

## 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» (при этом степень оригинальности работы в той ее части, где изложены результаты проведенного исследования, должна быть не менее 75%).

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 (**не менее 200 СЛОВ**), ключевые слова (на русском и английском языках); полный текст и формулы, список процитированной литературы (**не менее 15 источников**), 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 Суг 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 проставляются 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. При подготовке обзорных статей авторам следует принимать во внимание следующее:

а) как минимум один из авторов обзорной статьи должен иметь собственные публикации по тематике данной статьи в авторитетных научных журналах, индексируемых или в Перечне ВАК РФ, или в Web of Science, или в Scopus; при этом в списке литературы к данной статье должно быть представлено не менее 3 таких публикаций;

б) содержание обзорной статьи помимо всего прочего должно охватывать также достижения последних лет в данной области науки, опубликованные как в российской, так и зарубежной научной литературе, при этом общее число процитированных работ (и соответственно ссылок в списке литературы к статье) должно быть не менее 40. При этом крайне нежелательны ссылки на тезисы докладов любых конференций;

в) к публикации в журнале могут быть представлены также авторские обзоры, в которых произведены систематизация, анализ и обобщение работ, опубликованных преимущественно самими авторами обзорной статьи; в этом случае их авторы должны убедительно обосновать (в сопроводительном письме в редакцию журнала или в вводной части статьи), что они развивают уникальное научное направление в соответствующей отрасли науки и занимают в нем лидирующие позиции.

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 5x8 см** и в виде, пригодном для непосредственного воспроизведения. Рисунки могут включать невыде-

ленные 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). **Количество ссылок в статье должно быть не менее 15**.

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. Все опубликованные в Журнале статьи выставляются на Internet-сайте Журнала [www.elibrary.ru](http://www.elibrary.ru) в открытом доступе (Open Access). Плата за публикацию статей в Журнале и Open Access с авторов статей 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., доценту кафедры аналитической химии сертификации и менеджмента качества КНИТУ Романовой Разие Гусмановне: [vestnik@corp.knrtu.ru](mailto:vestnik@corp.knrtu.ru)

УДК 535.37:544.164

Д. А. Романова, К. А. Романова, Ю. Г. Галяметдинов

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОДИФИЦИРОВАННОГО ПЕКТИНА

*Ключевые слова:* квантово-химическое моделирование, модифицированный пектин, теория функционала плотности, ИК-спектроскопия.

Отличительные физико-химические и фармакологические свойства модифицированного пектина, такие как эффективное проникновение в кровоток, мощное провоспалительное и профиброзное действия, определяют его применение в медицине для лечения сердечно-сосудистых и почечных заболеваний, различных воспалительных процессов, для улучшения неврологического здоровья и предотвращения преждевременного старения. Особого внимания заслуживает его мощное противораковое действие. Также он используется в качестве флокулянта при очистке воды; при добыче и переработке полезных ископаемых; при бурении для усиления стенок скважин; в роли суперабсорбента; в сельском хозяйстве. Физико-химические свойства пектина напрямую зависят от его строения. Для того, чтобы предсказать структуру и свойства соединений зачастую прибегают к квантово-химическому моделированию, позволяющему изучить физико-химические свойства вещества до проведения его синтеза. Однако существует ограниченное число работ, посвященных моделированию строения и свойств модифицированного пектина. Поэтому в данной работе был произведен поиск оптимального подхода к квантово-химическому моделированию модифицированного с помощью акриламида цитрусового пектина. Произведен расчет строения мономерного звена полимера и его ИК-спектра с использованием нескольких квантово-химических методов и базисных наборов. Для оценки адекватности проведенных расчетов вычисленные колебательные частоты сравнивались с экспериментальными данными, что позволило установить строение мономерного звена и выяснить, что модифицированный пектин имеет циклическое строение. В результате сравнения расчетных данных с экспериментальными в качестве оптимального квантово-химического подхода к моделированию строения и ИК-спектра модифицированного пектина был предложен метод теории функционала плотности с функционалом PBE и базисным набором 6-31G(d,p).

D. P. Romanova, K. A. Romanova, Yu. G. Galyametdinov

## QUANTUM-CHEMICAL SIMULATION OF THE STRUCTURE AND IR-SPECTRUM OF MODIFIED PECTIN

*Keywords:* quantum chemical modeling, modified pectin, density functional theory, IR spectroscopy.

Distinctive physicochemical and pharmacological properties of modified pectin, such as effective penetration into the bloodstream, powerful pro-inflammatory and pro-fibrotic effects, determine its application in medicine for the treatment of cardiovascular and renal diseases, various inflammatory processes, to improve neurological health and prevent premature aging. Its powerful anti-cancer effect deserves special attention. It is also used as a flocculant in water purification; in the extraction and processing of minerals; while drilling to strengthen the walls of wells; in the role of superb sorbent; in agriculture. Physicochemical properties of pectin directly depend on its structure. In order to predict the structure and properties of compounds, one often uses quantum-chemical simulation, which makes it possible to study the physicochemical properties of a substance before its synthesis. However, there is a limited number of works devoted to simulation of the structure and properties of modified pectin. Therefore, in this work, a search was made for an optimal approach for quantum-chemical simulation of citrus pectin modified with acrylamide. The calculation of the structure of the monomer unit of the polymer and its IR-spectrum by several quantum-chemical methods and basic sets has been performed. To assess the adequacy of the calculations, the obtained vibrational frequencies were compared with experimental data, which made it possible to establish the structure of the monomer unit and find out that the modified pectin has a cyclic structure. As a result of comparing the calculated data with the experimental ones, the density functional theory method with the PBE functional and the 6-31G (d, p) basis set was proposed as an optimal quantum-chemical approach for simulation of the structure and IR-spectrum of modified pectin.

### Введение

В наш век полимеров многообразию этих соединений нет предела. Органические полимеры и олигомеры образуют важный класс современных материалов, которые демонстрируют множество привлекательных свойств, таких как высокая эластичность,

### Литература

1. К. А. Романова, Ю. Г. Галяметдинов, *Вестник технологического университета*, **23**, 9, 5-8 (2020).

© Д. П. Романова – магистрант кафедры физической и коллоидной химии, КНИТУ, e-mail: romanova050297@mail.ru; К. А. Романова – канд. хим. наук, доцент кафедры физической и коллоидной химии, КНИТУ, e-mail: ksenuya@mail.ru; Ю. Г. Галяметдинов – д-р хим. наук, проф., заведующий кафедрой физической и коллоидной химии, КНИТУ.

© D. P. Romanova - Master's student of the Department of Physical and Colloidal Chemistry, KNRTU, e-mail: romanova050297@mail.ru; K. A. Romanova - doctor of philosophy in chemistry, associate professor, physical and colloid chemistry department, KNRTU; Yu. G. Galyametdinov - doctor of sciences in chemistry, full professor, head of the physical and colloid chemistry department, KNRTU.

## 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, Черногоровка, 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.