

ISSN 2410-6593 (Print), ISSN 2686-7575 (Online)

<https://doi.org/10.32362/2410-6593-2020-15-2-30-37>



УДК 544.332.2:547.494.254

## Квантово-химический подход к расчету энтальпий образования ксантогенатов щелочных металлов

Ю.В. Попов<sup>1</sup>, А.С. Долгачев<sup>2</sup>, Е.В. Шишкин<sup>1,@</sup>, Ю.Л. Зотов<sup>1</sup>, В.Е. Шишкин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Волгоградский государственный технический университет, Волгоград, 400005 Россия

<sup>2</sup>АО «Волжский Оргсинтез», Волжский, Волгоградская область, 404117 Россия

@ Автор для переписки, e-mail: shishkin@vstu.ru

**Цели.** Целью работы является исследование возможности совместного использования квантово-химических методов и корреляционного анализа для определения энтальпий образования металлосодержащих органических веществ на примере ксантогенатов щелочных металлов, которые представляют интерес как биологически активные вещества и эффективные флотореагенты.

**Методы.** Используются полуэмпирические методы квантово-химических расчетов Modified Neglect of Diatomic Overlap, Austin Model 1, Recife model 1 и линейный регрессионный анализ.

**Результаты.** С помощью полуэмпирических методов Modified Neglect of Diatomic Overlap, Austin Model 1, Recife model 1 вычислены энтальпии образования 16 алкилксантогенатов калия и натрия, проведено сопоставление полученных результатов с экспериментальными данными. Выяснено, что наилучшая корреляция для калиевых и натриевых солей эфиров дитиоугольной кислоты наблюдается при использовании метода Austin Model 1. С помощью полученных уравнений регрессии вычислены энтальпии образования для 30 ксантогенатов, органическая часть которых содержит алкильные, циклические неароматические структуры и один или два гетероатома, такие как N, O, F, и экспериментальные данные по которым отсутствуют.

**Выводы.** В результате проведенного исследования была установлена превосходная корреляция между экспериментальными и рассчитанными по методу AM1 значениями энтальпий образования алкилксантогенатов калия и натрия. Полученные данные могут быть использованы для расчета теплового эффекта реакций ксантогенирования спиртов и проектирования производств соответствующих ксантогенатов.

**Ключевые слова:** ксантогенаты щелочных металлов, полуэмпирические квантово-химические методы расчета, корреляционный анализ, энтальпия образования.

**Для цитирования:** Попов Ю.В., Долгачев А.С., Шишкин Е.В., Зотов Ю.Л., Шишкин В.Е. Квантово-химический подход к расчету энтальпий образования ксантогенатов щелочных металлов. *Тонкие химические технологии*. 2020;15(2):30-37. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2020-15-2-30-37>

# Quantum chemical approach to calculating the enthalpies of the formation of alkali metal xanthates

Yuriy V. Popov<sup>1</sup>, Aleksandr S. Dolgachev<sup>2</sup>, Evgeniy V. Shishkin<sup>1,\*</sup>, Yuriy L. Zotov<sup>1</sup>, Veniamin E. Shishkin<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Volgograd State Technical University, Volgograd, 400005 Russia

<sup>2</sup>Volzhskii Orgsintez, Volzhskii, Volgograd oblast, 404117 Russia

\*Corresponding author, e-mail: shishkin@vstu.ru

**Objectives.** The aim of this work is to study the possibility of the joint use of quantum chemical methods and correlation analysis to determine the formation enthalpies of metal-containing organic substances using the example of alkali metal xanthates, which are of interest as biologically active substances and effective flotation reagents.

**Methods.** Semi-empirical methods of quantum chemical calculating (Modified Neglect of Diatomic Overlap, Austin Model 1, Recife model 1 methods) and linear regression analysis were used.

**Results.** Using the semi-empirical Modified Neglect of Diatomic Overlap, Austin Model 1, and Recife model 1 methods, the enthalpies of formation of 16 potassium and sodium alkyl xanthates were calculated, and the obtained results were compared with experimental data. It was found that the best correlation for potassium and sodium salts of dithiocarbonic acid esters could be observed using the Austin Model 1 method. Using the obtained regression equations, the enthalpies of formation were calculated for 30 xanthates, the organic part of which contained alkyl, cyclic non-aromatic structures, and one or two heteroatoms such as nitrogen, oxygen, and fluorine, and for which there are no experimental data.

**Conclusions.** As a result of the study, an excellent correlation was established between the experimental and the calculated (by the Austin Model 1 method) values of the enthalpies of formation of potassium and sodium alkyl xanthates. The data obtained can be used to calculate the thermal effect of the xanthogenation reactions of alcohols and to design the production of the corresponding xanthates.

**Keywords:** alkali metal xanthates, semi-empirical quantum chemical calculation methods, correlation analysis, formation enthalpy.

**For citation:** Popov Yu.V., Dolgachev S.A., Shishkin E.V., Zotov Yu.L., Shishkin V.E. Quantum chemical approach to calculating the enthalpies of the formation of alkali metal xanthates. *Tonk. Khim. Tekhnol.* = *Fine Chem. Technol.* 2020;15(2):30-37 (in Russ.). <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2020-15-2-30-37>

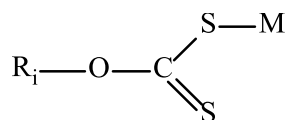
## ВВЕДЕНИЕ

Термодинамические характеристики являются важнейшими параметрами вещества. Термодинамический анализ химического процесса позволяет определить направление протекания реакции, условия равновесия, ее тепловой эффект. Однако задача определения термодинамических характеристик, в первую очередь, энтальпий образования различных органических веществ, является достаточно трудоемкой, а для некоторых соединений вообще неосуществимой. В настоящее время в связи с развитием квантовой химии и компьютерных технологий термодинамические параметры многих соединений могут быть быстро рассчитаны различными методами. Однако полностью полагаться на полученные значения нельзя, и всегда необходимо сверять результаты расчетов с экспериментальными данными.

Ранее в ряде работ с помощью сочетания полуэмпирических квантово-химических методов расчета и корреляционного анализа были определены энтальпии образования многих органических соединений: циклофанов [1]; азотсодержащих гетероциклов [2]; производных адамантана [3]. Для расчетов в этих работах были использованы соединения, включающие в себя наиболее часто встречающиеся элементы в органической химии: углерод, водород, кислород, азот и серу. В настоящее время широкое применение в народном хозяйстве находят и многие другие органические вещества, которые помимо перечисленных выше элементов включают в себя также различные металлы. Расчет термодинамических характеристик веществ такого рода, как правило, затруднен. Поэтому исследование возможности совместного использования квантово-химических методов и корреляционного анализа для нахождения энтальпий образования таких соединений является актуальной задачей.

## МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

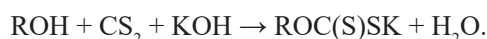
В качестве представителей исследуемой группы веществ были выбраны ксантогенаты щелочных металлов (соли O-эфиров дитиоугольной кислоты) общей формулы:



где  $\text{R}_1$  – органическая часть молекулы;  $\text{M} = \text{Na}, \text{K}$ . Эти соединения находят широкое применение в качестве флотореагентов-собирателей [4], а также обладают выраженной биологической активностью [5, 6]. Нумерация и структуры ксантогенатов представлены в табл. 1.

Для выявления корреляции между расчетными и экспериментальными значениями энтальпии образования были выбраны 16 соединений: метиловый (I, II), этиловый (III, IV), изопропиловый (V, VI),

пропиловый (VII, VIII), бутиловый (IX, X), амиловый (XI, XII), гексиловый (XIII, XIV) и гептиловый (XV, XVI) ксантогенаты калия и натрия (нечетные номера соответствуют калиевым ксантогенатам, четные – натриевым). В литературе [7–11] присутствуют экспериментальные данные о тепловом эффекте реакций ксантогенирования соответствующих спиртов ( $\Delta H_{r, 298}^0$ ):



Энтальпии образования веществ I–XVI ( $\Delta H_{f, \text{эксп.}}^0$ ) мы определили с помощью справочных данных об энтальпиях образования участников реакции и закона Гесса. Для этих соединений также была выполнена оптимизация геометрии и расчет энтальпий образования с помощью методов Modified Neglect of Diatomic Overlap (MNDO), Austin Model 1 (AM1), and Recife Model 1 (RM1) в пакете HyperChem. Результаты расчетов представлены в табл. 2.

**Таблица 1.** Перечень исследованных ксантогенатов калия и натрия (нечетные номера соответствуют калиевым ксантогенатам, четные – натриевым)  
**Table 1.** List of investigated potassium and sodium xanthates (odd numbers correspond to potassium xanthates, even numbers correspond to sodium xanthates)

№	Соединение Compound	№	Соединение Compound
I, II		XXIII, XXIV	
III, IV		XXV, XXVI	
V, VI		XXVII, XXVIII	
VII, VIII		XXIX, XXX	
IX, X		XXXI, XXXII	
XI, XII		XXXIII, XXXIV	

Таблица 1. Окончание  
Table 1. Continued

№	Соединение Compound	№	Соединение Compound
XIII, XIV		XXXV, XXXVI	
XV, XVI		XXXVII, XXXVIII	
XVII, XVIII		XXXIX, XL	
XIX, XX		XLI, XLII	
XXI, XXII		XLIII, XLIV	
XLV, XLVI			

Было выяснено, что общая линейная корреляция отсутствует, однако экспериментальные и расчетные данные укладываются на прямую отдельно для калиевых и отдельно для натриевых ксантогенатов. При этом для каждого из методов расчета коэффициенты корреляции для группы ксантогенатов натрия несколько выше, чем для группы ксантогенатов калия. Наибольший коэффициент корреляции в обоих случаях характерен для метода AM1, при этом, так как  $r > 0.99$ , то можно говорить о превосходной корреляции. Уравнения регрессии имеют в этом случае вид:

$$\Delta H_{f, \text{эксп.}, K}^0 = 0.8736 \times \Delta H_{f, \text{расч.}, K}^0 - 92.2980 \quad (1)$$

$$\Delta H_{f, \text{эксп.}, Na}^0 = 0.8738 \times \Delta H_{f, \text{расч.}, Na}^0 - 124.0000 \quad (2)$$

Полученные зависимости могут быть использованы для нахождения энтальпии образования тех ксантогенатов калия и натрия, экспериментальные данные по которым отсутствуют в научно-технической литературе. Для дальнейших расчетов были отобраны калиевые (нечетные номера) и натриевые (четные номера) ксантогенаты на основе следующих спиртов: 2-метилпропан-1-ол (XVII, XVIII), 3-метилбутан-1-ол (XIX, XX), бутан-2-ол (XXI, XXII), октан-1-ол (XXIII, XXIV), (1-адамантил)-метанол (XXV, XXVI), 2-(1-адамантил)-этан-1-ол (XXVII, XXVIII), бицикло-[2,2,1]-гептан-2-ол (XXXIX, XXX), 2-(винилокси)-этан-1-ол (XXXI, XXXII), 2-фторэтан-1-ол (XXXIII, XXXIV), 2-(*N,N*-диэтиламино)-этан-1-ол (XXXV, XXXVI), 2-(*N,N*-диэтиламиноэтокси)-этан-1-ол (XXXVII, XXXVIII), циклопентанол (XXXIX, XL), циклогексанол (XLI, XLII),

1,3-ди-(2-метилпиперидино)-пропан-2-ол (XLIII, XLIV), трицикло-[5,2,1,0]-декан-9-ол (XLV, XLVI). Все эти вещества описаны в литературе [6, 12–19] и являются либо высокоэффективными флотореагентами-собираателями, либо проявляют

высокую биологическую активность. Результаты расчета указанных выше ксантогенатов по методу AM1 и последующего пересчета энтальпий образования по уравнениям регрессии (1) и (2) приведены в табл. 3.

**Таблица 2.** Данные квантово-химического расчета энтальпий образования  $\Delta H_{f, \text{расч.}}^0$ , выполненные методами MNDO, AM1, RM1 для ксантогенатов I–XVI и коэффициенты корреляции  
**Table 2.** Data of quantum-chemical calculation of formation enthalpy  $\Delta H_{f, \text{calc.}}^0$  performed by MNDO, AM1, RM1 methods for xanthates I–XVI and correlation coefficients

№	$\Delta H_{f, 298}^0$ кДж/моль, $\Delta H_{f, 298}^0$ kJ/mol	$\Delta H_{f, \text{эксп.}}^0$ кДж/моль, $\Delta H_{f, \text{эксп.}}^0$ kJ/mol	$\Delta H_{f, \text{расч.}}^0$ , кДж/моль					
			$\Delta H_{f, \text{calc.}}^0$ , kJ/mol					
			MNDO	$\Delta$	AM1	$\Delta$	RM1	$\Delta$
I	-45.10	-312.31	-376.94	-64.63	-259.89	52.42	-231.55	80.76
II	-28.35	-297.19	-324.9	-27.71	-210.57	86.62	-175.56	121.63
III	-47.20	-348.21	-399.41	-51.2	-284.41	63.8	-256.46	91.75
IV	-32.79	-335.43	-345.92	-10.49	-235.15	100.28	-200.5	134.93
V	-6.50	-345.3	-405.33	-60.03	-299.78	45.52	-285.9	59.4
VI	-4.97	-345.4	-346.01	-0.61	-250.42	94.98	-230.76	114.64
VII	-52.80	-376.54	-419.27	-42.73	-310.46	66.08	-277.5	99.04
VIII	-36.20	-361.57	-361.57	0	-261.2	100.37	-220.48	141.09
IX	-43.50	-384.14	-438.96	-54.82	-335.14	49	-297.7	86.44
X	-30.92	-373.19	-380.05	-6.86	-289.69	83.5	-241.14	132.05
XI	-35.40	-403.99	-455.74	-51.75	-360.26	43.73	-319.04	84.95
XII	-27.50	-397.72	-396.82	0.9	-315.15	82.57	-259.29	138.43
XIII	-32.20	-428.69	-475.2	-46.51	-384.39	44.3	-337.92	90.77
XIV	-26.10	-424.22	-417.16	7.06	-343.76	80.46	-279.53	144.69
XV	-31.80	-450.75	-494.75	-44	-411.76	38.99	-358.4	92.35
XVI	-24.54	-445.12	-433.24	11.88	-369.12	76	-296.99	148.13
Коэффициент корреляции Correlation coefficient			$r_K = 0.9875$ $r_{Na} = 0.9907$		$r_K = 0.9907$ $r_{Na} = 0.9919$		$r_K = 0.9669$ $r_{Na} = 0.9841$	

**Таблица 3.** Энтальпии образования соединений XVII–XLVI, рассчитанные ( $\Delta H_{f, \text{расч.}}^0$ ) по методу AM1 и скорректированные ( $\Delta H_{f, \text{расч.}}^{0*}$ ) по уравнениям (1) и (2)

**Table 3.** Enthalpies of the formation of compounds XVII–XLVI, calculated ( $\Delta H_{f, \text{calc.}}^0$ ) by the AM1 method and corrected ( $\Delta H_{f, \text{calc.}}^{0*}$ ) by equations (1) and (2)

№	$\Delta H_{f, \text{расч.}}^0$ , кДж/моль	$\Delta H_{f, \text{расч.}}^{0*}$ , кДж/моль	№	$\Delta H_{f, \text{расч.}}^0$ , кДж/моль	$\Delta H_{f, \text{расч.}}^{0*}$ , кДж/моль
	$\Delta H_{f, \text{calc.}}^0$ , kJ/mol	$\Delta H_{f, \text{calc.}}^{0*}$ , kJ/mol		$\Delta H_{f, \text{calc.}}^0$ , kJ/mol	$\Delta H_{f, \text{calc.}}^{0*}$ , kJ/mol
XVII	-328.39	-379.18	XVIII	-282.02	-370.43
XIX	-359.04	-405.96	XX	-309.78	-394.69
XXI	-325.57	-376.72	XXII	-268.17	-358.33
XXIII	-452.03	-487.19	XXIV	-403.36	-476.46
XXV	-420.30	-459.47	XXVI	-371.44	-448.56
XXVII	-401.41	-442.97	XXVIII	-342.18	-423.00
XXIX	-259.93	-319.37	XXX	-209.58	-307.13

Таблица 3. Окончание  
Table 3. Continued

№	$\Delta H_{f, \text{расч.}}^0$ , кДж/моль	$\Delta H_{f, \text{расч.}}^0$ , * кДж/моль	№	$\Delta H_{f, \text{расч.}}^0$ , кДж/моль	$\Delta H_{f, \text{расч.}}^0$ , * кДж/моль
	$\Delta H_{f, \text{calc.}}^0$ , kJ/mol	$\Delta H_{f, \text{calc.}}^0$ , * kJ/mol		$\Delta H_{f, \text{calc.}}^0$ , kJ/mol	$\Delta H_{f, \text{calc.}}^0$ , * kJ/mol
XXXI	-265.90	-324.59	XXXII	-242.03	-335.49
XXXIII	-359.40	-406.27	XXXIV	-304.94	-390.46
XXXV	-320.61	-372.38	XXXVI	-271.13	-360.91
XXXVII	-335.89	-385.73	XXXVIII	-285.98	-373.89
XXXIX	-484.10	-515.21	XL	-434.06	-503.28
XLI	-270.55	-328.65	XLII	-219.63	-315.91
XLIII	-481.88	-513.27	XLIV	-401.58	-474.90
XLV	-323.05	-374.51	XLVI	-274.31	-363.69

При составлении данного перечня ксантогенатов соединения выбирались таким образом, чтобы их расчетная энтальпия образования лежала в интервалах от  $-200$  до  $-500$  кДж/моль для калиевых и от  $-200$  до  $-450$  кДж/моль для натриевых. О возможности применения уравнений (1) и (2) для ксантогенатов, содержащих гетероатомы в органическом радикале, свидетельствуют проведенные авторами ранее исследования [20]. При разработке методики получения диэтиламиноэтилового ксантогената калия нами была выполнена оценка теплового эффекта реакции в адиабатических условиях. Выяснено, что изменение энтальпии реакции ксантогенирования диэтиламиноэтанола лежит пределах от  $-30$  до  $-45$  кДж/моль. При этом вычисление теплового эффекта этой реакции с учетом полученных расчетных данных дает результат  $= -29.56$  кДж/моль. Учитывая, что в реальности наряду с основной реакцией ксантогенирования протекают побочные экзотермические процессы:



## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zauer E.A. Cyclophanes: Simulation of the formation enthalpy by quantum-chemical methods. *Russ. J. Gen. Chem.* 2017;87:918-922. <https://doi.org/10.1134/S1070363217050048>
2. Zauer E.A. Enthalpy of formation of five-membered nitrogen-containing aromatic heterocycles. *Russ. J. Gen. Chem.* 2015;85:2268-2276. <https://doi.org/10.1134/S1070363215100084>
3. Zauer E.A., Zauer O.A. Calculations of the enthalpies of formation of oxygen-containing adamantane derivatives by quantum-chemical methods. *Russ. J. Phys. Chem.* 2009;83:582-586. <https://doi.org/10.1134/S0036024409040128>
4. Абрамов А.А. Флотационные методы обогащения. М.: Издательство Московского государственного горного университета и др.; 2008. 720 с.

полученное расчетное значение изменения энтальпии ксантогенирования диэтиламиноэтанола можно считать надежным.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в данной работе была установлена превосходная корреляция между экспериментальными и рассчитанными по методу AM1 значениями энтальпий образования алкилксантогенатов калия и натрия. С помощью полученных корреляционных уравнений были вычислены энтальпии образования различных ксантогенатов, органическая часть которых содержит алкильные, циклические неароматические структуры и один или два гетероатома, такие как N, O, и F. Полученные данные в дальнейшем могут быть использованы для расчета теплового эффекта реакции ксантогенирования соответствующих спиртов и проектирования производств данных ксантогенатов.

*Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.*

*The authors declare no conflicts of interest.*

## REFERENCES

1. Zauer E.A. Cyclophanes: Simulation of the formation enthalpy by quantum-chemical methods. *Russ. J. Gen. Chem.* 2017;87:918-922. <https://doi.org/10.1134/S1070363217050048>
2. Zauer E.A. Enthalpy of formation of five-membered nitrogen-containing aromatic heterocycles. *Russ. J. Gen. Chem.* 2015;85:2268-2276. <https://doi.org/10.1134/S1070363215100084>
3. Zauer E.A., Zauer O.A. Calculations of the enthalpies of formation of oxygen-containing adamantane derivatives by quantum-chemical methods. *Russ. J. Phys. Chem.* 2009;83:582-586. <https://doi.org/10.1134/S0036024409040128>
4. Abramov A.A. Flotation methods of enrichment. Moscow: Moscow State Mining University Publ.; 2008. 720 p. (in Russ.).

5. Мельников Н.Н. Пестициды. Химия, технология и применение. М.: Химия; 1987. 712 с.
6. Carta F., Akdemir A., Scozzafava A., Masini E., Supuran C.T. Xanthates and Trithiocarbonates Strongly Inhibit Carbonic Anhydrases and Show Antiglaucoma Effects *in Vivo*. *J. Med. Chem.* 2013;56(11):4691-4700. <https://doi.org/10.1021/jm400414j>
7. Вальдман А.И., Панфилов Б.И., Вальдман Д.И., Навроцкий В.А. Ксантогенирование спиртов. Сообщение 1. Исследование кинетики реакции ксантогенирования алифатических спиртов C1–C7 нормального строения в водном растворе гидроксида калия. Деп. ОНИИТЭХИМ. Черкассы, 1984. № 476хп-Д84.
8. Вальдман А.И., Панфилов Б.И., Вальдман Д.И. Ксантогенирование спиртов. Сообщение 2. Исследование кинетики реакции ксантогенирования алифатических спиртов C1–C7 нормального строения в водном растворе гидроксида натрия. Деп. ОНИИТЭХИМ. Черкассы, 1984. № 477хп-Д84.
9. Вальдман А.И., Панфилов Б.И., Вальдман Д.И., Навроцкий В.А. Ксантогенирование спиртов. Сообщение 3. Кинетические закономерности реакции ксантогенирования алифатических спиртов C3–C5 изостроения в водном растворе гидроксида щелочного металла. Деп. ОНИИТЭХИМ. Черкассы, 1984. № 478хп-Д84.
10. Царенко С.В., Вальдман А.И., Панфилов Б.И., Вальдман Д.И. Калориметрическое исследование кинетики реакции ксантогенирования алифатических спиртов в водном растворе едкого натра. *Известия вузов. Серия химия и химическая технология.* 1979;26(1):1054-1058.
11. Хардин А.П., Вальдман А.И., Гнатюк П.П., Панфилов Б.И., Вальдман Д.И., Лисаченко Л.А. Исследование кинетики процесса получения изопропилксантогената натрия. *Химическая промышленность.* 1983;28(3):143-144.
12. Савельянов В.П., Савельянова Р.Т., Утробин Н.П., Рудакова Т.В. Способ получения алкилксантогенатов. А. с. 727641 (1977), Б. И. 1980. № 14.
13. Царенко С.В., Гнатюк П.П., Захарова Л.А., Нищенко Н.С., Утробин Н.П. Способ получения щелочных алкилксантогенатов спиртов C<sub>5</sub>–C<sub>7</sub>. А. с. 737397 СССР. Заявка № 2473114; заявл. 13.04.1977; опубл. 30.05.1980. Бюл. № 20.
14. Hummel K., Sherm A. Xanthates as antitumor agents: USA Pat. 4981869. 01.01.1991.
15. Трофимов Б.А., Иванова Н.И., Амосова С.В., Леонов С.Б., Белькова О.Н., Рогинская Л.В., Чеботарева Е.Г. Винилоксиэтилксантогенат калия как собиратель для флотации полиметаллических руд: А. с. 910615 СССР. Заявка № 2967113; заявл. 29.05.1980; опубл. 07.03.1982. Бюл. № 9.
16. Ларионов С.В., Косарева Л.А. Комплексообразующие свойства трифторэтилксантогенат-иона и летучесть его внутрикомплексных соединений. *Известия АН СССР. Серия химическая.* 1976;25(7):1451-1455.
17. Базанова Н.М., Лившиц А.К., Гурвич С.М. Способ флотационного обогащения медно-никелевых руд: А. с. 126816 СССР. Заявка № 628266/22; заявл. 18.05.1959; опубл. 1960. Бюл. № 6.
18. Gorgulu A.O., Celikkan H., Arslan M. The Synthesis, Characterization and Electrochemical Behavior of Transition Metal Complexes Containing Nitrogen Heterocyclic Sulphur Donor Ligand. *Acta Chim. Slov.* 2009;56:334-339.
19. Томиока М., Хасегава К. Стереизомеры трициклодекан-9-ил ксантогената: Пат. 2470915 РФ. Заявка № 2010103459/04; заявл. 03.07.2008; опубл. 27.12.2012. Бюл. № 36.
20. Попов Ю.В., Долгачев А.С., Шишкин Е.В. Синтез диэтиламиноэтилового ксантогената калия. *Известия ВолгГТУ. Серия «Химия и технология элементорганических мономеров и полимерных материалов».* 2015;(4):35-37.
5. Melnikov N. N. *Pestitsidy. Khimiya, tekhnologiya i primenenie* (Pesticides. Chemistry, technology and application). Moscow: Chemistry; 1987. 712 p. (in Russ.).
6. Carta F., Akdemir A., Scozzafava A., Masini E., Supuran C.T. Xanthates and Trithiocarbonates Strongly Inhibit Carbonic Anhydrases and Show Antiglaucoma Effects *in Vivo*. *J. Med. Chem.* 2013;56(11):4691-4700. <https://doi.org/10.1021/jm400414j>
7. Waldman A.I., Panfilov B.I., Waldman D.I., Navrotsky V.A. Xanthogenation of alcohols. Message 1. Investigation of the kinetics of the xanthogenation reaction of aliphatic alcohols C1–C7 of normal structure in an aqueous solution of potassium hydroxide. DEP. ONIITEKHIM. Cherkassy, 1984. No. 476 HP-D84 (in Russ.).
8. Waldman, A.I., Panfilov, B.I., Waldman D.I. Xanthogenation of alcohols. Message 2. Investigation of the kinetics of the xanthogenation reaction of aliphatic alcohols C1–C7 of normal structure in an aqueous solution of sodium hydroxide. DEP. ONIITEKHIM. Cherkassy, 1984. No. 477hp-D84 (in Russ.).
9. Waldman A.I., Panfilov B.I., Waldman D.I., Navrotsky V.A. Xanthogenation of alcohols. Message 3. Kinetic regularities of the reaction of xanthogenation of aliphatic alcohols C3–C5 from oxidation in an aqueous solution of alkali metal hydroxide. DEP. ONIITEKHIM. Cherkassy, 1984. No. 478 HP-D84 (in Russ.).
10. Tsarenko S.V., Waldman A.I., Panfilov B.I., Waldman D.I. Calorimetric study of the kinetics of the reaction of xanthogenation of aliphatic alcohols in an aqueous solution of caustic soda. *Izvestiya Vuzov. Seriya khimiya i khimicheskaya tekhnologiya = Russ. J. Chem. Chem. Technol.* 1979;26(1):1054-1058 (in Russ.).
11. Hardin A.P., Waldman A.I., Gnatyuk P.P., Panfilov B.I., Waldman D.I., Lisachenko L.A. Investigation of the kinetics of the process of obtaining sodium isopropylxanthogenate. *Chemical industry.* 1983;28(3):143-144 (in Russ.).
12. Savelyanov V.P., Savelyanova R.T., Utrobin N.P., Rudakova T.V. Method of preparing alkylxanthogenates. USSR Pat. 727641, 15.04.1980 (in Russ.).
13. Tsarenko S.V., Gnatyuk P.P., Zakharova L.A., Nishchenkova N.S., Utrobin N.P. Method of preparing C<sub>5</sub>–C<sub>7</sub> alcohol alkaline alkylxanthogenates. USSR Pat. 737397. 30.05.1980 (in Russ.).
14. Hummel K., Sherm A. Xanthates as antitumor agents: USA Pat. 4981869. 01.01.1991.
15. Trofimov B.A., Ivanova N.I., Amosova S.V., Leonov S.B., Belkova O.N., Roginskaya L.V., Chebotareva E.G. Potassium vinyloxyethylxanthogenate as collecting agent for flotation of polymetallic ores. USSR Pat. 910615. 07.03.1982 (in Russ.).
16. Larionov S.V., Kosareva L.A. Complexing properties of the trifluoroethyl xanthate ion and volatility of its intracomplex compounds. *Russian Chemical Bulletin.* 1976;25(7):1388-1391 (in Russ.).
17. Bazanova N.M., Gurvich S.M., Livshits A.K. Method for flotation concentration of copper-nickel ores. USSR Pat. 126816. 1960 (in Russ.).
18. Gorgulu A.O., Celikkan H., Arslan M. The Synthesis, Characterization and Electrochemical Behavior of Transition Metal Complexes Containing Nitrogen Heterocyclic Sulphur Donor Ligand. *Acta Chim. Slov.* 2009;56:334-339.
19. Tomioka M., Hasegawa K. Tricyclodecan-9-yl xanthogenate stereoisomers. RF Pat. 2470915. 27.12.2012 (in Russ.).
20. Popov Yu.V., Dolgachev A.S., Shishkin E.V. Synthesis of diethylaminoethyl potassium xanthate *Izvestia VSTU. Chemistry and Technology of Hetero-Organic Monomers and Polymer Materials.* 2015;(4):35-37 (in Russ.).

**Об авторах:**

**Попов Юрий Васильевич**, доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой технологии органического и нефтехимического синтеза Волгоградского государственного технического университета (400005, Россия, Волгоград, пр-т им. В.И.Ленина, 28). E-mail: popov@vstu.ru. Scopus Author ID 26028090100, <https://orcid.org/0000-0001-5659-028X>

**Долгачев Александр Сергеевич**, начальник инженерного центра АО «Волжский Оргсинтез» (404117, Россия, Волгоградская область, г. Волжский, ул. Александрова, 100). E-mail: 30011@zos-v.ru.

**Шишкин Евгений Вениаминович**, доктор химических наук, профессор кафедры «Технология органического и нефтехимического синтеза», декан химико-технологического факультета Волгоградского государственного технического университета (Россия, 400005, г. Волгоград, проспект им. В.И. Ленина, д. 28). E-mail: shishkin@vstu.ru. Scopus Author ID 7004314557, <https://orcid.org/0000-0002-2994-422X>

**Зотов Юрий Львович**, доктор химических наук, профессор кафедры «Технология органического и нефтехимического синтеза» Волгоградского государственного технического университета (Россия, 400005, г. Волгоград, проспект им. В.И. Ленина, д. 28). E-mail: ylzotov@mail.ru. Scopus Author ID 7003371961, <https://orcid.org/0000-0001-6301-0570>

**Шишкин Вениамин Евгеньевич**, доктор химических наук, профессор кафедры технологии органического и нефтехимического синтеза Волгоградского государственного технического университета (400005, Россия, Волгоград, пр-т им. В.И.Ленина, 28). E-mail: shishkin@vstu.ru. Scopus Author ID 7005233691, <https://orcid.org/0000-0002-3485-4413>

**About the authors:**

**Yuriy V. Popov**, Dr. of Sci. (Chemistry), Professor, Head of the Department of Organic and Petrochemical Synthesis Technology, Volgograd State Technical University (28, pr. im. V.I. Lenina, Volgograd, 400005, Russia). E-mail: popov@vstu.ru. Scopus Author ID 26028090100, <https://orcid.org/0000-0001-5659-028X>

**Aleksandr S. Dolgachev**, Head of the Engineering Center, Volzhskii Orgsintez (100, Aleksandrova ul., Volzhskii, Volgograd oblast, 404117, Russia). E-mail: 30011@zos-v.ru.

**Eugeniy V. Shishkin**, Dr. of Sci. (Chemistry), Associate Professor, Dean of the Chemical Technology Faculty, Volgograd State Technical University (28, pr. im. V.I. Lenina, Volgograd, 400005, Russia). E-mail: shishkin@vstu.ru. Scopus Author ID 7003414557, <https://orcid.org/0000-0002-2994-422X>

**Yuriy L. Zotov**, Dr. of Sci. (Chemistry), Professor, Department of Organic and Petrochemical Synthesis Technology, Volgograd State Technical University (28, pr. im. V.I. Lenina, Volgograd, 400005, Russia). E-mail: ylzotov@mail.ru. Scopus Author ID 7003371961, <https://orcid.org/0000-0001-6301-0570>

**Veniamin E. Shishkin**, Dr. of Sci. (Chemistry), Professor, Department of Organic and Petrochemical Synthesis Technology, Volgograd State Technical University (28, pr. im. V.I. Lenina, Volgograd, 400005, Russia). E-mail: shishkin@vstu.ru. Scopus Author ID 7005233691, <https://orcid.org/0000-0002-3485-4413>

*Поступила: 08.10.2019; Получена после доработки: 03.02.2020; Принята к опубликованию: 08.04.2020.  
Submitted: October 08, 2019; Reviewed: February 03, 2020; Accepted: April 08, 2020.*