

- ввести тамбура безопасности, позволяющие секционировать наиболее опасные производственные участки;
- внутри секций установить очистные комплексы, позволяющие очищать производственную атмосферу;
- при организации тамбуров безопасности, применять водовоздушную среду, обеспечивающую непрохождение через тамбур волны взрыва;
- изучить возможность состава шахтной атмосферы снижающего параметры процесса горения, не носящие катастрофический характер для обслуживающего персонала.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Баратов А.Н., Корольченко А.Я. Пожаро-взрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения / Справочник. - М.: Химия. Т. 1., 2. 1990. - 880 с.
2. Бесчастнов М.В. Промышленные взрывы оценка и предупреждение. М.: "Химия", 1991. - 432 с.
3. Нецепляев М.И., Любимова А.И., Петрухин П.М. и др. Борьба с взрывами угольной пыли в шахтах. - М.: Недра, 1992. - 298 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНФОРМАЦИОННЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ ТРИХЛОРОСФАЗСОЕДИНЕНИЙ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ И ЯКР-СПЕКТРОСКОПИИ

Сойфер Г.Б., Шууров С.Н.

Пермский государственный университет
Пермь, Россия

Строение десяти молекул трихлорфосфазосоединений типа $Cl_3P=NR$ с $R = C(CH_3)_3$, $C(C_2H_5)_3$, $C(CF_3)_3$, $CCl(CF_3)_2$, CCl_2CF_3 , CCl_3 , CCl_2CCl_3 , $CCl(CCl_3)_2$, $COCF_3$ и $COCCl_3$ рассмотрено на основе комплексного подхода с использованием результатов выполненных в настоящей работе квантовохимических расчётов и измеренных ранее [1] частот ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР) хлора-35. Конформационная специфика названных соединений, обусловленная пространственной относительной ориентацией связей P-Cl и N-C фрагмента $Cl_3P=NC$, отражается в его рассчитанных геометрических параметрах, а также в спектрах ЯКР хлора-35 группы PCl_3 , триплетный характер которых отчётливо соотносится со структурными особенностями молекул.

Сравнение выводов из проведённых расчётов молекулярной геометрии квантовохимическими полумпирическими и неэмпирическими методами продемонстрировало большую эффективность последних с преимущественным значением уровня MP2/6-31G*. В результате сопоставления расчётных и квадрупольно-резонансных данных установлено, что в исследованных три-

хлорфосфазосоединениях только $Cl_3P=NCCl(CCl_3)_2$ имеет *син*-перипланарное взаиморасположение одной из связей P-Cl и связи N-C, тогда как у всех остальных молекул конформация является *анти*-перипланарной.

Дополнительно проведена корреляция между полученными из расчётов зарядами атомов хлора групп PCl_3 и соответствующими частотами ЯКР, показавшая согласованность этих параметров в их отношении к структурным особенностям изученных молекул.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Кюнцель И.А., Сойфер Г.Б. Каталог спектров ЯКР ^{35}Cl соединений фосфора, содержащих связь P-Cl. Ч.1. Препринт. Пермь: Изд-во ТГУ. Перм. отделение, 1991.

О ПРЕПОДАВАНИИ ОСНОВ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПОРОГОВЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРОТЕКАНИЯ В ТИТРИМЕТРИЧЕСКИХ МЕТОДАХ АНАЛИЗА

Чеботарёв В.К., Ильина Е.Г., Пасека А.Е.,
Полякова И.Ю., Терентьев Р.А.
Алтайский государственный университет
Барнаул, Россия

Развитие теоретических знаний, применение ЭВМ позволяет в настоящее время найти подходы к прогнозированию использования аналитических реагентов в различных методах анализа. Весьма актуально прогнозирование возможности использования аналитических реагентов в самых распространённых методах анализа – титриметрических. Разработка титриметрических методик количественных определений с различной фиксацией конечной точки титрования, с использованием различных химических реакций при определении индивидуальных веществ и их смесей продолжается и в настоящее время. Экспериментальный поиск оптимальных условий титрования – длительный и трудоёмкий процесс, потому теоретические способы прогнозирования использования реагентов-титрантов с выявлением их полных возможностей для хорошо известных и новых реагентов представляют большой интерес. Вершиной любой исследовательской работы является возможность теоретического расчёта – прогноза результатов будущего эксперимента. В титриметрических методах анализа, как и в любых других, это особенно важно, так как позволяет значительно сэкономить время на разработку новых методик.

Наиболее подходящими критериями прогнозирования титрования индивидуальных соединений для аналитических реакций, на наш взгляд, могут быть:

- а) теоретические кривые титрования,