

Министерство
образования и науки
Российской Федерации

Вестник МИТХТ

5/2013

октябрь

Научно-технический
журнал

Издается с февраля 2006 г.
Выходит один раз
в два месяца

Учредитель
МИТХТ им. М.В. Ломоносова

Главный редактор:
д.т.н., проф. А.К. Фролова
**Заместитель главного
редактора:**
д.х.н., проф. В.В. Фомичев

Редакционная коллегия:
д.х.н., проф. Д.В. Дробот
проф. К.А. Кардона
(Колумбия)
д.т.н., проф. В.Ф. Корнюшко
акад. РАН Н.Т. Кузнецов
акад. РАН А.И. Мирошников
д.х.н., проф.
Ю.П. Мирошников
чл.-корр. РАН А.Н. Озерин
проф. Т. Пакканен
(Финляндия)
д.т.н., проф.
Л.А. Серафимов
д.э.н., проф.
С.М. Сухорукова
д.х.н., проф. В.А. Тверской
проф. А. Трохимчук
(Польша)
акад. РАН А.Ю. Цивадзе
акад. РАМН В.И. Швеи
к.х.н., доц. В.Д. Юловская

**Ответственный
секретарь:**
к.х.н., доц. Есипова О.В.

Редакция:
Агаянц И.М.
Наумова Ю.А.
Семерня Л.Г.
Середина Г.Д.

Адрес редакции:
119571, г. Москва,
пр. Вернадского, 86, к. Л-119
тел.: +7(495) 936-82-88
e-mail: vestnik@mitht.ru
www.finechemtech.com

СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

- Анохина Е.А. Энергосбережение в процессах экстрактивной ректификации 3
- Алексеев Б.В., Овчинникова И.В. Гидродинамическое описание движения электронов в кристаллической решетке графена 20
- Данилов Ф.О., Скрябина А.Ю., Шамсиев Р.С., Замалютин В.В. Квантово-химическое моделирование адсорбции молекулы пропионовой кислоты на кластерах Cu_{15} и Pd_{15} 40
- Данилов Ф.О., Шамсиев Р.С. Квантово-химическое моделирование син-анти-изомеризации в метилзамещенных аллильных комплексах никеля(II) 44
- Дронова М.С., Биляченко А.Н., Кирилин А.Д., Шубина Е.С., Левицкий М.М. Квантово-химический анализ структурообразования каркасных органосилоксанов и металлоорганосилоксанов 49
- Мажорова Н.Г., Иванов П.В. Закономерности гетерофазного гидролиза метилфенилдиметоксисилана 55
- Раева В.М., Серафимов Л.А., Морозов К.А., Порошина Т.В. Разделение жидких бинарных смесей ректификацией с добавлением дополнительного компонента 62

ХИМИЯ И ТЕХНОЛОГИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ И БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

- Сорокоумова Г.М., Ясин Я.О.Х., Микулович Ю.Л., Смирнова Т.Г., Андреевская С.Н., Селищева А.А., Черноусова Л.Н., Швеи В.И. Создание и изучение свойств липосомальной формы левофлоксацина 72
- Stanishevskiy Ya.M., Gritskova I.A., Fedorova A.V., Novikov V.P. Technology for test-systems for diagnosis of modified proteins (proteinopathy), underlying social diseases (Report 2) 77

ХИМИЯ И ТЕХНОЛОГИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

- Аликберова Л.Ю., Альбов Д.В., Кибальников П.С., Федорова Г.А., Зайцева М.Г. Кристаллические комплексы бромидов эрбия и лютеция с ацетамидом 83
- Кабанская А.Н., Ломовской В.А., Горшков А.А., Фомкина З.И., Копылова Е.В. Спектр внутреннего трения в селене 89
- Сизов А.Л., Бурлаков И.Д., Яковлева Н.И., Кортаев Е.Д., Мирофянченко А.Е., Исследование германиевых подложек для гетероэпитаксии КРТ 94

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

- Брагина Е.С., Савин Е.С. Скорость концертной химической реакции при низких температурах 99
- Валишин А.А., Миронова Т.С. Упругое взаимодействие локальных дефектов при квазихрупком разрушении полимеров и композитов на их основе 105
- Джемесюк И.А., Пономарев Ф.В. Тепловая реакция бесконечной пластины с теплообменом на одной из границ 118
- Кротов Г.С., Ремизова О.И. Численное и аналитическое решения краевой задачи для уравнения параболического типа в нецилиндрической области 122
- Осипов Р.А., Рук Н.С., Скворцова М.И., Замалютин В.В., Скрябина А.Ю. Оценка способности к протонированию некоторых органических оснований по их структурным формулам 128
- Тарасенко Р.Ю., Бурляева Е.В. Функциональное моделирование производства метил-трет-бутилового эфира 136
- ПАМЯТИ Р.П. ЕВСТИГНЕЕВОЙ 141

Fine Chemical Technologies (Vestnik MITHT)

5/2013
October

Published from February 2006,
six times per year

Founder:
M.V. Lomonosov Moscow State
University of Fine Chemical
Technologies (MITHT)

Editor-in-Chief:
A.K. Frolkova

Deputy Editor-in-Chief:
V.V. Fomichev

Editorial Board:
D.V. Drobot
C.A. Cardona
(Columbia)
V.F. Korniyushko
N.T. Kuznetsov
A.I. Miroshnikov
Yu.P. Miroshnikov
A.N. Ozerin
T. Pakkanen
(Finland)
L.A. Serafimov
S.M. Sukhorukova
V.A. Tverskoy
A. Trochimczuk
(Poland)
A.Yu. Tsivadze
V.I. Shvets
V.D. Yulovskaya
Executive Editor:
O.V. Esipova

Editorial:
I.M. Agayants
Yu.A. Naumova
L.G. Semernya
G.D. Seredina

Address:
Russia, 119571, Moscow,
Vernadskogo pr., 86,
phone: +7(495) 936-82-88
e-mail: vestnik@mitht.ru
www.finechemtech.com

CONTENTS

THEORETICAL BASES OF CHEMICAL TECHNOLOGY

Anokhina E.A. Energy saving in extractive distillation	3
Alexeev B.V., Ovchinnikova I.V. About the charge transfer in the graphene lattice	20
Danilov F.O., Skryabina A.Yu., Shamsiev R.S. Theoretical study of the adsorption of propionic acid over Cu ₁₅ and Pd ₁₅ clusters	40
Danilov F.O., Shamsiev R.S. Quantum chemical modelling of <i>syn-anti</i> isomerization in methyl-substituted allyl-nickel(II) complexes	44
Dronova M.S., Bilyachenko A.N., Kirilin A.D., Shubina E.S., Levitsky M.M. <i>Ab initio</i> calculation of structure formation in cage-like siloxanes and metallosiloxanes	49
Mazhorova N.G., Ivanov P.V. Mechanism of the heterophase hydrolysis of methylphenyldimethoxysilane	55
Raeva V.M., Serafimov L.A., Morozov K.A., Poroshina T.V. Separation of liquid binary mixtures by rectification with addition of subsidiary component	62

CHEMISTRY AND TECHNOLOGY OF MEDICINAL COMPOUNDS AND BIOLOGICALLY ACTIVE SUBSTANCES

Sorokoumova G.M., Yasin Ya.O.H., Mikulovich Yu.L., Smirnova T.G., Andreevskaya S.N., Selishcheva A.A., Chernousova L.N., Shvets V.I. Production and investigation of properties of liposomal levofloxacin	72
Stanishevskiy Ya.M., Gritskova I.A., Fedorova A.V., Novikov V.P. Technology for test-systems for diagnosis of modified proteins (proteinopathy), underlying social diseases (Report 2)	77

CHEMISTRY AND TECHNOLOGY OF INORGANIC MATERIALS

Alikberova L.Yu., Albov D.V., Kibalnikov P.S., Fedorova G.A., Zaitseva M.G. Crystalline complexes of erbium bromide and lutetium bromide with acetamide	83
Kabanskaya A.N., Lomovskoy V.A., Gorshkov A.A., Fomkina Z.I., Kopylova E.V. Spectrum of internal friction in selenium	89
Sizov A.L., Burlakov I.D., Yakovleva N.I., Korotaev E.D., Mirofyanchenko A.E., Investigation of Ge substrates for MCT grown by molecular-beam epitaxy	94

INFORMATION TECHNOLOGIES AND APPLIED MATHEMATICS

Bragina E.S., Savin E.S. Rate of concert chemical reaction at low temperatures	99
Valishin A.A., Mironova T.S. The elastic interaction of local defects at quasibrittle fracture of polymers and composites based on them	105
Dzhemesyuk I.A., Ponomaryov I.A. Thermal reaction of an infinite plate with heat exchange on one of the boundaries	118
Krotov G.S., Remizova O.I. Numerical and analytical solutions of boundary value problem for parabolic equations in non-cylindrical area	122
Osipov R.A., Rukk N.S., Skvortsova M.I., Zamalyutin V.V., Skryabina A.Yu. Estimation of protonation ability of some organic bases by their structural formulae	128
Tarasenko R.Yu., Burlyaeva E.V. Functional simulation of production of methyl tertiary butyl ether	136

IN REMEMBRANCE OF RIMA EVSTIGNEEVA

141

Журнал выходит один раз в два месяца и публикует обзоры и статьи по актуальным проблемам химической технологии и смежных наук. Журнал основан в 2006 году. Учредителем журнала является Московская государственная академия тонкой химической технологии имени М.В. Ломоносова (МИТХТ), ныне Московский государственный университет тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова.

Журнал входит в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертации на соискание ученой степени доктора (кандидата) наук.

● К публикации принимаются материалы на русском и английском языке, содержащие результаты оригинальных исследований, в виде полных статей, кратких сообщений, а также авторские обзоры и прогнозно-аналитические статьи по актуальным вопросам химической науки, в том числе по следующим разделам:

- Теоретические основы химической технологии
- Химия и технология органических веществ
- Химия и технология лекарственных препаратов и биологически активных соединений
- Синтез и переработка полимеров и композитов на их основе
- Химия и технология неорганических материалов
- Математические методы и информационные технологии в химии и химической технологии
- Эколого-экономические проблемы химических технологий.

● Правила для авторов размещены на сайтах: www.mitht.ru/vestnik; www.finechemtech.com, а также в выпуске № 1 за 2013 г.

● Электронные версии статей выходят с февраля 2006 г.

● Хорошо подготовленные статьи выходят в свет не более чем через 4 месяца после поступления в редакцию.

● Плата за публикации не взимается.

Журнал в розничную продажу не поступает. Он распространяется на территории Российской Федерации и стран СНГ по каталогу агентства «Роспечать», индекс **36924**. Подписка на журнал принимается в любом почтовом отделении.

Подписано в печать 25.10.2013 г.
Уч.-изд. листов 17,5

Формат 60×84/8
Тираж 500 экз.

Печать цифровая
Заказ 111

Отпечатано с оригинал-макета в типографии ООО «Генезис».
119571, Москва, пр. Вернадского, 86. Тел.: +7(495)434-83-55. www.copycentr.ru