

акцій вимагає аналізу їх механізмів на атомному рівні. Такий аналіз може бути виконаний на основі результатів квантово-хімічних розрахунків властивостей молекул вихідних речовин, напівпродуктів (інтермедіатів) та кінцевих сполук. Для оцінки кінетичних параметрів елементарних процесів важливим є також систематичний розгляд перерізів поверхні потенційної енергії для відповідних реакцій, що дозволяє обчислити структуру перехідних етапів та енергетичні бар'єри.

В роботі виконано систематичні розрахунки властивостей молекул різних органосилоксанів та продуктів їх гідролізу квантово-хімічним методом SCF MO LCAO AM1. Для молекул  $\text{Si}(\text{OCH}_3)_4$  та  $\text{CH}_3\text{Si}(\text{OCH}_3)_3$  механізми гідролізу та конденсації вивчено детально. На підставі результатів розрахунків зроблено оцінки термодинамічних та кінетичних параметрів процесів.

## РОЗРОБКА КАТАЛІЗАТОРІВ ДЛЯ НЕЙТРАЛІЗАЦІЇ ТОКСИЧНИХ ВИКИДІВ

С. Орлик (кафедра хімії НаУКМА)

Оксиди азоту  $\text{NO}_x$  — одні з найбільш токсичних і небезпечних забруднювачів атмосферного повітря. Подальше збільшення викидів  $\text{NO}_x$  може призвести до незворотних екологічних наслідків в глобальному масштабі, тому на сьогодні питання зниження викидів  $\text{NO}_x$  мають велике значення. Особливо гостро проблема знешкодження викидів газів від оксидів азоту стоїть для України, де об'єм викидів  $\text{NO}_x$  становить понад 400 тис. тонн на рік.

Каталіз відіграє всесвітньо відому роль в покращенні нашої атмосфери і зменшенні забруднення. Каталіз — найкраще рішення для видалення оксидів азоту. Каталітичне відновлення оксидів азоту є одним з підходів до цієї проблеми.

Нами розроблені паладійвмісні каталізатори з низьким газодинамічним опором на металокерамічних носіях та блоках сотової структури на основі кремнезему для відновлення оксидів азоту монооксидом вуглецю, а також воднем та вуглеводнями:



Дані каталізатори та розроблений на їх основі спосіб вуглекислотного підживлення рослин закритого ґрунту каталітично очищеними відхідними газами котелень знайшли широке застосування в тепличних господарствах України, Латвії, країн СНД.

Розроблено оксидні каталізатори для процесу селективного відновлення оксидів азоту аміаком (СКВ-процес):



Проведено дослідно-промислові випробування технології очистки продуктів горіння природного газу від оксидів азоту методом СКВ на Дарницькій ТЕЦ м.Києва і вперше показана можливість очистки відхідних газів промислового котлоагрегату на розробленому вітчизняному каталізаторі.

Розроблені ефективні катіонообмінні цеолітні каталізатори процесу селективного відновлення оксидів азоту альтернативним аміаку відновником — нижчими вуглеводнями  $\text{C}_1$ — $\text{C}_4$  (новий СКВ-процес):



Досліджено фізико-хімічні властивості розроблених каталізаторів: РФЕ-спектри поверхні, кислотні властивості металцеолітних каталізаторів — методами ІЧС та ТПД аміаку, кінетичні закономірності процесів відновлення оксидів азоту, вплив диоксиду сірки — каталітичної отрути, яка найчастіше зустрічається у різних відхідних газах, особливо - у продуктах спалювання палива.

## NITROGEN-14 MAGNETIC RESONANCE SPECTROSCOPY OF BIOFLUIDS AND TISSUES AS A NEW TOOL IN CLINICAL BIOCHEMISTRY

*S. Tyukhtenko* (chair of chemistry NaUKMA)

For many biologists and clinical biochemists magnetic resonance spectroscopy (MRS) remains a sophisticated and costly technique limited only to basic research. However, today it becomes obvious that in vitro MRS of  $^1\text{H}$   $^{13}\text{C}$   $^{19}\text{F}$  and  $^{31}\text{P}$  resonances can be automated for routine analyses and should not cost any more than currently used techniques. The  $^{14}\text{N}$  nucleus should be readily detectable in biological systems in the case of molecules with local fields that are tetrahedrally symmetrical, or nearly so, around the nitrogen. In vitro and in vivo  $^{14}\text{N}$  NMR of biological fluids and tissues will probably be a promising method for tissue characterization. However there are many methodological problems and therefore  $^{14}\text{N}$  MRS today couldn't be used as routine method. A number of factors complicate the monitoring of nitrogen-containing metabolites by  $^{14}\text{N}$  NMR. Primary among these factors is the effect of acoustic ringing caused by generation of ultrasonic waves. This