

OpenFOAM – свободно распространяемый инструментальный вычислительный гидродинамики для операций с полями (скалярными, векторными и тензорными). OpenFOAM позволяет решать полные уравнения с различными условиями, которые, обычно, не возможно решить аналитически, но становится возможным с помощью OpenFOAM. Для этого необходимо построить 3D-модель расчетной области, например, в программе КОМПАС-3D или же AutoCAD. После построения расчетной области строим расчетную сетку, что возможно сделать с помощью утилиты snappyHexMesh (рисунок 2). С помощью одного из решателей используем полученную расчетную сетку для вычисления полей скоростей и давлений (рисунок 2) в перерабатываемом материале.

#### СИНТЕЗ N-(3,5-ДИМЕТИЛАДАМАНТ-1-ИЛ)-2-ТОЗИЛГИДРАЗИН-1-КАРБОКСАМИДА

Рассказова Е.В., Дьяченко В.С., Бурмистров В.В., Бутов Г.М.

Волжский политехнический институт, филиал  
Волгоградского государственного технического  
университета, Волжский,  
e-mail: elena.rasskazova.96@mail.ru

В последнее время внимание многих исследователей приковано к химии адамантил содержащих соединений. Некоторые производные содержащие адамантильный фрагмент используются в качестве лекарственных препаратов (римантадин, мемантин и др.). Исследование 1,3-дизамещенных мочевины, содержащих в своём составе адамантильную группу, является актуальным благодаря проявляемой высокой ингибирующей активностью по отношению к растворимой эпиксигидролазе человека. Ингибирование этого фермента создает положительные предпосылки для подавления воспалительного процесса, вызванного образованием продуктов метаболизма. Среди широкого спектра ингибиторов эпиксигидролазы наибольшую активность показали адамантилсодержащие 1,3-дизамещенные мочевины, общей формулы:  $Ad-NHC(O)NH-R$  [1-3].

В нашей работе была синтезирована N-(3,5-диметиладамант-1-ил)-2-тозилгидразин-1-карбоксамид мочевины имеющая в своей структуре одну мочевиновую группу. Наличие в молекуле мочевины вторичной аминогруппы может повысить ингибирующую активность данного соединения. Для изоцианатов характерна реакция нуклеофильного присоединения. В ходе реакций присоединения нуклеофил (4-метилбензолсульфонилгидразин) атакует по месту полного или частичного положительного заряда на электрофиле т.к. имеет неподеленную электронную пару у атома азота [4].

В качестве исходных соединений для получения целевого продукта использовали 1-изоцианато-3,5-диметиладамантан полученный по методике [5], 4-метил-бензолсульфонилгидразин которые являются коммерчески доступными продуктом.

Реакцию получения N-(3,5-диметиладамант-1-ил)-2-тозилгидразин-1-карбоксамид проводили в диметилформамиде (ДМФА) при температуре 15-25°C, при молярном соотношении реагентов 1:1. Реакционную смесь перемешивали в течение 4 часов после чего в реакцию добавляли дистиллированную воду и смесь перемешивали ещё 30 минут. Выпавший кристаллический осадок отфильтровывали, промыли водой и этилацетатом. Полученное твердое вещество сушили в вакууме. Образующееся вещество плохо растворимо в ДМФА, что облегчало ее выделение и очистку. Выход продукта после очистки составил 96%. Идентификацию состава и строения полученного соединения доказывали с помощью ЯМР  $^1H$ -спектроскопии и масс-спектрометрии.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для молодых кандидатов наук (проект № МК-5809.2015.3).

#### Список литературы

1. Бурмистров В.В., Першин В.В., Бутов Г.М. Синтез и химические свойства 1-изоцианато-3,5-диметиладамантана // Известия ВолгГТУ: межвуз. сб. науч. ст. № 5(92) / ВолгГТУ. – Волгоград, 2012. – С. 62–66.
2. Бутов Г.М., Першин В.В., Бурмистров В.В. Реакции 1,3-дигидроадамантана с органическими изоцианатами // Журнал органической химии. – 2011. – Т. 47. – Вып. 4. – С. 601–602.
3. Vladimir Burmistrov, Christophe Morisseau, Dmitry Danilov, Todd R. Harris, Igor Dalinger, Irina Vatsadze, Tatiana Shkineva, Gennady M. Butov, Bruce D. Hammock 1,3-Disubstituted and 1,3,3-trisubstituted adamantyl-ureas with isoxazole as soluble epoxide hydrolase inhibitors // Bioorg. Med. Chem. Lett. 2015, 25, 5514–5519
4. Бурмистров В.В., Бутов Г.М., Данилов Д.В. Синтез и исследование свойств диadamантилсодержащих 1,3-дизамещенных димочевин // Известия ВолгГТУ: межвуз. сб. науч. ст. № 22 (149) / ВолгГТУ. – Волгоград, 2014. – (Серия «Химия и технология элементоорганических мономеров и полимерных материалов»; вып. 13). – С. 45–48.
5. Vladimir Burmistrov, Christophe Morisseau, Kin Sing Stephen Lee, Diyala S. Shihadih, Todd R. Harris, Gennady M. Butov, Bruce D. Hammock Symmetric adamantyl-diureas as soluble epoxide hydrolase inhibitors // Bioorg. Med. Chem. Lett. 2014, 24, 2193–2197.

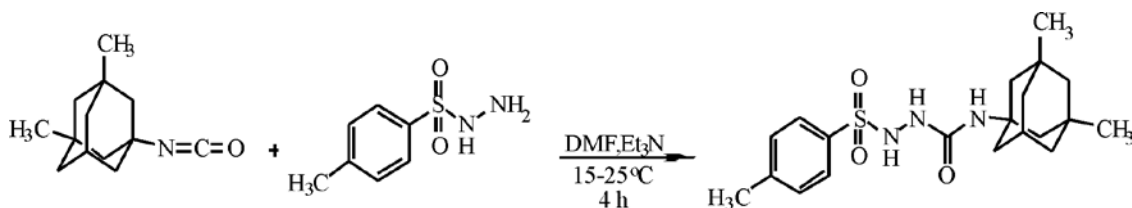
#### СИНТЕЗ N-(3,5-ДИМЕТИЛАДАМАНТАН-1-ИЛ)-2-(ФЕНИЛСУЛЬФОНИЛ)ГИДРАЗИН-1-КАРБОКСАМИДА

Солопов В.А., Дьяченко В.С., Бурмистров В.В., Бутов Г.М.

Волжский политехнический институт, филиал  
Волгоградского государственного технического  
университета, Волжский, e-mail: fines001@mail.ru

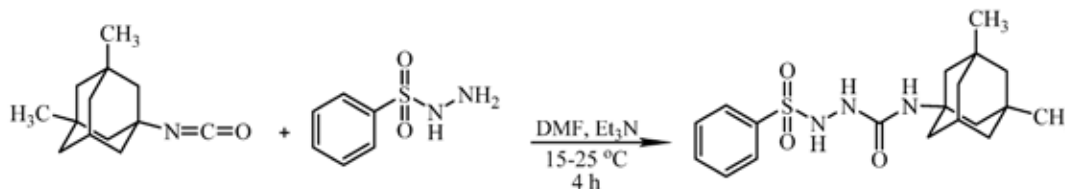
В последнее время большое внимание уделяется 1,3-дизамещенным мочевины, имеющим в своем составе одну или две адамантильные группы. Интерес к подобным соединениям вызван не только благодаря их биологической активности, но и возможностью использовать диadamантил содержащие мочевины в качестве мономеров для циклодекстриновых супрамолекулярных полимеров [1].

Адамантилсодержащие 1,3-дизамещенные мочевины обладают высокой ингибирующей активностью в отношении растворимой эпиксигидролазы (sEH) человека. Размер адамантильного радикала совпадает с размером полости активного центра фермента, поэтому наличие в составе мочевины адамантильного



фрагмента способствует ингибированию рекомбинантного энзима. На данный момент большое количество адамантилсодержащих мочевины исследовано в качестве ингибиторов (sEH) [2]. Среди широкого спектра ингибиторов эпоксигидролазы наибольшую активность показали адамантилсодержащие 1,3-изамещенные мочевины, общей формулы:  $\text{Ad1-NHC(O)NH-R}$ , где Ad1 – 1-адамантил; R – алкил, арил, гетерил и другие [3].

В нашей работе был синтезирован N-(3,5-диметиладамант-1-ил)-2-фенилсульфонилгидразин-1-карбоксамид имеющий в своей структуре одну мочевиновую группу. Наличие в молекуле мочевины вторичной аминогруппы может повысить ингибирующую активность данного соединения [4]. В качестве исходных соединений для получения целевого продукта использовали 1-изоцианато-3,5-диметиладамантан полученный по методике [5] и бензолсульфонилгидразин который является коммерчески доступными продуктом.



Реакцию получения N-(3,5-диметиладамант-1-ил)-2-тозилгидразин-1-карбоксамид проводили в диметилформамиде (ДМФА) при температуре 15-25°C, при молярном соотношении реагентов 1:1. Реакционную смесь перемешивали в течение 4 часов после чего в реакцию добавляли дистиллированную воду и смесь перемешивали ещё 30 минут. Выпавший кристаллический осадок отфильтровывали, промывали водой и этилацетатом. Полученное твердое вещество сушили в вакууме. Образующееся соединение плохо растворимо в ДМФА, что облегчало ее выделение и очистку. Выход продукта после очистки составил 97%. Идентификацию состава и строения полученного соединения доказывали с помощью ЯМР  $^1\text{H}$ -спектроскопии и масс-спектрометрии.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для молодых кандидатов наук (проект № МК-5809.2015.3).*

#### Список литературы

1. Синтез адамантилсодержащих мочевины, тиомочевины и бисмочевины – мономеров для циклодекстриновых супрамолекулярных полимеров / В.В. Бурмистров [и др.] // Бутлеровские сообщения. – 2014. – Т. 38, № 6. – С. 54–58.
2. S.H. Hwang, H.Tsai, B.D. Hammock. Orally Bioavailable Potent Soluble Epoxide Hydrolase Inhibitors. J.Med. Chem. 2007. No.50. P.3825-3840.
3. Синтез и химические свойства 1-изоцианатометил-3,5-диметиладамантана / В.В. Бурмистров, Г.М. Бутов // Известия ВолгГТУ: межвуз. сб. научн. ст. № 19 / ВолгГТУ. – Волгоград, 2013. – (Серия «Химия и технология элементоорганических мономеров и полимерных материалов»; вып. 11). – С. 25–29.
4. Бурмистров В.В., Бутов Г.М., Данилов Д.В. Синтез и исследование свойств диадамантилсодержащих 1,3-дизамещенных димочевины // Известия ВолгГТУ: межвуз. сб. науч. ст. № 22 (149). / ВолгГТУ. – Волгоград, 2014. – (Серия «Химия и технология элементоорганических мономеров и полимерных материалов»; вып. 13). – С. 45–48.5. Vladimir Burmistrov, Christophe Morisseau, Kin Sing Stephen Lee, Diyala S. Shihadih, Todd R. Harris, Gennady M. Butov, Bruce D. Hammock Symmetric adamantyl-diureas as soluble epoxide hydrolase inhibitors // Bioorg. Med. Chem. Lett. 2014, 24, 2193-2197.

#### ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК НАСАДКИ НА ЭКОНОМИЧЕСКУЮ ЭФФЕКТИВНОСТЬ РАБОТЫ ХИМИЧЕСКОГО АБСОРБЕРА.

Факанов П.М., Тишин О.А., Климова Е.В.

Волжский политехнический институт, филиал ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный технический университет», e-mail: fuckonoff@mail.ru

Абсорбцией называется перенос компонентов газовой смеси в объем соприкасающейся с ней конденсированной фазы. При абсорбции происходит избирательное поглощение одного или нескольких компонентов из газовой смеси жидкими поглотителями. Иногда растворяющийся газ вступает в химическую реакцию непосредственно с самим растворителем. Процесс, сопровождающийся химической реакцией между поглощаемым компонентом и абсорбентом, называют химической абсорбцией (хемосорбция). Химическую абсорбцию используют для извлечения

кислых компонентов с низким парциальным давлением, низкой концентрации загрязняющих веществ для тонкой очистки газа [1].

Основными источниками загрязнения атмосферного воздуха являются промышленные предприятия ( $\text{CO}$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$  и др.), котельные ТЭЦ (пыль, дым,  $\text{SO}_2$  и др.), железнодорожный, автомобильный транспорт, почва, особенно при несовершенстве уличных покрытий (пыль, микроорганизмы). Вредные примеси в атмосферном воздухе отрицательно влияют на здоровье населения [2]. Сера содержится в таких полезных ископаемых, как уголь, нефть, железные, медные и другие руды; одни из них используют как топливо, другие направляют с целью переработки на предприятия химической и металлургической промышленности. При переработке (в частности, при обжиге руд) сера переходит в химические соединения, например, в сернистый газ (оксид серы (IV)). Образовавшиеся соединения частично улавливаются очистными сооружениями, но основная масса выбрасывается в атмосферу [3].

Одним из аппаратов очистки газовых выбросов малой концентрации (не более  $0,12 \text{ мг/м}^3$ ) является насадочный абсорбер, благодаря его высокой поверхности контакта и относительно незначительного гидравлического сопротивления [4]. Добавление в абсорбент гидроксида натрия позволит уменьшить концентрацию абсорбата тем самым ускорить процесс абсорбции. Это особенно актуально для плохо растворимых веществ, таких как  $\text{SO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$  и др.

Целью работы является оценка экономической эффективности работы химического абсорбера на основании критерия оптимальности учитывающего: гидравлическое сопротивление; металлозатраты на абсорбер в зависимости от его диаметра и высоты; затраты на насадку в зависимости от количества, типа и материала.