

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 – меламинаформальдегидная смола. В результате экспериментов исследованы физико-химические свойства меламинаформальдегидной 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 меламинаформальдегидной 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

the methods of analysis used in the research process. The new data on the solubility of the sorbent in water and aqueous sulfuric acid solutions, showing the advantage of urea-melamine-formaldehyde resin before. New data on the effect of temperature and the content of sulfur dioxide in the feed gas to the adsorption capacity of the polymer sorbent. On the basis of the experimental data developed heat-resistant polymeric sorbent that effectively removing from flue and exhaust gases, sulfur dioxide. The results formed the basis for the development of treatment technology of various gases from sulfur dioxide.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА РЕГЕНЕРАЦИИ ТВЁРДЫХ ОСАДКОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ РАСТВОРОВ МЕЛАМИНА

Романова Г.А., Кондрашова Ю.Э.

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

В результате ранее проведённых исследований изучено влияние подвижности суспензии, объёмного расхода газа, температурного режима процессов абсорбции диоксида серы водной суспензией меламина. В настоящей работе показано влияние примесей в отходящих газах ТЭЦ, одновременно присутствующих с диоксидом серы, на процесс регенерации твёрдых осадков, получаемых фильтрацией раствора, полученного после очистки технологических газов водной суспензией меламина; изучены дериватограммы полученных образцов осадка, составлены материальные балансы опытов и определены потери массы образцов в зависимости от температуры разложения и состава осадков, показано влияние на химический состав полученных образцов температуры абсорбции, состава исходных газов и вида газа носителя. Рассчитаны степени абсорбции диоксида серы, десорбции полученных образцов, окисления диоксида серы до сульфата меламина. Выполнены аналитические методы определения состава газовой фазы.

INVESTIGATION OF THE REGENERATION PROCESS OF SOLID PRECIPITATION DERIVED FROM MELAMINE SOLUTION

Romanova G.A., Kondrashova Y.E.

Dzerzhinsky Polytechnic Institute (branch) of the Nizhny Novgorod State Technical University R.E. Alexeyev,
Dzerzhinsk, Russia (606026 , Dzerzhinsk, Nizhny Novgorod region, street Gaidar, 49), e-mail: 1924TNV@mail.ru

As a result of earlier conducted researches influence of mobility of suspension, a volume consumption of gas, a temperature mode of processes of absorption of dioxide of sulfur is studied by water suspension of melamine. In the real work influence of impurity in flue gases of the combined heat and power plants which are at the same time present with dioxide of sulfur, on process of regeneration of the firm precipitation received by a filtration of solution, received after purification of technological gases by water suspension of melamine is shown; are studied derivatograms the received samples of a deposit, material balances of experiences are made and losses of weight of samples depending on temperature of decomposition and structure of a precipitation are defined, influence on a chemical composition of the received samples of temperature of absorption, composition of initial gases and a type of gas of the carrier is shown. Extents of absorption of dioxide of sulfur, desorption of the received samples, oxidations of dioxide of sulfur to melamine sulfate are calculated. Analytical methods of definition of structure of a gas phase are executed.

ВЛИЯНИЕ ДОПИРУЮЩИХ ИОНОВ НА КАТАЛИТИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ ОКСИДА ЦЕРИЯ В РЕАКЦИЯХ ОКИСЛЕНИЯ УГЛЕРОДСОДЕРЖАЮЩИХ ВЕЩЕСТВ

Русских О.В., Тонкушина М.О., Гргегорьевский К.В.

Уральский федеральный университет (Научно-исследовательский институт физики и прикладной
математики), 620000, Екатеринбург, пр. Ленина, 51, e-mail: olga.v.russkikh@mail.ru

В настоящей работе методом пиролиза полимерно-солевых композиций осуществлен синтез допированных оксидных образцов $Ce_{1-x}Me_xO_2$ ($Me = Cs, Cu, Ag, Sm, Pr$; $x = 0 - 0.2$). Изучены фазовый состав, удельная поверхность, морфология поверхности полученных образцов. Исследована каталитическая активность полученных образцов в реакции окисления сажи и монооксида углерода молекулярным кислородом. Каталитическую активность в реакции окисления сажи изучали как в изотермических, так и в неизотермических условиях при создании плотного контакта между частицами сажи и оксида. В качестве образцов использовали «реальную» сажу, взятую из авиационных двигателей на обкаточном стенде. Каталитическую активность в реакции окисления монооксида углерода изучали в установке проточного типа, в котором реализовывался режим, близкий к режиму идеального вытеснения. В результате исследования было установлено влияние природы допирующих ионов (Cs, Cu, Ag, Sm, Pr) на каталитическую активность CeO_2 в реакциях окисления сажи и монооксида углерода молекулярным кислородом.