с волокнистой насадкой. В результате исследований были определены гидравлическое сопротивление аппарата и объемный коэффициент абсорбции при различных значениях основных факторов, влияющих на определяемые параметры (линейная скорость газа в свободном сечении аппарата, плотность орошения и др.). Учитывая изложенное, сказал автор, аппарат может быть рекомендован к промышленному применению при решении проблемы комплексной очистки газовых выбросов.

В изданном к конференции сборнике опублико-

ваны тезисы более ста докладов. Вопросам разработки новых катализаторов посвящен ряд докладов представителей научной школы академика И. И. Моисеева («Высокоселективная окислительная конденсация метана: влияние полиморфизма SiO₂ на свойства катализатора», «Новые наноструктурированные катализаторы - мезопористые аморфные силикаты редкоземельных элементов»). Член-корреспондент РАН А. Г. Дедов подчеркнул, что создание высокоселективных катализаторов нефтехимических процессов является одним из важных условий создания энерго- и ресурсосберегающих технологических процессов для нефтехимической промышленности.

В тезисах докладов нашли также отражение вопросы моделирования как одного из методов создания энергоресурсосберегающих процессов: «Моделирование состава раствора как основа создания ресурсосберегающей технологии электроосаждения сплавов» (Е.Г. Винокуров, Т.Ф. Бурухина), «Принципы энергосбережения по удалению отложений с теплообменных поверхностей в водных средах методами химической очистки и математического моделирования» (Е.О. Забенькина, Е.А. Барышникова), «Информационно-моделирующая прогнозная аналитическая система по свойствам химических веществ» (В.М. Зацепин и др.).

Широко представлены в сборнике доклады по проблеме очистке воды: «Ресурсосберегающая технология очистки сточных вод от ионов тяжелых металлов с использованием гальваношламов» (Е.С. Климов и др.), «Подготовка глубокоочищенной воды для новых энергосберегающих технологий» (И.В. Семенова, Е.В. Ушаков), «Энергосберегающий гибридный процесс умягчения и очистки воды на базе гетерогенной кристаллизации» (С.К. Мясников и др.), «Синтез и исследование оксидных наноструктурных катализаторов для очистки воды методом озонирования» (А.В. Шабалина и др.).

В стендовой сессии конференции приняли участие молодые ученые МГУИЭ, РХТУ им. Д.И. Менделеева, МАМИ (г. Москва), Бийского и Энгельсского технологических институтов. Отрадно, что свои результаты представили также и молодые коллеги из Казахстана (Кызылордынский государственный университет им. Коркыт Ата) и Белорусии (Научно-исследовательский институт физико-химических проблем Белорусского государственного университета).

В заключительном слове вице-президент РХО им. Д.И. Менделеева профессор Н.Н. Кулов с удовлетворением заявил, что первая конференция РХО состоялась. Химическое общество призвано консолидировать усилия химиков: отечественных и зарубежных, исследователей и практиков, и проведенное мероприятие будет способствовать успешному решению этой задачи. Н.Н. Кулов выразил общее мнение о необходимости ежегодного проведения такой конференции.

Премия имени В.Н.Ипатьева

*Е.З. ГОЛОСМАН, профессор, д.х.н.
(ООО «НИАП-КАТАЛИЗАТОР», г. Новомосковск)*

Проработав десятки лет в прикладном научно-исследовательском институте, я конечно, слышал об Академике Владимире Николаевиче Ипатьеве, о названной его именем «бомбе» Ипатьева, ставшей прообразом применяемых в химической практике автоклавов и реакторов, о том, что Владимир Николаевич является одним из основоположников технической химии. Похоже, что и многие из моих коллег знали об Ипатьеве не более. Ходили невнятные слухи о том, что Ипатьев и Чичибин в связи с их отъездом за границу лишены советского гражданства и о том, что лучше эту фамилию не упоминать. Общее собрание АН СССР в декабре 1936 г. лишило его звания академика. Наряду с этим было принято решение, что изымаются все его издания и запрещаются ссылки на опубликованные работы этого ученого. Лишь в 1990 г. состоялось посмертное возвращение имени академика Ипатьева и восстановление его в звании академика Российской Академии наук.

Постепенно в прессе и в Интернет-ресурсах стали появляться подробности о жизни и научной деятельности Ипатьева. Владимир Николаевич родился 21 декабря 1867 г. в семье русского архитектора. Его мама по происхождению была гречанкой. Один из предков Ипатьева подписывал в 1613 г. в Ипатьевском монастыре документ об избрании первого царя Михаила Романова. В печально знаменитом доме его родного брата инженера Николая Ипатьева была расстреляна семья последнего русского царя. В 40 лет Владимир Николаевич узнал, что его сводным братом является известный физико-химик, будущий академик Лев Чугаев.

Владимир Николаевич закончил Михайловскую артиллерийскую Академию и там же защитил свою первую диссертацию. За эту работу русское физико-химическое общество присудило ему премию имени А.М. Бутлерова. Следует отметить, что еще ранее Ипатьев стал самым молодым членом этой чрезвычайно престижной в России организации. В 1908 г. в Петербургском университете Владимир Николаевич защитил докторскую диссертацию



В.Н. Ипатьев

«Каталитические реакции при высоких температурах и давлениях». Эта капитальная работа принесла ученому широкую известность. Ипатьев несколько лет работал в Германии и во Франции. Вскоре после возвращения Ипатьев открывает свою знаменитую реакцию каталитической регенерации и вводит в практику герметизируемые, простые и удобные аппараты для осуществления реакций при высоких давлениях (500 — 1000 атм) и температурах (до 500 °С).

Во время первой мировой войны ученый работал в области создания химического оружия и методов химической

защиты войск. Ипатьеву в кратчайшие сроки удалось наладить производство противогазов, и тем самым спасти жизни многим военным. Из-за ошибок правительства и царя, Россия ввязалась в войну, не имея в нужном количестве взрывчатых веществ. Под руководством В.Н. Ипатьева и эта проблема очень скоро была решена. В 1916 году Ипатьев был избран Академиком Российской Императорской Академии наук. Незадолго до октябрьской революции ему было присвоено звание генерал-лейтенанта русской армии. Это был первый русский генерал, имевший степень доктора наук по химии. Ученый сотрудничал с нефтяной фирмой братьев Нобелей. В.Н. Ипатьев являлся руководителем химического комитета (фактически начальником химической промышленности России).

Октябрь 1917 г. поставил В.Н. Ипатьева, как и многих соотечественников, перед выбором. Владимир Николаевич открыто осуждал октябрьскую революцию, но, тем не менее, он начинает работать с Советским правительством. Следует заметить, что крупнейшие зарубежные лаборатории могли принять его и готовы были предоставить ему достойные условия для работы. Но в Ипатьеве всегда было чувство долга перед Родиной. Он общается с Троцким, Рыковым, Дзержинским, Лениным. В.Н. Ипатьеву обещали не мешать в его научной деятельности и оказывать помощь. В 1917 г. Ипатьева назначают директором Центральной химической лаборатории в Петрограде и председа-

телем научно-технической администрации, курировавшей 14 институтов. Позднее Ипатьев вошел в со-став Госплана и президиума ВСНХ, а в 1921 г. возглавил Главное управление химической промышленности ВСНХ. Начиная с 1926 г. Ипатьев становится научным консультантом ряда зарубежных фирм. Во всех своих контрактах он неизменно оставлял пункт, что все патенты и другие разработки, принадлежат и СССР. Значительную часть всех своих вознаграждений Ипатьев тратил на приобретение приборов и реактивов, научной литературы для созданной им в России сети химических научных институтов. Руководимый им институт высоких давлений был оборудован исключительно на его личные средства. В 1929 г. за работы в области химии был удостоен высшей научной награды – премии имени В.И. Ленина. Начавшиеся в 1929 г. аресты коллег и близких друзей, конфиденциальные предупреждения об опасности, говорили о том, что скоро могла прийти и его очередь. В этой ситуации он принял решение об отъезде из СССР.

В Чикагском университете В.Н. Ипатьев начал читать лекции по катализу и приступил к экспериментальным исследованиям в прекрасно оборудованной для него лаборатории. Он также состоял профессором и директором лаборатории катализа и высоких давлений в Нортвэстернском университете, созданной на его собственные средства и ныне носящей его имя. Более полувека она является международным центром по координации исследований в области катализа и химии экстремальных состояний. Заработанные деньги Ипатьев вкладывал в развитие своей лаборатории, приглашая на работу русских и американских ученых, знавших русский язык. Ходила такая байка, что Ипатьев, открывая совещания у себя в лаборатории, оглядывает свои кадры и говорит: «Ну, все, теперь в СССР остался только один Зелинский».

Ипатьев всегда направлял научные статьи с результатами своих исследований в советские издания, посылал на родину в научные учреждения СССР дефицитное оборудование. В 1937 г. из 1000 претендентов В.Н. Ипатьев был назван в США «Человеком года». Специальным решением правительства США были отмечены заслуги В.Н. Ипатьева в разработке промышленных процессов производства высокооктановых авиабензинов, что обеспечило в годы Второй мировой войны превосходство авиации США, СССР, Англии над авиацией Германии и Японии. Начиная с 1944 г. Ипатьев трижды предпринимал попытки вернуться на родину, но неизменно получал отказ. Один из учеников Ипатьева американский профессор Г. Сайнс, возглавивший лабораторию после его кончины, сказал: «Каждый час своей жизни в США, всю свою деятельность он отдал России. Беспредельная любовь к родине, какой я никогда и не у кого из эмигрантов не видел, была той почвой, на которой произрастали все выдающиеся результаты

исследовательских трудов Ипатьева». Именно В.Н. Ипатьев впервые в мире предложил использовать в качестве сырья в органической химии нефть и каменный уголь, вместо зерна, растительных и животных масел. Его разработки позволили наладить масштабное производство искусственного каучука, пластмасс, моющих веществ, смазки, авиационных бензинов и многого другого. С именами Зелинского Н.Д., Ипатьева В.Н. связано и производство противогазов. Работы В.Н. Ипатьева положили начало использованию высоких давлений и температур в химической технологии. Ипатьев внес огромный вклад в создание в СССР новых научно-исследовательских институтов (Институт высоких давлений, ИОХ им. Н.Д. Зелинского, ГИПХ и др.) Именем Ипатьева в США названа премия в области химических технологий, не уступающая, по мнению многих ученых, Нобелевской.

Премия имени В.Н. Ипатьева за выдающиеся работы в области технической химии с 1994 г. присуждается и Российской Академией наук. Конкурсы проводятся один раз в три года. Лауреатами одной премии становятся не более трех ученых. Присуждение премий Ипатьева приурочивается ко дню рождения или знаменательной дате, связанной с жизнью и деятельностью ученого. С 1994 г. по 2006 г. победителями были признаны девять авторов пяти работ:

1. В 1994 г. д.х.н. Сливинский Е.В., д.х.н. Локтев С.М., д.х.н. Корнеева Г.А. (Институт нефтехимического синтеза им. Топчиева А.В. РАН) – за цикл работ «Разработка научных основ и технологии получения кислородсодержащих продуктов гидроформилированием непредельных соединений на родиевых катализаторах под давлением».

2. В 1997 г. чл.-корр. Липидус А.Л., д.х.н. Крылова А.Ю., к.х.н. Пирожков С.Д. (Институт органического синтеза им. Зелинского Н.Д.) – за цикл работ «Разработка высокоэффективных катализаторов для процессов синтеза органических продуктов на основе оксида углерода».

3. В 2000 г. д.х.н. Колбановский Ю.А. (Институт нефтехимического синтеза им. Топчиева А.В. РАН) – за цикл работ «Разработка научных основ и энергосберегающих технологий получения полупродуктов для каталитического синтеза и экологически чистого уничтожения высокотоксичных и супертоксичных органических отходов при высоких давлениях и температурах в химических реакторах нового типа на базе энергетических установок».

4. В 2003 г. академик Мясоедов Б.Ф. (Институт геохимии и аналитической химии им. Вернадского В.И. РАН) – за цикл работ «Разработка научных основ фракционирования высокорadioактивных отходов и мониторинг территорий, загрязненных радионуклидами актинидов».

5. В 2006 г. д.т.н. Милёхин Ю.М. (ФГУП «Федеральный центр двойных технологий «Союз») – за

цикл работ «Разработка научных основ и реализация новых технологий создания энергетических конденсированных систем для перспективного ракетного вооружения и конкурентоспособной гражданской продукции».

8 декабря 2009 г. Президиум РАН утвердил представление экспертной комиссии по присуждению премии в области технической химии и постановил присудить премию имени В.Н. Ипатьева 2009 года академику Лунину В.В. (МГУ им. М.В. Ломоносова), профессору Ткаченко С.Н. (МГУ им. М.В. Ломоносова), профессору Голосману Е.З. (ООО «НИАП-КАТАЛИЗАТОР») за цикл работ «Физико-химические основы промышленной технологии производства водостойких катализаторов очистки газов от озона».

Как отмечается в постановлении, «рассматриваемая работа посвящена исключительно важному вопросу — созданию катализаторов очистки газов

от озона и освоению технологии их получения. В настоящее время озон достаточно широко используется в качестве реагента для экологических процессов. В этой связи возникла проблема удаления его избыточного количества. Эта проблема решена авторским коллективом... Более ста отечественных и зарубежных предприятий используют разработанные катализаторы».

Материалы этой работы были опубликованы в 40 статьях, 60 тезисах докладов конференций, в трех монографиях. На катализатор разработаны и утверждены технические условия, паспорт безопасности и санитарно-эпидемиологическое заключение, получено и находится на рассмотрении около 10 изобретений.

В статье использованы материалы, посвященные Академику В.Н. Ипатьеву, размещенные в Интернете (авторы: А. Корин, И. Куксин, В. Пименов,

НАУКА

Развитие молекулярного подхода к расчету констант стабильности внутрисферных комплексов катионов металлов

А.И. МИШУСТИН, д.х.н., профессор Московского государственного университета инженерной экологии

Знание констант стабильности комплексов катионов металлов с различными нейтральными и заряженными лигандами необходимо для расчетов концентрации частиц, образуемых катионами металлов в растворах. Такие расчеты необходимы для оптимизации технологических процессов, для понимания механизмов биохимических реакций, а также для решения экологических проблем. Например, существенным фактором, определяющим скорость неконтролируемой миграции актинидов из хранилищ ядерных отходов и мест загрязнений почвы, является образование комплексов катионов с присутствующими в природных водах лигандами. Однако расчеты концентраций комплексов во многих случаях затруднены из-за отсутствия надежных данных по их константам стабильности. Особенно остро этот вопрос стоит в случае актинидов, так как экспериментальное определение затруднено из-за малодоступности реагентов и радиационной опасности работы с ними. Поэтому актуальной задачей является развитие теоретических методов расчета констант.

Существует несколько общих подходов к априорной оценке или теоретическому расчету констант стабильности комплексов, исходящих из свойств катионов и лигандов.

Первый подход — качественный, основан на концепции Пирсона [1] «мягких» и «жестких» кислот и оснований (катион рассматривается как льюисова кислота, лиганд (анион или нейтральная молекула) как льюисово основание). Согласно Пирсону, «жесткие» катионы образуют более прочные комплексы с «жесткими» основаниями, а «мягкие» катионы — с «мягкими» основаниями. К «жестким» катионам относятся катионы щелочных, щелочноземельных металлов, лантанидов, актинидов. Они образуют более прочные комплексы с лигандами, имеющими кислород или азот в качестве электроно-донорного атома. Этот подход не дает количественных оценок констант стабильности.

Второй подход основан на статистическом анализе имеющихся экспериментальных данных по константам стабильности и установлении корреляционных зависимостей логарифмов констант стабильности от физических или физико-химических параметров катионов и лигандов. Было предложено несколько корреляционных уравнений. Среди них можно отметить работу Хэнкока с сотр. [2], где предложены трехпараметрические корреляционные уравнения для расчетов констант стабильности; параметры, по предположению ав-

торов, связаны с электростатической, ковалентной и стерической составляющей координационной связи. В работе Зигеля с соотр. [3] предложено корреляционное уравнение, связывающее логарифмы констант стабильности с основностью ряда гетероциклических аминов. Надежность констант стабильности, полученных с помощью этого статистического подхода, зависит от количества, точности и надежности имеющихся экспериментальных данных по константам стабильности. Для таких катионов, как актиниды, экспериментальных данных крайне мало и они зачастую существенно расходятся между собой (на порядки), поэтому к ним статистический подход не применим.

Третий подход – теоретический расчет констант стабильности на основе молекулярных параметров. Эти расчеты основаны на пионерской работе Бьеррума, который предложил рассчитывать константы стабильности ионных пар с использованием функций распределения анионов-лигандов относительно выделенного катиона. Количество ионных пар рассчитывается интегрированием функции распределения в заданных пределах, верхней границей интегрирования обычно выбирается первый минимум функции распределения катион-анион. При расчете функции распределения учитывалось лишь кулоновское взаимодействие между ионами, растворитель рассматривался как диэлектрический континуум. Позднее были предложены многочисленные усовершенствования этой теории, использующие более точные потенциалы межйонного взаимодействия. Как правило, в теоретических работах рассматривались ионные пары, образованные одноатомными ионами.

Четвертый подход быстро развивается в последние годы – это молекулярно-динамическое (МД) моделирование ионной ассоциации в растворах сильных электролитов. Вначале молекулярно-динамическое моделирование применялось для исследования структуры гидратных оболочек ионов, но по мере увеличения мощности компьютеров стали возможными более подробные исследования структуры растворов. МД-моделирование проводилось как для температуры 25°C, так и для высоких температур, включая область сверхкритических жидкостей. При этом исследовались не только разбавленные, но и концентрированные растворы. Рассмотрим несколько работ, посвященных исследованию образования ионных пар и кластеров в растворах.

В одной из первых работ по расчету констант ионной ассоциации методом молекулярно-динамического моделирования [4] было рассмотрено образование ионных пар Na^+Cl^- в сверхкритической воде. В таких условиях диэлектрическая константа воды заметно снижена и электролиты сильнее ассоциированы. Использованный подход к расчету констант ионной ассоциации, по существу, является развитием концепции Бьеррума, так как

использует интегрирование получаемой в МД-моделировании функции распределения катион-анион для расчета концентрации ионных пар, однако растворитель при этом рассматривается не как диэлектрический континуум, а как набор отдельных молекул, взаимодействующих с ионами и между собой. Важнейшей частью моделирования является выбор адекватной аналитической формы потенциалов ион-молекулярных, ион-ионных и межмолекулярных взаимодействий. Во многих работах по МД-моделированию используется потенциал в виде суммы кулоновского члена и потенциала Леннарда-Джонса. Термодинамическая константа ионной ассоциации рассчитывается через степень ассоциации (диссоциации), определяемую подсчетом среднего числа анионов вблизи рассматриваемого катиона в заданных пределах расстояний катион-анион. Это число определяется интегрированием функции радиального распределения анионов относительно выделенного катиона в заданных пределах, обычно в качестве нижнего предела выбирается расстояние наибольшего сближения катион-анион, в качестве верхнего предела интегрирования – расстояние от катиона до первого минимума функции радиального распределения. Несвершенство существующих аналитических форм модельных потенциалов межчастичного взаимодействия является пока слабым местом молекулярно-динамического моделирования ионной ассоциации. Для исследования ионной ассоциации, т.е. образования ионных пар и более сложных кластеров, необходимо увеличение числа анализируемых частиц, что связано с увеличением мощности компьютеров.

Развитие подобных исследований описано в работе [5], где методом МД исследовано образование ионных пар в разбавленных растворах NaCl при критической температуре $T_c=640$ К и температурах $T_1=0.97T_c$ и $T_2=1.036T_c$ в широком диапазоне плотностей, от 0.071 до 2.38 г/см³. Моделировалась система, состоящая из ионов Na^+ , Cl^- и 254 молекул воды. Рассчитана функция радиального распределения, интегрирование которой дало значения констант ион-парной ассоциации. Эти значения приведены в виде графика зависимости $\log K / T_r$, где T_r – относительная температура, $T_r=T/T_c$. Показано, что рассчитанные константы согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Степень ассоциации изменяется в широких пределах в исследованном диапазоне плотностей. Это исследование было продолжено в [6] для растворов в паре при температурах 773 К, 873 К и 973 К.

МД-моделирование с использованием более сложных потенциалов межчастичного взаимодействия растворов NaCl в воде (в сверхкритических условиях) было также выполнено в работе [7]. Исследовались растворы при высоких температурах в диапазоне от 723 К до 1073 К в интервале значений плотностей от 0 до 0,9 г/см³. Получены уравнения,

позволяющие рассчитать логарифм константы диссоциации ионной пары в зависимости от температуры и плотности. Показано, что эти уравнения хорошо согласуются с имеющимися литературными экспериментальными данными. Сделан вывод о том, что доля разделенных растворителем ионных пар пренебрежимо мала по сравнению с контактными ионными парами.

В работе [8] рассматривалась ассоциация ионов в водных растворах HCl при высоких температурах. Поскольку при высоких температурах снижается диэлектрическая константа воды происходит увеличение ионной ассоциации. Например, при повышении температуры до 250 °С сильные электролиты становятся слабыми, их константа ассоциации растет на 3-4 порядка. Авторы работы [8] рассчитали функцию радиального распределения для пары ионов Cl⁻ - H₃O⁺. При этом было использовано несколько вариантов модельных потенциалов взаимодействия. Учитывалась также, что связь между этими ионами не является чисто ионной и включает ковалентную составляющую. В результате при расчетах кулоновского взаимодействия учитывался частичный перенос заряда с Cl⁻ на H₃O⁺. В результате МД-моделирования найдено, что образуются только контактные ионные пары, а вклад сольваторазделенных ионных пар пренебрежимо мал. Этот вывод был получен для всех используемых модельных потенциалов, однако рассчитанные константы ассоциации для нескольких использованных модельных потенциалов показали разброс до 4 порядков величины. Опубликованные в литературе экспериментальные данные, полученные кондуктометрическим методом и методом растворимости, также сильно расходятся между собой, но они лежат в пределах диапазона рассчитанных методом МД-моделирования. В работе [9] подобные исследования были продолжены с использованием квантово-механического потенциала взаимодействия. Моделировались растворы при температурах вблизи критической (620 К, 640 К и 673 К) в диапазоне плотностей от 0.02 г/см³ до 0.65 г/см³. Система состояла из 254 молекул воды и пары ионов. В результате в этой работе были получены зависимости констант ассоциации от плотности и температуры.

В работе [10] МД-моделирование было применено для исследования образования ионных кластеров в водных растворах LiCl при концентрациях 1М, 5М и 10М, при температуре 293 К. Исследуемая система содержала от 680 до 968 молекул воды и соответствующее число ионов. Потенциал взаимодействия ион-молекула состоял из кулоновского и Леннарда-Джонса, а ион-ионное взаимодействие описывалось потенциалом Хиггинса-Майера. Рассчитанная в результате проведенного моделирования функция радиального распределения Li⁺-Cl⁻ содержала острый максимум с центром у 2,2 Å, что близко к сумме ионных радиусов и указывает

на образование контактных ионных пар. Показано также, что при концентрации раствора, равной 1М 70% всех катионов связано с одним анионом, а 30% с двумя анионами. При более высоких концентрациях 70% катионов связано с двумя анионами, а 30% - с тремя. При увеличении концентрации размеры кластеров увеличиваются. Э этой работе определены также доли кластеров различного состава с временами жизни более 1 пикосекунды при трех концентрациях.

Сложные межмолекулярные потенциалы использованы в работе [11] при моделировании методом МД водных растворов LiCl и NaCl. Для получения парциальных атомных зарядов всей системы использован метод выравнивания электроотрицательностей. Исследуемые системы содержали 214 молекул воды и пару ионов при температуре 298 К. Найдено, что в растворах хлорида лития более стабильна конфигурация разделенных растворителем ионных пар, а в растворах хлорида натрия – конфигурация контактных ионных пар. Рассчитаны константы скорости интерконверсии контактных и разделенных ионных пар.

В работе [12] исследованы растворы хлорида цезия методами рассеяния рентгеновских лучей, нейтронов и молекулярно-динамического моделирования, с тремя концентрациями – 1.5, 7.5 и 15 мольных % соли. В эксперименте количество частиц в системе составляло около 3000. Использован парный потенциал межмолекулярного взаимодействия, состоящий из кулоновского и леннарда-джонсова вкладов. Рассчитаны функции радиального распределения, согласующиеся с дифракционными данными. Найдено образование ионных пар с расстоянием между центрами ионов, равным 3.5Å. В растворе с концентрацией 7,5 мол.% в первой координационной сфере каждого из ионов находится один противоион, а при концентрации 15 мол.% - два противоиона.

В работе [13] проведено моделирование методом МД водных растворов хлоридов и бромидов щелочных металлов при температуре 298 К. Моделируемая система состояла из 11341 молекулы воды, к которым добавлялось определенное число катионов и анионов. Например, для 1 моляльного раствора добавлялось по 204 катиона и аниона. Такой большой объем моделируемой системы позволил определить средние концентрации ионных пар и кластеров (квадруполей и более высоких), на основании которых были рассчитаны константы образования. Значения констант стабильности всех изученных 1:1 ионных пар меньше 1 л/моль и монотонно уменьшаются для хлоридов от 0.76 для хлорида натрия до 0.49 для хлорида цезия, а для бромидов от 0.72 для бромида натрия до 0.55 для бромида цезия. Полученные значения в целом согласуются с литературными данными, полученными кондуктометрическим методом, за исключением рубидиевых солей. Найдено, что кластеры образуются в значительно меньшем количестве, чем ионные пары, даже в 1

моляльных растворах. В растворах с концентрациями меньше, чем 0.1 моляльная, концентрации ионных пар и кластеров столь малы, что электролиты можно считать сильными, то-есть практически полностью диссоциированными.

МД-моделирование всех растворов щелочных галогенидов описано в [14]. Использовался парный потенциал межмолекулярного взаимодействия, состоящий из кулоновского и леннард-джонсова членов. Использовались несколько вариантов упрощенной точечной модели воды. В результате подсчета населенностей различных кластеров определены константы ион-парной ассоциации. В качестве примера в таблице 1 приведены значения констант ассоциации в моляльной шкале, полученные в трех работах [13 15].

Ионная ассоциация в водных растворах галогенидов щелочных металлов при стандартных условиях моделировались также в работе [15]. В этой работе моделировалось поведение системы, состоящей из двух ионов и 864 молекул воды. Были использованы различные типы силовых полей и различные модели воды для расчетов потенциалов средней силы. Были рассчитаны константы ионной ассоциации для всех галогенидов щелочных металлов, от LiCl до CsI. Эти значения приведены в приложении к этой статье. Они были сравнены с литературными

данными, полученными кондуктометрическим методом. Показано, что рассчитанные значения констант ионной ассоциации зависят от выбора силовых полей и выбора модели воды, особенно сильно эта зависимость проявляется в случае фторида и в меньшей степени хлорида лития.

В работе [16] исследовались водные растворы CaCl₂ с концентрациями 2.5М и 4М тремя методами – рассеяния рентгеновских лучей, нейтронов и молекулярной динамики. В МД-эксперименте исследуемая система состояла из 25 катионов кальция, 50 анионов хлора и 500 молекул воды (что соответствовало 2.5М раствору), а в случае 4М раствора к этим частицам были добавлены еще 41 катион и 82 аниона. Потенциал межчастичного взаимодействия был взят в виде суммы кулоновского и леннард-джонсова членов. Определена радиальная функция ион-ионного распределения, указывающая на образование контактных ионных пар, расстояние до первого пика 2.75А. Интегрирование функции распределения показало, что в 2.5 М растворе 25% катионов образуют ионную пару, а в 4М растворе – 32%. Найдено также, что большинство катионов образуют ионные пары (контактные и разделенные растворителем), а доля свободных гидратированных катионов составляет 8.5% в 2.5М растворе и 1% в 4М растворе.

Таблица 1
Рассчитанные в моляльной шкале методом МД константы ионной ассоциации галогенидов щелочных металлов в водных по данным [13 15]; T= 298 К.

Ионная пара	Работа [13]	Работа [14]	Работа [15]
LiCl	-	0.48 ±0.072	-
LiBr	-	0.085 ±0.059	-
LiI	-	0.0077 ±0.017	-
NaF	-	0.14 ±0.082	-
NaCl	0.76 ±0.05	0.12 ±0.072	0.60 ±0.04
NaBr	0.72 ±0.17	0.09 ±0.062	0.61 ±0.04
NaI	-	0.048 ±0.043	-
KF	-	0.19 ±0.097	-
KCl	0.57 ±0.04	0.28 ±0.12	0.52 ±0.02
KBr	0.65 ±0.10	0.30 ±0.13	0.53 ±0.02
KI	-	0.26 ±0.12	-
RbF	-	0.18 ±0.097	-
RbCl	0.52 ±0.12	0.32 ±0.14	0.46 ±0.02
RbBr	0.60 ±0.14	0.34 ±0.14	0.58 ±0.03
RbI	-	0.33 ±0.14	-
CsF	-	0.19 ±0.095	-
CsCl	0.49 ±0.07	0.39 ±0.16	0.42 ±0.02
CsBr	0.55 ±0.14	0.44 ±0.18	0.54 ±0.02
CsI	-	0.47 ±0.18	-

Большинство работ по молекулярно-динамическому моделированию ионной ассоциации ограничивались одноатомными катионами и анионами, так как применение этого метода к более сложным лигандам затруднено недостаточной изученностью межмолекулярных потенциалов для многоатомных лигандов. Известно, что использование неадекватных аналитических форм потенциалов межмолекулярного (межатомного) взаимодействия может привести к искаженной картине микроструктуры растворов и тем самым приводит к ошибочным количественным характеристикам ионной сольватации и ионной ассоциации. Тем не менее, начинают появляться работы по моделированию ионной ассоциации растворов солей с многоатомными анионами.

В работе [17] методом молекулярной динамики моделировалось образование ионных пар между катионами магния, кальция, стронция, бария и хлорид-анионами в водных растворах. Использовался потенциал взаимодействия в виде суммы кулоновского и леннард-джонсова взаимодействия. Рассчитаны концентрации контактных и разделенных растворителем ионных пар MgCl⁺, CaCl⁺, SrCl⁺ и BaCl⁺

в зависимости от концентрации соли. Найдено, что для пар магния и кальция сильно преобладают разделенные ионные пары, для стронция доля контактных ионных пар становится существенной, а для бария контактные ионные пары становятся преобладающими при увеличении концентрации. Рассчитанные константы ассоциации для комплексов $MgCl^+$, $CaCl^+$, $SrCl^+$ и $BaCl^+$ увеличиваются с ростом радиуса катиона, в противоречии с экспериментально измеренными значениями, полученным из кондуктометрических измерений, которые показывают противоположную тенденцию зависимости от радиуса катиона. Авторы обсуждают возможные причины этого расхождения и в качестве одной из причин предполагают использование слишком упрощенной формы потенциала межмолекулярного взаимодействия.

В работе [18] методом МД моделировалась структура водных растворов KNO_3 в широком диапазоне концентраций, от 0.3 до 7.0 М. Потенциал межмолекулярного взаимодействия взят в виде суммы кулоновского и леннард-джонсова потенциалов взаимодействия. Нитрат-анион описывался моделью четырех зарядов. В результате моделирования в растворах обнаружены различные виды ионных пар и ионных кластеров. Структуры всех ионных пар включают от 2 до 5 молекул воды, что делает структуры пар более стабильными. Константы ассоциации не были определены.

Исследованию ассоциации ионов в неводных растворах посвящено небольшое число работ. В работе [19] методом МД моделировалась ионная ассоциация в растворах $NaCl$ и NaI в смешанном растворителе вода-метанол. Система включала 400 молекул растворителя и по 8 ионов. Молекулы воды и метанола описывались трехзарядными моделями. Ион-молекулярное взаимодействие описывались потенциалами, состоящими из кулоновской и леннард-джонсовой частей. Определены константы ассоциации при различных составах смешанного растворителя и показано, что зависимость от состава проходит через максимум при мольной доле метанола, равной 0.9, и не подчиняется ожидаемой монотонной зависимости от диэлектрической константы растворителя. Это объяснено важной ролью структуры растворителя.

Можно отметить, что работы по МД-моделированию ионной ассоциации в растворах быстро развивается в последние годы, число публикаций измеряется несколькими десятками в год. Важным ограничением на пути развития этого метода и применения к более сложным системам является недостаточная изученность потенциалов межмолекулярного, ион-молекулярного и межионного взаимодействий.

Пятый подход к теоретическому исследованию образования комплексов катион-лиганд разрабатывается автором данной статьи. Этот метод включает приближенный расчет констант стабильности

1:1 внутрисферных комплексов, образуемых катионами металлов с различными лигандами, как заряженными, так и нейтральными [20]. Метод также основан на интегрировании функции радиального распределения катион-лиганд, которая рассчитывается на основе потенциала средней силы взаимодействия катион-лиганд. Для расчета потенциала средней силы используется модельный потенциал взаимодействия катион-лиганд, включающий кулоновский, поляризационный потенциалы и потенциал Леннарда-Джонса, и подбирается энергетически наиболее выгодная траектория сближения катиона с лигандом и ориентация лиганда относительно катиона. Растворитель рассматривается как непрерывный диэлектрик, характеризуемый диэлектрической константой. Лиганд описывается набором точечных зарядов, радиусом и поляризуемостью. Данный подход имеет следующие преимущества.

- Во-первых, он позволяет рассчитывать константы нестойкости комплексов, образуемых катионами с нейтральными лигандами. Например, в работе [21] описаны данные по расчету констант нестойкости 1:1 комплексов, образуемых различными катионами с некоторыми алифатическими и гетероциклическими аминами в водных растворах. Рассчитанные константы согласуются с экспериментальными в пределах порядка величин. Такая сравнительно невысокая точность предопределена грубостью модели лиганда. Однако расчеты правильно предсказывают тенденцию изменения констант при изменении радиуса и заряда катиона и заряда на электроно-донорном атоме лиганда.

- Во-вторых, использование упрощенной модели лиганда позволяет рассматривать широкий круг лигандов, в том числе многоатомные анионы. Модель может быть улучшена при использовании более точных параметров лиганда (точечных зарядов на атомах). Возможно рассматривать как монодентатную, так и многодентатную координацию катиона лигандом.

- В-третьих, метод позволяет исследовать комплексы переходных металлов и оценивать степень ковалентности координационной связи.

Ранее данный метод позволил правильно оценить порядок констант стабильности комплексов, образованных катионами щелочных, щелочноземельных и ряда переходных металлов с различными заряженными или нейтральными O- и N-донорными лигандами, в том числе аммиаком, аминами, анионами карбоксильных кислот и некоторыми молекулами [22].

Ниже приведены результаты применения рассматриваемого метода к исследованию комплексообразования трехвалентных лантанидов и актинидов с O-донорными лигандами. Эти катионы относятся к «жестким» и их взаимодействие с «жесткими» O-донорными лигандами имеет преимущественно ионную природу. Были рассчитаны

константы стабильности 1:1 комплексов трехвалентных актинидов и лантанидов с OH-, CO₃²⁻ и анионами ряда карбоксильных кислот методом интегрирования функции плотности радиального распределения лигандов относительно катиона. Эта функция определяется исходя из модельного потенциала взаимодействия катион-лиганд, взятого в виде суммы кулоновского, поляризационного и Леннард-Джонсова членов:

$$U(r) = U_{\text{кул}} + U_{\text{ЛДЖ}} + U_{\text{пол}}$$

Для учета ковалентного вклада в потенциал вводится безразмерный множитель:

$$U_{\text{ков}}(r) = U(r) \cdot (1 + \beta \cdot \exp[-\lambda(\gamma_{\text{равн}} - r)^2]),$$

в котором β - безразмерный параметр, характеризующий долю ковалентности связи, λ - параметр, характеризующий ширину области ковалентной связи, γ - расстояние от центра катиона до центра ближайшего (электроно-донорного) атома лиганда, $\gamma_{\text{равн}}$ - равновесное расстояние катион-лиганд. Потенциал средней силы взаимодействия катион-лиганд $W(r)$ выражен в континуальном приближении для кулоновского вклада:

$$W(r) = (U_{\text{кул}}/D + U_{\text{ЛДЖ}} + U_{\text{пол}}) \cdot (1 + \beta \cdot \exp[-\lambda(\gamma_{\text{равн}} - r)^2]),$$

где D - диэлектрическая константа растворителя. Ввиду того, что определенные различными авторами значения атомных зарядов одной молекулы заметно расходятся, к тому же нет общепринятого метода деления электронной плотности молекул на атомные вклады, в данной работе кулоновский член рассчитывался с использованием приближенной модели лиганда как совокупности нескольких зарядов. Монодентатные лиганды H₂O и OH⁻ описаны двухзарядной моделью, где более отрицательный заряд расположен в центре электроно-донорного атома O, посредством которого лиганд координируется катионом, а другой заряд расположен в центре остальной части молекулы. При расчете поляризационного вклада лиганд аппроксимирован сферой, а вклад потенциала Леннарда-Джонса учитывается лишь для взаимодействия катиона с ближайшими (электроно-донорными) атомами; для монодентатных лигандов модельный потенциал имеет форму (расстояния даны в Å, энергии в ккал/моль):

$$U(r) = 332z_1[z_2/r + z_3/(r + d/2)] + 4\epsilon[(r/\sigma)^{12} - (r/\sigma)^6] - 116z_1^2\alpha/(r + d/2 - 1 + \rho)^4,$$

где z_1 - заряд катиона, z_2 и l - заряд и радиус электроно-донорного атома лиганда, z_3 - заряд остальной части лиганда, d - средний диаметр лиганда, ϵ и σ - энергетический и геометрический параметры

потенциала Леннарда-Джонса, α - поляризуемость лиганда, ρ - корректирующий член поляризационного вклада.

Константа стабильности 1:1 комплекса в растворе получена интегрированием функции плотности распределения лигандов относительно катиона, расс

$$K = 0.0024\pi \int_0^{r_{\text{мин}}} [\exp(-W(r)/RT)] r^2 dr$$

Верхний предел интегрирования традиционно принят равным расстоянию от центра катиона до первого минимума плотности распределения ($r_{\text{мин}}$).

В данной работе рассчитаны константы устойчивости 1:1 комплексов Am³⁺, Cm³⁺, Bk³⁺, Cf³⁺ и трехвалентных лантанидов с O-донорными лигандами в водных растворах при бесконечном разбавлении (298 К). Координационные связи в этих комплексах преимущественно ионные, но включают некоторую ковалентную часть.

Параметры модельного потенциала взаимодействия катион-лиганд были определены для моногидратов катионов в газовой фазе, на основе данных квантово-механических расчетов. Значения σ подбирались так, чтобы соответствующее минимуму потенциала значение $\gamma_{\text{равн}}$ соответствовало квантово-механическим данным. Для всех катионов использовались следующие значения параметров: $\lambda=0.5 \text{ \AA}^{-2}$, $\epsilon=0.1$ ккал/моль, $l=1.4 \text{ \AA}$, заряд на атоме O воды $z_2=-0.43$ (в единицах заряда электрона), диаметр молекулы воды $d=3.5 \text{ \AA}$, поляризуемость молекулы воды $\alpha=1.45 \text{ \AA}^3$; корректирующий параметр ρ взят равным 3 \AA . Рассчитанные в предположении отсутствия ковалентного вклада ($\beta=0$) энергии образования моногидратов в газовой фазе $U(\gamma_{\text{равн}})$, оказались заниженными по сравнению с квантово-механическими данными. Предполагая, что это различие обусловлено частичной ковалентностью связей, сравнение рассчитанных двумя методами энергий связи для каждого катиона позволило определить параметр ковалентности β .

В ряду лантанидов параметр β постепенно растет с ростом атомного номера от 0.25 для лантана до 0.35 для лютеция; так же монотонно увеличивается β в ряду актинидов от 0.27 для актиния до 0.40 для лоуренсия. Если сравнивать лантаниды и актиниды с близкими значениями ионных радиусов, то у актинидов параметр β больше в среднем на 20%. Полученные значения параметров σ и β для каждого катиона использовались неизменными для расчетов констант комплексов с другими O-донорными лигандами. В таблице 2 приведены результаты расчетов для гидроксокомплексов и карбонатных комплексов. Заряд на атоме O гидроксиланиона взят равным -1.1, заряды на каждом атоме O карбонат-аниона взяты равными -1. Для карбонатных комплексов была принята бидентатная координация карбонат-аниона, лежащего в одной плоскос-

Таблица 2
Параметры ассоциации некоторых гидроксо- и карбонатных комплексов

Катион	σ Å	β	lgK гидроксо- комплексов		lgK карбонатных комплексов	
			расчет	литер. данные	расчет	литер. данные
Ce ³⁺	3.15	0.25	4.5	5.7 [23]	6,2	6,95 [25]
Pr ³⁺	3.12	0.26	4.6	5.9 [23]	6,3	7,03 [25]
Nd ³⁺	3.09	0.27	4.7	6.0 [23]	6,5	7,13 [25]
Pm ³⁺	3.06	0.26	4.8	5.77[23]	6,5	7,22 [25]
Sm ³⁺	3.05	0.29	4.9	6.1 [23]	6,7	7,30 [25]
Eu ³⁺	3.03	0.28	4.9	6.2 [23]	6,7	7,37 [25]
Gd ³⁺	2.99	0.28	5.0	6.0 [23]	6,8	7,44 [25]
Tb ³⁺	2.98	0.29	5.1	6.1 [23]	6,9	7,50 [25]
Dy ³⁺	2.96	0.30	5.2	6.0 [23]	7,0	7,55 [25]
Ho ³⁺	2.96	0.30	5.2	6.0 [23]	7,0	7,59 [25]
Er ³⁺	2.94	0.33	5.4	6.1 [23]	7,2	7,63 [25]
Tm ³⁺	2.91	0.33	5.5	6.3 [23]	7,3	7,66 [25]
Yb ³⁺	2.89	0.33	5.6	6.3 [23]	7,4	7,67 [25]
Lu ³⁺	2.86	0.33	5.7	6.4 [23]	7,5	7,70 [25]
Am ³⁺	3.05	0.35	5.3	6.1 [24]	7,1	7.7 [26]
Cm ³⁺	3.03	0.36	5.3	6.1 [24]	7,2	7.7 [26]
Bk ³⁺	3.02	(0.36)	5.3	5,8 [24]	7,2	7,8 [26]
Cf ³⁺	3.01	(0.36)	6,6	5,8 [24]	7,3	7,9 [26]

Таблица 3
Параметры ассоциации (lgK) некоторых карбоксилатных комплексов

Катион	ацетат		пропионат		гликолят		лактат		бензоат	
	Расчет	[28]	Расчет	[28]	Расчет	[28]	Расчет	[28]	Расчет	[28]
La ³⁺	2.6	2.24	2,6	2,34	2,6	2.75	2,5	2.87	2,5	2,54
Ce ³⁺	2.6	2.35	2,6	2.52	2,6	2.89	2,5	2.94	2,5	2,61
Pr ³⁺	2.7	2.44	2,6	2.58	2,6	2.96	2,6	3.12	2,6	2,68
Nd ³⁺	2.7	2.52	2,7	2.65	2,7	3.04	2,6	3.10	2,6	2,77
Pm ³⁺	2.7	-	2,7	-	2.7	-	2,6	-	2,6	-
Sm ³⁺	2.8	2.61	2,7	2.64	2,7	3.01	2,7	3.23	2,6	2,83
Eu ³⁺	2.8	2.58	2,7	2.70	2,7	2.97	2,7	3.27	2,7	2,78
Gd ³⁺	2.8	2.43	2,8	2.54	2,8	2.97	2,7	3.35	2,7	2,70
Tb ³⁺	2.9	2.33	2,8	2.48	2,8	2.96	2,7	3.32	2,7	2,57
Dy ³⁺	2.9	2.26	2,8	2.39	2,8	3.04	2,7	3.50	2,8	2,58
Ho ³⁺	2.9	2.24	2,8	2.43	2,8	2.98	2,7	3.41	2,8	2,63
Er ³⁺	3,0	2.21	2,9	2.41	2,9	3.20	2,8	3.63	2,8	2,54
Tm ³⁺	3.0	2.26	2,9	2.32	3,0	3.19	2,9	3.54	2,9	2,56
Yb ³⁺	3.0	2.56	3,0	2.33	3,0	3.15	2,9	3.64	2,9	2,56
Lu ³⁺	3.1	2.54	3,0	2.44	3,0	3.24	2,9	3.80	2,9	2,54
Am ³⁺	3,0	1.99[24]	2,9	-	2,9	2.59[29]	2,8	2.43[29]	2,8	-
Cm ³⁺	3,0	2.06[24]	2,9	-	2,9	2.59[29]	2,8	2.52[29]	2,9	-
Bk ³⁺	3,0	2.06[24]	2,9	-	2,9	2.65[29]	2,8	-	2,9	-
Cf ³⁺	3,0	2.11[24]	2,9	-	2,9	2.63[29]	2,9	-	2,9	-

ти с катионом.

Как видно из данных, представленных в таблице 2, рассчитанные константы стабильности хорошо согласуются с экспериментальными данными в пределах порядка величины и правильно отражают тенденцию изменения с изменением атомного номера.

Далее были рассчитаны константы устойчивости для карбоксилатных комплексов. Карбоксилатные анионы присутствуют в поверхностных и подземных водах, а также могут рассматриваться как модели гуминовых кислот, играющих важную роль в естественном связывании актинидов. Методика расчетов и формулы для потенциалов карбоксилатных комплексов описаны в работе [27]. Для карбоксилатных анионов использована трехзарядная модель, где два отрицательных заряда локализованы на атомах О, а третий заряд расположен в центре остальной части молекулы. Расчеты проводились для двух типов координации этих анионов – симметричной бидентатной и монодентатной. Результаты расчетов логарифмов констант для бидентатной координации приведены в таблице 3.

Примечание: значения $\lg K$ в работе [29] приведены для ненулевой ионной силы.

Как видно из таблицы 3, рассчитанные константы устойчивости согласуются с экспериментальными величинами в пределах порядка величины. В результате можно сделать вывод о том, что величина констант ассоциации определяется в первую очередь радиусом катиона и зарядом на донорных атомах О лиганда, тогда как размер лиганда играет второстепенную роль. Для монодентатной координации значения констант оказались несколько ниже.

Список литературы

1. Пирсон Р.Дж. //Успехи химии. 1971. Т.40. №7. С.1259.
2. Hancock R.D., Marsicano F. //Inorg. Chem.1980. V.19. №9. P.2709.
3. Kapinos L.E., Sigel H.//Inorg. Chim.Acta 2002 V.337. № P.131.
4. Chialvo A.A., Cummings P.T., Cochran H.D.et al. //J. Chem.Phys. 1995. V.103. №21. P.9379.
5. Chialvo A.A., Simonson J.M. // J.Chem.Phys. 2003. V.118.№17. P.7921.
6. Chialvo A.A., Gruszkiewicz M.S.,Simonson J.M. //J. Solut. Chem. 2009. V.38. №7. P.827.
7. Liu W., Wood R.H., Doren D.J.// J.Phys.Chem. 2008. V.B112. №24. P.7289
8. Chialvo A.A., Cummings P.T., Simonson J.M.// J.Chem. Phys. 2000. V.113.№18. P.8093.
9. Chialvo A.A., Simonson J.M. // J.Phys. Chem. 2007. V.C111. №43. P.15569.
10. Degreve L., Mazze F.M. //Molec. Phys. 2003. V.101. №10. P.1443.
11. Li X., Gong L.D., Yang Z.Z. //Science in China. Ser B: Chemistry. 2008 V.51. №12. P.1221.
12. Mile V., Pusztai L., Domingues H. et al. //J.Phys.Chem. 2009. V.B113. №31. P.10760.
13. Chen A.A., Pappu R.V. //J. Phys.Chem. 2007. V. B111. №23. P.6469.
14. Joung J.S., Cheatham T.F. //J.Phys.Chem. 2009. V. B113. №40. P.13279.
15. Fennell C.J., Bizjak A., Vlachy V.et al. // JPC. 2009 V.B113. №19. P.6782.
16. Megyes T., Bako I., Balint S. et al. //J.Molec.Liquids. 2006. V.129. №1-2. P.63.
17. Larentzos J.P., Criscenti L.J. //JPC. 2008 V.B112. №45. P.14243.
18. Lu G., Li Y., Li Ch. //Chinese J.Chem Phys. 2007/ V.20. №1. P.22.
19. Hawlicka E., Swiatla-Wojcik D. //J.Chem.Phys. 2003. V.119. №4. P.2206.
20. Мишустин А.И. // Журн. неорганической химии. 2004. Т.49. №1. С.84.
21. Мишустин А.И. //Журн. неорганической химии. 2008. Т.53. №9. С.1475.
22. Мишустин А.И. //Журн. неорганической химии. 2007. Т.52. №2. С.326.
23. Baes C.F., Mesmer R.E. The hydrolysis of cations. NY. Wiley.1976.
24. Martell A.E., Smith R.M. Critical stability constants. NY. Plenum. 1974-1986. V.1-6.
25. Millero F.J. //Geochim. Cosmochim. Acta. 1992. V.56. №8. P.3123.
26. Cantrell K.J. //Polyhedron. 1988. V.7. №7. P.573.
27. Мишустин А.И. //Журн. неорганической химии. 2005. Т.50. №11. С.1906.
28. Wood S.A. //Engineer. Geology. 1993. V.34. №3-4. P.229.
29. Portanova R., Lajunen L.H.J., Tolazzi M. et al. //Pure Appl. Chem. 2003. V.75. №4. P.495.

« Левинтерские чтения – 2009 »

И.К. МОИСЕЕВ, профессор, председатель Самарского отделения РХО им. Д.И. Менделеева

22-25 октября 2009 г. в Самарском государственном техническом университете прошла II Всероссийская научная конференция «Переработка углеводородного сырья. Комплексные решения. Левинтерские чтения – 2009», посвященная памяти видного ученого, профессора СГТУ Михаила Ефимовича Левинтера.

Организаторы и поддержка

Конференция была организована Российским химическим обществом им. Д.И.Менделеева, Министерством промышленности и энергетики Самарской области, Самарским государственным техническим университетом, Самарским отделе-



Профессор М.Е. Левинтер

нием РАН при поддержке ОАО «Новокуйбышевский нефтеперерабатывающий завод», ОАО «Сызранский нефтеперерабатывающий завод», ОАО «Куйбышевский нефтеперерабатывающий завод», ООО «Новокуйбышевский завод масел и присадок», ООО «Новокуйбышевский завод катализаторов».

Конференция проходила на базе отдыха «Политехник».

В работе конференции приняло участие 188 человек, из них 151 – иногородние участники. География участников включала 11 городов: Москва, Уфа, Самара, Новокуйбышевск, Ангарск, Омск, Томск, Санкт - Петербург, Дзержинск, Казань.

В ходе работы конференции было заслушано и обсуждено 13 пленарных, 20 секционных и 19 стендовых докладов.

Представленные организации

1. Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, г. Новосибирск.
2. Самарский государственный технический университет, г. Самара.
3. Институт проблем переработки углеводородов СО РАН, г.Омск.
4. ОАО «Тольяттиазот», г. Тольятти.
5. ОАО «Средневолжский научно-исследовательский институт по нефтепереработке» (ОАО «СвНИИ НП»), г.Новокуйбышевск.
6. РГУ нефти и газа им.И.М.Губкина, г. Москва.
7. ОАО НК «Роснефть», г. Москва.
8. ОАО «Куйбышевский НПЗ», г. Самара.
9. Московская государственная академия тонкой химической технологии, г. Москва.
10. Российской академии наук Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского

(ИОХ РАН), г.Москва.

11. ООО «Компания «Катахим», г. Москва.
12. ЗАО «Компамин», г. Санкт-Петербург.
13. ООО «Новокуйбышевский завод катализаторов», г. Новокуйбышевск.
14. ОАО «Сызранский НПЗ», г. Сызрань.
15. ОАО «Новокуйбышевский НПЗ», г. Новокуйбышевск.
16. ОАО «Ангарский завод катализаторов и органического синтеза, г. Ангарск.
17. Санкт-петербургский государственный технический университет (ТУ), Г. Санкт-Петербург.
18. ЗАО «ВНИИОС НК», Самарская область, пос. Новосемейкино.
19. ООО «Новокуйбышевский завод масел и при-садок», г.Новокуйбышевск.
20. Уфимский государственный нефтяной техни-ческий университет, г.Уфа.
21. ФГУП «ГосНИИ «Кристалл», г. Дзержинск.
22. Самарский государственный университет, г. Самара.

В рамках конференции проводилась экскурсия «Вечерняя Самара».

Молодые участники конференции были награждены дипломами за высокий уровень доклада. Среди них: Климов Н.А. (Московская государственная академия тонкой химической технологии, г. Москва), Шупляк А.Ю. (Самарский государственный технический университет, г. Самара), Максимов Н.М. (Самарский государственный технический университет, г. Самара), Резниченко С.О. (Санкт-петербургский государственный технический институт (ТУ), г. Санкт-Петербург), Никульшин П.А. (Самарский государственный технический уни-верситет, г. Самара).

Решение конференции

1. Предлагается Самарскому государственному техническому университету провести следующую III Всероссийскую научную конференцию «Переработка углеводородного сырья. Комплексные ре-



На пленарном заседании конференции



Участники конференции

шения. (Левинтерские чтения)» осенью 2012 г.

2. Расширить географию участников конференции.

3. Организовать в рамках конференции круглый стол представителей выпускающих кафедр по специальности 240403 «Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов».

4. Организовать круглый стол представителей нефтеперерабатывающих предприятий, катализаторных производств и ведущих научных школ по разработке технологии и катализаторов.

5. Пригласить принять участие в работе конференции руководителей департаментов нефтегазопереработки нефтяных компаний России.

6. Выйти с предложением в редакцию журнала «Нефтепереработка и нефтехимия» о публикации материалов конференции.

7. Просить Научные советы «Нефтехимия» и «Каталитиз» РАН обратиться в соответствующие министерства и комитет по науке Государственной Думы по вопросу об увеличении доли прибыли направляемой на финансирование научных разработок в области нефтегазопереработки и катализа.

В РЕГИОНАЛЬНЫХ ОТДЕЛЕНИЯХ РХО ИМ. Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА

В Алтайском отделении РХО

А.В. ВИХАРЕВ, профессор, Председатель Алтайского отделения РХО

15 октября в Ползуновском техническом университете (АлтГТУ им И.И. Ползунова, г. Барнаул) прошли торжества по случаю 50-летия химико-технологического факультета. На собрании присутствовало около 600 человек: нынешние и бывшие студенты (всего факультет за эти годы подготовил более 4000 специалистов); гости из родственных вузов и академических организаций г.г. Бийска, Томска, Кемерово, Красноярска; ветераны; представители администрации.

Из первого набора 1959 года на торжества пришли 13 человек. Среди них три доктора и шесть кандидатов наук, что свидетельствует о добротной профессиональной подготовке выпускников факультета. Вместе с первыми студентами на сцену поднялись трое ветеранов, которые в год основа-

ния факультета были первыми преподавателями.

Деканату, кафедрам гости подарили сувениры, картины, вычислительную технику. А артисты порадовали присутствующих музыкальными номерами.

К пятидесятилетию были приурочены две Российские научно-практические конференции - «Исследования и достижения в области теоретической и прикладной химии» и «Перспективные разработки в области химической технологии и инженерной экологии «ХимЭкоТех-2009»»; вышел очередной номер журнала «Ползуновский вестник», полностью посвященный химической тематике.

От имени Президиума РХО им. Д.И. Менделеева факультет с юбилеем поздравил президент общества академик Саркисов П.Д.

Отчет о работе секции «Физическая и коллоидная химия» РХО им. Д.И. Менделеева за 2009 год

Н.А. СМЕРНОВА, член-корреспондент РАН, председатель секции

Мероприятие	Срок проведения	Ответственные исполнители
1. Постоянно действующие семинары		
Молекулярная термодинамика сложных флюидов.	В течение года, по специальной программе (см. Приложение 1)	проф. А.И.Викторов
Растворы частично кристаллических природных полимеров	февраль-декабрь 2009 г.	проф. Н.П.Новоселов
Российско-финский семинар «Chemical Engineering»	В течение года, по специальной программе (см. Приложение 2)	проф. И.А.Зверева
Современные проблемы химической термодинамики и кинетики	В течение года, по специальной программе (см. Приложение 3)	проф. А.М.Тойкка
Физико-химия стекла и стеклообразных расплавов	В течение года, по специальной программе (см. Приложение 4)	проф. В.Г.Конаков
Физическая химия природных полимеров	февраль-декабрь 2009 г.	проф. Г.М.Полторацкий
Хроматография, ионный обмен, альтернативные методы	В течение года, по специальной программе (см. Приложение 5)	проф. А.А.Демин
2. Организация и проведение совещаний и конференций		
Участие в организации и проведении V Городского турнира школьников по химии на тему «Химия и Медицина»	Санкт-Петербург, Менделеевский центр СПбГУ, 12 апреля 2009 г.	проф. И.А.Зверева Турнир подготовлен оргкомитетом студентов и преподавателей химического факультета СПбГУ
Участие в организации и проведении Международной конференции «Основные тенденции развития химии в начале XXI века»	С.-Петербург, Менделеевский центр СПбГУ и Химический факультет СПбГУ, 21-24 апреля 2009 г.	Члены оргкомитета: Н.А.Смирнова А.М.Тойкка
Участие в организации и проведении V Санкт-Петербургской конференции молодых ученых «Современные проблемы науки о полимерах»	Санкт-Петербург, ИВС РАН, апрель 2009 г.	проф. Г.М.Полторацкий
Участие в организации и проведении 4-ой студенческой научной конференции кафедры физической и коллоидной химии СПбГТУРП и ее филиала в ИВС РАН	С.-Петербург, СПбГТУРП, май 2009 г.	проф. Г.М.Полторацкий
Участие в организации и проведении XVII Международной конференции по химической термодинамике в России (RCST 2009)	Казань, 29 июня – 3 июля 2009 г.	Члены оргкомитета: В.В.Гусаров А.Г.Захаров Н.А.Смирнова
Участие в организации и проведении VII Международной конференции «Лиотропные жидкие кристаллы и наноматериалы» и симпозиума «Успехи в изучении жидких кристаллов» (V Чистяковские чтения)	Иваново, 22–25 сентября 2009 г.	проф. Н.В.Усольцева (сопредседатель оргкомитета конференции)
Организация и проведение Открытого семинара РХО им. Д.И.Менделеева	С.-Петербург, Химический факультет СПбГУ Проведено 2 заседания: 23 апреля и 29 декабря 2009 г. Докладчики: Ж.Шуане (Франция), В.Кочербитов (Швеция)	проф. И.А.Зверева
3. Организационная работа		
Заседания бюро секции	Менделеевский центр, Санкт-Петербург. Проведено 2 заседания	член-корр. РАН Н.А.Смирнова

Приложение 1

**Отчет о работе научного семинара
«Молекулярная термодинамика сложных флюидов»**

Место проведения: химический факультет СПбГУ; Менделеевский центр СПбГУ

Бюро семинара: проф. Викторов А.И. (председатель), проф., чл.-корр. РАН Смирнова Н.А., проф. Соколова Е.П.

Дата	Докладчик	Тема доклада
2 ноября	А.Л.Макаров (СПбГУ)	Мицеллообразование и макросвойства водных растворов цетилтриметиламмоний бромида и додецилсульфата натрия с органическими солями
27 октября	Prof. Evelyne Neau (Universite Mediterranee, France)	Petroleum fluids with polar and associating compounds: a cubic EoS approach for the prediction of phase equilibria under high pressures
13 ноября	В.С.Захаров (СПбГУ)	Компьютерное моделирование сольватации целлюлозы в полярных растворителях
20 ноября	О.С.Субботин (ИНХ СО РАН)	Моделирование свойств двойных гидратов этан+метан при низких температурах

Приложение 2

Отчет о работе

российско-финского семинара «Chemical Engineering»

Место проведения: СПбГУ, Менделеевский центр

Отв.: д.х.н., проф. И.А.Зверева

Дата	Докладчик	Тема доклада
25 сентября	проф. А.Краславский (Технический университет Лапеенранты, Финляндия)	Проблемы и перспективы российско-финских научных контактов в области «Knowledge management»

Приложение 3

**Отчет о работе научного семинара
«Современные проблемы химической термодинамики и кинетики»**

Место проведения: СПбГУ; ИХС РАН

Бюро семинара: проф. Тойка А.М. (председатель), проф., чл.-корр. РАН Гусаров В.В., проф. Устьяров О.Г.

Дата	Докладчик	Тема доклада
17 февраля	К.Н.Семенов (СПбГУ)	Растворимость легких фуллеренов в органических растворителях
3 июля	А.В.Лукашин (МГУ)	Создание функциональных нанокмполитов на основе твердофазных матриц с упорядоченной пористостью
15 декабря	А.М.Тойка (СПбГУ)	О 10-й Объединенной Европейской термодинамической конференции (JETC-10) и XVII Международной конференции по химической термодинамике в России (RCST 2009)
22 декабря	О.Г.Устьяров (СПбГУ)	Поверхностная проводимость и электропроводность мицеллярных растворов

Приложение 4

**Отчет о работе научного семинара
«Физическая химия стекла и стеклообразующих расплавов»**

Место проведения: СПбГУ, Менделеевский центр

Отв.: д.х.н., проф. В.Г.Конаков

Бюро семинара: проф. О.В.Януш (председатель), проф. В.Г.Конаков (зам. председателя),
проф. В.И.Арбузов, проф. О.В.Мазурин, проф. А.А.Пронкин, Т.С.Маркова (секретарь).

Дата	Докладчик	Тема доклада
4 февраля	С.В.Немилов (СПбГУ ИТМО)	Нулевая энтропия стекол как физическая реальность
4 марта	О.В.Мазурин (ООО «Термекс»)	Способы получения надежных результатов исследования свойств стекол и возможность их внедрения в мировую практику
1 апреля	А.А.Осипов, Л.М.Осипова (Институт минералогии УрО РАН)	Экспериментальное изучение структуры щелочноборатных стекол и расплавов методом высокотемпературной спектроскопии комбинационного рассеяния света
	В.Е.Еремяшев А.А.Осипов, Л.М.Осипова (Институт минералогии УрО РАН; Южно-Уральский ГУ)	Импульсная катодолюминесценция как метод исследования структурных особенностей щелочных боратных стекол
3 июня	А.А.Белюстин (СПбГУ)	Сто лет стеклянному электроду
2 сентября	Б.З.Певзнер (ООО «Лаборатория свойств стекла»)	Спекание порошков кристаллизующихся стекол (вязкость, кристаллизация и диаграмма плавкости стеклообразующей системы «в одном флаконе»)
	О.А.Прохоренко (ООО «Лаборатория свойств стекла»)	Рассеяние излучения в ближней ИК-области при прохождении через гетерогенные системы
7 октября	Д.С.Сандитов, В.В.Мантатов, Б.Д.Сандитов (Бурятский НЦ СО РАН; Бурятский ГУ)	Ангармонизм колебаний решетки и пластичность стекол
11 ноября	Г.Г.Бойко (ИХС РАН)	Моделирование диоксида кремния в жидком, стеклообразном и кристаллическом состояниях методом молекулярной динамики
2 декабря	В.В.Голубков (ИХС РАН)	Некоторые вопросы кинетики фазового разделения (кристаллизации) и релаксации структуры по данным РМУ

Приложение 5

**Отчет о работе научного семинара
«Хроматография, ионный обмен, альтернативные методы»**

Место проведения: Менделеевский центр, СПбГУ

Отв.: д.х.н., проф. А.А.Демин

Бюро семинара: проф. А.А.Демин (председатель), проф. А.А.Блохин (зам. председателя), А.Т.Меленевский (секретарь), А.Г.Болдырев, проф. А.И.Гинак, А.А.Горбунов, проф. Ю.А.Кокотов.

Дата	Докладчик	Тема доклада
20 апреля	Н.С.Колодзева Н.С.Григорова, М.А.Синякова (СПбГУ)	Свойства гетерогенных мембран на основе неорганических ионитов и полимерного связующего
	Д.В.Жилинский (Ин-т биорегуляции и геронтологии, Санкт-Петербург)	Фракционирование жесткоцепных полимеров при микрофльтрации на трековых мембранах
	А.Г.Болдырев (НИИ особо чистых биопрепаратов, Санкт-Петербург)	Композиционные вакцины по Гурвичу. Новые подходы
10 октября	А.С.Чугунов (СПбГТУ)	Использование сорбционно-мембранной технологии для очистки воды и жидких отходов
	В.И.Слесарев, А.В.Шавров (СПб ГМА им. И.И.Мечникова)	Вода – структурно-информационные свойства, явление аквакоммуникации
9 ноября	О.А.Крохина, В.Н.Постнов (СПбГУ)	Синтез кремнеуглеродных сорбентов для хроматографического разделения фуллеренов
14 декабря	М.А.Синякова, М.К.Прудников (СПбГУ)	Поглощение различных ионов золами каменных углей

3rd EuChemS Chemistry Congress

Chemistry – the Creative Force



29.08. – 02.09.2010 · NÜRNBERG · GERMANY

Topics

Innovative Materials
Resources and Environment
Supramolecular Systems
Catalysis
Molecular Life Sciences
Analysis, Manipulation and Simulation
Advances in Organic and Inorganic Chemistry

Chairmen

François Diederich
Swiss Federal Institute of Technology Zurich/CH
Andreas Hirsch
University Erlangen-Nuremberg/D



www.euchems-congress2010.org

Contact: Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V.
Congress Team
P.O. Box 90 04 40
60444 Frankfurt am Main · Germany
Phone: +49 69 7917-358/-366
E-mail: euchems-congress2010@gdch.de

CALL FOR PAPERS
SUBMIT YOUR ABSTRACT NOW
www.euchems-congress2010.org/abstracts.htm