

optimal synthesis protocol were the deposition rate of the magnetic particles in a magnetic field and stability in solution during storage. The methods of synthesis of nanoparticles of diameter 10 nm, characterized by a narrow size distribution, high stability in solution, sufficient magnetic susceptibility and a low degree of aggregation. The method allows the synthesis at room temperature and atmospheric air.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМОВ РЕАКЦИЙ ОКИСЛОВ АЗОТА С СЕРУСОДЕРЖАЩИМИ И НИТРОСОСОДЕРЖАЩИМИ СОЕДИНЕНИЯМИ

Плехович С.Д.

ГОУ «Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»
Российская Федерация, 603950 Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23., e-mail: senypl@mail.ru

Методом UB3Lyp/6-31g+d проведено моделирование взаимодействия нитро- и нитрозосоединений с оксидами серы. Рассмотрен один из возможных механизмов реакции фотоокисления нитросоединений в присутствии нитрозосоединений в разной мультиплетности. Для проведения расчетов использован программный комплекс Gaussian03. При помощи методов TS, QST2 и QST3 получены переходные состояния реакции окисления исследуемого вещества. Обнаружено, что во время протекания исследуемых реакций происходит образование нитрозооксидов. Наиболее выгодным по энергиям активации является протекание данных реакций для участников, находящихся в триплетных состояниях. Рассчитаны энергии активации для каждого этапа превращения. Результаты нахождения переходных состояний подтверждены наличием одной мнимой частоты, а также успешным проведением процедуры восстановления координаты реакции методом IRC.

QUANTUM CHEMICAL STUDY OF THE MECHANISM OF REACTION BETWEEN NITROGEN OXIDES WITH S- AND NITROSO- CONTAINING COMPOUNDS

Plechovich S.D.

Nizhnii Novgorod State University, Russia, 603950, Nizhnii Novgorod, Gagarin Ave., 23. NNGU.
Chemical Department, e-mail: senypl@mail.ru

UB3Lyp/6-31g+d was used to model reactions of nitro- and nitroso compounds with sulfur oxides. Gaussian03 computer program was used to do the study. It was discussed one of the possible mechanism of the nitrocomponent photooxidation in the presence of nitroso component of different multiplicity. We determined geometries and electronic structure parameters of the reactions by means of QST2 and QST3 procedures. We have found that nitroso oxides formation occurs in the course of the oxidations. The most favorable in energy was to proceed the reactions in the triplet states. For every reaction step involved the activation energies were determined. The reliability of our calculations was supported by observing the only imaginary frequency. Besides, we have performed the IRC calculations to recover the reaction coordinate paths.

ОЧИСТКА SO₂ – СОДЕРЖАЩИХ ВЫБРОСОВ МЕЛАМИНО–ФОРМАЛЬДЕГИДНЫМИ СМОЛАМИ

Постникова И.Н., Павлова И.В., Егорова О.В.

ФГБОУ ВПО «Дзержинский политехнический институт (филиал) Нижегородского государственного
технического университета им. Р.Е. Алексеева», Дзержинск, Россия
(606026, г. Дзержинск, Нижегородской области, ул. Гайдара, 49), e-mail: 1924TNV@mail.ru

Объектом исследования является продукт конденсации меламина и формальдегида – меламиноформальдегидная смола. В результате экспериментов исследованы физико-химические свойства меламиноформальдегидной смолы, определены её адсорбционные свойства, оптимизирован состав. В статье приведены методы анализа, использованные в процессе исследования. Получены новые данные по растворимости сорбента в воде и водных растворах серной кислоты, показывающие преимущество меламиноформальдегидной смолы перед карбамидоформальдегидной. Получены новые данные о влиянии температур и содержания диоксида серы в исходном газе на адсорбционную емкость полимерного сорбента. На основе полученных экспериментальных данных разработан термостойкий полимерный сорбент, позволяющий эффективно извлекать из дымовых и отходящих газов диоксид серы. Полученные результаты составили основу для разработки технологии очистки различных газовых выбросов от диоксида серы.

CLEANING OF SO₂-CONTAINING EMISSIONS BY MELAMINEFORMALDEHYDE RESIN

Postnikova I.N., Pavlova I.V., Egorova O.V.

Dzerzhinsk polytechnic institute (filiation) of the Nizhny Novgorod state technical university
named R.E. Alekseeva, Dzerzhinsk, Russia, (606026, Dzerzhinsk, Gaidar street, 49), e-mail: 1924TNV@mail.ru

The object of study is the condensation product of melamine and formaldehyde - melamine-formaldehyde resin. The experiments investigated the physicochemical properties of resin, its composition is optimized. The paper presents