Химические науки

ПРОГНОЗ ПЕСТИЦИДНОЙ АКТИВНОСТИ ПРОДУКТОВ ГИДРОСИЛАНОЛИЗА 2-ФУРИЛЗАМЕЩЕННЫХ 1,3-ДИОКСАЦИКЛОАЛКАНОВ

[1]Хлебникова Т.Д., [2]Хамидуллина И.В., [1]Микрюкова А.А., [1]Закирова И.У., [1]Патраева Е.В.

Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, e-mail: khlebnikovat@mail.ru; Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа, e-mail: inkaelf@mail.ru

С использованием ранее сформированных авторами моделей «структура-фунгицидная активность» и «структура-рострегулирующая активность» осуществлен прогноз пестицидной активности синтезированных ациклических производных 2-(фурил-2)-1,3-диоксациклоалканов – α-триэтилсилокси-ω-фурфурилоксиалканов (**1-7**) – продуктов взаимодействия 2-фурил-1,3-диоксациклоалканов с триэтилсиланом:

$FuCH_2OCR^1R^2(CR^3R^4)_nCHR^5OSi(C_2H_5)_3$ (**1-7**)
$n = 0$ (**2**); $n = 1$ (**1, 3–7**), $R^1 = H$ (**1, 2, 4–7**),
$R^1 = CH_3$ (**3**); $R^2 = H$ (**1, 2, 5–7**), CH_3 (**3, 4**);
$R^3 = H$ (**3–6**), CH_3 (**7**), C_2H_5 (**1**); $R^4 = H$ (**3–6**),
CH_3 (**7**), CH_2OH (**1**); $R^5 = H$ (**1–5, 7**), CH_3 (**6**);
Fu = фурил

Прогноз проведен по двум алгоритмам теории распознавания образов «геометрическому подходу» и «голосованию» (таблица). При этом с целью ранжирования структур по активности рассчитывается расстояние до гипотетических эталонов в классе «А» (активные) и в классе «В» (неактивные).

Результаты прогноза показывают, что к потенциальным регуляторам роста растений могут быть отнесены соединения (**3, 4**), а к потенциальным фунгицидам – только соединение (**6**).

ОЧИСТКА СТОЧНЫХ ВОД НЕФТЕХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ С ПРИМЕНЕНИЕМ КОАГУЛЯЦИОННО-ФЛОКУЛЯЦИОННОГО МЕТОДА

Шачнева Е.Ю., Зугумов М.З., Тимошенко В.М.

ФГБОУ ВО «Астраханский государственный университет», Астрахань, e-mail: evgshachneva@yandex.ru

Рассмотрены основные положения коагуляционно-флокуляционного метода очистки сточных вод промышленных предприятий. Приведена его краткая характеристика, отмечены преимущества и практическое использование.

Коагуляция представляет собой процесс агрегации дисперсных частиц, который происходит в результате изменения их структуры и заряда, под влиянием электролитов или других факторов. Основной сущностью процесса является обработка воды коагулянтами с последующим гидролизом и взаимодействием продуктов гидролиза с коллоидными или грубодисперсными загрязнителями, итогом которого является образование хлопьев [1]. Для ускорения и повышения качества очистки воды в дополнение к коагулянтам вводят некоторые высокомолекулярные вещества – флокулянты, что приводит к более активному хлопьеобразованию и отстаиванию. Это приводит к улучшению качества обработанной воды. Основной недостаток рассматриваемого метода состоит в том, что в условиях постоянно изменяющегося качества воды

Результаты прогноза фунгицидной и рострегулирующей активности соединений (1-7)

№ п/п	Прогноз по фунгицидной активности						Прогноз по рострегулирующей активности					
	По «голосованию»			По «геометрии»			По «голосованию»			По «геометрии»		
	Число голосов	Ранг	Активность	Расстояние до ЭА	Расстояние до ЭВ	Активность	Число голосов	Ранг	Активность	Расстояние до ЭА	Расстояние до ЭВ	Активность
1	–2	4	В	1,329	1,259	В	–2	6	В	2,321	2,278	В
2	–1	3	В	0,962	0,999	А	–2	6	В	2,321	2,278	В
3	0	2	–	1,311	1,382	А	1	3	А	2,781	2,957	А
4	0	2	–	1,880	1,887	А	1	3	А	2,463	2,811	А
5	0	2	–	1,848	1,840	В	0	4	–	2,550	2,841	А
6	1	1	А	1,641	1,724	А	0	4	–	2,550	2,841	А
7	–3	5	В	1,578	–	–	–5	7	В	2,321	–	–