

1. Жмойдин Г.И., Чаттерджи А.К. Шлаки для рафинирования металла. Динамика свойств системы $\text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{CaF}_2$. М.: Metallurgia, 1986. 298с.

2. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: справочное издание в 4 – х т. / Под ред. В.П. Глушко. 3 изд. Т. III. кн. 1 М.: Наука, 1981. 472.

3. Тюрин А.Г. К термодинамике молекулярных и ионных растворов // Металлы. 1993. №2. с. 48 – 56.

СИНТЕЗ, АТТЕСТАЦИЯ И СВОЙСТВА СВИНЕЦСОДЕРЖАЩИХ НИОБАТОВ И ТАНТАЛАТОВ

Пронина М.В., Бикметова М.А., Штин С.А., Подкорытов А.Л.

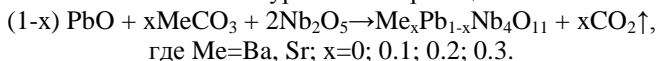
Уральский государственный университет
620000, г. Екатеринбург, пр. Ленина, д.51

По степени воздействия на живые организмы свинец отнесен к классу высокоопасных веществ. Опасность свинца для человека определяется его значительной токсичностью и способностью накапливаться в организме. Свинцовые отравления весьма различны в проявлениях и включают психическое возбуждение, тревогу, ночные кошмары, галлюцинации, нарушения памяти и интеллекта с симптоматикой распада личности.

Исходя из опасности действия свинца на организм человека, необходимы экспрессные и надежные методы контроля содержания свинца в окружающей среде, одним из которых является ионометрия.

Целью настоящей работы является синтез сложных ниобатов свинца состава: $\text{Pb}_{1-x}\text{Me}_x\text{Nb}_4\text{O}_{11}$ ($\text{Me}=\text{Sr}, \text{Ba}; x=0; 0.1; 0.2; 0.3$), конструирование и электрохимическая аттестация свинецселективных электродов на их основе.

По стандартной керамической технологии синтезированы объекты исследования в соответствии с уравнением реакции:



Синтез осуществили при ступенчатом повышении температуры и многократных перетираниях. Для лучшей гомогенизации смеси в качестве дисперсионной среды использовали изопропиловый спирт.

Для идентификации фаз и определения однофазности использовали РФА (ДРОН-2.0, Cu K_α – излучение). Однофазными синтезированы образцы $\text{PbNb}_4\text{O}_{11}$, $\text{Pb}_{0.9}\text{Ba}_{0.1}\text{Nb}_4\text{O}_{11}$, $\text{Pb}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{Nb}_4\text{O}_{11}$. Для данных составов проведен гранулометрический анализ порошков (Shimadzu SALD-7101).

На основе полученных твердых растворов были изготовлены плочные электроды с твердым контактом. В качестве инертной матрицы использовали полистирол. Исследованы основные характеристики электродов: крутизна и область линейности основной электродной функции, время отклика, рабочая область рН. Полученные данные представлены в таблице.

Электродно-активное вещество	Область линейности, моль/л	Крутизна электродной функции, мВ/рС _{Pb} ²⁺	Время отклика, мин.	Рабочая область рН
PbNb ₄ O ₁₁	10 ⁻⁴ - 10 ⁻¹	-(20,8±2,2)	10-15	5,0-3,5
Pb _{0,9} Va _{0,1} Nb ₄ O ₁₁	10 ⁻⁵ - 10 ⁻¹	-(22,6±1,8)	5-10	5,0-4,0
Pb _{0,9} Sr _{0,1} Nb ₄ O ₁₁	10 ⁻⁶ - 10 ⁻¹	-(21,1±2,4)	10-15	5,0-3,9

В работе для целей ионометрии синтезированы пять танталатов свинца с соотношением PbO:Ta₂O₅ = 1:1, 2:1, 3:1, 4:1, 5:1.

Исследована их устойчивость в кислых средах, проведены пробные испытания ИСЭ на основе однофазных танталатов.

НИР выполнена при поддержке Министерства образования и науки в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы (ГК №П984 от 27 мая 2010).

ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА БИМОЛЕКУЛЯРНОЙ ГИБЕЛИ H₂COO

Птицына А.А., Талипов М.Р., Хурсан С.Л., Сафиуллин Р.Л.

Институт органической химии УНЦ РАН
450054, г. Уфа, проспект Октября, д. 71

В ходе данного исследования методами квантовой химии в приближении MCQDPT2//CASSCF в различных активных пространствах и с использованием базисных наборов 6-31G(d), 6-311G(d,p) и 6-311+G(d,p) был изучен бимолекулярный механизм гибели карбонилосидов. Показано, что реализация синхронного (3+3)-циклоприсоединения невозможна ввиду различной симметрии НВМО и ВЗМО орбиталей (рис.1), в соответствии с правилом Вудворда-Хоффмана об орбитальной симметрии.