



Рис. 3. ККС по фракциям:
а – 3-4 мм; б – 2-3 мм; в – 1-2 мм; г – 0.5-1 мм; д – до 0.5 мм

При проектировании установок, работающих в непрерывном режиме, необходимо производить классификацию частиц, отделяя и досушивая только те влажные гранулы, которые уже достигли требуемого размера.

Список литературы

1. Саранов И.А., Магомедов Г.О., Шахов С.В. Разработка установки для агломерирования пищевых порошкообразных полуфабрикатов комбинированным способом //

Сборник докладов конференции «Инновационные технологии на базе фундаментальных научных разработок – прорыв в будущее» – г. Воронеж, 25-26 ноября 2014 / Сборник докладов. – Воронеж: Воронежский ЦНТИ – филиал ФБГУ «РЭА» Минэнерго РФ, 2014. – С. 186-190.

2. Дерней Й. Производство быстрорастворимых продуктов: Пер. с венг. – М.: Легкая и пищевая пром-сть, 1983. – 184 с.

3. Магомедов Г.О. и др. Структурообразование кондитерских дисперсных систем на основе пищевых порошков Монография / Г.О. Магомедов, Г.П. Мальцев, А.Я. Олейникова, В.Н. Колодежнов. – Воронеж: ВГТА, 2001. – 204 с.

Химические науки

**СПЕКТР КОМБИНАЦИОННОГО
РАССЕЯНИЯ СВЕТА
4-[(4-ДОЦЕЦИЛОКСИ)БЕНЗОИЛОКСИ]
БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ.
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

¹Брусилковский Ю.Э., ¹Новикова Н.С.,
¹Килименчук Е.Д., ²Михайлов Г.П.,
^{2,3}Кузнецов В.В.

¹Физико-химический институт им. А.В. Богатского
НАН Украины, Одесса;

²Уфимский государственный авиационный
технический университет, Уфа;

³Уфимский государственный нефтяной технический
университет, Уфа, e-mail: kuzmaggy@mail.ru

Замещенные бензоилоксикарбоновые кислоты обладают мезоморфными свойствами; на их основе возможно создание ценных в практическом отношении люминесцентных комплексов с редкоземельными элементами [1-4]. Целью настоящей работы является компьютерное моделирование спектра комбинационного рассеяния света 4-[(4-додецилокси)бензоилокси]бензойной кислоты (I) с помощью неэмпирического квантовохимического приближения HF/6-31+G(d) (пакет GAUSSIAN 03 [5]).

При определении расчетных колебательных мод использовалась процедура масштабирования с коэффициентом 0.8953, соответствующим уровню теории HF/6-31+G(d) [6].

Проведен анализ распределения потенциальной энергии (РПЭ) по естественным коле-

бательным координатам (валентным связям и углам, двугранным углам и координатам, соответствующих выходу связей из плоскости молекулы). Анализ формы нормальных колебаний позволяет установить степень участия каждой колебательной координаты в данной полосе КР, а исследование РПЭ по колебательной координате показывает, в каком структурном элементе локализована потенциальная энергия данного колебания. В таблице представлены рассчитанные и экспериментальные частоты, интенсивности полос КР и РПЭ (в скобках указан процентный вклад координаты в полную потенциальную энергию колебания). Анализ РПЭ показывает, что большинство колебаний являются смешанными. При этом в области 10-800 см⁻¹ вклад в колебания от различных колебательных координат меньше 5%, т.е. они не являются характеристическими и поэтому в таблице не представлены. Рассмотренные колебательные частоты являются отличительной спектральной характеристикой 4-бензоилоксикарбоновых кислот и могут быть использованы для идентификации и подтверждения структуры соединений этого класса. Так, спектр КР 4-[(4-гептилокси)бензоилокси]бензойной кислоты, исследованный ранее [7], содержит близкий набор колебательных частот; в частности, экспериментальное значение νC-C^{аром.} составляет 1631 см⁻¹ в сравнении с 1635 см⁻¹ для соединения I, а колебания νC=O + δC аром. – 1735 см⁻¹ (1740 см⁻¹ для соединения I).

Основные колебательные частоты соединения I

Отнесение (вклад в РПЭ, %)	ν , см ⁻¹ (расчет)	ν , см ⁻¹ (эксп.)
$\nu C_{16}H_{19}$ (19) + $\nu C_{17}H_{20}$ (53)	3058	3108
νC_3H_2 (38) + νC_4H_3 (11) + νO_2H_4 (26)	3056	3085
$\nu C_{19}H_{21}$ (49) + $\nu C_{20}H_{22}$ (19)	3055	3073
$\nu C_{22}H_{24}$ (6) + $\nu C_{22}H_{25}$ (6) + $\nu C_{23}H_{26}$ (9) + $\nu C_{23}H_{26}$ (9) + $\nu C_{24}H_{28}$ (7) + $\nu C_{24}H_{29}$ (7)	2850	2900
$\nu C_{10}H_9$ (5) + $\nu C_{10}H_{10}$ (5) + $\nu C_{12}H_{13}$ (7) + $\nu C_{13}H_{14}$ (7) + $\nu C_{22}H_{24}$ (5) + $\nu C_{23}H_{25}$ (5) + $\nu C_{13}H_{15}$ (5) + $\nu C_{13}H_{16}$ (5) + $\nu C_{14}H_{17}$ (5) + $\nu C_{14}H_{18}$ (5)	2847	2886
$\nu C_{21}O_4$ (20) + $\nu C_{18}C_{21}$ (9) + $\delta C_{21}O_5H_{23}$ (10)	1775	1740
νC_7O_2 (18) + νC_5C_7 (8) + νC_7O_3 (5) + $\delta C_5C_7O_3$ (8)	1733	1771
$\nu C_{16}C_{17}$ (5) + $\nu C_{19}C_{20}$ (5) + $\delta C_{18}C_{19}H_{21}$ (5)	1616	1635
$\delta C_{21}O_5H_{22}$ (12)	1198	1205
$\delta C_3C_6H_4$ (7) + $\delta C_5C_6H_4$ (7)	1157	1163
$\tau O_3C_{15}C_{16}H_{19}$ (7) + $\tau O_3C_{15}C_{20}H_{22}$ (7)	904	895

Примечание. ν – валентное колебание, δ – деформационное, τ – торсионное.

Экспериментальный спектр КР соединения (I) в таблетке был зарегистрирован на спектрометре ДФС-24 с использованием линии 488 нм аргонового лазера ЛГН-503 мощностью 200 мВт на образце. Погрешность в определении положения полос КР не превышала ± 2 см⁻¹.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках базовой части госзадания образовательным организациям высшего образования.

Список литературы

1. Деркач Л.Г., Теслюк О.И., Новикова Н.С., Дога П.Г., Яркова М.Ю., Мешкова С.Б. // ЖОХ. – 2014. – Т.84, вып. 7. – С.1095.
2. Binnemans K., Görlle-Walrand Ch. // Chem. Rev. 2002. V.102. P.2303.
3. Новикова Н.С., Кирименчук Е.Д., Кондратьева Р.В., Мешкова С.Б., Топилова З.М. // ЖПХ. 2011. Т.84, вып.6. – С.954.
4. Новикова Н.С., Кирименчук Е.Д., Яркова М.Ю., Мешкова С.Б., Топилова З.М. // ЖПХ. – 2008. Т.81, вып.8. – С.1528.
5. Gaussian 03, Revision B 03. Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2003.
6. Scott P.A., Radom L. // J. Phys. Chem., 1996. V.100. N 41. P.16502.
7. Брусиловский Ю.Э., Новикова Н.С., Кирименчук Е.Д., Михайлов Г.П., Кузнецов В.В. // Международный журнал экспериментального образования. – 2015. – № 2, часть 1. – С. 42.

СОСТАВ КОСМЕТИЧЕСКИХ ПУДР. ИЗУЧЕНИЕ СТЕПЕНИ БЕЗВРЕДНОСТИ ОТДЕЛЬНЫХ ИНГРЕДИЕНТОВ ПУДР

Орлин Н.А., Рылова Е.В.

*Владимирский государственный университет
им. А.Г. и Н.Г. Столетовых, Владимир,
e-mail: ornik@mail.ru*

Пудра (от фр. «poudre» – пыль) – мелкий порошок, обычно используемый для декоративной косметики. Косметическая пудра представляет собой ароматизированную тонкодисперсную однородную смесь минеральных и органических веществ, предназначенную для улучшения

цвета лица, для защиты кожи от вредных воздействий среды и впитывания выделений кожи.

Косметическая пудра задает тон всему макияжу. Одна и та же пудра не подходит для разных типов кожи. В связи с этим перед выбором пудры желательно знать свой тип кожи. По целевому назначению существует 13 классов пудр. Среди них: пудра с тональной основой; компактная, глиттер пудра; халайтер, шиммер, аква пудри; антисептическая, матирующая, прозрачная пудри; пудра в форме шариков; запеченная, рассыпчатая и крем пудри. У каждого класса пудр свое предназначение. Покупая пудру нужно знать не только свой тип кожи, а и целевое назначение соответствующего класса пудр.

Любой класс косметической пудры в своем составе содержит до двух десятков химических соединений, среди которых имеются соединения, благоприятно влияющие на кожу, и есть большая часть ингредиентов, враждебных для нежной кожи лица.

Раньше в состав пудр входили натуральные компоненты: крахмал, рисовая мука, мука пшеницы и неорганические соединения (в частности свинца). Сейчас любая пудра имеет минеральную основу, как правило, не однозначно воспринимающую кожей лица. Если учесть, что пудра находится на лице в течение дня и практически всегда подвергается воздействию солнечного света, то не трудно сделать вывод о химических взаимодействиях между компонентами пудры и затем и кожным покровом лица.

Основными компонентами большинства косметических пудр являются: тальк, слюда, миристат магния, карбонат магния, эмульгенты (жиры и жироподобные вещества), многоатомные спирты (глицерин, пропиленгликоль), парабены, ароматизаторы. Многие из этих ингредиентов способны вызывать аллергические реакции.

В данной работе исследованию подвергались три образца косметических пудр.

Faberlic «Eye to eye» («Глаза в глаза»), Россия.