

лучше всего совмещается с каучуком СКИ-3, ДБФ – с каучуком СКН-18 АСМ, а ТХЭФ – с каучуком СКН-40 АСМ. При выборе смесевых пластификаторов предварительно оценивали совместимость смесевых пластификаторов с исследуемыми каучуками. Изучали влияние соотношения выбранных для исследования смесевых пластификаторов на характеристики смесей и вулканизатов.

На основании проведенных исследований, для улучшения характеристик резиновых смесей и вулканизатов на основе каучука СКН-26 АСМ можно рекомендовать смесевой пластификатор ТХЭФ – 30% ДБФ – 70%, для улучшения характеристик резиновых смесей и вулканизатов на основе каучука СКМС-30 АРК можно рекомендовать смесевой пластификатор ДБФ – 20% и ПН-6 – 80%.

УДК 547.794.3

Ю. В. Бутина, асп.;

Е. А. Данилова, д-р хим. наук, проф.;

А. С. Маясова, канд. хим. наук, ст. науч. сотр.

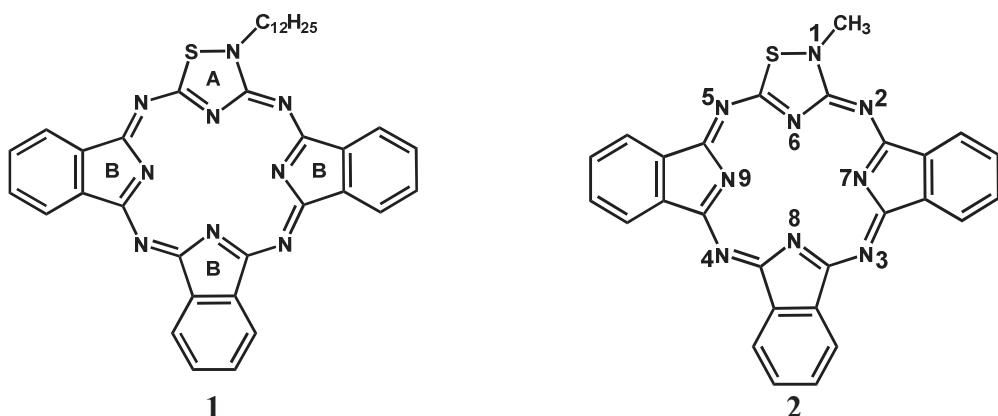
(ФГБОУ ВО «ИГХТУ», г. Иваново)

**ИЗУЧЕНИЕ КИСЛОТНО-ОСНОВНЫХ СВОЙСТВ
МАКРОГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ
АВВ-ТИПА НА ОСНОВЕ 5-АМИНО-2-ДОДЕЦИЛ-3-ИМИНО-
1,2,4-ТИАДИАЗОЛИНА**

В последнее время внимание ученых обращено к синтезу так называемых «молекулярных хамелеонов» – соединений, обладающих уникальной возможностью постсинтетической модификации оптических свойств молекулы. Такая способность подобных соединений может быть широко использована в различных областях, например, в медицине для лечения онкологических заболеваний [1].

Макрогетероциклическое соединение АВВ-типа (**1**), в котором А – фрагмент 5-амино-2-додецил-3-имино-1,2,4-тиадиазолина, В – изоиндольное ядро, синтезировано в соответствии с методикой [2].

В электронном спектре раствора продукта **1** в дихлорметане наблюдается максимум поглощения в области 459 нм. Нами было замечено, что при растворении **1** в моногидрате происходит значительное батохромное смещение максимума поглощения до 611 нм, что свидетельствует о протонировании молекулы **1**. Изучение кислотно-основных взаимодействий **1** в среде $\text{CH}_2\text{Cl}_2-\text{CF}_3\text{COOH}$ (рис. а), позволило установить, что происходит взаимодействие **1** с одной молекулой кислоты.



Спектрофотометрическое титрование в среде $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}-\text{H}_2\text{SO}_4$ (рис. б) показало существование непротонированной ($\lambda=478$ нм) и двух протонированных форм ($\lambda = 550$ нм, $\lambda = 716$ нм). При этом было замечено, что при добавлении к раствору 1 в кислоте некоторого количества основания происходит обратный процесс: переход протонированной формы в непротонированную. Таким образом, соединение 1 можно отнести к «молекулярным хамелеонам».

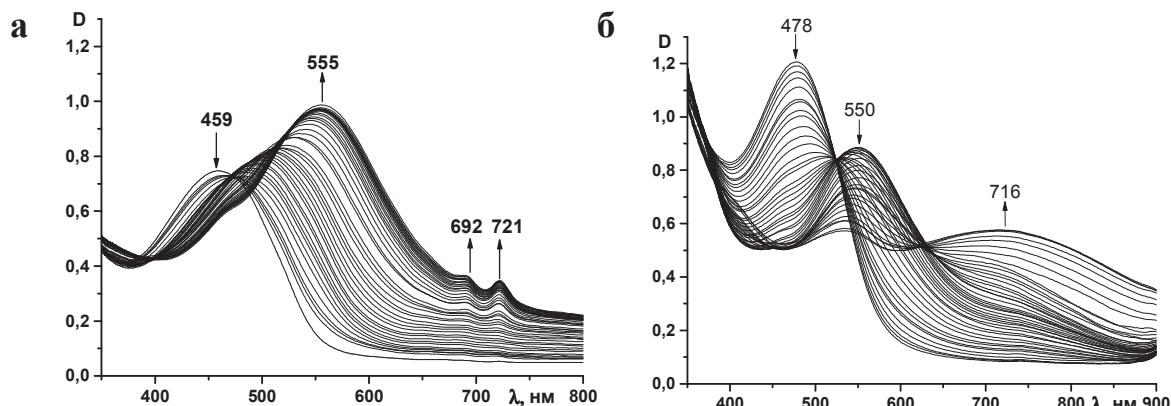


Рисунок - Изменение ЭСП соединения 1 в среде:
а) $\text{CH}_2\text{Cl}_2-\text{CF}_3\text{COOH}$; б) $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}-\text{H}_2\text{SO}_4$

Для определения наиболее вероятного места присоединения протона нами выполнены квантово-химические расчеты модельного соединения 2 методом DFT с использованием гибридного функционала B3LYP и базисного набора 6-31G(d,p). Расчеты, выполненные с полной оптимизацией геометрических параметров, показали, что наиболее предпочтительным центром для протонирования на первой стадии является внутрициклический атом азота изоиндольного ядра, расположенного напротив 2N-замещенного 1,2,4-тиадиазольного фрагмента (положение 8).

ЛИТЕРАТУРА

1. Safonova, E. A. A molecular chameleon: reversible pH- and cation-induced control of the optical properties of phthalocyanine-based complexes in the visible and near-infrared spectral ranges / E. A. Safonova, A. G. Martynov, S. E. Nefedov, G. A. Kirakosyan, Y. G. Gorbunova, A. Yu. Tsivadze. // Inorg. Chem. – 2016. – V. 55. – P. 2450–2459.
2. Butina, Yu. V. Synthesis and properties of macroheterocyclic compound of ABBB-type with fragment of 5-amino-2-dodecyl-3-imino-1,2,4-thiadiazoline / Yu. V. Butina, T. V. Kudayarova, E. A. Danilova, N. N. Semenishin // Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol. – 2016. – Vol. 59, N 10. – P. 37–40.

УДК 678.8-022.532

И. А. Мансурова, доц., канд. техн. наук;
А.А. Бурков доц., канд. техн. наук;
И.Б. Шилов, доц., канд. хим. наук;
Э.О. Долгий, студ.; А.А. Савин, студ.
(ВятГУ, г. Киров)

РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В ВУЛКАНИЗАТАХ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ МАЛОСЛОЙНЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

Как известно, релаксационные свойства полимеров определяются подвижностью макромолекул, их сегментов и боковых групп. В свою очередь релаксационные свойства наполненных полимеров существенно зависят от характера взаимодействия макромолекул с поверхностью наполнителя, т.к. в результате адсорбции изменяется набор возможных конформационных превращений у макромолекул граничного слоя, их физические, химические и механические свойства. При использовании наноразмерных наполнителей свойства материала в значительной степени определяются существованием граничных слоев и их вкладом в релаксационные свойства материала в целом.

В настоящей работе исследуется молекулярная подвижность каучука методами DMA (DMA 242C ф. «Netzsch») и ДСК (DSC анализатор ф. «Shimadzu») в вулканизатах, модифицированных малослойными углеродными нанотрубками (УНТ) серии «Tuball». Вулканизаты изготовлены на основе смеси каучуков СКД и СКИ-3, наполнены ТУ N330. Образцы модифицированных вулканизатов отличаются содержанием УНТ и условиями их функционализации техническим углеродом.

По данным DMA установлено, что включение в структуру вулканизатов гибридных частиц мастербатчей УНТ/ТУ (где содержание