

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
РОССИЙСКИЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Д. И. МЕНДЕЛЕЕВА

УСПЕХИ
В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ
ТЕХНОЛОГИИ

Том XXXIII

№ 2

Москва
2019

УДК 66.01-52
ББК 24.35
У78

Рецензент:
Российский химико-технологический университет
имени Д. И. Менделеева

Успехи в химии и химической технологии: сб. науч. тр. Том XXXIII,
У78 № 2 (212). – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2019. – 38 с.

В сборнике "Успехи в химии и химической технологии" опубликованы статьи по актуальным вопросам в области теории и практики устойчивого развития в рамках МКХТ-2019.

Материалы сборника были представлены для обсуждения на XI научно-практической конференции: «Образование и наука для устойчивого развития», посвященной Международному году Периодической таблицы химических элементов.

Сборник находится в открытом доступе, научные статьи включены в систему Российского индекса научного цитирования (РИНЦ) на платформе Elibrary.ru.

Сборник представляет интерес для научно-технических работников, преподавателей, аспирантов и студентов химико-технологических вузов.

УДК 66.01-52
ББК 24.35

Содержание

«ОКРУЖАЮЩАЯ СРЕДА И УСТОЙЧИВОЕ РАЗВИТИЕ»

Шеленкова Е.П., Кривобородов Е.Г.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДИМЕТИЛФОСФАТА 1,3-ДИМЕТИЛИМИДАЗОЛИЯ В КАЧЕСТВЕ ДЕМЕРКАПТАНИЗИРУЮЩЕГО АГЕНТА 7

Булаева В.В., Комстачев К.Ю., Кузнецов В.А.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ СОЕДИНЕНИЙ КАЛЬЦИЯ И АММИАКА В ВОЗДУХЕ МЕТОДОМ ПАССИВНОЙ ДОЗИМЕТРИИ 9

Джамолидинова Н.Ш., Кривобородов Е.Г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДИМЕТИЛФОСФАТА 1,3-ДИМЕТИЛИМИДАЗОЛИЯ С ЭЛЕМЕНТНОЙ СЕРОЙ МЕТОДОМ ЯМР-СПЕКТРОСКОПИЯ 12

Немеш И.И., Кривобородов Е.Г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИМИДАЗОЛИЕВЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ С КОМПЛЕКСАМИ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ..... 15

«ЗЕЛЕНАЯ ХИМИЯ ДЛЯ УСТОЙЧИВОГО РАЗВИТИЯ»

Атабаева М.А., Джеджея В.Т., Лусс А.Л., Устинова М.С., Штильман М.И.

ПОЛИМЕРНЫЕ ФОРМЫ РЕГУЛЯТОРОВ РОСТА РАСТЕНИЙ 18

Казимир А.Р., Егорова А.Н., Цирельсон В.Г.

ДАВЛЕНИЕ И СИЛЫ В ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМЕ КОНФОМЕРОВ С7 ДИАМИДА ГЛЮТАМИНОВОЙ КИСЛОТЫ В ОБЛАСТИ НЕКОВАЛЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ..... 20

Мендруль В.В., Серегина Т.С., Ивановская Е.В., Деревнин И.А., Дятлов В.А.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КЛЮЧЕВЫХ САЙТОВ СВЯЗЫВАНИЯ ГОССИПОЛА С ДИАЛЬДЕГИДПОЛИСАХАРИДАМИ 23

Серегина Т.С., Мендруль В.В., Ивановская Е.В., Харитонова В.Г., Деревнин И.А., Дятлов В.А.

МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ БИОРАЗЛАГАЕМЫЕ ТКАНЕЗАМЕЩАЮЩИЕ МАТЕРИАЛЫ..... 26

Харитонова В.Г., Серегина Т.С., Деревнин И.А., Ивановская Е.В., Мендруль В.В., Дятлов В.А., Лусс А.Л.

ИНТЕРМЕДИАТЫ ДЛЯ СИНТЕЗА ПОЛИ-2-ЦИАНАКРИЛАТОВ 29

**«СОЦИАЛЬНО-ЭКОНОМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ УСТОЙЧИВОГО
РАЗВИТИЯ»**

Кресо́ва А. М.

ГЕНДЕРНАЯ СЕГРЕГАЦИЯ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ В РОССИИ 32

Фро́лова А. В., Шушу́нова Т. Н.

**АНАЛИЗ МЕЖДУНАРОДНОГО И ОТЕЧЕСТВЕННОГО ОПЫТА ЦИФРОВОЙ
ТРАНСФОРМАЦИИ ГОСУДАРСТВЕННОГО УПРАВЛЕНИЯ 34**



В соответствии с приказом ректора № 14-ОД от 06.03.2019, 23 - 25 апреля 2019 года, в РХТУ имени Д.И. Менделеева, в рамках МКХТ-2019, была проведена XI научно-практическая конференция: «Образование и наука для устойчивого развития», посвященная Международному году Периодической таблицы химических элементов.

В ходе конференции было проведено два пленарных и три секционных заседания, в которых приняли участие более 150 студентов и сотрудников университета, а также представители других научных и учебных организаций г. Москвы.

На пленарных заседаниях были заслушаны доклады о создании и возможных направлениях развития периодической таблицы, так с докладом «История классификации химических элементов. Периодической таблице Д.И. Менделеева 150 лет!» выступил д.х.н, профессор, кафедры ЮНЕСКО «Зеленая химия для устойчивого развития» РХТУ имени Д.И. Менделеева Дмитрий Исхакович Мустафин.

Большой интерес вызвал доклад к.т.н, доцента кафедры ЮНЕСКО «Зеленая химия для устойчивого развития» РХТУ имени Д.И. Менделеева Екатерины Сергеевны Оганесян «Визуальное отображение Периодического закона с учетом его многомерности».

Значительный интерес у участников пленарных заседаний вызвали также материалы, представленные в видео фильме вице-президента Лондонского королевского общества, профессора химии в Ноттингемском университете Мартина Полякофф «The Periodic Table on Videos. Moscoveum» и видео фильме «Менделеев и его таблица».

С большим вниманием участники заключительного пленарного заседания конференции заслушали доклад выпускника инженерного физико-химического факультета МХТИ (в настоящее время РХТУ) имени Д.И. Менделеева, участника ликвидации Чернобыльской аварии, к.х.н. Анатолия Борисовича Иванова «Техногенные катастрофы и устойчивое развитие. Воспоминания о работе по ликвидации последствий катастрофы на Чернобыльской АЭС».

Авторы лучших докладов, заслушанных на секционных заседаниях, были награждены дипломами и подарками и рекомендованы к публикации.

Секция

**«ОКРУЖАЮЩАЯ СРЕДА И УСТОЙЧИВОЕ
РАЗВИТИЕ»**

Председатель секции – профессор Д.И. Мустафин,

секретарь секции – ассистент Е.Г. Кривобородов.

УДК 54.057, 54.058

Шеленкова Е.П., Кривобородов Е.Г.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДИМЕТИЛФОСФАТА 1,3-ДИМЕТИЛИМИДАЗОЛИЯ В КАЧЕСТВЕ ДЕМЕРКАПТАНИЗИРУЮЩЕГО АГЕНТА

Шеленкова Елизавета Петровна, магистрант 1 года Института Проблем Устойчивого Развития;
Кривобородов Ефрем Георгиевич, аспирант, ассистент кафедры ЮНЕСКО «Зеленая химия для устойчивого развития», e-mail: vv1992@yandex.ru;

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия
 125047, Москва, Миусская пл., д. 9

Исследование реакционной способности ионной жидкости диметилфосфата 1,3-диметилимидазола по отношению к этантиолу позволяет определить возможность использования диметилфосфата 1,3-диметилимидазола в качестве демеркаптанизирующего агента.

Ключевые слова: нефтеочистка, ионные жидкости, демеркаптанизация, полисульфидные олигомеры, сера.

USE OF 1,3-DIMETHYLIMIDAZOL DIMETHYL PHOSPHATE AS A DEMERCAPTANIZING AGENT

Shelenkova E.P., Krivoborodov E.G.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

The research of the reactive ability of ionic liquid dimethylphosphate 1,3-dimethylimidazole in relation to the sulphur mercaptan to determine the possibility of using dimethylphosphate 1,3-dimethylimidazole as demercaptanization agent.

Keyword: oil treatment, ionic liquids, demercaptanization, polysulfide oligomers, sulfur.

В современных условиях роста глобального промышленного потребления перспективными являются поиски и разработки новых и экономически выгодных методов и технологий обессеривания нефтей и нефтепродуктов, отвечающих современным экономическим и экологическим требованиям. Особое внимание в этой проблеме заслуживают исследования в области селективной очистки нефтяных фракций с использованием ионных жидкостей – зеленых растворителей [1].

Очистка нефтепродуктов от серы связана с постоянным повышением требований к качеству моторных и печных топлив и с решением вопросов охраны окружающей среды [2].

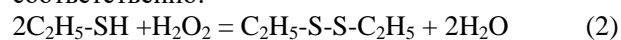
Применение ионных жидкостей для очистки нефтей и нефтепродуктов от серы и серодержащих соединений является перспективным направлением области нефтеочистки. Высокая эффективность ионных жидкостей для обессеривания дизельного топлива была продемонстрирована на примере использования ИЖ, содержащих в качестве катиона 1-бутилметилимидазолий, а в качестве анионов — тетрафторборат, гексафторфосфат, октилсульфат, этилсульфат и диметилфосфат [3].

Демеркаптанизация — процесс обессеривания сжиженных углеводородных газов и дезодорации высококипящих углеводородных бензиновых, керосиновых, дизельных фракций и нефтей. Химический процесс перехода от сульфидов до дисульфидов, заключается в окислении меркаптанов [4]:



Ранее была проведена работа на исследование реакционной способности диметилфосфат-содержащих ионных жидкостей по отношению к элементной сере. Было установлено, что в ходе реакции 1,3-диметилфосфата диметилимидазолия с элементной серой в среде бензола образуется полисульфидный олигомер (ПСО) $DMeIm(S_n)PO_4(CH_3)_2$ [5]. Опираясь на полученные результаты, были сделаны выводы, что диметилфосфат-содержащие ионные жидкости имеют возможность связывать элементную серу, до олигомерной формы.

В данной работе рассматривалась реакционная способность ионных жидкостей, в состав которых входят диметилфосфат-анион, по отношению к этилмеркаптану. Этилмеркаптан был подвержен окислению перекиси водорода, в соотношении 2:1, соответственно:



К полученному диэтилдисульфиду была добавлена ионная жидкость – 1,3-диметилфосфат диметилимидазолия в качестве экстрагента серы. Полученная реакционная система подвергалась перегонке при 356 К.

По данным ВЭЖХ-анализа (рис. 1) и 1H (рис. 2) и ^{13}C ЯМР-спектроскопии полученный после перегонки конденсат представляет собой смесь метанола с этанолом и водой. Анализ ЯМР-спектроскопии проводился в ЦКП РХТУ имени Д.И. Менделеева.

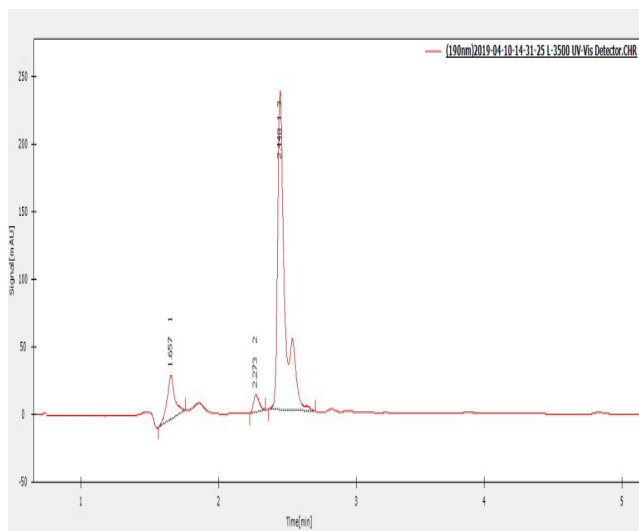


Рисунок 1. Хроматограмма конденсированной фазы реакционной смеси.

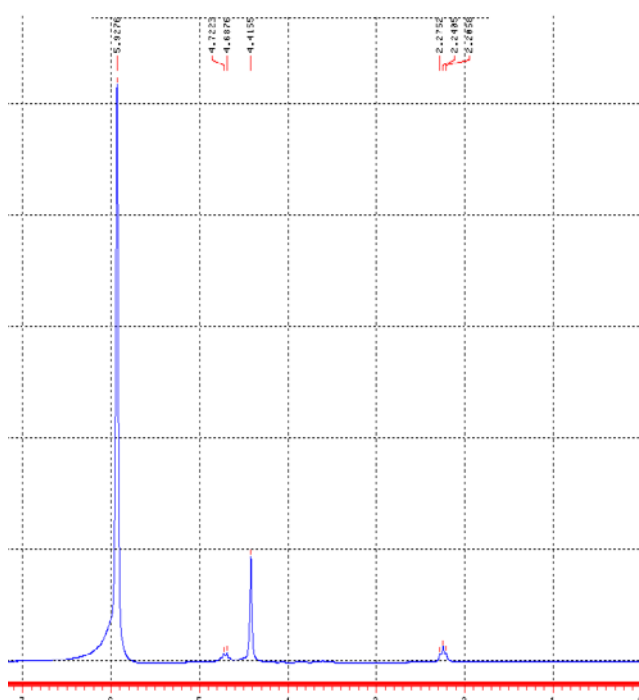


Рисунок 2. ^{31}P ЯМР-спектр конденсированной фазы реакционной смеси.

После перегонки реакционной смеси на дне колбы образовывался вязкий осадок, предположительно являющийся ПСО. ПСО был проанализирован с помощью ^{31}P ЯМР-спектроскопии (рис.3). Анализ проводился в ЦКП РХТУ им. Д.И. Менделеева. На рисунке 4 представлен ^{31}P ЯМР-спектр ПСО, полученного в прошлой работе. Про анализированные данные ^{31}P ЯМР-спектров можно сделать вывод о том, что в данной работе, присоединение серы происходит по анионной части ионной жидкости.

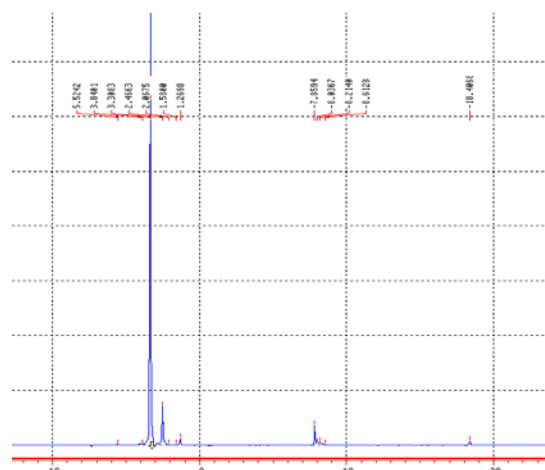


Рисунок 3. ^{31}P ЯМР-спектр полисульфидного олигомера.

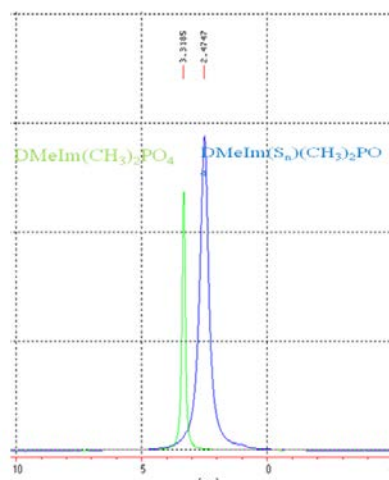


Рисунок 4. ^{31}P ЯМР-спектр полисульфидного олигомера.

В сочетании с методами очистки нефтей от серы и серодержащих соединений применение ионных жидкостей, имеющих в своем составе диметилфосфат-анион, в целях обессеривания нефтей и топлив является перспективным направлением для использования в данной области промышленности.

Список использованной литературы:

1. Кустов Л.М. Ионные жидкости – прорыв в новое измерение? Химия и жизнь. 2007, №11, С.36 – 41.
2. Тарасова Н.П., Василевич Н.И. Проблемы устойчивого развития: история возникновения и роль химии в их решении. Экология и химическая безопасность. Аналитика. 2018, №1, С. 38 – 43.
3. Шведене Н. В., Чернышев Д. В., Плетнев И. В. Ионные жидкости в электрохимических сенсорах. Российский химический журнал (Журнал Российского химического общества им. Д. И. Менделеева), 2008, № 2, С. 80 – 91.
4. Оаз С. Химия органических соединений серы. — М.: Химия, 1975, С. 512.
5. Interaction of ionic liquids with sulfur. N. P. Tarasova, Ya. O. Mezhev, A. A. Zanin, E. G. Krivoborodov. Doklady Chemistry, Volume 484, Issue 1, pp 8–11.

УДК 504.054

Булаева В.В., Комстачев К.Ю., Кузнецов В.А.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ СОЕДИНЕНИЙ КАЛЬЦИЯ И АММИАКА В ВОЗДУХЕ МЕТОДОМ ПАССИВНОЙ ДОЗИМЕТРИИ

Булаева Виктория Викторовна

Магистрант Российского химико-технологического университета им. Д. И. Менделеева, г. Москва, E-mail: vikbu77@yandex.ru

Комстачев Кирилл Юрьевич

Студент Российского химико-технологического университета им. Д. И. Менделеева, г. Москва, E-mail: kosmokir@rambler.ru

Кузнецов Владимир Алексеевич

д. т. н., профессор Российского химико-технологического университета им. Д. И. Менделеева, г. Москва, E-mail: vakuz@inbox.ru

В данной работе разработан метод пассивной дозиметрии для определения содержания кальция и аммиака в атмосферном воздухе. Был выбран сорбент, а также проведен ряд экспериментов на территории заповедника "Долина реки Сетунь". Зимой содержание кальция в атмосферном воздухе в исследуемых районах превышало предельно допустимое значение. Наибольшие концентрации наблюдались вблизи дорог с интенсивным движением, на которых в зимний период активно применялись противогололедные средства.

Ключевые слова: пассивная дозиметрия, атмосферный воздух, щелочные примеси.

DETERMINATION OF CALCIUM COMPOUNDS AND AMMONIA IN AIR BY THE METHOD OF PASSIVE DOSIMETRY

Bulaeva V.V., Komstachev K.U., Kuznetsov V.A.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia.

In this paper, developed a method of passive dosimetry to determine the calcium and ammonia content in ambient air. A sorbent was selected, as well as a series of experiments were conducted on the territory of the Setun River Nature Reserve. In winter, the calcium content in the atmospheric air in the study areas exceeded the maximum permissible value. The highest concentrations were observed near the roads with heavy traffic, on which anti-icing agents were actively used during the winter period.

Keywords: dry deposition, atmospheric pollution, alkaline impurities.

Несомненную актуальность для реализации различных программ мониторинга состояния атмосферного воздуха на природных и особенно на особо охраняемых территориях имеют интегральные методы, основанные на естественных процессах выведения загрязняющих примесей из воздуха.

В связи с этим в РХТУ им. Д.И. Менделеева был разработан метод интегральной оценки загрязнения приземного воздуха по интенсивности сухого осаждения примесей на искусственную поглотительную поверхность [1,2]. Использование искусственной поглотительной поверхности и пробоотборников специальной конструкции позволяет сделать пробоотбор внесезонным.

После экспозиции сорбированные примеси переводятся в водный раствор, в котором стандартными методами определяется их масса и рассчитываются уровни загрязнения примесей в единицах массы соответствующих веществ, поглощенных на единицу поверхности за единицу времени. Полученные значения уровней загрязнения пропорциональны среднему за период экспозиции содержанию примесей в атмосферном воздухе [3].

Пробоотборники позволяют проводить одновременный пробоотбор газообразных и мелкодисперсных соединений серы, азота, хлора и

фтора относящиеся к наиболее массовым и опасным для растений загрязнителям атмосферного воздуха, как известно данные примеси вызывают закисление атмосферных осадков. Однако в последние годы в Москве часть осадков является щелочными [4]. Щелочной характер осадков, на наш взгляд, связан с присутствием в воздухе соединений кальция и аммиака. Источниками аммиака в атмосферном воздухе являются, как природные, так и антропогенные процессы. Концентрация этого соединения в воздухе г. Москве и в городах Московской области может достигать высоких значений. Так, по данным «Росгидромет», в июне 2018 г. среднемесячная концентрация аммиака в целом по городу составляла 1,3 ПДК_{сс} [5].

Соединения кальция могут попасть в атмосферный воздух при работе предприятий строительной индустрии и при использовании в зимний период противогололедных реагентов на основе хлористого кальция. К сожалению, на стационарных станциях Мосэкомониторинга содержание соединений кальция в воздухе не определяется. В этой связи нами были проведены эксперименты по определению содержания данных примесей в атмосферном воздухе методом пассивной дозиметрии.

Для расширения возможностей данного метода нами была проведена серия экспериментов по развитию метода пассивной дозиметрии для определения примесей аммиака и кальция в воздухе. Было предложено использовать сорбент пропитанный раствором серной кислоты и глицерина, которые обеспечивают максимальную интенсивность поглощения в процессе сухого осаждения щелочных примесей. Наибольшей интенсивностью поглощения при наименьшем отклонении от средних значений при прочих равных условиях обладает, как показали наши эксперименты, сорбент, полученный при

использовании растворов, содержащих 0,5 нормальный раствор серной кислоты и 10% глицерина. Этот раствор и использовался при дальнейших экспериментах по определению загрязнения атмосферного воздуха. Для определения содержания соединений кальция в воздухе на территории природного заказника «Долина реки Сетунь», вблизи юго-западной границы было размещено 21 поглотитель на 7 контрольных участках (рис.1). Поглотители экспонировались в период с 10 по 17 февраля 2019 года.

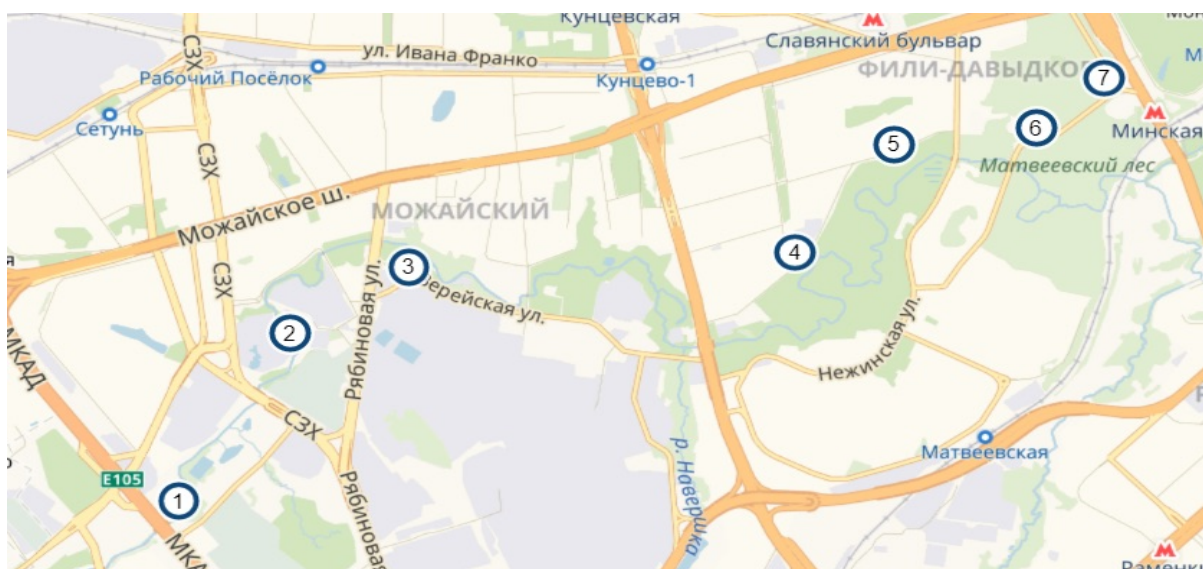


Рисунок 1. Схема размещения пробоотборников на территории природного заказника «Долина реки Сетунь»

По окончании экспозиции сорбированные примеси переводились в раствор, в котором методом высокоэффективной жидкостной хроматографии на ионном хроматографе «Стайер» определяли массу связанных с поглотителем соединений кальция и рассчитывали интенсивность поглощения примесей, в пересчете на Ca^{2+} .

Как известно, если использовать одинаковые пробоотборники и сорбенты, то при экспонировании их в контрольных точках с одинаковыми метеорологическими условиями, интенсивность поглощения будет зависеть только от концентрации поглощаемого вещества в воздухе. Следовательно, можно, определив значения концентрации и интенсивности поглощения в одной контрольной точке, рассчитать значение концентрации данной примеси во всех точках, для которых известна интенсивность поглощения за данный период времени. В ходе данной серии экспериментов концентрацию примесей в воздухе определялась в период экспозиции динамическим методом при прокачивании воздуха через водный раствор, в котором хроматографическим методом определяли содержание ионов кальция. Этот эксперимент проводился на в Миусская площади г. Москвы на участке, граничащем с РХТУ им. Д.И. Менделеева,

где, также, размещались пробоотборники для определения интенсивности поглощения примесей. В ходе данного эксперимента была установлена связь между интенсивностью поглощения примесей и их концентрацией в воздухе. Это позволило определить средние значения концентраций соединений кальция на контрольных площадках природного заказника (см. рис. 2).

Как видно из полученных данных, концентрация кальция на большинстве участков исследуемой природной территории превышает среднесуточные предельно допустимые значения равное $0,01 \text{ мг/м}^3$ [5]. Необходимо отметить, что и в районе Миусской площади концентрация кальция в воздухе составляла $0,03 \pm 0,01 \text{ мг/м}^3$, что также, превышает предельно допустимое среднесуточное значение. Источниками загрязнения атмосферного воздуха, вероятно, являются автодороги, на которых интенсивно использовались противогололедные реагенты. Поэтому в зимний период времени представляется необходимым организовывать постоянные наблюдения за содержанием кальция в атмосфере городов.

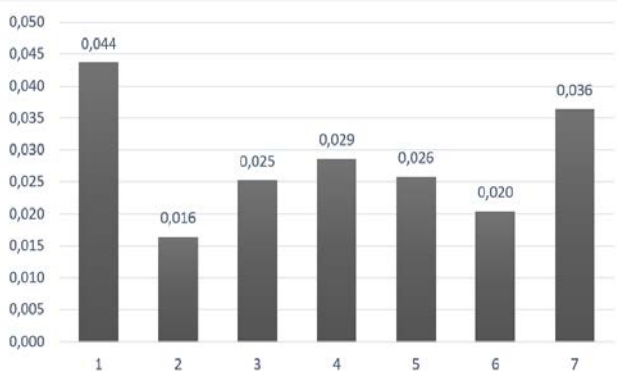


Рисунок 2. Средняя за период экспозиции концентрация кальция в воздухе на контрольных площадках природного заказника «Долина реки Сетунь», мг/м³

Эксперименты по определению содержания аммиака в атмосферном воздухе методом пассивной дозиметрии проводили на территории Волынского леса, часть природного заказника «Долина реки Сетунь» г. Москвы. На 10 контрольных площадках в течение двух периодов по 21 дню, каждый, в феврале и апреле 2019 года были проэкспонированы поглотители и определена интенсивность поглощения аммиака. В те же периоды экспозиции в районе Миусской площади г. Москвы, как и в представленной выше серии экспериментов по определению содержания кальция в воздухе, проводилось определение концентрации аммиака динамическим методом и интенсивности его поглощения методом пассивной дозиметрии. Среднее содержание аммиака в воздухе в зимний период экспозиции составило 0,016 мг/м³. В весенний период наблюдался рост концентрации до 0,037 мг/м³, что вероятно связано с интенсификацией процессов аммонизации в почвенном слое. Однако следует отметить, что эти значения не превышали значения предельно допустимой среднесуточной концентрации для аммиака равной 0,04 мг/м³ [6].

Таким образом проведенное исследование позволило расширить возможности разработанного

ранее в РХТУ метода пассивной дозиметрии и показало необходимость более строгого контроля за соединениями кальция в зимний период, когда дополнительными источниками его поступления в атмосферу являются противогололёдные реагенты.

Список литературы

1. Тарасова Н.П., Кузнецов В.А. Интегральный метод оценки загрязнения атмосферного воздуха и его использование для повышения эффективности управления на городских природных территориях.// Безопасность в техносфере. – М. 2008 г. №6.
2. Кузнецов В.А., Тарасова Н.П. Комплексная оценка воздействия физических и химических факторов на городскую окружающую среду// Экология и промышленность России 2008 г., №10, с. 41-43.
3. Bednova O.V., Kuznetsov V.A. and Tarasova N.P. 2018 Eutrophication of an Urban Forest Ecosystem: causes and effect *Doklady Earth Sciences* 478 (1) pp 124-8;
4. Мосэкомониторинг. Доклад за 2017 год. Долгосрочная динамика уровня загрязнения атмосферного воздуха [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://mosecom.ru/meropriyatya-i-smi/>;
5. Росгидромет. Об уровнях загрязнения окружающей среды и радиационной обстановке на территории г. Москвы и Московской области в июне 2018 года [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.meteorf.ru/product/infomaterials/100/16965/?referer=%2Fproduct%2Finfomaterials%2F100%2F>;
6. ГН 2.1.6.3492-17 "Предельно допустимые концентрации (ПДК) загрязняющих веществ в атмосферном воздухе городских и сельских поселений" (с изменениями на 31 мая 2018 года).

УДК 546.04

Джамолидинова Н.Ш., Кривобородов Е.Г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДИМЕТИЛФОСФАТА 1,3-ДИМЕТИЛИМИДАЗОЛИЯ С ЭЛЕМЕНТНОЙ СЕРОЙ МЕТОДОМ ЯМР-СПЕКТРОСКОПИЯ

Джамолидинова Нигора Шавкатовна, магистрант 1 года Института Проблем Устойчивого Развития;
 Кривобородов Ефрем Георгиевич, аспирант, ассистент кафедры ЮНЕСКО «Зеленая химия для устойчивого развития», e-mail: vv1992@yandex.ru;
 Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия
 125047, Москва, Миусская пл., д. 9

Исследовано взаимодействие диметилфосфата 1,3-диметилимидазолина с серой методом ЯМР-спектроскопии с целью получения технологии синтеза полисульфидных олигомеров.

Ключевые слова: ионные жидкости, полисульфидные олигомеры, сера.

THE INTERACTION OF DIMETHYLPHOSPHATE 1,3-DIMETHYLIMIDAZOLIUM WITH SULFUR BY NMR SPECTROSCOPY

Jamolidinova N.S., Krivoborodov E.G.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

The interaction of dimethylphosphate 1,3-dimethylimidazolium with sulfur by NMR spectroscopy in order to obtain the technology of synthesis of polysulfide oligomers is investigated.

Keyword: ionic liquids, polysulfide oligomers, sulfur.

В последнее время происходит интенсивные исследования химии серы - одного из наиболее распространенного элемента периодической системы. Способность элементной серы взаимодействовать с органическими и неорганическими соединениями с образованием практически ценных продуктов и доступность сырьевой базы (сера и серные соединения являются сопутствующими соединениями при добыче и переработке нефти) послужили основой для развития химии и химической технологии серосодержащих олигомеров [1].

Полисульфидные олигомеры серы (ПСО) относятся к гибкоцепным полимерам – величина их эффективного кинетического сегмента (l_c) заключена в интервале 2000 – 4000 в зависимости от природы алифатического радикала и преобладающего типа сульфидных связей в олигомере [2].

Полимерные полиорганополисульфиды, построенные чередованием полисульфидных и органических группировок, синтезируют методами полимеризации и поликонденсации. Известны примеры, когда полисульфидные цепи являются боковыми фрагментами. Наиболее важные представители полиорганополисульфидов – хемостойкие твердые тиоколы и их производные: жидкие олигомеры, способные к «холодной» сшивке за счет концевых тиольных групп. Своеобразным примером полимерных полисульфидов является композиционный материал – эбонит, продукт

вулканизации ненасыщенных каучуков сопоставимым количеством элементной серы [3]. В данной работе исследовалось реакция взаимодействия диметилфосфата 1,3-диметилимидазолия $\text{DMeImPO}_4(\text{CH}_3)_2$ с элементной серой S_8 .

Экспериментальная часть.

В круглодонной колбе, предварительно продутой аргоном, в 100 мл бензола («х.ч.», «Химмед», ГОСТ 5955-75) при перемешивании диспергировали 1,5 г порошка S_8 («осч», «Реахим», ТУ 6-09-2546-77) и затем добавляли 1 мл диметилфосфата 1-3-диметилимидазолия («х.ч.», Merck, Германия). Реакционную систему выдерживали при комнатной температуре в течение 80 минут. После смешения реагентов наблюдалось растворение серы и углубление бурой окраски реакционной системы в течение первых 20 минут. После полного растворения серы перемешивание прекращали, реакционную систему выдерживали 60 минут, при этом наблюдалось расслоение фаз. Внизу скапливался более плотный темно-красный продукт реакции, вверху – раствор исходной ИЖ в бензоле. Продукт реакции выделяли отделением нижнего слоя на делительной воронке.

Строение выделенного продукта устанавливали методом ЯМР-спектроскопии на ядрах ^1H (ЦКП Института элементоорганических соединений имени А. Н. Несмеянова РАН) и ^{13}C (ЦКП РХТУ им. Д. И. Менделеева), сдвиги в ЯМР ^1H , ^{13}C спектрах измеряли относительно сигнала $(\text{CH}_3)_4\text{Si}$.

При сопоставлении ЯМР ^1H (рис. 1) и ^{13}C спектров исходного диметилфосфата 1,3-диметилимидазолия (рис. 2) и продукта взаимодействия диметилфосфата 1,3-диметилимидазолия с элементарной серой (рис. 3), наблюдается небольшое смещение сигнала атомов углерода (53,9 – 54,7 м.д.) и сигнала атомов

водорода (4,33 – 4,25 м.д.) метильной группы фосфатного аниона. Это означает, что реакция серы и ионной жидкости происходит за счет диметилфосфат-аниона по механизму нуклеофильной атаки атомом кислорода, несущим отрицательный заряд, по циклу S_8 .

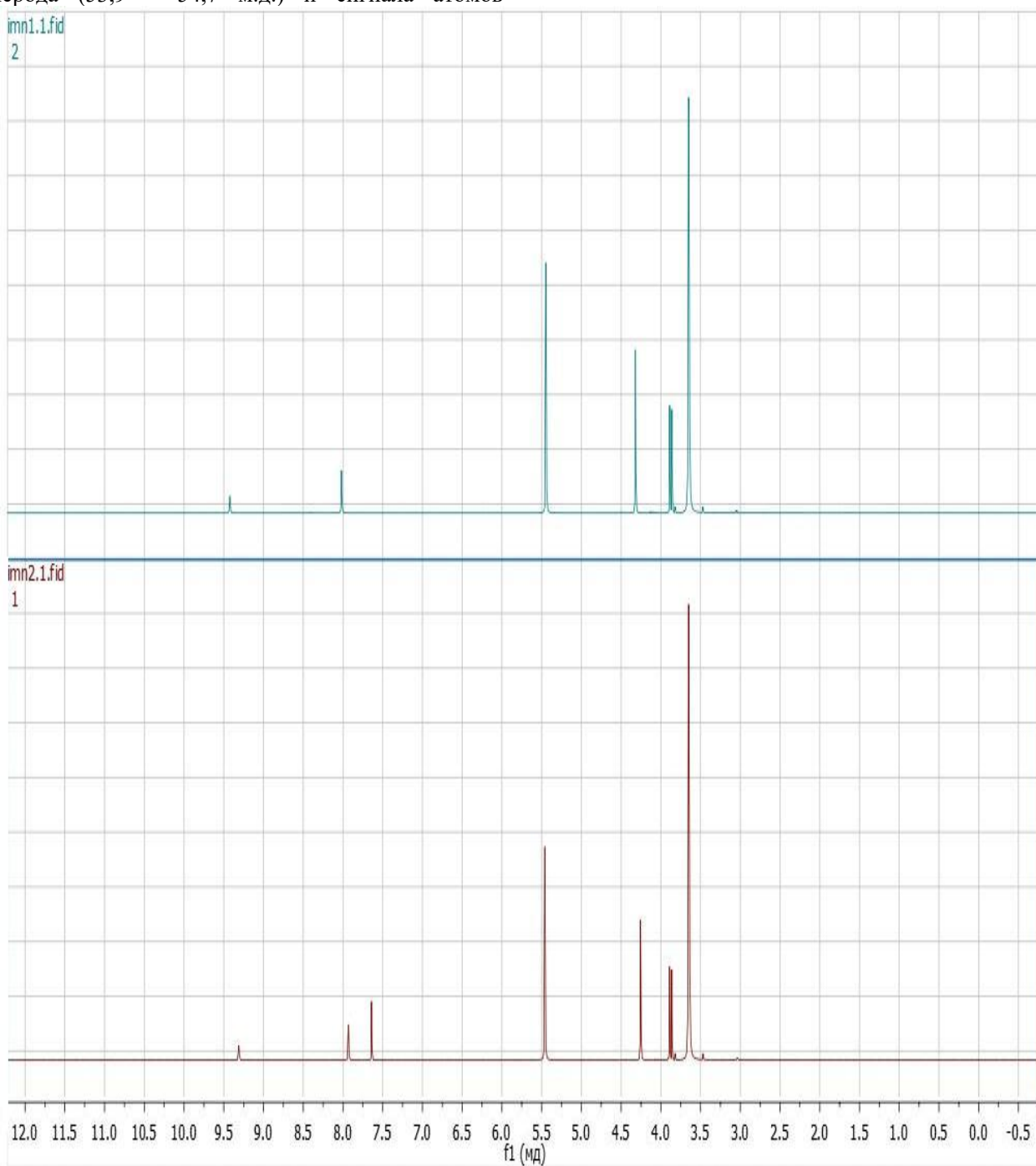


Рисунок 1. ^1H ЯМР-спектры исходного диметилфосфата 1,3-диметилимидазолия (1) и продукта взаимодействия диметилфосфата 1,3-диметилимидазолия с элементарной серой (2), зарегистрированный в среде CD_3OD .

Появление новых сигналов в области 7,67 м.д. (ЯМР ^1H) и 130,7 м.д. (ЯМР ^{13}C), вероятно, является следствием взаимодействия имидазолиевой катионной части ИЖ с серой по атому водорода

второго положения, несущего положительный заряд, после раскрытия цепи атомов серы в результате взаимодействия ее с диметилфосфат-анионом.

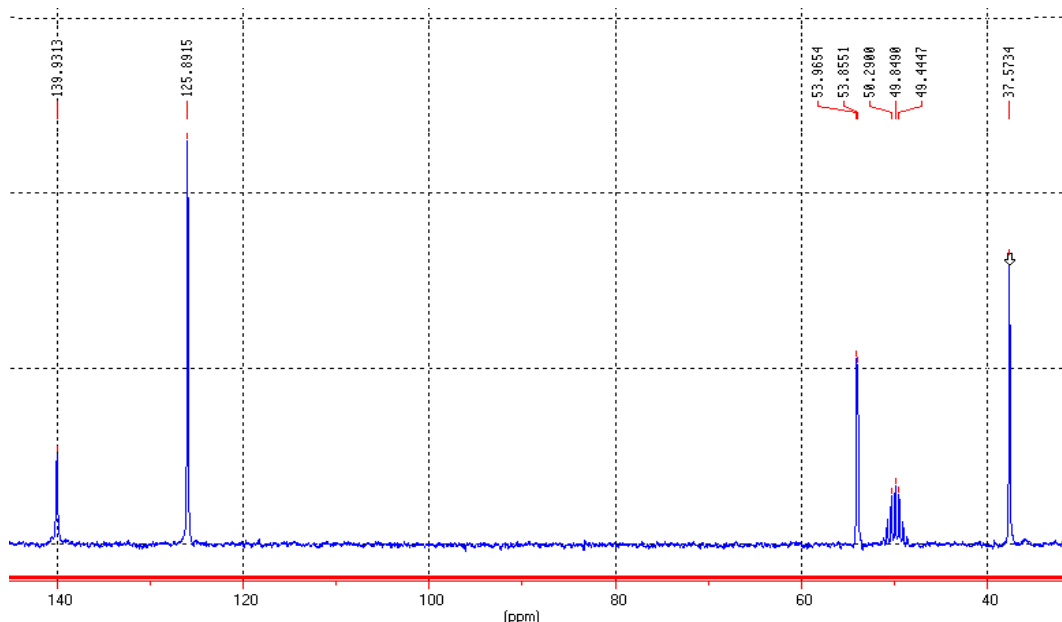


Рисунок 2. ЯМР ^{13}C спектр исходного диметилфосфата 1,3-диметилимидазолия, зарегистрированный в среде CD_3OD .

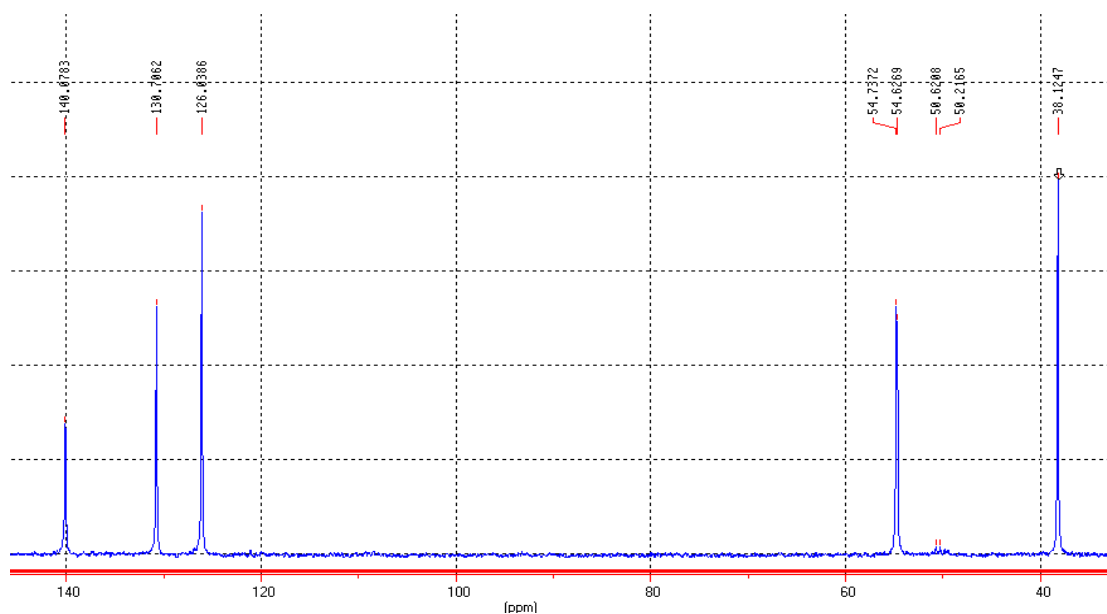


Рисунок 3. ЯМР ^{13}C спектр продукта взаимодействия диметилфосфата 1,3-диметилимидазолия с элементарной серой, зарегистрированный в среде CD_3OD .

Таким образом, можно заключить, что продуктом взаимодействия диметилфосфата 1,3-диметилимидазолия с элементарной серой в нормальных условиях является полисульфидный олигомер $\text{DMeIm}(\text{S}_n)\text{PO}_4(\text{CH}_3)_2$.

Список литературы

1. Неделькин В.И., Зачернюк Б.А., Андрианова О.Б. Органические полимеры на основе элементарной серы и ее простейших соединений. Ж. Рос. Хим. Об-ва Д.И. Менделеева. 2005, Т. 49, № 6, С. 3 – 10.
2. В. С. Минкин, А. В. Нистратов, М. А. Ваниев, Ю. Н. Хакимуллин, Р. Я. Дебердеев, И. А. Новаков. Синтез, структура и свойства полисульфидных олигомеров. Известия ВолгГТУ. Волгоград, 2006, вып. 3, №1, С. 9 – 20.
3. Ю.А. Сангалов, С.Г. Карчевский, В.И. Ионов. Полисульфиды – важнейшие представители высокосернистых соединений. Вестник Академии Наук РБ, Уфа, 2013, Т. 18, № 1, С. 15 – 24.

УДК 546.8

Немеш И.И., Кривобородов Е.Г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИМИДАЗОЛИЕВЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ С КОМПЛЕКСАМИ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Немеш Иван Иванович, магистрант 2 года Института Проблем Устойчивого Развития;

Кривобородов Ефрем Георгиевич, аспирант, ассистент кафедры ЮНЕСКО «Зеленая химия для устойчивого развития», e-mail: vv1992@yandex.ru;

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия
125047, Москва, Миусская пл., д. 9

Взаимодействие комплексов переходных металлов с некоторыми ионными жидкостями изучено на примере растворов $VO(acac)_2$ в различных растворителях с добавлением ионной жидкости $BuMeImPF_6$.

Ключевые слова: ионные жидкости, переходные металлы, комплексы переходных металлов, ванадил ацетилацетонат

STUDY OF THE INTERACTION IMIDAZOLIDIN AN IONIC LIQUID WITH COMPLEXES OF TRANSITION METALS

Nemesh I.I., Krivoborodov E.G.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

The interaction of transition metal complexes with some ionic liquids was studied by the example of $VO(acac)_2$ solutions in various solvents with the addition of the ionic liquid $BuMeImPF_6$.

Keyword: ionic liquids, transition metals, complexes of transition metals, vanadyl acetylacetonate.

Ионные жидкости (ИЖ) представляют собой расплавы органических солей, которые в широком интервале температур (в ряде случаев ниже комнатной) находятся в жидком агрегатном состоянии. В большинстве случаев структуру ионных жидкостей формируют объемные органические катионы в сочетании с неорганическими или органическими анионами [1]. Одной из наиболее важных областей применения ионных жидкостей является катализ, в которой основное внимание уделяется тому, насколько хорошо катализатор удерживается в ионной жидкой фазе и может ли он быть регенерирован. Это подразумевает изменения в структуре катализатора, однако это не означает, что модифицированный катализатор будет проявлять такие же свойства, как и исходный. Кроме того, возникает вопрос, какую ионную жидкость выбрать, чтобы максимизировать производительность катализатора. Часто предполагается, что ионные жидкости являются не координирующими полярными растворителями, однако результаты некоторых работ показывают способность ионных жидкостей образовывать координационные соединения при взаимодействии с комплексами переходных металлов [2]. Первоначально считалось, что такая высокополярная среда, как ионная жидкость, состоящая из ионов, легко растворяет другие соли. Однако, было показано что обычные соли металла имеют иногда очень низкую растворимость в ионных жидкостях.

Взаимодействия с растворителем происходят на молекулярном уровне, при этом необходимо учитывать множество различных видов таких взаимодействий [3].

Координирующая способность ионной жидкости является очень важным параметром при подборе веществ, использующихся в химических процессах в качестве катализаторов [4].

Ванадил ацетилацетонат $V(O)(acac)_2$ используется в качестве катализатора во многих реакциях с участием органических соединений, например в процессе эпоксирирования аллиловых спиртов гидропероксидом трет-бутила. Его свойства были изучены несколькими исследователями [5] и кристаллическая структура была опубликована в 1962 [6]. В твердом состоянии $V(O)(acac)_2$ является пятикоординатным; однако при растворении в органических растворителях ванадий может координировать с молекулой-донором в свободном положении, образуя $[VO(acac)_2S]$ (где S = молекула-донор растворителя) [7].

В данной работе исследовались взаимодействия некоторых имидазолиевых ионных жидкостей с комплексами переходных металлов, в частности $V(O)(acac)_2$, $K_3[MoCl_6]$, $NH_4[K_2MoCl_6]$, $K_4Mo_2Cl_8$, $(NH_4)_2MoO_4 \cdot 4H_2O$ в среде различных органических растворителей.

Отдельное внимание стоит уделить системам $V(O)(acac)_2+TГФ$ и $V(O)(acac)_2+TГФ+BuMeImPF_6$. При взаимодействии ванадил ацетилацетоната с

данным растворителем наблюдалось изменение цвета раствора с зеленого на коричневый, что очевидно вызвано окислением V(IV) в комплексе в V(V). При добавлении в раствор BuMeImPF₆ наблюдалось повторное изменение цвета раствора до салатого, что, предположительно, может быть следствием взаимодействия получившейся системы V(O)(acac)₂ + ТГФ с BuMeImPF₆ и восстановлением V(V) в V(IV) в составе нового координационного соединения.

Для более подробного описания взаимодействия V(O)(acac)₂ с BuMeImPF₆ были исследованы растворы V(O)(acac)₂ и V(O)(acac)₂ + BuMeImPF₆ в ацетоне (рис. 1, 2).

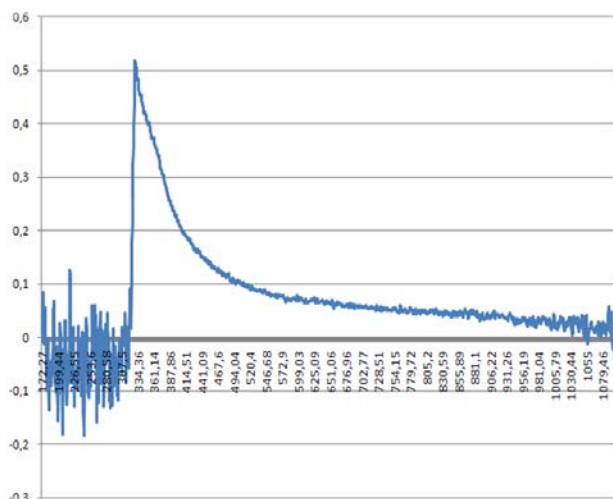


Рисунок 1. УФ-В-спектр раствора V(O)(acac)₂ в ацетоне.

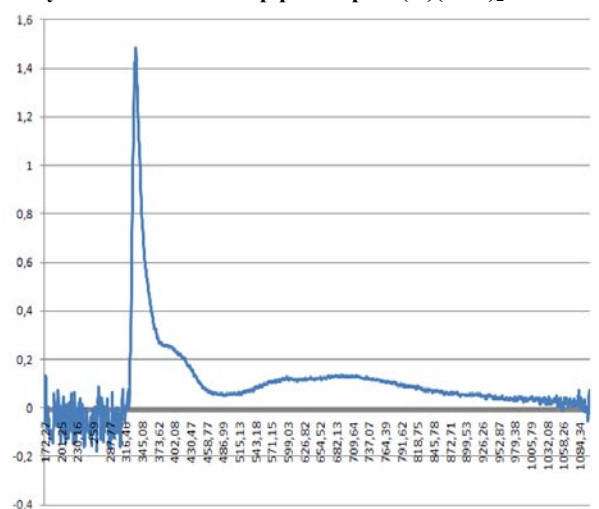


Рисунок 2. УФ-В-спектр раствора V(O)(acac)₂ + BuMeImPF₆ в ацетоне.

Изменение видимой окраски ацетонового раствора при добавлении ионной жидкости, а также в характере сигнала УФ-В-спектра исследуемых систем свидетельствуют об образовании нового координационного соединения V(IV) в качестве комплексообразователя, предположительно, с фрагментами ИЖ в качестве лигандов.

Список использованной литературы:

1. Доценко В.В. Ионные жидкости: новые перспективы для рефрактометрического анализа // Украинський метрологічний журнал. 2008. №3. С. 53-57.
2. P. Wasserscheid, C. M. Gordon, C. Hilgers, M. J. Muldoon and I. R. Dunkin, Chem. Commun., 2001, 1700.
3. C. Reichardt, Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 3rd edn, 2004.
4. Andreia Mota, Jason P. Hallett, Maxim L. Kuznetsov and Isabel Correia, Structural characterization and DFT study of VIVO(acac)₂ in imidazolium ionic liquids, Phys. Chem. Chem. Phys., 2011, 13, 15094–15102.
5. D. Mustafi and M. W. Makinen, Inorg. Chem., 2005, 44, 5580–5590.
6. R. P. Dodge, A. Zalkin and D. H. Templeton, J. Chem. Phys., 1961, 35, 55–67.
7. E. Garrirba, G. Micera and D. Sanna, Inorg. Chim. Acta, 2006, 359, 4470–4476.

СЕКЦИЯ
«ЗЕЛЕНАЯ ХИМИЯ ДЛЯ УСТОЙЧИВОГО
РАЗВИТИЯ»

Сопредседатели – профессора В.Г. Цирельсон, М.И. Штильман,
секретарь секции – профессор Я.О. Межуев.

УДК 541.64

Атабаева М.А., Джеджея В.Т., Лусс А.Л., Устинова М.С., Штильман М.И.

ПОЛИМЕРНЫЕ ФОРМЫ РЕГУЛЯТОРОВ РОСТА РАСТЕНИЙ**Атабаева Мунира Акбаровна**, студентка 1-го курса магистратуры кафедры биоматериалов**Джеджея Важа Тенгизович**, аспирант кафедры биоматериалов**Лусс Анна Леонидовна**, м.н.с. кафедры биоматериалов**Устинова Мария Сергеевна**, техник кафедры биоматериалов**Штильман Михаил Исаакович**, д.х.н., профессор, заведующий кафедрой биоматериалов, научный руководитель,E-mail: shtilmanm@yandex.ru

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

125047, Москва, Миусская пл., д.9

Регуляторы роста растений привлекают серьезное внимание с 20-30-х годов прошлого века. Большая часть сложностей и ограничений их широкого использования связана с характеристиками их свойств. Как известно, так называемые системы с контролируемым высвобождением активного вещества используются для устранения таких недостатков, которые присущи различным регуляторам роста. Данная работа посвящена сополимеризации аллиламидов с присоединенным регулятором роста растений (2,4-дихлорфеноксиуксусная кислота, 2,4-Д) с акриловой кислотой. Установлены закономерности процесса сополимеризации акриловой кислоты и аллиламида регулятора в зависимости от влияния времени сополимеризации, общей концентрации мономера, температуры процесса, количества инициатора и состава смеси мономеров, что позволило установить оптимальные условия для максимального выхода, высокое содержание активных звеньев и низкую вязкость сополимера.

Ключевые слова: регуляторы роста и развития растений, фитоактивные полимеры, ауксины, 2,4-дихлорфеноксиуксусная кислота.

POLYMERIC FORMS OF PLANT GROWTH REGULATORS

Atabaeva M.A., Dzhedzheya V.T., Luss A.L., Ustinova M.S., Shtilman M.I.

Plant growth regulators have attracted serious attention since the 20s-30s of the last century. Most of the complexity and limitations of their widespread use are related to the characteristics of their properties. As is known, the so-called controlled release systems of the active substance are used to eliminate such deficiencies that are inherent in various growth regulators. This work is devoted to the copolymerization of allylamides with an attached plant growth regulator (2,4-dichlorophenoxyacetic acid, 2,4-D) with acrylic acid. The regularities of copolymerization of acrylic acid and allylamide regulator were established depending on the influence of copolymerization time, total monomer concentration, process temperature, amount of initiator and monomer mixture composition, which allowed to establish optimal conditions for maximum yield, high content of active units and low viscosity of the copolymer.

Keywords: plant growth and development regulators, phytoactive polymers, auxins, 2,4-dichlorophenoxyacetic acid.

Введение

Регуляторы роста и развития растений (РРР) широко используются в настоящее время в сельском хозяйстве. Во избежание сложностей и ограничений в их применении используют системы с контролируемым выделением активного вещества. К ним относятся полимерные производные РРР – фитоактивные полимеры [1-2].

Их преимущества заключаются в пролонгированном выделении биологически активного вещества (БАВ), широком диапазоне стимулирующих концентраций и возможности получения водорастворимых производных не растворимых в воде регуляторов. Кроме того, включенный в систему, но не выделившийся из нее регулятор не обладает активностью и защищен от побочного расходования [3].

Теоретический анализ

Полимерные формы регуляторов роста и развития растений, дозирующие активные вещества с оптимальной скоростью – это системы, содержащие

определенное БАВ, связанное с полимерной цепью гидролитически лабильной связью, постепенно разрушающейся в условиях функционирования системы. Полимер может содержать также лиофилизующие группы, придающие всей системе растворимость в воде (рис.1).

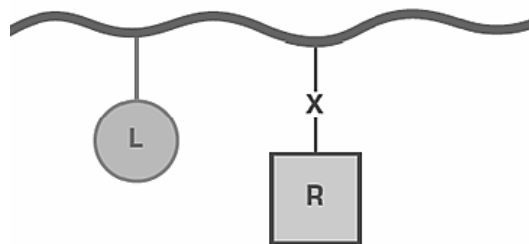


Рис.1. Принципиальное строение фитоактивного полимера. R- остаток регулятора; X- гидролизуемая группа (сложная эфирная, амидная, мочевиная и т.п.); L - лиофилизующая группа (гидроксильная, амидная, пирролидонная, карбоксильная и т.п.)

Биологическая активность фитоактивных полимеров зависит от скорости гидролиза функциональной группы, связывающей регулятор и полимерный носитель. Установив характер взаимосвязи между химическим строением фитоактивных полимеров, склонностью их к гидролизу и биологической активностью, можно не только прогнозировать уровень активности, но и целенаправленно конструировать препараты с оптимальной способностью к гидролизу [3].

Наиболее удобными методами синтеза фитоактивных полимеров являются взаимодействие РРР с соответствующими полимерными носителями и полимеризация или сополимеризация их ненасыщенных производных. Большинство опубликованных работ, касающихся синтеза фитоактивных полимеров, рассматривает получение полимерных производных регуляторов группы ауксинов, что объясняется относительной простотой строения регуляторов этой группы.

Ауксиновая активность была обнаружена у большого числа соединений, среди которых можно отметить производные фенилуксусной, феноксиуксусной, 1-нафтилуксусную кислоту и др., в том числе 2,4-дихлорфеноксиуксусную кислоту (2,4-Д).

В данной работе представлен способ получения фитоактивного полимера путем сополимеризации аллиламида карбоксилсодержащего регулятора ауксинового типа - 2,4-дихлорфеноксиуксусной кислоты с акриловой кислотой.

Экспериментальная часть

Синтез сополимера 2,4-дихлорфеноксиуксусной кислоты и акриловой кислоты проводили по трехстадийному методу через получение хлорангидрида 2,4-дихлорфеноксиуксусной кислоты с последующим образованием сомономера - аллиламида 2,4-дихлорфеноксиуксусной кислоты.

Массовый процент 2,4-Д в полимере определяли УФ-спектрофотометрией по поглощению остатков кислоты при помощи построенной для этой кислоты калибровочной кривой. Также спектрофотометрически определяли содержание активных звеньев.

Образование сополимера аллиламида 2,4-Д (АА 2,4-Д) и акриловой кислоты (рис. 2) протекало в соответствии со стандартной схемой цепной полимеризации.

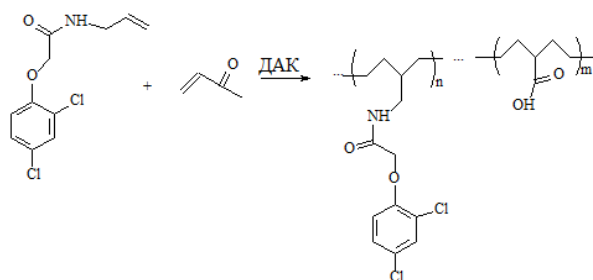


Рис.2. Образование сополимера аллиламида 2,4-Д и акриловой кислоты

При этом участие в реакции аллильного сомономера, трудно вступающего в гомополимеризацию, но способного образовывать сополимеры, требовало исследования влияния на протекание процесса условий его проведения.

Результаты и их обсуждение

Изучение влияния времени протекания реакции на выход, содержание активного вещества и вязкость сополимеров показало, что с увеличением времени полимеризации значительно возрастает содержание активного вещества, что отражает сильное различие способности двух сомономеров к полимеризации.

Скорость полимеризации АК существенно выше скорости полимеризации аллильного мономера, которая осложнена явлением аллильного обрыва цепи. Хорошо полимеризуемая АК быстро и с высокой конверсией переходит в высокомолекулярное состояние, после чего в течение более длительного времени полимер обогащается звеньями аллильного мономера.

Время протекания реакции оказывало значительное влияние и на выход - резкое увеличение в начале, при полимеризации АК, сменяется более плавным увеличением выхода по мере полимеризации АА 2,4-Д.

Разница в скоростях реакций влияет и на изменение приведенной вязкости, которая по мере насыщения полимера аллильным компонентом падает за счет действия эффекта деградиационного переноса, обуславливающего значительную роль реакций передачи цепи на мономер, снижающих молекулярную массу продукта.

Хотя высокого выхода полимеризации удается достичь уже после 3-4 часов синтеза, для получения продукта с более высоким содержанием активного компонента целесообразно увеличить время проведения реакции до семи – восьми часов.

Исследование влияния концентрации показало, что наибольший выход наблюдался при суммарной концентрации сомономеров 2,5 моль/л. Ниже этого значения выход был ниже, очевидно, вследствие закона действующих масс. Выше оптимума некоторое снижение выхода объясняется возрастанием вязкости системы. Примерно такая же зависимость наблюдается в случае зависимости от концентрации сомономеров вязкости образующегося продукта. Состав сополимеров зависит от концентрации незначительно.

Заключение

Таким образом, были синтезированы сополимеры аллиламида 2,4-дихлорфеноксиуксусной и акриловой кислот и изучены влияния проведения реакции на сополимеризацию.

Список литературы

1. Штильман М.И. // Фитоактивные полимеры // СОЖ, 1998, №10.
2. Штильман М.И. // Полимеры в биологически активных системах// СОЖ, 1998, №5.
3. Штильман М.И., Тсатсакис А.М., Влахос И. и др. // Физиология растений. 1997. Т. 44, № 6.

УДК 544.18

Казимир А.Р., Егорова А.Н., Цирельсон В.Г.

ДАВЛЕНИЕ И СИЛЫ В ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМЕ КОНФОРМЕРОВ C7 ДИАМИДА ГЛЮТАМИНОВОЙ КИСЛОТЫ В ОБЛАСТИ НЕКОВАЛЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Казимир Александр Романович, магистр 2 курса факультета естественных наук;

Егорова Анна Николаевна, к.х.н., ст.н.с., доцент кафедры квантовой химии, e-mail: anegor@muctr.ru

Цирельсон Владимир Григорьевич, д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой квантовой химии.

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

125047, Москва, Миусская пл., д.9.

*Исследованы особенности пространственного распределения давления и сил в сочетании с квантово-топологическим анализом электронной плотности нековалентных взаимодействий в конформерах диамида glutamic acid***Ключевые слова:** *диамид glutamic acid; нековалентные взаимодействия; метод функционала плотности; квантово-топологический анализ; давление и силы в электронной среде.***INTERNAL PRESSURE AND FORCES IN ELECTRON SUBSYSTEM OF THE CONFORMERS C7 OF GLUTAMIC ACID DIAMIDE IN NON-COVALENT INTERACTIONS**

Kazimir A.R., Egorova A.N. *, Tsirelson V.G.

D.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia.

*The features of the spatial distribution of pressure and forces in combination with the quantum-topological analysis of the electron density of non-covalent interactions in the conformers of glutamic acid diamide are studied.***Key words:** *glutamic acid diamide; non-covalent interactions; density functional method; quantum-topological analysis; electron pressure.*

Структурные особенности и биохимические свойства биологических систем связаны со стабилизирующими нековалентными взаимодействиями. Исследование этих взаимодействий в малых биосистемах позволяет подойти к решению задачи предсказания биологического поведения более сложных агрегаций. В данной работе исследованы нековалентные взаимодействия в диамиде glutamic acid, являющимся незаменимым элементом белковых структур и играющим роль транмиттера в нервной системе позвоночных. В данной молекуле эти взаимодействия реализуются внутри основных цепей и между основной и боковой цепями, определяя устойчивость формирующихся конформеров. В качестве объектов исследования выбраны конформеры $\text{CH}_3\text{CONH} - \text{Glu} - \text{CONHCH}_3$ с конформациями основной цепи C5 и C7, формирующимися в зависимости от значений углов ϕ и ψ (рис.1, I). Нами исследованы особенности распределения квантового давления в электронной среде (кинетический и обменный вклады и их сумма) в нековалентных взаимодействиях в конформерах диамида glutamic acid. Картина локального давления внутри неоднородного электронного континуума дает физически обоснованный способ найти характеристики концентрации и деконцентрации электронов в реальном пространстве молекул и кристаллов [1,2]. При их образовании электронное облако

самоорганизуется в поле ядер и создаются области разной концентрации электронов; результирующая картина зависит от химического связывания – как внутри -, так и межмолекулярных взаимодействий. Внутреннее давление неоднородной электронной подсистемы обусловлено электростатическими и квантовыми кинетическими и обменно-корреляционными эффектами. Соответствующие вклады удобно описать в рамках теории функционала плотности, где они зависят только от электронной плотности (ЭП), градиента ЭП и лапласиана ЭП. Соответствующие формулы приведены в [1, 2].

Анализ гиперповерхности потенциальной энергии, рассчитанной в зависимости от значений двугранных углов χ_1, χ_2, χ_3 и χ_4 [3] (см. рис. 1), выявил локальные минимумы, которым отвечают конформеры молекулы $\text{CH}_3\text{CONH} - \text{Glu} - \text{CONHCH}_3$, отличающиеся друг от друга как ориентацией основной цепи, так и ориентацией боковой цепи. Мы исследовали десять наиболее устойчивых конформеров с ориентацией основной цепи C5 и C7, оптимизация геометрии которых была проведена методом Кона-Шэма в приближении B3LYP/6-311++G(d,p). Расположение конформеров в порядке понижения устойчивости соответствует приведенному ряду: $C5(N1) > C7(N1) > C7(N2) > C5(N2) > C5(N3) > C7(N3) > C7(N4) > C7(N5) > C5(N4) > C5(N5)$.

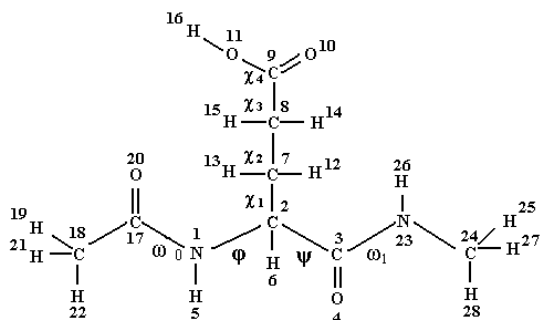


Рис. 1. Нумерация атомов и торсионные углы в молекуле $\text{CH}_3\text{CONH-Glu-CONHCH}_3$

В квантово-топологическом анализе ЭП (QТАИМС) взаимодействия между атомами в молекулах и кристаллах отождествляют со связевыми путями в ЭП и седловыми критическими точками (КТ) (3;-1). Этим методом идентифицированы ковалентные и

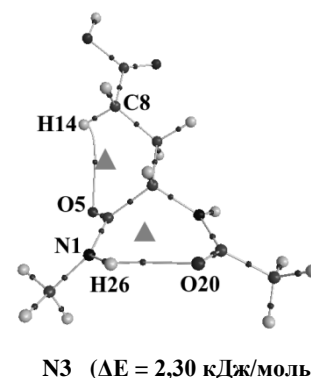
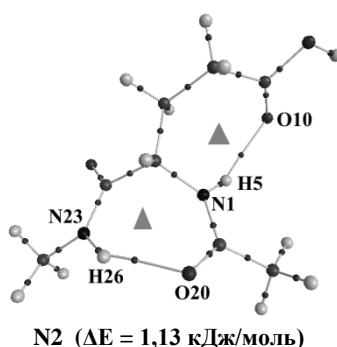
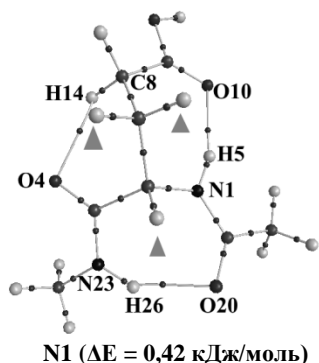


Рис. 2. Конформеры N1, N2, N3 молекулы $\text{CH}_3\text{CONH-Glu-CONHCH}_3$ с конформацией основной цепи C7. Показаны атомы, связевые пути и критические точки: маленькие кружки - КТ связей, треугольники - циклические КТ, квадраты - клеточные КТ. Связевые пути ковалентных взаимодействий показаны сплошными линиями, нековалентных - пунктирными.

Электростатические силы приводят к доминирующему притяжению электронов к ядрам. Квантовые - кинетическое движение и обмен препятствуют этому. Формируется неоднородное электронное распределение во внутримолекулярных фрагментах, включающих пары атомов, связанных нековалентными взаимодействиями и вовлеченных в псевдоциклы, см. рис. 3. Электронный континуум сжат кинетической компонентой давления вдоль ковалентных N1/23-H5/26, C8-H14 связей, образуя локальные мостики, отвечающие концентрациям связывающих электронных пар; они разделены седловыми точками на линиях связей. Это области максимально «жестких» молекулярных фрагментов. Видны также максимумы кинетической составляющей внутреннего давления электронной среды, соответствующие несвязывающим (неподеленным) электронным парам атомов N1/23, C8 и O10.

Распределение обменной составляющей давления (рис. 3, б) так же увязывается с седловыми точками в ЭП на линиях ковалентных связей и неподеленными электронными парами атомов: им отвечают минимумы обменной составляющей давления.

нековалентные взаимодействия в исследованных системах, последние из которых замыкают в основной и между основной и боковой цепью псевдоциклы с возникновением КТ (3; +1). В наиболее устойчивых конформерах цепи C7 псевдоциклы, которые замыкают боковую и основную цепь (например, N23-H26...O20 (N1, N2, N3), N1-H5...O10 (N2)) по данным QТАИМС являются *устойчивыми*: КТ (3;+1) и (3;-1) расположены достаточно далеко друг от друга. Взаимодействие C8-H14...O5 (N3) между основной и боковой цепью замыкает *неустойчивый* псевдоцикл, близкий к так называемой «структурной катастрофе», когда КТ (3,+1) и (3,-1) располагаются достаточно близко (на расстоянии менее 0,2 а. е.), см. рис. 2.

Таким образом, обмен электронов понижает структурную жесткость каркаса молекулы, но не изменяет молекулярный граф.

Суммарное распределение квантовых компонент давления электронной среды (рис. 3, в) показывает, что электронный континуум максимально разрежен на линиях нековалентных связей диамида глютаминовой кислоты. Эти области будут испытывать максимальное сжатие при внешних воздействиях. Отметим, что для *устойчивых* псевдоциклов на линии нековалентных связей наблюдаются седловые точки как в суммарном распределении двух компонент (рис. 3, в), так и в кинетической части (рис. 3, а). В обменной части электронного давления (рис. 3, б) наблюдается локальный максимум.

Обменные силы максимальны вдоль линий ковалентных связей и электронная среда будет в большей степени препятствовать внешнему сжатию в этих областях (рис. 4). На линиях нековалентных связей эти силы минимальны и электронный континуум при внешнем сжатии будет здесь «расширяться», а область будет максимально деформирована.

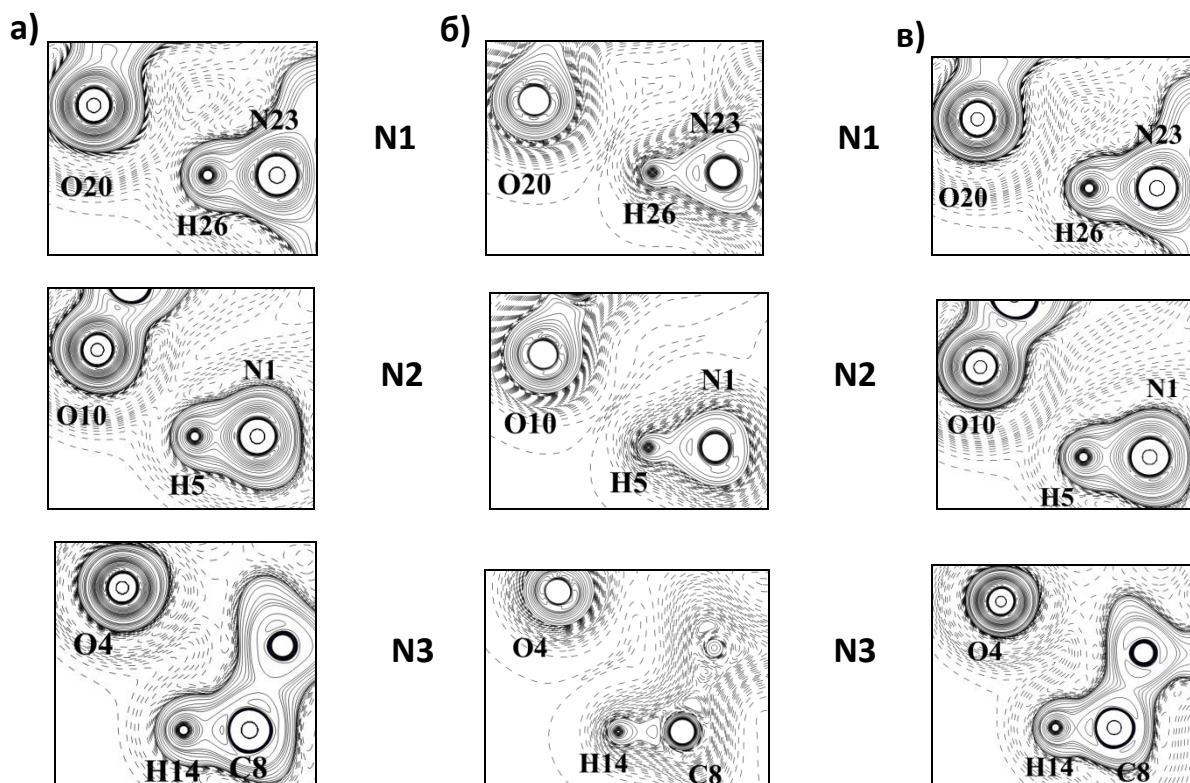


Рис. 3. Наиболее устойчивый конформеры C7 молекулы $\text{CH}_3\text{CONH} - \text{Glu} - \text{CONHCH}_3$. Распределение кинетической (а), обменной (б) компонент внутреннего электронного давления и их суммы (в) во фрагментах: C8-H14...O20, N23/1-H26/5...O20/10. Плоскости сечений проведены через указанные атомы, (а) и (в) изолинии в инт. $-0,03 - 3$ с шагом $0,006$ ат.е., (б) изолинии в интервале $-0,4 - 0$ с шагом $0,02$ ат.е.; (а), (в) отрицательным значениям отвечают непрерывные линии, (б) все значения отрицательны.

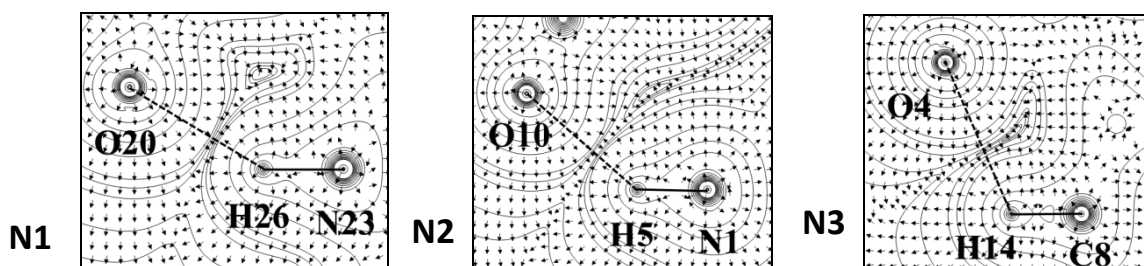


Рис. 4. Распределения обменных сил (векторная карта) и обменного потенциала (сплошные изолинии) в наиболее устойчивых конформерах C7 молекулы $\text{CH}_3\text{CONH} - \text{Glu} - \text{CONHCH}_3$ во фрагментах: C8-H14...O20, N23/1-H26/5...O10/4 (изолинии в интервале $-14 - 0$ с шагом $0,5$ ат.е.).

Таким образом, мы выявили ряд новых свойств конформеров молекулы $\text{CH}_3\text{CONH} - \text{Glu} - \text{CONHCH}_3$ в контексте давления и сил, возникающих в электронной среде, важных для биологического структурообразования. Распределение электронного давления показывает, что области нековалентных взаимодействий, замыкающих неустойчивые псевдоциклы, будут сильнее всего деформированы при внешнем воздействии. Для устойчивых псевдоциклов электронная среда будет меньше деформирована вдоль нековалентной связи.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных исследований (грант 19-03-00141а).

Список литературы

1. Tsirelson V.G., Stash A.I. and Tokatly I.V. Bonding in Molecular Crystals from the Local Electronic Pressure Viewpoint // Mol. Phys. - 2016. Vol. 114. - P. 1260-1269.
2. V.G. Tsirelson, A.I. Stash, I.V. Tokatly. Quantum Pressure Focusing in Solids: A Reconstruction from Experimental Electron Density. Acta Cryst., B75 (2019) 201-209 doi.org/10.1107/S2052520619001471.
3. Казимир А.Р., Коротенко В.Н., Егорова А.Н., Цирельсон В.Г. Нековалентные взаимодействия в конформерах C5 диамида глютаминовой кислоты по данным квантово-химического анализа // Успехи в химии и химической технологии. - 2017. Т.31, №4 - с.25-27.

УДК 66.091.7

Мендруль В.В., Серёгина Т.С., Ивановская Е.В., Деревнин И.А., Дятлов В.А.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КЛЮЧЕВЫХ САЙТОВ СВЯЗЫВАНИЯ ГОССИПОЛА С ДИАЛЬДЕГИДПОЛИСАХАРИДАМИ

Мендруль Виктория Васильевна, магистрант 1 курса факультета нефтегазохимии и полимерных материалов, e-mail: vik.mendrul@yandex.ru;

Серёгина Татьяна Сергеевна, студентка 3 курса факультета нефтегазохимии и полимерных материалов;

Деревнин Игорь Алексеевич, студент 3 курса факультета нефтегазохимии и полимерных материалов;

Ивановская Екатерина Владиславовна, студентка 1 курса факультета нефтегазохимии и полимерных материалов;

Дятлов Валерий Александрович, д-р хим. наук, профессор, РХТУ им. Д.И. Менделеева;

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Миусская площадь, 9, Москва, Россия

Исследование посвящено определению ключевых сайтов для связывания госсипола с диальдегидполисахаридами, которые используются в качестве полимеров-носителей лекарственных средств. Обнаружено, что в условиях реакции нафтахинон присоединяется как к окисленным звеньям, так и к гидроксильным группам восстанавливающих концов полисахаридов с образованием полуацетальных связей.

Ключевые слова: диальдегиддекстран; диальдегидкарбоксиметилцеллюлоза; деалкилирование госсипола; гликозилирование госсипола.

DETERMINATION OF THE KEY SITES FOR COVALENT BONDING OF GOSSYPOL TO DIALDEHYDE POLYSACCHARIDES

Seregina T. S., Mendrul V.V., Ivanovskaia E.V., Kharitonova V.G., Derevnin I. A., Dyatlov V. A.

D.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia.

This study is devoted to determination of the key sites for covalent bonding of gossypol to dialdehyde polysaccharides, which are used as conventional drug carriers. It has been found that gossypol irreversibly interacts with hemiacetal cycles of oxidized units and reducing terminal groups via aldehyde moiety only. The products of gossypol glycosilation have been synthesized and used as low molecular mass models to determine the bonding sites and chemical structure of resulting polymers.

Key words: dialdehydedextran; dialdehydecaryboxymethylcellulose; gossypol dealkylation; gossypol glycosilation.

Госсипол – природный полифенол, токсин хлопчатника, выделяемый из корней и листьев этого растения. Он и его производные обладают множеством видов биологической активности, включая противоопухолевую, антиоксидантную, противовирусную и другие [1]. В тоже время госсипол относится к классу высокотоксических соединений действующих на быстро делящиеся клетки. Он угнетает мужскую фертильность, а в более высоких дозах вызывает токсический синдром. Высокая цитотоксичность госсипола обусловлена наличием двух альдегидных групп, способных сшивать белки и нуклеиновые кислоты. Одним из подходов, позволяющих существенно снизить токсичность, является иммобилизация на биodeградирующие полимеры [2]. Весьма эффективными носителями госсипола оказались диальдегиддекстран и диальдегидкарбоксиметилцеллюлоза, получаемые периодатным окислением соответствующих природных и полусинтетических полимеров [3, 4]. Целью работы было определение ключевых сайтов для ковалентной связи госсипола с диальдегидполисахаридами.

Окисленные полисахариды имеют несколько потенциальных сайтов для связывания активного вещества, содержащего ароматическую альдегидную группу.

Первый – это окисленное глюкозное кольцо существующее в виде циклических полуацеталей. ДАКМЦ содержит единственный тип окисленных звеньев (рисунок 1, сайты a), в то время как ДАД имеет три типа (рисунок 1, сайты b, c, d).

Второй потенциальный сайт - остатки неокисленных ангидроглюкозных звеньев. Этот сайт имеет особое значение для полимеров с высокой молекулярной массой, содержащих относительно небольшое количество окисленных звеньев. Конденсация может протекать с вовлечением первичных (C6) и вторичных (C2–C4) спиртовых –ОН групп (рисунок 1, сайты e, f, g).

Третий сайт – полуацетальные –ОН группы восстанавливающих концов макромолекул (C1). Этот сайт имеет особое значение для низкомолекулярных полисахаридов, которые могут содержать до 1-2 мол.% (рисунок 1, сайты h, i).

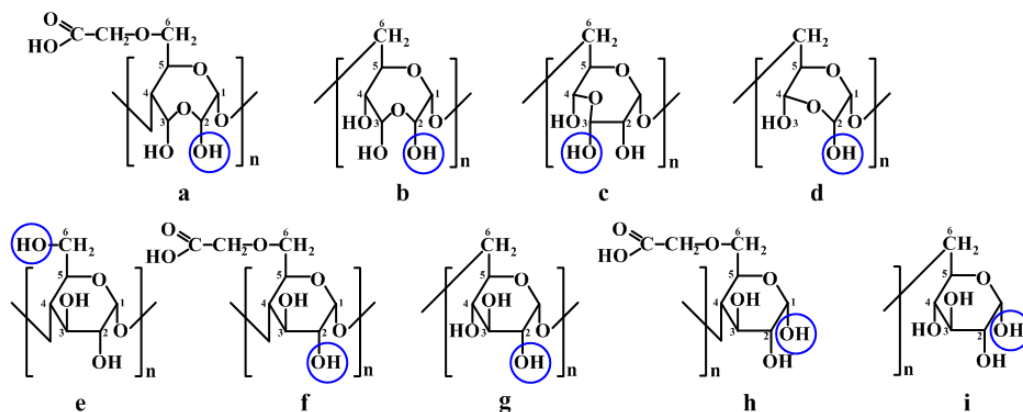


Рисунок 1 – Потенциальные сайты для присоединения госсипола к ДАКМЦ и ДАД

Конденсация госсипола с сайтами первого типа была изучена с использованием полисахаридов содержащих не менее 60% окисленных звеньев. В ЯМР ¹³C спектре полимеров, полученных в водном щелочном растворе при эквимольном соотношении госсипола и диальдегидполисахаридов, химические сдвиги ключевых атомов углерода C1'' и C11'' подтверждают образование химической связи между госсиполом с носителями, с образованием продуктов конденсации ацетального типа. Гемиацетальные –ОН группы окисленных полисахаридов являются ключевыми сайтами для взаимодействия с госсиполом. Окисленные звенья ведут себя как монофункциональные фрагменты в используемых экспериментальных условиях, только одна –ОН группа может реагировать с госсиполом с образованием продукта гликозилирования. Взаимодействие с двумя фрагментами молекулы госсипола не происходит по стерическим причинам. Бифункциональная молекула госсипола может взаимодействовать с окисленными звеньями одной и той же или разных макромолекул носителя, однако спектральные исследования не позволяют определить разницу и это остается вне сферы данного исследования.

Взаимодействие глюкозы с госсиполом использовали в качестве модельной реакции связывания нафталдегида с неокисленными звеньями и восстанавливающими концевыми группами макромолекул. Реакцию проводили в водной среде при нейтральных и щелочных значениях pH. Борная кислота, введенная в реакционную среду, была использована для эффективного контроля стерео- и региоселективности гликозилирования. Ориентационный эффект комплекса Безекена, образующегося в борат содержащей водной среде, закрывает –ОН группы глюкозных циклов полисахаридов направленные в одну сторону, обеспечивая региоселективность реакции присоединения

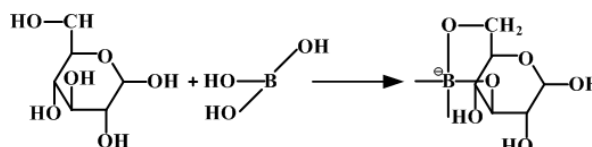


Рисунок 3 – Образование боратного комплекса Безекена с глюкозой

Взаимодействие госсипола с глюкозой в боратном буфере приводит к конденсации с –ОН групп у анамерных атомов углерода C1''. Вторичные спиртовые функциональные группы при атомах углерода C2, C3 и C4 остаются нетронутыми в вышеупомянутых условиях. Реакция дает смесь трех соединений (Рис. 4), которые могут быть выделены в виде боратных комплексов.

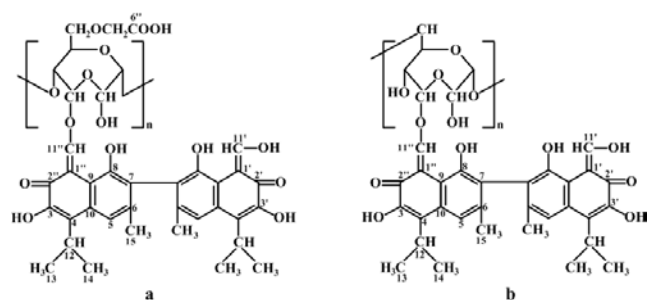


Рисунок 2 – Госсипол, ковалентно связанный с цепью: ДАКМЦ (a) и ДАД (b)

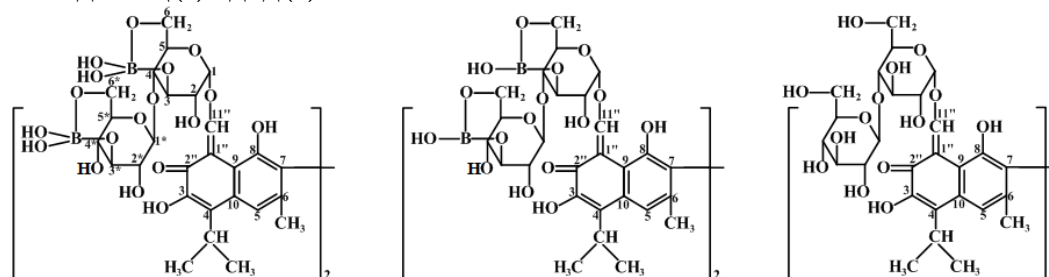


Рисунок 4 – Продукты гликозилирования госсипола олигомерами глюкозы (целлобиозой) в водной боратсодержащей среде

Взаимодействие глюкозы с госсиполом в спиртовой среде изучали, чтобы подтвердить стерическое затруднение в молекуле дизамещенного нафталяльдегида. Конденсация с вовлечением сайта С1 достаточно высоко стерео- и региоселективна, что обусловлено стерическими затруднениями при гликозилировании двух альдегидных групп молекулы госсипола. Присоединение двух молекул α -глюкозы, имеющей ОН группу при анамерном углеродном атоме в аксиальном положении не вызывает сильных стерических затруднений, в то время как замещение госсиполом экваториальной ОН-группы β -глюкозы стерически невозможно. Спектр ЯМР ^{13}C продукта конденсации демонстрирует существенные изменения в положении ключевых сигналов.

1. Сигнал анамерного атома углерода С(1) незамещенного α -гликозидного кольца 93,6 м.д. в спектре отсутствует, в спектре присутствует сигнал 96,4 м.д. малой интенсивности анамерного углерода С(1) β -глюкозы, не вступающей в реакцию;

2. В спектре присутствует сигнал 101,22 м.д. замещенного анамерного атома углерода С(1) α -гликозидного кольца, вступившего в реакцию с госсиполом.

При проведении реакции в условиях избытка глюкозы образуется смесь моно- и дизамещенного продуктов в мольном соотношении 1:3. При равномольном соотношении и в условиях избытка госсипола образуется продукт моногликозилирования.

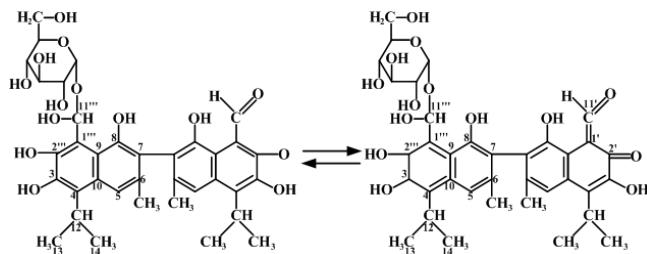


Рисунок 5 – Продукт моногликозилирования госсипола в спиртовой среде

Таким образом, альдегидные функциональные группы являются ключевыми сайтами для связывания молекул госсипола с полисахаридными полимерами-носителями. В щелочной боратсодержащей среде и спиртовом растворе госсипол существует в кетольной и альдегидной таутомерных формах соответственно.

Гемиацетальные –ОН группы диальдегидполисахаридов являются ключевыми сайтами для взаимодействия с госсиполом. Причем, окисленные звенья ДАКМЦ и ДАД реагируют как монофункциональные фрагменты в выбранных экспериментальных условиях. В реакции также участвуют восстанавливающие концевые группы макромолекул.

Борная кислота, введенная в реакционную среду, может быть использована для эффективного контроля стерео- и региоселективности гликозилирования.

Все три вторичные –ОН группы неокисленных ангидроглюкозных звеньев декстрана (С2-С4) и одна –ОН группа карбоксиметилцеллюлозы (С3) не участвуют во взаимодействии с госсиполом в выбранных экспериментальных условиях.

Список литературы:

1. V.G. Nesterenko, A.P. Suslov, V.A. Dyatlov, I.S. Kruppa. Gossypol polymer derivatives, methods for production thereof and pharmaceutical composition based thereon // Patent RU 2577539C2.2016.
2. V.A. Dyatlov, I.S. Kruppa, T.A. Grebeneva, V.V. Kireev, I.B. Sokol'skaya. Covalent Linkage of Gossypol and Dialdehyde Dextran // Chem. Nat. Compd. 2016, V. 52. I. 4. P. 628–633.
3. V.A. Dyatlov, V.I. Gumnikova, I.S. Kruppa, I.R. Rustamov, V.V. Kireev, T. A. Grebeneva, V.I. Maleev. Study of the chemical structure of dialdehyde carboxymethyl cellulose produced by periodate oxidation under different condition // Int. Polymer Sci. Tech. 2015. V. 42. I. 4. P. 19-26.
4. V.I. Gumnikova, V.A. Dyatlov, T.A. Grebeneva, I.S. Kruppa, V.V. Kireev, V.I. Bakhmutov. Study of the chemical structure of dialdehydedextran produced by periodate oxidation under different condition // Int. Polymer Sci. Tech. 2013. 6. I. 6. P. 44-50.

УДК 66.091.7

Серегина Т.С., Мендруль В.В., Ивановская Е.В., Харитоновна В.Г., Деревнин И.А., Дятлов В.А.

МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ БИОРАЗЛАГАЕМЫЕ ТКАНЕЗАМЕЩАЮЩИЕ МАТЕРИАЛЫ

Серегина Татьяна Сергеевна бакалавр 3 курса кафедры химической технологии пластических масс; e-mail: tatiana.seregina.2016@yandex.ru;

Мендруль Виктория Васильевна магистр 1 курса кафедры химической технологии пластических масс;

Ивановская Екатерина Владиславовна бакалавр 1 курса кафедры химической технологии пластических масс;

Харитоновна Виктория Геннадьевна магистр 2 курса кафедры химической технологии пластических масс;

Деревнин Игорь Алексеевич бакалавр 3 курса кафедры химической технологии пластических масс;

Дятлов Валерий Александрович, д.х.н., профессор, РХТУ им. Д. И. Менделеева, Россия, Москва.

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Россия, Москва, Миусская пл., 9

Предложен способ создания биоразлагаемых скаффолдов, на основе ксеноперикарда и глиссоновой капсулы печени, для выращивания дифференцированных тканей. Такой биоматериал способен замещаться собственной тканью организма и выделять в кровоток фармакологически активные субстанции. В работе в качестве полимеров носителей использовали эпокси-пропилдекстран и диальдегиддекстран, в полимерную матрицу которых включены антибиотик гентамицин, морфогенетические белки, стимулятор ранозаживления и нанокорпускулярные носители. Каждое лекарственное средство имеет собственную независимую динамику выделения.

Ключевые слова: полисахариды, эпокси-пропилдекстран, диальдегиддекстран, полимерные производные гентамицина, морфогенетические белки, методы обработки ксеноперикарда и глиссоновой капсулы печени.

MULTIFUNCTIONAL BIODEGRADABLE SCAFFOLDS FOR TISSUE SUBSTITUTION

Seregina T. S., Mendrul V.V., Ivanovskaia E.V., Kharitonova V.G., Derevnin I. A., Dyatlov V. A.

D.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia.

Has been proposed a method of creating biodegradable scaffolds which are based on xenopericardium and gelon capsule for growing differentiated tissues. This biomaterial is able to be replaced by the body's own tissue and release pharmacologically active substances into the bloodstream. Chemically modified polysaccharides epoxypropyl dextran and dialdehyde dextran have been used as the polymer drug carriers. That contain antibiotic gentamicin, morphogenetic proteins, wound healing activators and nanocorpuscular carriers. Every drug has its own independent release dynamics.

Keywords: polysaccharide, epoxypropyl dextran, dialdehyde dextran, polymeric derivatives of gentamicin, morphogenetic proteins, methods of processing xenopericardium and gelon capsule.

В современной реконструктивной хирургии вопрос тканзащещения становится все более актуальным. Это связано с тем, что в остеопластике, абдоминальной и кардиохирургии, протезировании сосудов, лечении ожогов и других областях остро ощущается дефицит биоразлагаемых материалов, способных замещаться собственной тканью. Особенно актуальной является разработка подходов к созданию биоразлагаемых скаффолдов для выращивания дифференцированных тканей, таких как эпителиальная, костная ткань и т.д. В качестве основы скаффолдов используют химически стабилизированные биологические ткани на основе ксеноперикарда и глиссоновой капсулы печени. Опыт последних лет показал, что скаффолд должен выполнять функции протеза, а кроме того, обладать лечебными свойствами, выделяя в кровоток локально лекарственные вещества. Со временем протез замещался собственной тканью, способной выполнять нормальные функции. В настоящее время в восстановительной хирургии широко используют небiorазлагаемые материалы, стабилизированные в растворе глутарового альдегида, однако они не способны замещаться собственной тканью

организма и выделять в кровоток фармакологически активные вещества.

Целью настоящей работы явилась разработка подходов к синтезу биоразлагаемых скаффолдов на основе химически стабилизированных биологических тканей содержащих полусинтетические полимеры и корпускулярные носители, способные выделять в кровоток лекарственные вещества.

Скорость биоразложения полимеров регулировали путем их химической обработки активированными полимерами полисахаридного типа, эпихлоргидрин активированным декстраном и диальдегиддекстраном. Выбор этих полимеров не случаен. Их основой является нетоксичный биоразлагаемый полимер декстран – поли-1,6- α -глюкоза, который можно использовать для создания межволоконного геля без риска блокады клубочковой фильтрации почек высокомолекулярными фракциями, которые неизбежно присутствуют при разложении сшитых полимеров.

Эпихлоргидрин активированный декстарн является биоразлагаемым полимером, однако присутствие в его структуре эпокси-пропильных групп, способных

необратимо взаимодействовать с аминными группами коллагена биологической ткани позволяет регулировать в широких пределах скорость ферментативного гидролиза коллагена – белка,

составляющего основу волокон биоткани. Полимер получали обработкой клинического кровезаменителя полиглюкина эпихлоргидрином в щелочной среде в соответствии со схемой 1.

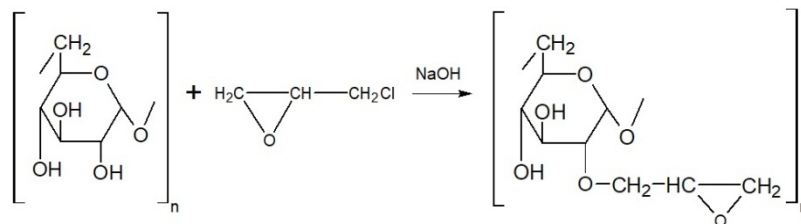


Схема 1. Получение эпихлоргидрин активированного декстрана.

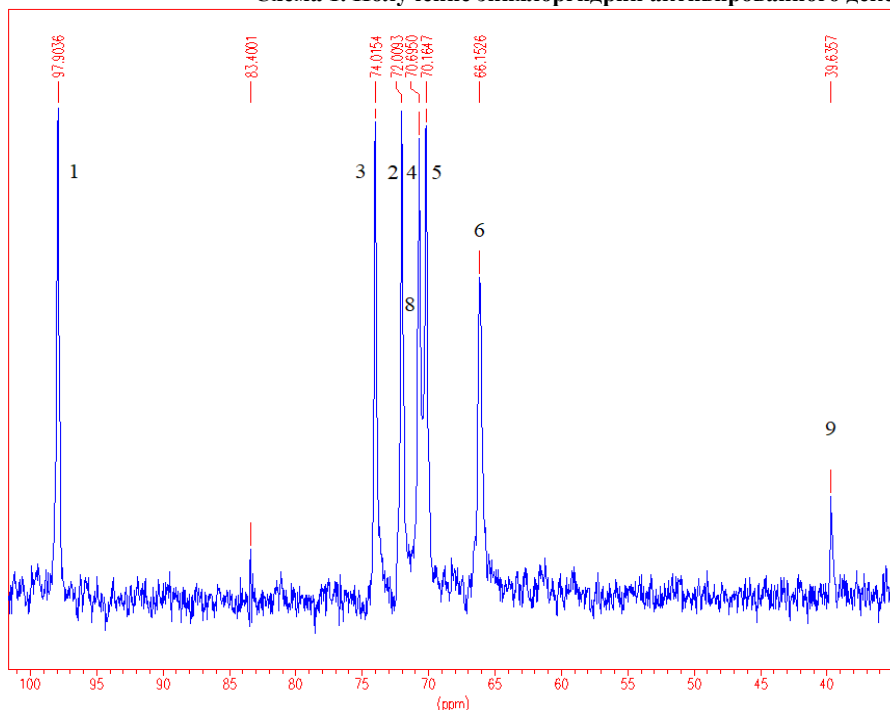
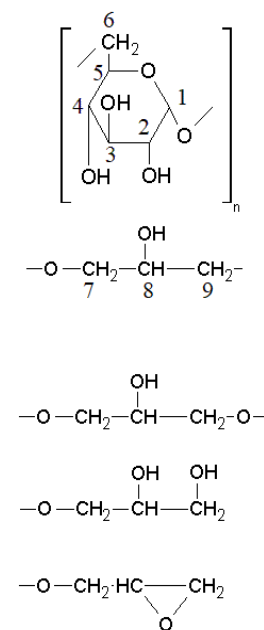


Схема 1а. ЯМР ¹³C спектр эпихлоргидрин активированного декстрана.



Второй полимер – диальдегиддекстран способен ковалентно связываться с поверхностью коллагена, однако внутри организма может быть подвергнут гидролизу без участия ферментов. Поэтому его удобно использовать в качестве полимера носителя лекарств, выделение которых из протеза необходимо обеспечить в течение первого периода после хирургической имплантации биопротеза в организм. Диальдегиддекстран получали методом периодатного окисления клинического кровезаменителя полиглюкина в соответствии со схемой 2.

Способ позволяет синтезировать носители с различным содержанием окисленных звеньев, которое может изменяться в широких пределах. В работе использовали диальдегиддекстран, содержащий 40% окисленных звеньев ($\gamma_{ок} = 40\%$). Для введения в композиционные материалы лекарств, способных к длительному постепенному выделению, использовали нанокорпускулярные носители полицианакрилатного типа, которые получали по следующей схеме 3. Лабораторный способ обработки биоткани предусматривает следующую последовательность технологических стадий (схема 4).

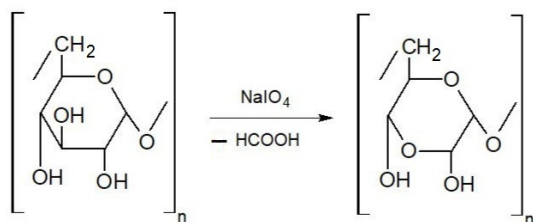


Схема 2. Получение диальдегиддекстрана.

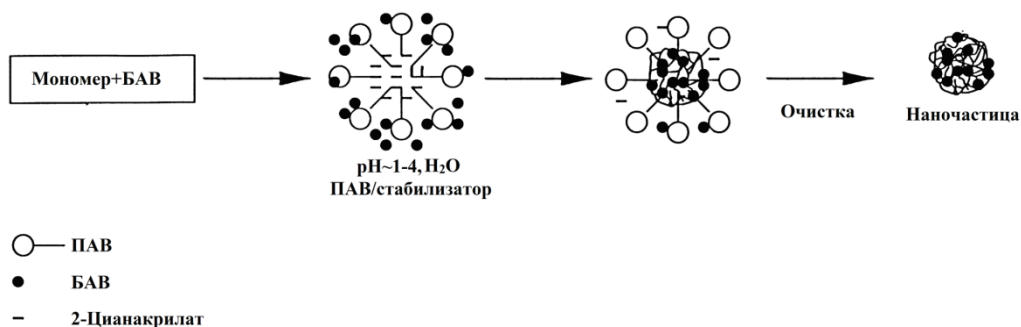


Схема 3. Получение нанокорпускулярных полицианакрилатных носителей.



Схема 4. Последовательность обработки биоткани.

Первоначально ткань животного происхождения, отмытая от клеточных элементов ферментативным способом, обрабатывают эпихлоргидрин активированным декстраном, который проникает в межволоконное пространство, образуя мукополисахаридный матрикс, ковалентно связанный с коллагеном волокон. Скорость биодеградации контролируется изменением содержания эпоксипропильных групп в декстрани, которое позволяет регулировать степень химической модификации коллагена и соответственно скорость его ферментативного гидролиза. На второй стадии остаточные оксипропильные группы закрывают избытком аминокликозидного антибиотика гентамицина, который ковалентно связывается с мукополисахаридным матриксом и способствует приданию материалу способности длительно сопротивляться бактериальной инфекции. Вторым веществом, которое используют для связывания с матриксом, является морфогенетический белок. Состав морфогенетических белков зависит от назначения скаффолда. Например, протезы костной ткани содержат костный морфогенетический белок, а скаффолды, находящиеся в контакте с кровью, факторы васкуляризации и роста эпителия. Присутствие морфогенетического белка позволяет определять тип ткани, которая заместит скаффолд после его резорбции. На третьем этапе скаффолд наполняют диальдегиддекстраном в смеси с нанокорпускулярным носителем, содержащем лекарства. Эти компоненты необходимы для обеспечения быстрого выхода лекарств, ускоряющих послеоперационную регенерацию. Таким образом, скаффолд содержит набор физиологически активных веществ выделяющихся независимо друг от друга с индивидуальной динамикой.

Скорость биоразложения определяли методами *in vivo* и *in vitro*. Способ *in vitro* предполагает использование стандартного метода количественного определения скорости выхода гидроксипролина из образца биоткани под

действием коллагеназы. В опытах *in vivo* биодеградацию определяли по изменению размера образца биоткани после подкожной имплантации крысам на срок от 7 до 30 дней.

Синтезированные скаффолды содержат мукополисахаридный матрикс, содержащий антибиотик гентамицин, ковалентно связанный с эпихлоргидрин активированным полисахаридным гелем устойчивой к гидролизу связью. Кроме того гель содержит гепарин, обеспечивающий гемосовместимость и морфогенетический белок. Антибиотик выделяется в кровоток только под действием ферментов бактерий. Все остальные компоненты медленно выделяются при биорезорбции скаффолда. Это обеспечивает длительную защиту протеза от бактериальной инфекции, а также локальную дифференциацию замещающей ткани по выбранному пути. Дополнительно межволоконное пространство заполнено диальдегиддекстраном, содержащим ковалентно связанный стимулятор ранозаживления инсулин, который выделяется локально в течение первых 7 дней после хирургического вмешательства и обеспечивает ускоренную местную регенерацию, а также нанокapsулы выделяющие в кровоток противовоспалительное средство.

Таким образом, изучены подходы к синтезу биоразлагаемых скаффолдов для выращивания различных дифференцированных тканей. Скаффолды, на основе ксеноперикарда и глиссоновой капсулы печени, содержат набор физиологически активных веществ, способных выделяться в кровоток, причем каждое лекарство имеет собственную независимую динамику выделения.

Список литературы

1. Rustamov I.R., Dyatlov V.A., Grebeneva T.A., Dyatlov A.V., Zaitsev V.V., Maleev V.I. Polycyanoacrylate porous material for bone tissue substitution // Journal of Material Chemistry. В. 2014. I 2. P.4310-4317.

УДК 542.06

Харитонов В.Г., Серегина Т.С., Деревнин И.А., Ивановская Е.В., Мендруль В.В., Дятлов В.А., Лусс А.Л.

ИНТЕРМЕДИАТЫ ДЛЯ СИНТЕЗА ПОЛИ-2-ЦИАНАКРИЛАТОВ**Харитонов Виктория Геннадьевна**, магистр 2 курса кафедры химической технологии пластических масс; e-mail: elinor.ktk@gmail.com**Серегина Татьяна Сергеевна**, бакалавр 3 курса кафедры химической технологии пластических масс;**Деревнин Игорь Алексеевич**, бакалавр 3 курса кафедры химической технологии пластических масс;**Ивановская Екатерина Владиславовна**, бакалавр 1 курса кафедры химической технологии пластических масс;**Мендруль Виктория Васильевна**, магистр 1 курса кафедры химической технологии пластических масс;**Дятлов Валерий Александрович**, д.х.н., профессор, РХТУ им. Д. И. Менделеева, Россия, Москва.**Лусс Анна Леонидовна**, к.х.н. младший научный сотрудник, РХТУ им. Д.И. Менделеева, г Москва,

Эфиры 2-цианакриловой кислоты широко известны в качестве мгновенных адгезивов, а также могут быть использованы в качестве исходных соединений в технологии нанокорпускулярных носителей лекарственных средств и генной терапии. Методика синтеза этих соединений является одной из важных проблем, которые требуют решения. В данной работе были описаны методы синтеза эфиров 2-цианакриловой кислоты, а также рассмотрен альтернативный способ получения исходных соединений для синтеза поли-2-цианакрилатов. Кроме того, рассматривается итог получения капсул из нового типа интермедиатов.

Ключевые слова: поли-2-цианакрилаты, 2-цианакриловая кислота, вакуумный пиролиз этил-2-цианакрилата, нелетучие эфиры 2-цианакриловой кислоты, нанокорпускулярные носители лекарственных средств.

INTERMEDIATES FOR SYNTHESIS OF POLY-2-CYANOACRYLATES

Kharitonova V.G, Seregina T.S., Derevnin I.A., Ivanovskaya E.V., Mendrul V.V., Dyatlov V.A., Luss A.L.

D.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

Esters of 2-cyanoacrylic acid are well known as instant adhesives and also can be used as monomers in the technology of nanocarpuscular carriers of drugs. The method of synthesis for those compounds is one of the most important issues. In this work we introduce different methods of synthesis esters of 2-cyanoacrylic acid. We focus on one of them and the result of its application.

Keywords: poly-2-cyanoacrylates; 2-cyanoacrylic acid; pyrolysis of ethyl-2-cyanoacrylate; nano-carpuscular drug carriers; nonvolatile esters of 2-cyanoacrylic acid.

Способность эфиров 2-цианакриловой кислоты, описывающихся общей формулой (Рис.1), мгновенно вступать в реакцию полимеризации даже под действием слабых нуклеофилов, в том числе следов воды, обуславливает их применение в качестве адгезивов, например, их широко применяют в качестве основного компонента медицинских, а также «супер-клеев». Также, 2-цианакрилаты используют для получения полиалкил-2-цианакрилатных наноносителей лекарственных средств или других активных агентов, в том числе и предназначенных для генной терапии.

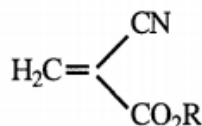


Рис. 1 – Общая формула эфиров 2-цианакриловой кислоты.

Известно несколько способов синтеза 2-цианакриловых мономеров [1].

В промышленности широко применяется метод Кновенагеля. Он протекает в две стадии, на первой проводят синтез олигомеров алкилцианоакрилатов, на второй - путем термической деструкции получают моноэфиры 2-цианакриловой кислоты. Этой стадией лимитируется разнообразие получаемых мономеров, невозможно получить

эфиры с заместителем карбонильной группы, содержащим более 8-10 углеродов.

Другим способом является переэтерфикация. Она проходит в одну стадию и заключается в замещении метиловой или этиловой группы в эфире 2-цианакриловой кислоты более высокомолекулярным спиртом в условиях кислотного катализа. Эта реакция протекает с крайне незначительным выходом.

Третий способ требует промежуточной защиты двойной С=C связи [2], было выяснено, что лучшие результаты дает антраценовая защита. Таким образом, на первой стадии проводят синтез аддукта антроцена с эфиром 2-цианакриловой кислоты, затем получают высший эфир и соответствующую кислоту. Защиту затем снимают по реакции Дильса-Альдера. Остатки диена удалить достаточно сложно, а также конечные продукты содержат большое количество трудноотделимых примесей, в связи с чем данный метод не нашел широкого распространения.

Еще один метод в качестве исходного соединения использует цианацетилен [3]. Получение из него 2-цианакрилатов проводят путем каталитического α-карбоксихлорирования. В промышленности этот метод не нашел применения в связи с трудностью очистки от остатков нуклеофильного катализатора, который

может приводить к спонтанной полимеризации при хранении, и низким выходом.

Также, существует хлорангидридный метод, связанный с получением 2-цианакрилоилхлорида хлорированием цианакриловой кислоты при помощи пятихлористого фосфора [4]. Однако, активное применение данного способа значительно осложняется тем, что обработка мягкими хлорирующими агентами не приводит к образованию целевого продукта, а использование слишком сильных агентов, например пятихлористого фосфора, может привести к побочным реакциям и тому, что конечный ангидрид будет иметь недостаточную чистоту, а выход будет снижен.

Нами был разработан еще один метод получения интермедиатов, позволяющих получить поли-2-цианакрилаты. Он заключается в присоединении высокомолекулярного спирта по двойной связи к эфиру 2-цианакриловой кислоты (Рис. 2).

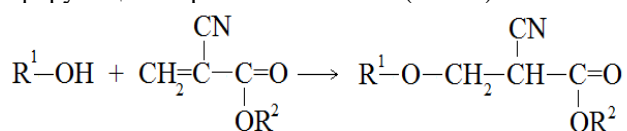


Рис. 2 – Реакция получения аддукта высокомолекулярного спирта и эфира 2-цианакриловой кислоты.

Данный способ не требует использования растворителя, в случае, если оба исходных реагента являются жидкостями. В качестве эфира 2-цианакриловой кислоты использовался этил-2-цианакрилат ($R^2 = C_2H_5$), в качестве высокомолекулярного спирта использовался додеканол ($R^1 = C_{12}H_{25}$), хотя также проводились испытания и с другими спиртами, например, октанолом, а также спиртами Span 20 и Span 85 фирмы Sigma Aldrich.

В качестве инициатора реакции использовалась смесь 2-цианакриловой кислоты и паратолуолсульфокислоты, в качестве ингибитора полимеризации использовался гидрохинон. Также, система барботировалась двуокисью серы для удаления следов воды, которые могли попасть в систему.

Данный способ достаточно продолжительный по времени – систему оставляют без нагрева в условиях постоянного перемешивания на 2- часов. Барботирование при этом приводится только в самом начале, в течение пяти минут.

Это позволяет получить конечный продукт с высоким выходом, однако точное его процентное соотношение выяснить достаточно затруднительно, потому как очистить его от следов этил-2-цианакрилата и спирта не вступивших в реакцию оказывается тяжело. Реакция является равновесной и, как следствие, обратимой и удаление из реакционной среды излишков реагентов, приводит к тому, что равновесие смещается в сторону исходных соединений. Тем не менее, использование в качестве метода разделения смеси вакуумной перегонки является достаточно качественным способом для данного случая.

Аддукт представляет собой маслянистую прозрачную жидкость, обладающую слабой желтоватой окраской, а также сохраняющую слабый запах эфиров 2-цианакриловой кислоты. Добавление его в воду приводит к образованию полимера этил-2-цианакрилата. Однако, в процессе полимеризации происходит самоорганизация в мицеллы, в результате чего получается эмульсия.

Согласно исследованию полученных частиц методом динамического светорассеяния их размеры в среднем составляют 100 нм (Рис. 3).

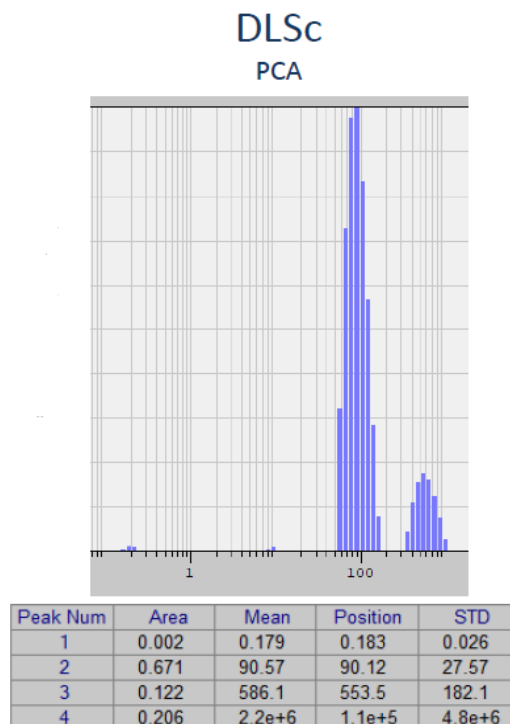


Рис. 3 – Результаты исследования частиц полиэтил-2-цианакрилата методом динамического светорассеяния. Получение большого разнообразия эфиров 2-цианакриловой кислоты остается открытой научной задачей, что связано с недостаточным количеством методов, дающих достаточную вариативность получаемых соединений и обладающих большим выходом целевых продуктов. Однако, существует возможность получать другие интермедиаты для синтеза поли-2-цианакрилатов, которые также могут образовывать мицеллы в процессе полимеризации.

Список литературы:

1. Dyatlov V.A., Maleev V.N., WO 9526371 A1 – 1995.
2. Jaime Ayarza, Ibraheem T Badejo, Kenneth W Davis, Jeffrey R Hennenkamp, WO 2002036549 A3 – 2003.
3. Dyatlov V.A., Rustamov I.R., Grebeneva T.A., Maleev V.I., Gololobov Yu.G., Kireev V.V. Synthesis of 2-cyanoacryloyl chloride and its interaction with O- and S- nucleophiles // Mendeleev Communications. 2013. V. 23. I. 6. P. 356.
4. Hans-Athanas Dr Bruhn, Miklos Dr Danielisz, Hubert Dr Harth, Hasso Leischner, Rolf Lier, Willi Dr Wuest, DE 3233007 A1 – 1984.

Секция

**«СОЦИАЛЬНО-ЭКОНОМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
УСТОЙЧИВОГО РАЗВИТИЯ»**

Председатель секции профессор А.В. Малков,
секретарь – доцент Я.П. Молчанова.

УДК 31

Кресова А. М.

ГЕНДЕРНАЯ СЕГРЕГАЦИЯ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ В РОССИИ

Кресова Алена Максимовна магистрант 1 курса Института химии и проблем устойчивого развития РХТУ имени Д.И. Менделеева, г. Москва, e-mail: alena.kresova@mail.ru

В статье раскрывается актуальность исследования гендерной сегрегации в естественных науках в Российской Федерации. В статье освещены основные аспекты, необходимые для более глубокого исследования проблем выбора профессии и профессиональных трудностей.

Ключевые слова: гендерная сегрегация, гендерная социология.

GENDER SEGREGATION IN SCIENCE IN RUSSIA

Kresova A.M.

This article reveals the relevance of the study of gender segregation in the natural Sciences in the Russian Federation. The article highlights the main aspects necessary for a deeper study of the problems of choosing a profession and professional difficulties.

Keywords: gender segregation, gender sociology.

Естественные науки имеют более выраженную междисциплинарную направленность, чем точные и гуманитарные, которая, ожидаемо, должна способствовать более или менее равномерной гендерной сегрегации среди естественнонаучных отраслей. Следует отметить, что ряд исследователей [1] отмечает некоторую тенденцию к увеличению числа женщин в естественных науках за последние годы. Так, например, по данным Росстата [2] в России в 2015 году среди выпускников ВУЗов, получивших естественнонаучную специальность, женщин больше, чем мужчин почти в два раза, но при этом в научной образовательной деятельности на руководящих должностях (а также имеющих научные степени (кандидата наук, доктора наук)) больше мужчин, чем женщин [2. С.75]. Данный факт, в свою очередь, является примером вертикальной сегрегации.

По всему миру возрастает потребность в STEM-специальностях, а проблема гендерного неравенства является пятой целью устойчивого развития [3], что в свою очередь говорит об острой актуальности данной темы. В соответствии с приказом Росстата от 23.10.2017 N 1027 [4] на территории Российской Федерации вводится следующая классификация наук:

1. естественные науки;
2. технические науки;
3. медицинские науки;
4. сельскохозяйственные науки;
5. общественные науки;
6. гуманитарные науки.

В конце 1990-х годов в США зародилась система образования STEM (STEM расшифровывается следующим образом: STEM – это естественные, технические, инженерные и математические науки [5]. Иногда добавляют букву R – робототехника [6]). Данная система образования имеет больший уклон к практико-ориентированному подходу с дошкольного возраста. Такой процесс обучения позволяет детям с раннего возраста глубже погрузиться в изучаемые STEM области и к моменту завершения обучения в средней школе быть более готовым к обучению в профессиональных учебных заведениях.

Данная система образования в России развита слабо и распространена лишь в частном секторе, а также, по

большой части, в крупных городах. Примерами могут являться детский сад от ОАО «РЖД» [6] и Хорошевская гимназия «Хорошевская школа» [7]. В первом случае идёт активная педагогическая деятельность, направленная на ознакомление с железнодорожными профессиями, а во втором – более глубокое изучение естественно-научных дисциплин в соответствии с системой образования STEM. В государственных учебных заведениях такая система обучения не является актуальной.

При этом важно отметить следующие черты, которые существенно влияют на формирование профессиональной стратегии у детей на период обучения в дошкольном учебном заведении [6]:

- профессия родителей;
 - профессия знакомых, либо профессия, с которой сталкивался дошкольник в повседневной жизни (воспитатель, врач, водитель) и в рамках образовательной деятельности;
 - влияние телевидения, мультипликации, книг;
 - профориентационные мероприятия в учреждении образования;
 - способности, интересы, мотивации, успехи и удачи в какой-либо деятельности;
 - родительское программирование, нацеленность семьи на достижение ребёнком ещё в дошкольном детстве определённых профессиональных успехов (спорт, танцы, гимнастика, рисование, музыка).
- Практически аналогичные факторы влияют на формирование профессиональной стратегии у школьников [8]:
- деятельность родителей и близкого окружения (профессиональные династии, советы родственников и знакомых.);
 - профориентационные мероприятия;
 - эффективность системы образования в школе;
 - влияние педагогов в школе;
 - экономические возможности семьи;
 - влияние СМИ;
 - престижность профессии в среде сверстников школьника;
 - возможность реализации собственных способностей и интересов.

Помимо вышесказанного следует также обращать внимание на успешность усвоения следующих аспектов профессиональной самореализации в студенческие годы [9]:

- наглядные примеры в ходе обучения (персоналии, экскурсии и пр.);
- моделирование проблемных ситуаций (практики, игровые методы и пр.);
- самостоятельные и коллективные работы (реализация личностных качеств в учебных ситуациях);
- социальная атмосфера в учебной среде (поведение преподавателей и студентов);
- влияние ближайшего окружения (родственники, друзья, знакомые);
- опыт первичной профессиональной деятельности.

Данные аспекты были сформированы с помощью анализа литературы, а также пилотажного исследования. Важно отметить, что каждый аспект отвечает за формирование у человека понятий «мужская» или «женская» профессия, стереотипов. Успешность усвоения вышеперечисленных аспектов влияет на формирование отношения к данной области, а также раскрытие и формирование личностных и профессиональных качеств.

Важно выделить следующие проблемные поля, необходимые для более глубокого изучения, выявленные в ходе проведения пилотажного исследования (метод исследования: фокус-группа; респонденты: 7 магистрантов РХТУ им. Д. И. Менделеева кафедры ЮНЕСКО «Зелёная химия для устойчивого развития»). Время интервьюирования: 00:40:51. Для обработки информации было использовано следующее ПО: MAXQDA 2018, MS Office):

– Большая часть респондентов отметили, что интерес к естественным наукам сформировался в ходе обучения на бакалавриата.

– Почти половина опрошенных отметили, что сталкивались лично или присутствовали при нарушении этических норм в отношении преподавателя и студента в ходе учебной деятельности.

– Почти все респонденты отметили, что ничего не предпринимали для решения вышеупомянутых нарушений в связи с отсутствием веры в решение проблем.

– Большая часть участников фокус-группы заявили о том, что не собираются продолжать научную деятельность в аспирантуре после завершения обучения в магистратуре в связи с отсутствием экономической выгоды в сравнении с профессиональной деятельностью.

– Почти половина опрошенных респондентов предпочли бы административную и рутинную (но стабильную) научно-исследовательской работе, которая в свою очередь носит непостоянный характер. Резюмируя сказанное выше, можно выделить следующие аспекты, подлежащие более глубокому изучению:

– роль семьи и ближайшего окружения в процессе обучения и первичной профессиональной деятельности;

– влияние педагогов и преподавателей;

– влияние СМИ;

– экономические возможности в семье.

Список литературы

1. Яковенко Я. Ю. «Гендерное равенство в сфере образования и науки»/ Электронный ресурс. Режим доступа: <http://old.fa.ru/projects/mknrsa/skireports/3/Социология%20и%20политология/Яковенко%20Я.Ю.pdf> (Дата обращения: 26.09.2018)
2. Женщины и мужчины России. 2016, Статистический сборник с208, С73/ Электронный ресурс. Режим доступа: http://www.gks.ru/free_doc/doc_2016/woman16.pdf (Дата обращения: 26.09.2018)
3. Цель 5: Обеспечение гендерного равенства и расширение прав и возможностей всех женщин и девочек/Цели в области устойчивого развития – Режим доступа: <https://www.un.org/sustainabledevelopment/ru/gender-equality/> (Дата обращения: 25.11.2018)
4. Приказ Росстата от 06.08.2018 N 487 (ред. от 14.01.2019) «Об утверждении статистического инструментария для организации федерального статистического наблюдения за деятельностью в сфере образования, науки, инноваций и информационных технологий»/ Электронный ресурс. Режим доступа: http://www.consultant.ru/document/cons_doc_LAW_304631/bf72c50fc9708b9f8c74b73fc2626e47948924e2/ (Дата обращения: 22.02.2019)
5. Что такое STEM-образование/Amotech – Режим доступа: <https://anrotech.ru/blog/chto-takoe-stem-obrazovanie/> (Дата обращения: 25.11.2018)
6. Теплова А. Б. «Психолого-педагогические условия реализации программы «STEM-образование для дошкольников и младших школьников». Сборник докладов IX Международной научно-практической конференции «Исследовательская деятельность учащихся в современном образовательном пространстве»/ Электронный ресурс. Режим доступа: <https://publications.hse.ru/mirror/pubs/share/direct/222421805> (Дата обращения: 22.02.2019)
7. Ловягин С. А. «Изучение естественных наук в логике STEM-образования: концепция и практика Хорошколе». Сборник докладов IX Международной научно-практической конференции «Исследовательская деятельность учащихся в современном образовательном пространстве» / Электронный ресурс. Режим доступа: <https://publications.hse.ru/mirror/pubs/share/direct/222421805> (Дата обращения: 22.02.2019)
8. «Ранняя опережающая профориентация как форма перспективного регулирования региональных сегментов рынка труда». Профессиональные группы в модернизирующемся российском обществе: [монография]/[А. С. Голубева и др.]; Москва: ФНИСЦ РАН, 2018/ Электронный ресурс. Режим доступа: http://www.isras.ru/files/File/publ/Professionalnye_gruppy_2018.pdf (Дата обращения: 24.02.2019)
9. Павлова Вера Степановна Педагогические инновации технологического подхода к профессиональной подготовке бакалавров // ПНиО. 2015. №3 (15). Электронный ресурс. Режим доступа: <https://cyberleninka.ru/article/n/pedagogicheskie-innovatsii-technologicheskogo-podhoda-k-professionalnoy-podgotovke-bakalavrov> (дата обращения: 23.02.2019).

УДК 330.33

Фролова А. В., Шушунова Т. Н.

АНАЛИЗ МЕЖДУНАРОДНОГО И ОТЕЧЕСТВЕННОГО ОПЫТА ЦИФРОВОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ ГОСУДАРСТВЕННОГО УПРАВЛЕНИЯ

Фролова Анастасия Владимировна, студент гуманитарного факультета, e-mail: frolovaaa1996@mail.ru

Шушунова Татьяна Николаевна, канд. техн. наук, доцент кафедры менеджмента и маркетинга

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

125047, город Москва, площадь Миусская, д. 9

Одной из глобальных тенденций последних десятилетий является стремительное внедрение информационно-коммуникационных технологий в систему государственного управления. Во всем мире порталы государственных услуг позволяют облегчить и усовершенствовать процесс взаимодействия общественности, коммерческих организаций и государства в электронной форме. Проведен анализ функционирования порталов стран, включенных в рейтинг электронного правительства Организации Объединенных Наций. Разработаны рекомендации по совершенствованию предоставления государственных услуг в Российской Федерации.

Ключевые слова: электронное правительство, государственные услуги, портал государственных услуг, информационно-коммуникационные технологии.

ANALYSIS OF INTERNATIONAL AND DOMESTIC EXPERIENCE OF THE DIGITAL TRANSFORMATION OF PUBLIC ADMINISTRATION

Frolova A.V., Shushunova T.N.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

One of the global trends of the last decades is the rapid introduction of information and communication technologies in the public administration system. Around the world, public service portals make it possible to facilitate and improve the process of interaction between the public, commercial organizations and the state in electronic form. The analysis of the functioning of the portals of the countries included in the United Nations electronic government rating is made. Recommendations for improving the provision of public services in the Russian Federation have been developed.

Keywords: electronic government, public services, public services portal, information and communication technologies.

На сегодняшний день позиции любой страны на мировой арене и уровень её экономического развития можно объективно оценить, ознакомившись с качеством и количеством государственных информационных услуг, а также со степенью их доступности для различных категорий граждан [6].

Различные услуги, предоставляемые государственными органами, сопровождают человека от самого рождения и до конца его дней. На стадиях жизненного цикла люди встречаются с различными видами государственных услуг, например, регистрация брака, получение паспорта гражданина РФ, поиск работы с помощью государственных центров занятости, регистрация купленного автомобиля и многое другое.

Ещё некоторое время назад люди ассоциировали любое государственное учреждение страны с потерей времени в бесконечных очередях, а все государственные услуги сопровождалась необходимостью заполнения множества бумаг и дополнительным посещением различных государственных инстанций. На сегодняшний же день наблюдается повсеместная трансформация всех сфер деятельности человека и общественных институтов под воздействием информационно-коммуникационных технологий. Именно новейшие информационно-коммуникационные технологии

способствуют наиболее результативному взаимодействию таких важных экономических субъектов, как государство и общество.

Активное применение информационно-коммуникационных технологий открыло для государства возможности по оптимизации и усовершенствованию процессов государственного управления. Применение системы электронного правительства в сфере предоставления государственных услуг способствует снижению издержек, характерных для традиционного документооборота, позволяет автоматизировать некоторые из процессов государственного управления, а также экономит самый ценный и не возобновляемый ресурс человечества – время [7].

Различные порталы государственных услуг в сети Интернет дают возможность гражданам и коммерческим организациям взаимодействовать с государственными службами по принципу «одного окна», что позволяет рассматривать Порталы в качестве ключевого элемента системы электронного правительства. Принцип «одного окна» предусматривает исключение или максимально возможное ограничение участия заявителя в процессе сбора и предоставления различных документов в прочие инстанции. Благодаря данным технологиям снижается время вынужденного общения индивидуальных предпринимателей,

юридических и физических лиц с государственными органами, а все действия по какой-либо услуге концентрируются в одном месте, начиная от подачи заявления и заканчивая выдачей актов о принятии решения по вопросу заявителя.

Применение электронного правительства широко используется большинством государств мира. Каждые два года Организация Объединенных Наций составляет рейтинг электронного правительства

стран мира. Лидеры и положение России в рейтинге представлены в таблице 1. В расчете индекса E-Government Development Index (EGDI) учитываются такие важные показатели, как уровень развития телекоммуникационной инфраструктуры (Telecommunication Infrastructure Index, TII), объем человеческого капитала (Human Capital Index, HCI), широта и качество онлайн-услуг (Online Service Index, OSI) [2].

Таблица 1. Рейтинг электронного правительства ООН

Позиция	Страна	EGDI Уровень развития	E-Government Development Index (EGDI)	Онлайн- сервисы	ИКТ- инфраструктур а	Человеческий капитал
1	Дания	Очень высокий	0,915	1	0,7978	0,9472
2	Австралия	Очень высокий	0,9053	0,9722	0,7436	1
3	Республика Корея	Очень высокий	0,901	0,9792	0,8496	0,8743
4	Великобритания	Очень высокий	0,8999	0,9792	0,8004	0,92
5	Швеция	Очень высокий	0,8882	0,9444	0,7835	0,9366
32	Россия	Очень высокий	0,7969	0,9167	0,6219	0,8522

В рейтинге стран 2018 года Российская Федерация находится на 32 позиции, поднявшись на три пункта, по сравнению с рейтингом 2016 года. При этом Россия вошла в число одиннадцати стран, которые имеют «очень высокий» показатель EGDI. Так же, стоит отметить, что Россия поднялась с 34-го на 23-е место в группе стран с наиболее высоким уровнем вовлеченности граждан. В данной группе все государства ранжируются по уровню участия граждан в управлении и принятии государственных решений с использованием ИКТ.

Стоит отметить, что в новом рейтинге 2018 года ООН в исследовании впервые стали оценивать уровень развития электронного правительства в городах мира. Всего было изучено 40 городов, а лидирующую позицию среди них заняла столица России - Москва, которая набрала 55 из 60 индикаторов развитости электронного правительства, таким образом опередив такие развитые города как Лондон, Париж, Сидней, Хельсинки и другие.

Анализ рейтинга ООН 2018 года и его сравнение с рейтингом 2017 года показали, что развитие проектов электронного правительства улучшилось и возросло по всему миру. Группа стран с показателем

EGDI на уровне от 0,75 до 1 по сравнению с 2016 годом увеличилась и составила более 40 стран, хотя раньше не поднималась выше отметки в 29 стран [1].

Число стран с минимальными показателями (от 0 до 0,25) уменьшилось вдвое - с 32 до 16, однако не смотря на активное развитие электронного правительства во многих странах, цифровая отсталость одних стран и ошутимое превосходство других всё ещё сохраняется.

В процессе исследования был проведен сравнительный анализ сайтов государственных услуг различных стран, представленный в таблице 2. Все выбранные для анализа страны имеют показатель уровня развития EGDI «Очень высокий».

Таким образом, объектами для анализа выступили:

- Портал государственных услуг Российской Федерации (URL: www.gosuslugi.ru) [3];
- Портал государственных услуг и информации Соединённого Королевства Великобритании (URL: www.gov.uk) [4];
- Портал государственных услуг Канады (URL: www.canada.ca) [5].

Таблица 2. Сравнительный анализ порталов государственных услуг России, Великобритании и Канады

Фактор/Портал	gosuslugi.ru.	gov.uk	canada.ca
Количество категорий, на которые подразделяются государственные услуги	16	16	8
Наличие информации о действиях в различных жизненных ситуациях	Имеется	Имеется	Имеется
Возможность регистрации на портале	Реализуется	Реализуется	Реализуется
Наличие выбора языка для сайта	Возможность выбора языка из 4-х представленных	Не реализуется	Возможность выбора языка из 2-х представленных
Наличие на сайте колонки с самыми актуальными и популярными услугами	Имеется	Имеется	Не имеется
Наличие оплаты услуг на сайте	Имеется	Имеется	Имеется
Возможность подписки на рассылку об интересующих услугах	Реализуется	Реализуется	Реализуется
Наличие поиска по сайту	Имеется	Имеется	Имеется
Возможность доступа к portalу для людей с ограниченными возможностями	Не реализуется	Реализуется	Реализуется
Возможность доступа к portalу с разных платформ	Реализуется	Реализуется	Реализуется
Наличие мобильного приложения	Имеется	Имеется	Имеется
Возможность связи с консультантом, отвечающим на типовые вопросы граждан	Не реализуется	Реализуется	Не реализуется
Наличие дополнительной информации о государстве	Не имеется	Имеется	Имеется
Получение обратной связи	Реализуется	Реализуется	Реализуется

В ходе анализа было выявлено, что информация, представленная на сайтах, является понятной и общедоступной для всех пользователей. На каждом из сайтов имеется поиск по интересующим услугам, а также каждый пользователь имеет право оформить подписку на рассылку о каких-либо услугах сайта. По наличию языков для пользователей сайта портал государственных услуг России занимает лидирующую позицию и предоставляет услуги на четырех языках. У каждого из порталов имеется мобильное приложение и возможность доступа к portalу с разных платформ. Все сайты отвечают требованиям пользователей и без труда, помогут подобрать нужную услугу, а также дополнительно ознакомят с информацией о действиях в определенных жизненных ситуациях. Для портала государственных услуг Российской Федерации были разработаны следующие рекомендации:

- создание связи с консультантом, отвечающим на типовые вопросы граждан;
- создание режима, облегчающего доступ к portalу для людей с ограниченными возможностями;
- внесение на сайт дополнительной и познавательной информации о государстве, ведомствах и прочее;
- создание версий для иностранных граждан с возможностью получения услуги на иностранном языке.

В заключении стоит отметить, что хотя система предоставления государственных услуг в электронной форме и интерактивное взаимодействие

являются новым видом взаимоотношений между органами власти и обществом, данное сотрудничество при постоянном поддержании отношений принесет большую пользу всем вышеупомянутым экономическим субъектам.

Список литературы

1. МФЦ.Международный опыт, 2016 [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.tadviser.ru/index.php/%D0%A1%D1%82%D0%B0%D1%82%D1%8C%D1%8F:%D0%9C%D0%A4%D0%A6.pdf>
2. Нисневич Ю.А Индексы развития государств мира [Текст]. — М.: НИУ-ВШЭ, 2018.
3. Портал государственных услуг Российской Федерации [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.gosuslugi.ru/>
4. Портал государственных услуг Соединенного Королевства Великобритании [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.gov.uk/>
5. Портал услуг правительства Канады [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.canada.ca/en.html>
6. Шипкова О.Т., Елизарьев В.Е. Институциональная и поведенческая экономическая теория как научная основа инновационной политики государства //Успехи в химии и химической технологии. 2015. Т. 29. № 5 (164). С. 101-104.
7. Шампоров М.М., Шипкова О.Т., Шушунова Т.Н. Порталы государственных услуг Российской Федерации: проблемы и оптимизация работы // Транспортное дело России, №

**Российский химико-
технологический
университет
имени Д.И. Менделеева**



При поддержке

**Российского химического
общества им. Д. И. Менделеева**



ООО «БИНАКОР-ХТ»

Научное издание

УСПЕХИ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Том XXXIII

№ 2 (212)

Компьютерная верстка: Зверева О.В.
Текст репродуцирован с оригиналов авторов

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева
Студенческое трансферное агентство разработок и технологий (С.Т.А.Р.Т)

Адрес университета: 125047, г. Москва,
Миусская пл., д. 9