

samples, source of information. The authors provide reasonable requirements to the objects of expert research, their quality and quantity, to the issues to be resolved in the production of DNA examination. Special attention is given to issues of concern to establish individualizing signs victims of terrorist attacks and mass disasters that would allow this identification at the level of their chromosomal DNA, since the discovery of these objects in situations of massive loss of life is almost impossible. As the only possible option provides a method - indirect identification, which uses samples obtained from relatives of the victims. And finally analyzed the requirements for registration of a list of facilities provided by the expert.

Химические науки

О ВЗАИМОСВЯЗИ ХИМИИ И ФИЗИКИ: ПРИНЦИП ДОПОЛНИТЕЛЬНОСТИ

Ананьева Е.А., Наговицына О.А., Сергиевский В.В.

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия
(115409, г. Москва, Каширское ш., 31.), e-mail: EAAnyeva@mephi.ru

Проведен анализ методики химических исследований и особенностей логики языка химии. Свойства любого вещества в химии определяют по результатам взаимодействий с другими веществами. Использование логики отношений приводит к тому, что в общем случае целостное описание химических свойств вещества достигается наборами различных терминов, включая антонимы. В зависимости от природы реагентов, относительно которых устанавливаются химические свойства, вещества могут быть и кислотами, и основаниями; и окислителями, и восстановителями, то есть проявляют химическую двойственность. Эта двойственность установлена в химии задолго до открытия дуализма «волна-частица», для понимания которого Н. Бор предложил принцип дополнительности. Химия имеет все атрибуты фундаментальной науки: методологию, язык, обширные области практического применения. Свойства вещества исследуются методами и химии, и физики, и других естественных наук, что соответствует принципу дополнительности.

THE RELATIONSHIP BETWEEN CHEMISTRY AND PHYSICS: COMPLEMENTARITY PRINCIPLE

Ananyeva E.A., Nagovitsyna O.A., Sergievskii V.V.

National Research Nuclear University “MEPhI” Moscow, Russia (115409, Moscow, Kashirskoye shosse 31),
e-mail: EAAnyeva@mephi.ru

The analysis of the research technique and chemistry language peculiarities was carried out. Properties of any material in chemistry are defined by results of interaction with other substances. In general, usage of logic of relations results in the following aspect: complete description of the chemical properties of the substance achieved sets of various terms, including antonyms. The same substances can be both acids and bases, and oxidizing and reducing agents, namely exhibit chemical duality. It depends on the nature of the reagents, which are established with respect chemical properties. This duality is set in chemistry before the opening of dualism «wave-particle», for understanding that Bohr proposed the complementarity principle. Chemistry has all distinctive aspects of the fundamental science: methodology, language and vast application field. Chemical substance's properties are investigated by the help of chemical and physics as well as other natural sciences research techniques according to the complementarity principle.

ПРОДУКТ ХИМИЧЕСКОЙ ДЕСТРУКЦИИ ПОЛИЭТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТА КАК КОМПЛЕКСНЫЙ РЕАГЕНТ ДЛЯ ИЗВЛЕЧЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКОЙ МАССЫ УГЛЯ

Бодьян Л.А., Варламова И.А., Гиревая Х.Я., Калугина Н.Л., Медяник Н.Л.

ФГБОУ ВПО «Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова», Магнитогорск,
Россия (455000, г. Магнитогорск, пр. Ленина, 38), e-mail: chem@magtu.ru

Получен продукт химической деструкции полиэтилентерефталата. Расчет квантово-химических параметров соединений, входящих в состав продукта деструкции (этиленгликольтерефталат, диэтиленгликольтерефталат, терефталевая кислота, этиленгликоль), показал наличие активных электронодонорных (нуклеофильных) центров на атомах кислорода карбоксильной, сложноэфирной и гидроксильной групп. Расчет квантово-химических параметров функциональных групп, моделирующих структуру органической массы угля (ОМУ), позволил установить наличие электроноакцепторных (электрофильных) центров адсорбции, которыми являются углеродные фрагменты угольной поверхности с сосредоточенным на них максимальным положительным зарядом. Установлено, что взаимодействие ОМУ – реагент протекает по зарядо-контролируемому механизму, активные центры адсорбции ОМУ для взаимодействия с реагентом предоставляют нижние свободные молекулярные орбитали (НСМО), компоненты продукта деструкции полиэтилентерефталата – верхние занятые молекулярные орбитали (ВЗМО). Доказана возможность использования продукта деструкции полиэтилентерефталата в качестве комплексного реагента, сочетающего свойства собирателя и пенообразователя, для извлечения органической массы угля. При использовании комплексного реагента получены более высокие показатели флотации по сравнению с традиционно применяемыми реагентами термозойлем и КОБС. При уменьшении расхода реагента в 3,5 раза выход концентрата увеличился на 4,5% при практически одинаковой зольности.

THE PRODUCT OF POLYETHYLENE TEREPHTHALATE CHEMICAL DESTRUCTION AS THE COMPLEX REAGENT FOR COAL ORGANIC MASS EXTRACTION

Bodyan L.A., Varlamova I.A., Girevaya N.Y., Kalugina N.L., Medyanik N.L.

Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia (455000, Magnitogorsk, Lenina, 38),
e-mail: chem@magtu.ru

The product of polyethylene terephthalate chemical destruction was obtained. Quantum-chemical parameters of compounds-components of the destruction product (ethyleneglycolterephthalate, diethyleneglycolterephthalate, terephthalic acid, ethyleneglycol) were calculated, and these results were a foundation to evidence presence of active electron donor (nucleophilic) centers on oxygen atoms of carboxyl, ester and hydroxyl groups. Quantum-chemical parameters of functional groups which modeled a structure of the coal organic mass (COM) were calculated, and they were a basis to establish presence of electron acceptor (electrophilic) adsorption centers with maximum positive charge on coal surface carbon fragments. COM - reagent interaction runs using the charge-controlled mechanism was established: COM's active adsorption centers give lower unoccupied molecular orbitals (LUMO), components of the polyethylene terephthalate destruction product give highest occupied molecular orbitals (HOMO). The ability to use the polyethylene terephthalate destruction product as a complex reagent which combines collector and foamer properties to extract coal organic mass was proved. Use of the complex reagent leads to better parameters of flotation in comparison with traditional flotation reagents as thermogasoil and waste still bottoms of butyl alcohols was obtained. When reagent consumption was reduced 3.5 times concentrate output increased by 4.5% with nearly the same ash.

ИЗОТОПНЫЙ ОБМЕН В МОЛЕКУЛАХ СО НА ЦЕМЕНТНОМ MNALCA-КАТАЛИЗАТОРЕ

Бреева Н.В.^{1,2}

1 ФГБОУ ВПО «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»
(125047, г. Москва, Миусская пл., 9), e-mail: n_breeva@mail.ru
2 ООО «Химвэй Палладиум» (302027, г. Орел, Октябрьская, 27)

Методом изотопного обмена исследовано взаимодействие СО с промышленным катализатором MnAlCa в интервале температур -196 ± 500 °С. При температурах выше 300 °С наблюдался гетерообмен $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ с поверхностным кислородом катализатора. $^{12}\text{C}^{18}\text{O} + [^{16}\text{O}]_{\text{пов}} \leftrightarrow ^{12}\text{C}^{16}\text{O} + [^{18}\text{O}]_{\text{пов}}$. Скорость гетерообмена в 1060 раз больше скорости гомомолекулярного обмена $\text{CO} (^{12}\text{C}^{18}\text{O} + ^{13}\text{C}^{16}\text{O} \leftrightarrow ^{12}\text{C}^{16}\text{O} + ^{13}\text{C}^{18}\text{O})$ при этой же температуре. Наряду с гетерообменом наблюдалось образование CO_2 в газовой фазе. На основании данных кинетики изотопного обмена и адсорбционных измерений высказано предположение, что в интервале температур -196 ± 25 °С обмен протекает через промежуточные комплексы адсорбированных молекул СО, слабо связанных с поверхностью. При высоких температурах равновесие между различными формами адсорбированного СО сдвинуто в сторону адсорбции с большей энергией связи и обмен между молекулами СО идет через соединения, включающие поверхностный кислород катализатора.

CO ISOTOPIC EXCHANGE REACTION OVER MNALCA CATALYST

Breeva N.V.^{1,2}

1 D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia (125047, Moscow, Миусская а square, 9),
e-mail: n_breeva@mail.ru
2 Chemway Palladium Co.ltd (302027, Orel, Oktybrskaya street, 27)

In this paper we report our results regarding the isotopic exchange reaction: $^{12}\text{C}^{18}\text{O} + ^{13}\text{C}^{16}\text{O} \leftrightarrow ^{12}\text{C}^{16}\text{O} + ^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ over MnAlCa catalyst between -196 and $+5000$ °C. In the -196 ± 250 °C temperature range, no CO disproportionation/dissociation reactions are observed. For the MnAlCa catalyst, an activation energy of 14,6 kJ mol⁻¹ was estimated for the isotopic mixing reaction within the range -196 ± 250 °C. It is proposed that the CO isotopic exchange proceeds via no dissociative mechanism in the same range. At higher temperature, reactions of CO disproportionation are observed. An exchange of the ^{16}O from the MnAlCa support with the gas-phase ^{18}O -containing isotopes of CO takes place. Three types of CO adsorbed species on MnAlCa were proposed. Mass spectrometric, chemisorptions measurements have been employed.

ВЛИЯНИЕ ДОБАВКИ АЛЮМИНИЯ НА СОСТАВ И МОРФОЛОГИЮ ПЛЕНОК ГИДРОКСИДА ЦИНКА, ОСАЖДЕННЫХ ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

Ваганова Ю.В., Миролюбов В.Р., Катышев С.Ф., Ищенко А.В., Ключкина Е.О.

ФГАОУ ВПО «Уральский Федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»,
Екатеринбург, Россия (620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19), e-mail: mery118@mail.ru

Пленки гидроксида цинка с добавкой алюминия были получены методом химического осаждения из водных растворов. Определены условия совместного осаждения гидроксидов цинка и алюминия с использованием методики расчета условий ионного равновесия в растворе. Методами рентгенофазового анализа и сканирующей электронной микроскопии исследованы фазовый состав и морфология полученных продуктов. В сильно щелочной области