

## Правила для авторов

Журнал «Вестник технологического университета» составлен из оригинальных статей теоретического и экспериментального характера ведущих специалистов, работающих в различных областях, развиваемых в настоящее время в вузе, научных и образовательных учреждениях, промышленных предприятиях Республики Татарстан, Российской Федерации и за рубежом.

При оформлении представляемых к публикации материалов следует соблюдать следующие правила.

1. Авторы направляют в редакционную коллегию журнала (корпус А Казанского национального исследовательского технологического университета, ком. 335 или почтовым отправлением по адресу: 420015, г.Казань, ул.К.Маркса, д.68, КНИТУ, заведующему редакцией журнала «Вестника технологического университета») статью, подписанную всеми авторами, и ее компьютерный вариант – по электронной почте.

2. Сопроводительные документы должны включать (по 1 экз.):

- экспертное заключение о возможности опубликования в открытой печати (для статей естественно-научного профиля);

- справку о проверке статьи программой «Антиплагиат».

Авторы, не являющиеся сотрудниками КНИТУ, присылают письмо-направление организации.

3. Компьютерный вариант статьи оформляется в виде единого файла (двухполосный вариант), включающего индекс УДК, инициалы и фамилии авторов (в т.ч. англоязычное написание), название статьи (на русском и английском языках), аннотации на русском и английском языках объемом около **250 СЛОВ**, ключевые слова (на русском и английском языках); полный текст и формулы, список процитированной литературы, таблицы и при наличии возможности – рисунки, сведения об авторах на русском и английском языках. **Файл именуется по фамилии первого автора.**

4. Текст должен быть напечатан в редакторе «Word», параметры страницы: верхнее поле 2 см, нижнее - 1.5 см, левое – 1,75, правое - по 2 см, верхний колонтитул - 1.0 см, нижний - 1.5 см; шрифт текста статьи - Times New Roman Cyr 10 кгл через один интервал; ключевых слов, аннотации, Литературы и сведений об авторах - 9 кгл; подстрочные и надстрочные индексы - 10 кгл шрифта Arial. Абзацный отступ – 0,5 см. Ключевые фразы текста могут быть выделены курсивом. Использование жирного шрифта, подчеркивания, отличных от одинарного межстрочных интервалов, а также оформление отступов пробелами **не допускаются**. Номера страниц представляются в центре нижнего колонтитула.

Статья не должна превышать по объему 10 страниц с учетом рисунков и таблиц. Обзоры направляются в редакционную коллегию по предварительному согласованию. Объем - не более 20 страниц, включая все иллюстративные материалы, а список используемой литературы должен содержать не менее 40 источников.

5. Математические и химические символы в формулах и уравнениях должны быть набраны в одном из формульных редакторов. *Поскольку макет журнала двухполосный, формулы*, представленные в статье, должны по размеру помещаться в одну полосу, т.е. иметь размер не более, чем 5×8 см.

6. В статье желательно придерживаться следующего порядка изложения материала. В начале располагаются индексы УДК, инициалы и фамилии авторов, название на русском языке прописными буквами, ключевые слова на русском языке, аннотация на русском языке; инициалы и фамилии авторов, название на английском языке прописными буквами, ключевые слова на английском языке и аннотация на английском языке. Аннотации и ключевые слова оформляются курсивом. Текст статьи должен содержать исходные (в том числе литературные) данные и цель работы, для работ экспериментального характера - экспериментальную часть (реагенты, аппаратура, основные методики), результаты и их обсуждение, список литературы. Следует придерживаться единиц измерения и терминологии, рекомендуемых ИЮПАК. Все используемые условные обозначения и сокращения должны быть расшифрованы. Дробные части чисел отделяются запятой.

Дублирование данных в тексте, таблицах, рисунках, а также использование в таблицах, не обсуждаемых в тексте литературных данных, не допускаются.

7. Использование рисунков должно диктоваться необходимостью более ясного понимания излагаемого материала. Публикация может включать **не более 5-ти рисунков** (с обязательной ссылкой на них в тексте статьи). Рисунок с разделением на (а) и (б) части считается как рис.1 и рис.2. Каждый **рисунок д.б. форматом не более 5х8 см** и в виде, пригодном для непосредственного воспроизведения. Рисунки могут включать невыделенные краткие цифровые или буквенные обозначения (нумерующиеся слева направо или по часовой стрелке), набранные соответствующим остальному тексту шрифтом; размер любых обозначений на рисунках выбирается в пределах 12-14 кгл. Формат рисунка следует выбирать с учетом представленного изображения для исключения значительных свободных полей. Рисунки д.б. включены в состав файла, желательно непосредственно после указанной ссылки. Подписи к рисункам выполняются следующим образом: слово «Рис.» (пробел), номер рисунка цифрами, тире, пробел, название с большой буквы (без точки в конце предложения).

8. Публикация может включать **не более 3 таблиц**. Таблицы представляются по форме: слово «Таблица» в левом верхнем углу без отступа (пробел), номер таблицы цифрами (если их более одной), тире, пробел, название с большой буквы. Содержимое ячеек следует располагать по центру. **Ширина таблицы д.б. не более 8 см**. Если таблица занимает более одной страницы, ниже шапки таблицы на первой странице располагается строка нумерации колонок - по порядку слева направо, вторая и последующая страницы начинаются словами «Продолжение таблицы (пробел, номер, точка)», далее повторяется строка нумерации. Таблицы размером менее одной страницы разрывать не следует. Размеры ячеек и таблицы в целом следует по возможности минимизировать.

В таблицы включаются только необходимые цифровые данные. Материал должен быть метрологически обработан (указаны число измерений, погрешность и т.п.). Ссылки на таблицы в тексте статьи обязательны. Таблицы д.б. включены в состав файла, желательно непосредственно после приводимой ссылки.

9. В исключительных случаях, если выполнение требований к форматированию формул, таблиц и рисунков приводит к искажению представляемой информации, возможно их расположение по ширине одной полосы с последующим оформлением текста согласно Правилам.

10. Цитируемая литература нумеруется в порядке упоминания, в тексте порядковый номер ссылки заключается в квадратные скобки. Список используемой литературы помещается в конце статьи и оформляется без абзацных отступов в соответствии с **Правилами оформления литературы** (приводятся ниже).

Нумерация и включение в список всех упомянутых в статье литературных источников обязательны. Ссылки на статьи, находящиеся в печати, не допускаются. Статья, в которой не содержатся ссылки на литературные источники, не будет принята к дальнейшему рассмотрению.

11. На последней странице статьи, после приведенного списка литературы, необходимо указать **сведения об авторах**: Ф.И.О., звание, должность, структурное подразделение, организация, e-mail, с полным переводом данных сведений на **английский язык**.

12. Материалы статей, не отвечающие какому-либо требованию «Правил для авторов» возвращаются авторам. При повторном представлении такой статьи срок ее подачи обновляется.

13. На доработку статьи после научного редактирования авторам предоставляется срок не более одной недели. На стадии подготовки очередного выпуска журнала редакционная коллегия оставляет за собой право конкурсного отбора материалов.

14. Авторы несут ответственность за правильность изложения материала и использования специальных терминов. Корректур статей для просмотра не предоставляется.

15. Плата с аспирантов за публикацию рукописей не взимается.

Распространение издания осуществляется по технологическим вузам и крупным библиотекам России.

Статьи подаются в электронном виде (совместно с отсканированными экспертным заключением о возможности опубликования статьи в открытой печати и данными о проверке статьи программой «Антиплагиат») на рассмотрение зав. редакцией – к.х.н., доцента кафедры аналитической химии сертификации и менеджмента качества КНИТУ Романовой Разие Гусмановне: romanova\_rg@mail.ru.

За справками обращаться к ответственному секретарю журнала - к.х.н., доценту кафедры аналитической химии сертификации и менеджмента качества КНИТУ Горюновой Светлане Михайловне (А-335 e-mail: svetlanagoryunova@yandex.ru).

УДК 543.4:544.2

А. И. Носков, А. И. Фишман, Р. М. Аминова,  
Р. А. Скочилов

## ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ 1,2-ДИХЛОРЭТАНА В СТЕКЛЮЮЩЕЙСЯ МАТРИЦЕ

*Ключевые слова:* 1,2-дихлорэтан, конформационный анализ.

*Исследованы колебательные спектры растворов 1,2-дихлорэтана в стеклующейся матрице (парафиновое масло) в широком интервале температур, в том числе и ниже температуры стеклования. Обнаружено, что при концентрациях более 0,07 об. дол. наблюдаются признаки комплексообразования. Совместный анализ экспериментальных данных с привлечением методов факторного анализа и квантово-химических расчетов позволил установить, что молекулярным комплексом является димер, образованный транс- и гаши-конформациями 1,2-дихлорэтана. Определены термодинамические параметры комплекса. ....*

A. I. Noskov, A. I. Fishman, R. M. Aminova,  
R. A. Skochilov

## STUDIES ON THE MOLECULAR COMPLEXES OF 1,2-DICHLOROETHANE IN A VITRIFIED MATRIX

*Keywords:* 1,2-dichloroethane, conformational analysis.

*The vibrational spectra of 1,2-dichloroethane solutions in a glass matrix (wax oil) at a wide temperatures interval including below glass-transition temperature has been investigated. It is revealed that at concentrations more than 0,07 i.v.f. the complexing signs are observed. The joint analysis of experimental data with factor analysis and quantum-chemical calculation methods has allowed to establish that the molecular complex is the dimer formed by trans- and gauche-conformations of 1,2-dichloroethane. The thermodynamic parameters of the complex were determined. ....*

### Введение

Интерес к изучению молекулярных комплексов связан с тем, что межмолекулярные взаимодействия играют исключительно важную роль в понимании кинетики химических реакций, процессов растворения и адсорбции, эффектов самоорганизации молекул и образования супрамолекулярных систем с необычными физико-химическими свойствами. Поэтому исследование явлений, обусловленных слабыми внутри- и межмолекулярными взаимодействиями, представляет собой одну из актуальных задач современной химической и молекулярной физики.

В представленной работе приведены результаты экспериментальных исследований методом ИК-Фурье спектроскопии молекулярных кластеров 1,2-дихлорэтана в стеклующемся растворителе в широком интервале температур и концентраций. Экспериментальные данные интерпретированы с привлечением методов факторного анализа и квантово-химических расчетов электронной и пространственной структуры и энергии молекулярных кластеров.

### Экспериментальная часть и квантово-химические расчеты

В качестве стеклующейся матрицы использовалось парафиновое масло (ПМ). Раствор с заданной

концентрацией 1,2-дихлорэтана (ДХЭ) тщательно перемешивался в течение 5 минут и помещался в кювету фиксированной толщины (50 мкм), приспособленную для низкотемпературных исследований.

Регистрация ИК-фурье спектров поглощения проводилась на спектрометре «Tenzor-27» фирмы «Bruker». Спектральное разрешение составляло 1 см<sup>-1</sup>, число сканов – 32. Низкотемпературные исследования выполнялись в стандартном криостате в диапазоне температур 100-300 К. Криостат охлаждался с помощью жидкого азота, средняя скорость охлаждения составляла 0,5 - 1 К/мин. Температура регистрировалась с помощью платинового термометра. Точность поддержания температуры образца составляла ±1 К. В случае сильно перекрывающихся полос они разделялись на отдельные спектральные компоненты с помощью пакета прикладных программ PeakFit. Форма полос задавалась суммой контуров Лоренца и Гаусса.

### Литература

*Текст, текст, текст, текст, текст, текст, текст,*

© А. И. Носков – сведения об авторе; А. И. Фишман – сведения об авторе; Р. М. Аминова – сведения об авторе; Р. А. Скочилов - сведения об авторе.

© A. I. Noskov - information about the author A. I. Fishman - information about the author R. M. Aminova - information about the author R. A. Skochilov - information about the author.

## Правила оформления литературы

1. В журнале установлена следующая единая последовательность изложения содержащейся в публикуемых статьях библиографической информации для всех основных цитируемых литературных источников (статей, книг, изобретений, диссертаций и тезисов докладов на различных конференциях), а именно:

### 1.1. Для статей:

- в журналах и иных периодических изданиях – Инициалы, Фамилии ВСЕХ авторов в указанном в статье порядке на языке ее оригинала. *Принятая аббревиатура названия журнала, Номер тома* журнала (издания), годичный номер выпуска, начальная страница – конечная страница статьи в журнале (издании) (год выхода журнала в свет) (например: O.V. Mikhailov, *Rev. Inorg. Chem.*, **30**, 4, 199-273 (2010));
- в сборниках и книгах – Инициалы, Фамилии ВСЕХ авторов в указанном в статье порядке на языке ее оригинала. В сб. (В кн.) *Название сборника (или книги)*, издательство, город, год издания, номера цитируемых страниц (например: Г.И. Лихтенштейн, В сб. *Окислительно-восстановительные металлоферменты и их модели*. Ч. I. ИХФ АН СССР, Черноголовка, 1982. С. 7-10, 13, 16);

### 1.2. Для книг и монографий:

- при цитировании их в целом – Инициалы, Фамилии всех авторов в указанном в книге порядке на языке ее оригинала. *Название*, Издательство, город, год издания. Общее число страниц (например: Д. Перрин, *Органические аналитические реагенты*. Мир, Москва, 1967. 407 с.);
- при цитировании их отдельных страниц – Инициалы, Фамилии всех авторов в указанном в книге порядке на языке ее оригинала. *Название*, Издательство, Город, номера цитируемых страниц (например: Д. Перрин, *Органические аналитические реагенты*. Мир, Москва, 1967, С. 224-227);

### 1.3. Для изобретений – сокращение от слова «Патент» или от словосочетания «Авторское свидетельство», название страны, патентным ведомством которой он выдан, номер патента, (год выдачи патента) [например, Пат. США 4.318.977 (1982), Авт. свид. СССР 1.340.410 (1987)];

### 1.4. Для диссертаций – Инициалы, Фамилия автора, указание ученой степени и наук, организация – место ее выполнения, город, где это место находится, год выхода в свет, общее число страниц [например, Т.Н. Ломова. Дисс. докт. хим. наук, Ин-т химии неводных растворов АН СССР, Иваново, 1990. 456 с.];

для авторефератов диссертаций – Инициалы, Фамилия автора, указание слова «Автореферат», ученой степени и наук, организация – место ее защиты, город, где это место находится, год выхода в свет, общее число страниц [например, П.В. Гуцин. Автореф. дисс. канд. хим. наук, Санкт-Петербургский гос. ун-т, Санкт-Петербург, 2010. 16 с.];

### 1.5. Для тезисов докладов – Инициалы, Фамилии всех авторов в указанном в сборнике тезисов порядке на языке его оригинала. *Название конференции, симпозиума, съезда* (Место проведения, сроки проведения), Издательство (если указано), Город, год издания, том издания (если имеется), начальная–конечная страницы (например: S.I. Dorovskikh, L.N. Zelenina, N.B. Morozova, I.K. Igumenov, *XVIII International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia* (Samara, Russia, October 3-7, 2011). Abstracts. Samara, 2011. Volume 1. P. 83-84.