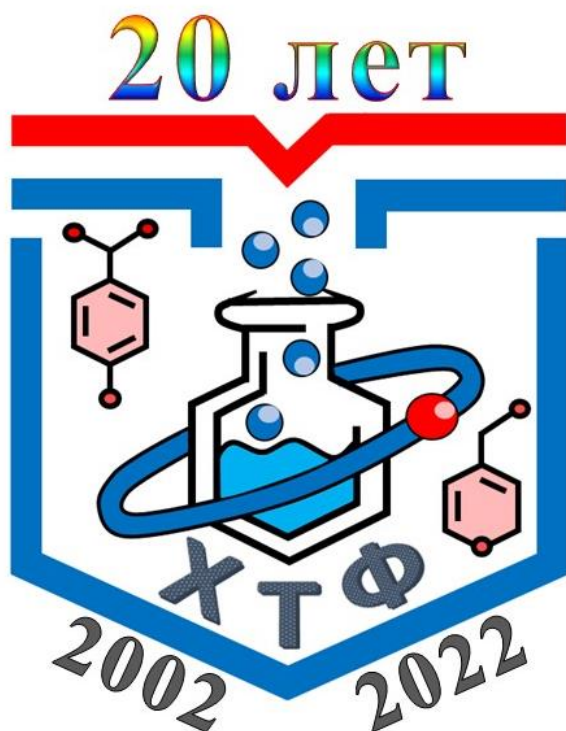


Министерство науки и высшего образования  
Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Тверской государственный университет»



ПОСВЯЩЕНА  
ДВАДЦАТИЛЕТИЮ  
ОБРАЗОВАНИЯ  
ХИМИКО-  
ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО  
ФАКУЛЬТЕТА

XXI НАУЧНАЯ  
КОНФЕРЕНЦИЯ  
АСПИРАНТОВ И  
СТУДЕНТОВ ХИМИКО-  
ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО  
ФАКУЛЬТЕТА

Тезисы докладов

23 мая, Тверь  
2022 г.

Ответственный за выпуск  
доцент, к.х.н. Н.П. Русакова

В сборнике представлены тезисы докладов научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов химико-технологического факультета Тверского государственного университета 2022 года в количестве 68 материалов. Доклады сгруппированы по секциям, соответствующим научным направлениям кафедр.



## Оглавление

<b>Секция биохимии и биотехнологий .....</b>	<b>8</b>
1. <a href="#"><u>Карпова К.А.</u></a> Технологии производства желеиногo мармелада .....	9
2. <a href="#"><u>Лазаренко С.С.</u></a> Технология производства мягких грильяжных конфеТных масс и оценка качества изделий из них .....	10
3. <a href="#"><u>Паршина М.Н.</u></a> Производство функциональных мучных кондитерских изделий .....	11
4. <a href="#"><u>Смирнова И.В., Смирнова Е.С.</u></a> Анализ сдобных хлебобулочных изделий на примере слойки свердловской .....	12
<b>Секция неорганической и аналитической химии .....</b>	<b>13</b>
1. <a href="#"><u>Абрамеева А.С.</u></a> Квантово-химическое моделирование карбонилoв металлов .....	14
2. <a href="#"><u>Бабошина А.А.</u></a> Квантово-химическое исследование комплексов металлов с основанием Шиффа .....	15
3. <a href="#"><u>Биткова В.В.</u></a> Определение сульфаниламидов в лекарственных препаратах методом нитритометрии .....	16
4. <a href="#"><u>Бондарева Т.Д.</u></a> Структура комплекса европия (III) с хлоринoм Е6 по результатам квантовохимического расчета .....	17
5. <a href="#"><u>Варзар А.А., Сутугина К.А.</u></a> Анализ смеси цефазолина и цефуроксима методом тонкослойной хроматографии .....	18
6. <a href="#"><u>Гигава А.М.</u></a> Изучение методом DFT комплексов платины с пиридин-производными .....	19
7. <a href="#"><u>Глафилова А.В.</u></a> Анализ косметического крема на содержание цинка .....	20
8. <a href="#"><u>Ельченинов П.С.</u></a> Ионоселективный электрод для определения аскорбиновой кислоты .....	21



9.	<a href="#"><u>Ермолаева А.А.</u></a>	Компьютерное моделирование молекулы фталоцианина кобальта .....	22
10.	<a href="#"><u>Зуева А.С.</u></a>	Титриметрический анализ аспирина различных производителей .....	23
11.	<a href="#"><u>Иванова А.А.</u></a>	DFT расчёт структуры комплекса этилендиаминтетраацетатааквамагния .....	24
12.	<a href="#"><u>Козликова Е.Е.</u></a>	Идентификация морской капусты по содержанию йода .....	25
13.	<a href="#"><u>Козлова Е.Д.</u></a>	Спекрофотометрическое определение ЭДТА в воде .....	26
14.	<a href="#"><u>Кравец О.Б.</u></a>	Физико-химические методы анализа комбинированных лекарственных средств .....	27
15.	<a href="#"><u>Крылов А.А.</u></a>	Выбор функционала и базиса для DFT расчёта двугранного угла в молекуле дифенила .....	28
16.	<a href="#"><u>Ксенофонтова С.Д.</u></a>	Ионоселективный электрод для определения сотагексала в фармацевтических препаратах.....	29
17.	<a href="#"><u>Макарова Е.А.</u></a>	Компьютерное моделирование комплексов лантаноидов с ампициллином .....	30
18.	<a href="#"><u>Попова В.А.</u></a>	Количественное определение микроэлементов в продуктах питания.....	31
19.	<a href="#"><u>Салазкин Н.С.</u></a>	Интенсификация скорости сорбции редкоземельных элементов под влиянием электрогидродинамических эффектов второго рода. ....	32
20.	<a href="#"><u>Свидерская О.В.</u></a>	Сравнительный анализ воды питьевого назначения из разных источников Москвы .....	33
21.	<a href="#"><u>Скобин М.И., Крюков Т.В.</u></a>	Синтез и спектроскопическое исследование твердого комплекса иттербия с гепарином .....	34
22.	<a href="#"><u>Уварова С.С.</u></a>	Анализ стеаратов II-A подгруппы в мезиме и панкреатине .....	35
23.	<a href="#"><u>Федорова А.А.</u></a>	Метод анализа цинка оксихинолином в присутствии меди .....	36



24.	<a href="#">Филатова М.А.</a>	Квантово-химическое исследование процессов комплексообразования N,N-диметилбигуанидина с катионами d-металлов .....	37
25.	<a href="#">Шачнева К.С.</a>	Спектрофотометрическое и титриметрическое определение сульфаниламида в лекарственных препаратах .....	38
<b>Секция органической химии .....</b>			<b>39</b>
1.	<a href="#">Арефьев А.А.</a>	Изучение каталитической активности хлоралюминатных ионных жидкостей в реакции алкилирования бензола дихлорметаном.....	40
2.	<a href="#">Барсукова В.В.</a>	Получение со-эмульгатора на основе олеиновой кислоты и исследование его свойств.....	41
3.	<a href="#">Барсукова Е.В.</a>	Разделение пигментов листа наперстянки пурпурной методом бумажной хроматографии .....	42
4.	<a href="#">Васильева Д.В.</a>	Получение димерного поверхностно-активного вещества ацилированием неанола 9-12 .....	43
5.	<a href="#">Веролайн В.А.</a>	Получение и исследование свойств N-додеканоилоксиэтил-N,N-диметиламмонийпропионата.....	44
6.	<a href="#">Веселова А.В.</a>	Получение алкилполигликозидов ферментативным способом .....	45
7.	<a href="#">Воробьева А.О.</a>	Синтез и исследование электропроводности тетрахлорферратов N-алкилпиридиния .....	46
8.	<a href="#">Гальцова В.В.</a>	Микроэмульгирование гидрофобных растворителей в водных растворах Твин-80 .....	47
9.	<a href="#">Данилова Д.А.</a>	Синтез диэфиров на основе неионогенных поверхностно-активных веществ и янтарной кислоты.....	48
10.	<a href="#">Жевлакова Я.А.</a>	Влияние высокочастотного электромагнитного поля на свойства поверхностно-активных веществ .....	49
11.	<a href="#">Ковальчук К.М.</a>	Исследование влияния силиконакрилового поверхностно-активного вещества на устойчивость суспензий ментола .....	50



12. [Кофейникова А.М.](#)  
Четвертичные соли N-метилморфолина..... 51
13. [Кружков С.М.](#)  
Функциональные добавки и их влияние на свойства  
водно-дисперсионных полиакриловых красок ..... 52
14. [Кудряшова Е.А.](#)  
Получение азогидразонов на основе  
2-гидроксипропановой кислоты ..... 53
15. [Лебедев И.И.](#)  
Влияние структуры аммониевых ионных жидкостей на  
эквивалентную электропроводность их растворов ..... 54
16. [Машкин Л.О.](#)  
Исследование антирадикальной активности природных  
и синтетических антиоксидантов ..... 55
17. [Михайлова В.А.](#)  
Исследование свойств четвертичных солей аминов с  
металлосодержащим комплексным ионом..... 56
18. [Просьяник Ю.А.](#)  
Исследование пенообразующих свойств растворов  
кокамидопропил бетаина..... 57
19. [Рассказова Н.Ю.](#)  
Влияние природы аниона в пиридиниевых ионных жидкостях  
на размер наночастиц сульфида цинка ..... 58
20. [Суратова Е.С.](#)  
Получение пиридиниевых ионных жидкостей для их использования  
в синтезе наночастиц ..... 59
21. [Сурнина В.А.](#)  
Получение биоразлагаемого олигомера молочной кислоты ..... 60
22. [Сырова Е.М.](#)  
Синтез азотсодержащих лигандов на основе семикарбазида..... 61
23. [Тарабанова А.А.](#)  
Синтез сукцинилглицерида методом азеотропной этерификации ..... 62
24. [Шамарина К.А.](#)  
Влияние степени наполнения полимера лестосила  
на его термическую стабильность..... 63
25. [Шамахов В.И.](#)  
Определение содержания полифенолов в различных сортах пива..... 64



<b>Секция физической химии.....</b>	<b>65</b>
1. <a href="#"><u>Барсегян Т.А.</u></a> Формирования наночастиц серебра в цистеин-серебряном растворе под действием УФ излучения в сравнении с действием видимого излучения.....	66
2. <a href="#"><u>Бойкова С.С.</u></a> Кислые L-аминокислоты. Квантовая теория атомов в молекулах.....	67
3. <a href="#"><u>Ватаманюк В.О.</u></a> Исследование полимерных пористых материалов методом ИК-спектроскопии .....	68
4. <a href="#"><u>Волкова В.М.</u></a> Зелёный синтез наночастиц серебра с использованием водных экстрактов листьев клёна .....	69
5. <a href="#"><u>Воробьев А.А.</u></a> Спектроскопический подход для оценки стабильности прямых эмульсий .....	70
6. <a href="#"><u>Козлова Р.Р.</u></a> Теория графов в изучении корреляций структура – теплоёмкость двухатомных спиртов .....	71
7. <a href="#"><u>Мананникова М.Д.</u></a> Атомно-абсорбционный метод определения марганца в створах Иваньковского водохранилища.....	72
8. <a href="#"><u>Москаленко А.Б.</u></a> Топологический подход в изучении энтальпии образования карбоновых кислот.....	73
9. <a href="#"><u>Нефедова И.А., Шостак М.С.</u></a> Заряд сульфогруппы в сульфонах и влияние на него заместителя.....	74
10. <a href="#"><u>Родькин В.А.</u></a> Квантовохимическое моделирование пентамера винилиденфторида .....	75
11. <a href="#"><u>Смирнова К.А.</u></a> Исследование механической прочности пленок на основе водных растворов L-цистеина, нитрата серебра и поливинилового спирта .....	76
12. <a href="#"><u>Соловьева Е.Д.</u></a> Флуориметрическое определение нефтепродуктов в реках г. Твери.....	77



13. [Тимофеева Е.В.](#)  
Распределение электронной плотности  
в 2-(метиламино)-1-(4-метилфенил) этаноне ..... 78
14. [Щенухина А.С.](#)  
QТАІМ заряды групп метилового красного..... 79





## ***Секция биохимии и биотехнологий***

## Технологии производства желейного мармелада

Карпова К.А. (бакалавр, 5 курс)

Научный руководитель: ст. преподаватель Кудряшова Н.А.

Технология мармелада основана на свойстве пектина загущать продукт. Пектин – вещество, которое содержится практически во всех фруктах и ягодах. Помимо пектина, в технологии сладости используются другие загустители – агар-агар и желатин [1].

Цель работы: изучить традиционные технологии производства желейного мармелада.

Объект исследования: Технологии производства мармелада.

Предмет исследования: Желейный мармелад.

Производство складывается из следующих стадий: подготовка сырья; замочка, набухание, промывание агара; приготовление агаро-сахаро-паточного сиропа; охлаждение агаро-сахаро-паточного сиропа; разделка агаро-сахаро-паточного сиропа; разливка желейной массы, студнеобразование мармелада, выборка его из форм и раскладка на решетка; обсыпка мармелада сахаром и подсушка (выстойка) его; сушка; охлаждение; укладка, упаковка, маркировка [2]. Результаты физико-химического анализа представлены в Таблице.

Таблица: Физико-химические показатели образцов мармелада

Наименование показателя	Требования ГОСТ	Фактические показатели		
		Образец №1	Образец №1	Образец №1
Массовая доля влаги, %	15-22	17,8	18,8	18,2
Массовая доля общей сернистой кислоты, %, не более	0,1	0,0001	0,0010	0,0005
Соответствие/ несоответствие ГОСТ		Соответствует	Соответствует	Соответствует

Вывод: Все образцы соответствуют требованиям ГОСТа

1. Румянцева, В.В. Технология кондитерского производства: конспект лекций для вузов / В.В. Румянцева. – Орел: ОрелГТУ, 2009 –141 с.



## **Технология производства мягких грильяжных конфетных масс и оценка качества изделий из них**

Лазаренко С.С. (бакалавр, 5 курс)

Научный руководитель: ст. преподаватель Кудряшова Н.А.

Согласно ГОСТ 4570–2014 «Конфеты. Общие технические условия»:

Конфета - формованное сахаристое кондитерское изделие из одной или нескольких конфетных масс, определяющих идентификационный признак конфеты. Для производства конфет применяют следующие грильяжные массы: твердую, мягкую, фруктово-(овоще) грильяжную. По идентификационным признакам конфеты должны соответствовать требованиям, предъявляемым к соответствующим конфетным массам [1].

Производство мягких грильяжных конфетных масс и изделий из них включает в себя следующие технологические стадии: 1)Подготовка сырья к производству; 2)Замешивание конфетной массы; 3)Охлаждение конфетной массы; 4)Резка раскатанной массы на порции; 5)Глазировка; 6)Охлаждение; 7)Упаковка [2].

При оценке качества образцов: №1 - «Метеоритный Дождь» (ООО «ПО МасКа»), №2 - «Паркур» MINI» (ООО «Невский кондитер Мокшан), №3 – «Свердловский метеорит» (ООО «ПШК»), №4 - «Грильяжные» (ООО "Красный Октябрь") установлено, что по физико-химическим показателям (массовая доля влаги) все образцы соответствуют требованиям ГОСТ 4570-2014. По органолептическим показателям у образца №2 - вкус и запах не свойственен основному составу компонентов конфет, остальные образцы показали соответствие установленным нормам ГОСТ.

1. ГОСТ 4570-2014 «Конфеты. Общие технические условия».
2. Лурье И. С. «Технология кондитерского производства». — М.: Агропром- издат, 1992. — 399 с.



## **Производство функциональных мучных кондитерских изделий**

Паршина М.Н. (студентка 3 курса)

Научный руководитель: ст. преп. Лихуша П.С

Функциональный пищевой продукт – специальный пищевой продукт, предназначенный для систематического употребления в составе пищевых рационов всеми возрастными группами здорового населения, обладающий научно обоснованными и подтвержденными свойствами, снижающий риск развития заболеваний, связанных с питанием, предотвращающий дефицит или восполняющий имеющийся в организме человека дефицит пищевых веществ, сохраняющих и улучшающих здоровье за счет наличия в его составе функциональных пищевых ингредиентов.

Для изучения данной темы, была произведена контрольная закупка тверского производителя, на упаковке которого указывалось, что используются пищевые волокна и зерновые добавок.

В результате анализа продукции, можно отметить, что производитель не обманул своих потребителей, образцы печенья богаты пищевыми волокнами и функциональными добавками. Продукция популярного тверского производителя соответствует ГОСТ и указанным на упаковке качествам, что говорит о добросовестном производителе. Из полученных данных можно сделать выводы, что все добавки, имеющие в популярных видах печенья безопасны и полезны для людей

1. ГОСТ 24901-2014 «Печенье. Общие технические условия»
2. ГОСТ Р 52349-2005 «Продукты пищевые функциональные. Термины и определения»
3. Чубенко, Н.Т. Хлеб как функциональный продукт-какой он [Текст]/Н.Т. Чубенко// Хлебопечение России.-№ 3.-2010

## Анализ сдобных хлебобулочных изделий на примере слойки свердловской

Смирнова И.В., Смирнова Е.С. (бакалавры, 3 курс)

Научный руководитель: ст. преподаватель Кудряшова Н.А.

Согласно классификации ГОСТ 9511-80 «Изделия хлебобулочные слоеные. Технические условия» слойка свердловская имеет квадратную или прямоугольную форму светло-коричневого цвета с притисками, отделана отделочной крошкой, мякиш хорошо пропеченный, без следов непромеса, сладковатая на вкус со свойственным ей запахом, массой 100 г.

Объектами исследования явились образцы слойки свердловской трех производителей: Образец №1 – ЗАО «Хлеб», ГОСТ 9511-80; Образец №2 – АО «Хлебокомбинат «Пролетарец», ГОСТ 9511-80; Образец №3 – АО «Хлебозавод №28», ГОСТ 9511-80. Анализ показателей качества проводился согласно ГОСТ 9511-80. По органолептическим показателям у всех испытуемых образцов отклонений не выявлено. Результаты физико-химического анализа представлены в Таблице №1:

Таблица: Физико-химические показатели образцов слойки свердловской

Наименование показателя	Требования ГОСТ	Фактические показатели		
		Образец №1	Образец №2	Образец №3
Влажность мякиша, %, не более	35,0	30,4	32,6	29,9
Кислотность мякиша, град, не более	2,5	2,0	2,2	1,9
<b>Соответствие / несоответствие ГОСТ</b>		<b>Соответствует</b>	<b>Соответствует</b>	<b>Соответствует</b>

По итогам исследования можно сделать вывод, что все образцы по органолептическим и физико-химическим показателям соответствуют ГОСТ 9511-80. Наилучшие значения показал образец №3.

1. ТР ТС 021/2011 «О безопасности пищевой продукции»
2. ГОСТ9511-80 «Изделия хлебобулочные слоеные. Технические условия».



**Секция неорганической и аналитической химии**

## **Квантово-химическое моделирование карбониллов металлов**

Абрамеева А.С. (студент, 5курс)

Научный руководитель: к.х.н., доцент Веселов И.Н.

Для шести соединений карбониллов металлов было проведено компьютерное моделирование методом DFT. Исследованы следующие соединения, имеющие различную геометрию: тетракарбонилникель  $\text{Ni}(\text{CO})_4$  (тетраэдр), пентакарбонилжелезо  $\text{Fe}(\text{CO})_5$  (тригональная бипирамида), гексакарбонилхром  $\text{Cr}(\text{CO})_6$  и гексакарбонилмолибден  $\text{Mo}(\text{CO})_6$  (октаэдр), нонакарбонилдижелезо  $\text{Fe}_2(\text{CO})_9$  (структура «фонарь») и декакарбонилдимарганец  $\text{Mn}_2(\text{CO})_{10}$  (незеркальный диоктаэдр).

Применялись следующие функционалы: B3LYP, B3LYP-D3, PBE, PBE-D3, M06, M06-D3 и базисы: 6-31G++\*\*, LACV3P++\*\*, LANL2DZ.

В ходе исследования были сопоставлены рассчитанные значения длин связей и ИК-спектры с ранее известными экспериментальными данными. Выяснено, что все использованные функционалы и базисные наборы применимы к исследуемым структурам. Погрешность варьируется в диапазоне от 0-6%. Однако есть некоторые исключения. Данные по структуре октаэдра  $\text{Cr}(\text{CO})_6$  отсекают базисный набор LANL2DZ (погрешность достигает 11,5%). Структура  $\text{Fe}(\text{CO})_5$  функционалами PBE/PBE-D3 оптимизируется с погрешностью, достигающей 7,5%. Также для  $\text{Fe}_2(\text{CO})_9$  применение этих функционалов ведет к погрешности 13%. При применении функционалов M06 и M06-D3 для той же структуры «фонарь» происходит нарушение точности расчетов, относительно других функционалов. Следует отметить, что функционалы PBE/PBE-D3 хорошо оптимизируют металлическую связь в структуре  $\text{Mn}_2(\text{CO})_{10}$ .

Проведенный эксперимент доказывает, что функционалы B3LYP/B3LYP-D3 и M06/ M06-D3 являются функционалами общего применения. А PBE/PBE-D3 предпочтительно применим к металлическим структурам.

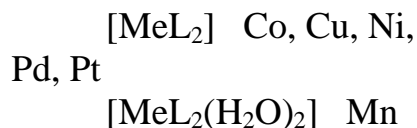
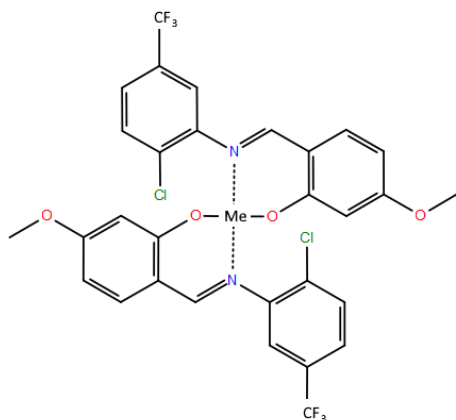
## Квантово-химическое исследование комплексов металлов с основанием Шиффа

Бабошина А.А. (студент, 4курс)

Научный руководитель: к.х.н., доцент Веселов И.Н.

Основания Шиффа представляют собой комплексы с альдегидными или кетонными соединениями, в которых карбонильная группа заменена азометиновой или иминной группой. Способны образовывать комплексы различными переходными металлами, в том числе в высокой степени окисления, стабилизируя их. Они обычно используются в промышленных целях, как катализаторы, а также проявляют широкий спектр биологической активности, вследствие чего рассматриваются как возможные антибактериальные, противовирусные и противораковые препараты.

В работе методом функционала плотности (DFT B3LYP-D3/LACV3P\*\*++) были изучены комплексы с металлами Co, Cu, Mn, Ni, Pd и Pt в степени окисления II.



Комплексы имеют плоскоквадратную или октаэдрическую (Mn) геометрию. Были рассчитаны колебательные спектры, распределение электронной плотности и значения энергий для наивысшей занятой (HOMO) и низшей вакантной молекулярной орбитали (LUMO). За счет наличия электроноакцепторного заместителя (CF<sub>3</sub>) сильно смещается электронная плотность, увеличивается энергетический зазор и тем самым комплексы проявляют более выраженные оптические и биологические свойства.



## Определение сульфаниламидов в лекарственных препаратах методом нитритометрии

Биткова В.В. (студент, 5 курс)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Баранова Н.В.

Титриметрия нашла широкое применение в фармацевтическом анализе, поскольку является абсолютным методом и не требует использования стандартных образцов, а также характеризуется экономичностью, так как исключает применение дорогостоящего оборудования. Нитритометрия – метод титриметрического анализа, в котором в качестве титранта выступает раствор  $\text{NaNO}_2$ . Данный метод используется для количественного анализа соединений, в составе которых имеется первичная ( $-\text{NH}_2$ ) или вторичная ( $-\text{NH}-$ ) ароматическая аминогруппа, а также при определении гидразидов и ароматических нитросоединений после предварительного восстановления нитрогруппы до аминогруппы.

Методом нитритометрии [1] было определено количественное содержание сульфаниламидов в лекарственных препаратах.

Таблица 1. Результаты нитритометрического определения сульфаниламидов

Объект исследования	$m_{\text{теор}}$ , Г	$m_{\text{пр}}$ , Г
Стрептоцид ООО «Люми»	0,2500	0,2531
Стрептоцид ООО «Лекарь»	0,2500	0,2502
Сульгин ОАО «Ирбитский химфармзавод»	0,2083	0,1985
Бисептол АО «Адамед Фарма», г.Пабянице, Польша	0,1181	0,1212
Ко-тримаксазол ОАО "Фармстандарт-Лексредства", г. Курск, Россия	0,1356	0,1408

В результате проведенного анализа можно сделать вывод о соответствии содержания определяемых компонентов заявленному и, соответственно, о подлинности данных препаратов.

1. Государственная фармакопея Российской Федерации. XIII изд. – Т. 1-3. – М.: 2015.

## Структура комплекса европия (III) с хлорином Е6 по результатам квантовохимического расчета

Бондарева Т.Д. (студентка 5 курса)

Научный руководитель: профессор, д.х.н. Алексеев В.Г.

Комплекс европия (III) с хлорином е6 предложен в качестве фотосенсибилизатора для фотодинамической терапии онкологических заболеваний. Комплекс был изучен различными физико-химическими методами [1], однако структура его координационной сферы не была точно установлена. Целью данной работы было создание компьютерной модели комплекса для оценки координационных возможностей лиганда. Структура комплекса рассчитана методом DFT/PW6B95-D3/CSDZ\*\*++ . Расчёт показал, что наиболее вероятным вариантом является координация лиганда через атомы кислорода карбоксилатных групп. При этом две группы координированы бидентатно, а одна монодентатно.

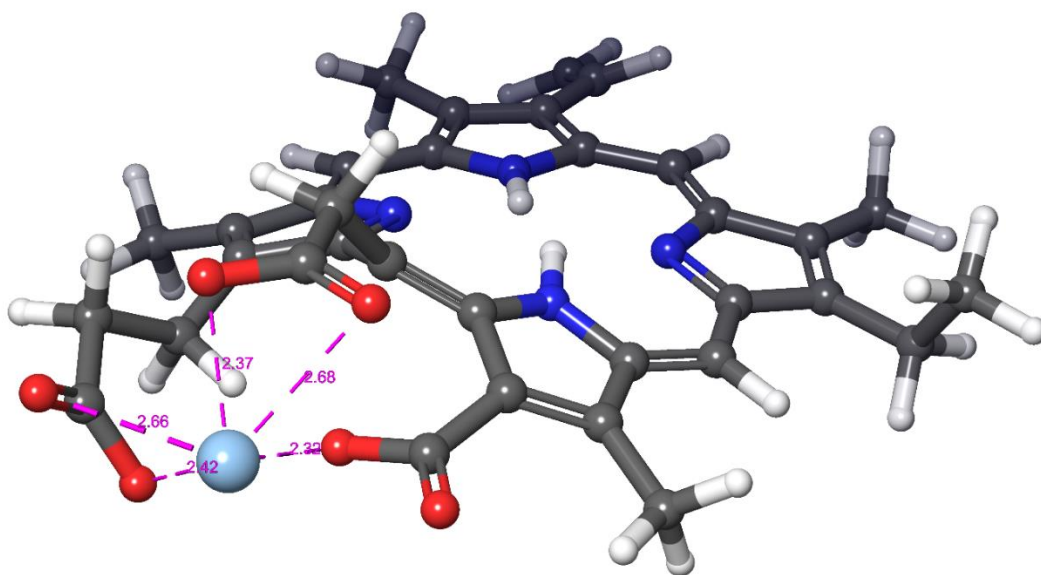


Рис.1. Структура комплекса европия (III) с хлорином е6 рассчитанная методом DFT/PW6B95-D3/CSDZ\*\*++

1. Стеблевская Н. И., Медкова М. А., Белобелецкая М. В. // Журнал неорганической химии. – 2020. – № 3. – С. 327-333.

## Анализ смеси цефазолина и цефуроксима методом тонкослойной хроматографии

Варзар А.А., Сутугина К.А. (студенты, 4 год обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Минина М.В.

Цефазолин и цефуроксим – цефалоспориновые антибиотики I и II поколения соответственно, обладающие широким спектром действия. Относятся к антибиотикам кислотного типа. В настоящее время цефазолин и цефуроксим широко используются в медицинской практике. В то же время продолжается поиск новых экспрессных методов определения антибиотиков в биологических жидкостях, продуктах питания.

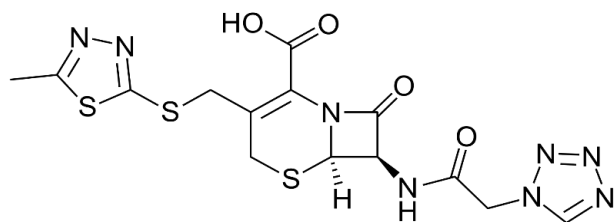


Рис 1. Структурная формула молекулы цефазолина

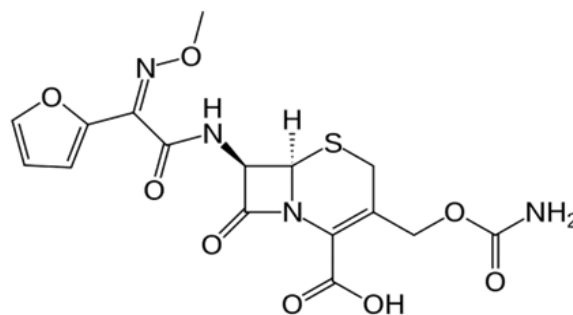


Рис 2. Структурная формула молекулы цефуроксима

Методом тонкослойной хроматографии проведен анализ смеси цефазолина и цефуроксима, подобраны оптимальные условия хроматографического определения цефалоспоринов в лекарственных смесях, биологических жидкостях и продуктах питания [1]. Для проведения эксперимента использовали: хроматографическую пластинку на закрепленном слое, элюент, состав которого: бутанол, уксусная кислота х.ч. и вода в соотношении 4:1:1, а также концентрация антибиотиков цефазолина и цефуроксима 0,04М и 0,03М соответственно. Были получены следующие значения  $R_f$  для цефазолина-0,47, для цефуроксима-0,59.

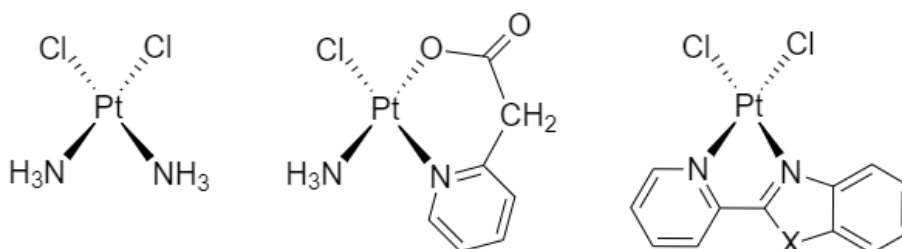
1. Хроматографические методы анализа: метод. пособие для спец. Курса / сост. Е. Н. Шаповалова, А. В. Пирогов; ред. О. А. Шпигун. - М.: МГУ им. Ломоносова, 2007. – 204 с

## Изучение методом DFT комплексов платины с пиридин-производными

Гигава А.М. (студентка, 4 курса)

Научный руководитель: к.х.н., доцент Веселов И.Н.

Комплексы платины (II) с органическими лигандами широко используются в качестве противораковых средств за счет их высокой токсичности. В частности, цисплатина (цис-диамминдихлороплатина), сшивает участки ДНК, тем самым предотвращая возможность деления раковых клеток. Использование вместо одного из лигандов пиридин-производных, делает комплекс в числе прочего более устойчивым к разрушающим ферментам, что позволяет уменьшить дозировки препарата, тем самым снижая общий вред. Поэтому изучение подобных комплексов представляет значительный интерес.



С использованием метода функционала плотности (DFT) были исследованы следующие комплексы: цисплатина ( $\text{cis-}[\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]$ ),  $[\text{PtCl}(\text{NH}_3)(\text{pyAc-N,O})]$  (pyAc — 2-ацетилпиридин), а также семейство комплексов с 2-(2-пиридил) бензимидазолом ( $\text{X} = \text{NH}, \text{O}, \text{S}$ ). Используемый функционал B3LYP-D3 и базисный набор LACV3P. Программный пакет Schrodinger Suite.

В результате компьютерного моделирования были рассчитаны геометрия молекул, парциальные атомные заряды, ИК-спектры, а также наивысшая занятая (НОМО) и низшая вакантная молекулярная орбитали (LUMO). Рассмотрено влияние заместителя (X) на форму молекулярных орбиталей.



## **Анализ косметического крема на содержание цинка**

Глафинова А.В. (специалист, 5 курс)

Научный руководитель: профессор, д.х.н. Никольский В.М.

Кремы, содержащие цинк, всегда пользовались популярностью среди обладателей проблемной кожи. Микроэлемент подсушивает воспаления и уменьшает покраснения при акне и постакне. Также крем, содержащий цинк, обладает антибактериальным и фотопротекторным эффектами, защищает и успокаивает чувствительную кожу.

Для ухода за кожей цинк начали использовать еще в далекой древности. По прошествии многих лет цинк все еще используется как активный микроэлемент многих косметических средств, только эффективность его действия возросла во много раз. Так, мы можем проследить, как менялось количественное содержание цинка в косметических кремах за последние 10 лет.

Целью нашего исследования было установление содержания цинка в косметическом креме. Для анализа был взят аква-крем для лица «Мгновенная матовость» Чистая линия.

Определение содержания цинка в анализируемых пробах осуществляли двумя методами, а именно гравиметрическим методом и фотометрированием [1].

В результате мы получили, что содержание цинка в исследуемом креме равно 393,37 мг/кг. В сравнении с результатами исследований, которые были упомянуты в статье 2012 года [2], содержание цинка в кремах значительно увеличилось, ведь в настоящее время использование косметических средств с большим содержанием цинка в качестве активного компонента становится все более популярным.

1. Живописцев В. П. Аналитическая химия цинка / В. П. Живописцев, Е. А. Селезнева. – М.:Наука, 2015. – 31 с.
2. Брайкова А.М. Определение тяжелых металлов в кремах для лица методом инверсионной вольтамперометрии/ А.М. Брайкова, Н.П. Матвейко//Вестник Витебского государственного технологического университета. – 2012. – №1. – С. 111.



## **Ионоселективный электрод для определения аскорбиновой кислоты**

Ельченинов П.С. (студент 2 года магистратуры)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Мантров Г.И.

Потенциометрические методы, в частности, с использованием ионоселективных электродов (ИСЭ) отличаются простотой и экспрессностью анализа, поэтому целью настоящей работы явилось создание ИСЭ на основе никотината меди для определения аскорбиновой кислоты, изучение его потенциометрических характеристик и разработка методики ионометрического определения аскорбиновой кислоты в готовых лекарственных формах.

В работе использовали аскорбиновую кислоту фармакопейной чистоты, никотиновую кислоту ч.д.а., диоктилфталат (ДОФ) ч.д.а., поливинилхлорид (ПВХ) марки С-70 х.ч. Электродноактивное вещество (ЭАВ) получали добавлением к раствору никотиновой кислоты раствора гидроксида меди(II), при нагревании, до полного выпадения осадка.

Пластифицированные мембраны ИСЭ изготавливались на основе никотината меди и имели состав (в масс. %): ПВХ-35, ДОФ-60, ЭАВ-5. ИСЭ перед применением вымачивали в 0,05 М растворе аскорбиновой кислоты. Для определения электродных характеристик использовали электрохимическую ячейку:



мембрана    исследуемый раствор    насыщенный раствор KCl    AgCl | Ag

Изготовленные электроды обладали хорошими потенциометрическими характеристиками. Интервал линейности электродной функции находится в промежутке 1-4 рС, крутизна электродной функции близка к теоретическому значению и составляет 50 мВ/рС, время отклика составляло 5-10 с. Показано, что потенциал ИСЭ не изменяется в интервале рН 4 - 6. Определение аскорбиновой кислоты в готовых лекарственных формах показало работоспособность созданного ИСЭ.

## Компьютерное моделирование молекулы фталоцианина кобальта

Ермолаева А.А (студент, 4 год обучения)

Научный руководитель: д.х.н., доцент Алексеев В.Г.

Фталоцианин кобальта (CoPc) используется во многих органических электронных устройствах, таких как светоизлучающие диоды (LED), органические фотогальванические элементы (OPV), органические полевые транзисторы (OFET) и химические датчики.

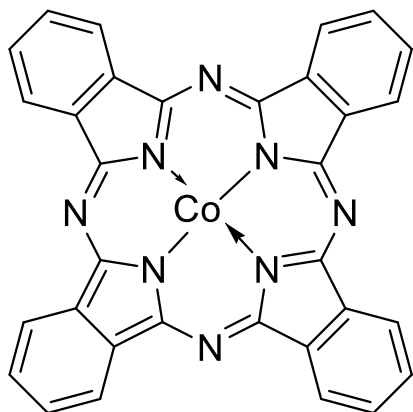


Рис 1.  
Структурная формула фталоцианина кобальта

В данной работе была поставлена задача, подобрать функционал обеспечивающий правильный расчёт энергии HOMO и LUMO молекулы фталоцианина кобальта(II). Геометрия молекулы CoPc рассчитана методом DFT/PW6B95-D3/LACVP\*\*++, длины и углы связей хорошо совпадают с экспериментальными данными. Результаты расчёта энергии HOMO и LUMO представлены в таблице:

Функционал	HOMO, eV	LUMO, eV	E <sub>g</sub> , eV
Эксперимент	-5.0	-3.4	1.6
M11-L	-5.10	-3.60	1.50
TPSS	-4.40	-3.21	1.19
MN12-L	-4.33	-3.00	1.33
SCAN	-4.25	-3.20	1.05
PW6B95-D3	-5.37	-2.85	2.52
M05-2X-D3	-5.93	-2.40	3.53
M06-2X-D3	-5.92	-2.45	3.47
M06-L	-3.89	-3.14	0.75
OLYP-D3	-3.98	-3.05	0.93
ωB97X-D	-6.38	-1.65	4.73

Видно, что хорошее совпадение с экспериментальными данными обеспечивает использование meta-GGA функционала M11-L.

## Титриметрический анализ аспирина различных производителей

Зуева А.С. (магистр, 2-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Баранова Н.В.

Одной из важнейших проблем отечественного здравоохранения в наше время – контроль качества лекарственных препаратов. Несоответствие заявленной и фактической дозировки активного вещества может повлечь за собой серьезные последствия при лечении пациентов.

В качестве объекта исследования был выбран аспирин четырех различных производителей, содержащий ацетилсалициловую кислоту в качестве активного вещества.

Количественное определение ацетилсалициловой кислоты проводили методами алкалометрического и бромометрического титрования [1]. Результаты исследования приведены в таблице 1.

Таблица 1

### Результаты количественного определения ацетилсалициловой кислоты

Метод количественного определения	Исследуемые образцы							
	АО «ПФК Обновление», Россия		ОАО «Фармстандарт-Лексредства», Россия		«Байер Биттерфельд ГмбХ», Германия		«ФП Оболенское», Россия	
	Теор. масса, мг	Практич. масса, мг	Теор. масса, мг	Практич. масса, мг	Теор. масса, мг	Практич. масса, мг	Теор. масса, мг	Практич. масса, мг
Алкалометрический анализ	500,00	486,54	500,00	499,04	300,00	296,62	50,00	49,66
Бромометрический анализ	500,00	486,33	500,00	498,38	300,00	296,27	50,00	49,42

В результате проведенного анализа разных лекарственных препаратов, содержащих ацетилсалициловую кислоту, можно сделать вывод о соответствии заявленного и фактического количества активного вещества в одной таблетке от разных производителей, что подтверждает подлинность данных препаратов.

1. Государственная фармакопея XIV. Ацетилсалициловая кислота. – М: МЗ РФ, 2018. – С.3413.

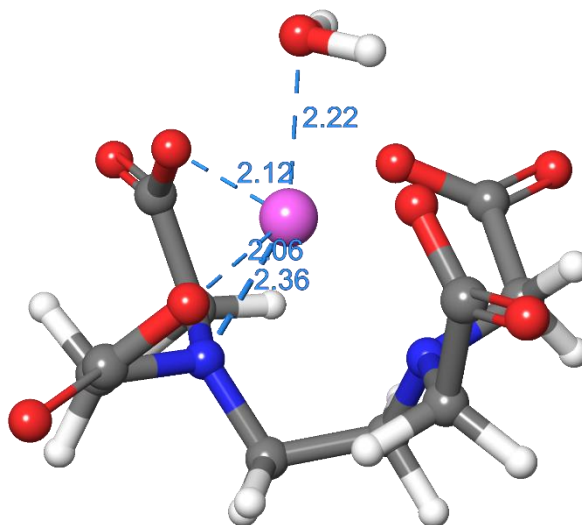


DFT расчёт структуры комплекса этилендиаминтетраацетатааквамагния

Иванова А.А. (бакалавр, 4-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, д.х.н. Алексеев В.Г.

Структура комплекса  $[\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})\text{edta}]^{2-}$  рассчитана методом DFT с использованием базиса 6-31G\*\*++ и различных hybrid-GGA функционалов, рекомендованных в работе [1].



Связь	Экспе- римент	B3LYP-D3	M05-2X-D3	M06-D3	M06-2X-D3	M06-HF
Mg–O (H <sub>2</sub> O)	2.06	2.33	2.25	2.28	2.22	2.22
Mg–O	2.08	2.08	2.07	2.07	2.06	2.07
Mg–O	2.27	2.11	2.12	2.11	2.12	2.13
Mg–N	2.38	2.41	2.36	2.42	2.36	2.34

Как видно из таблицы, результаты, наиболее близкие к экспериментальным данным [2] обеспечивает использование функционалов M05-2X-D3 и M06-2X-D3.

1. Goerigk L., Hansen A., Bauer C., Ehrlich S., Najibi A., Grimme S. // Physical Chemistry Chemical Physics. 2017. Vol.48. P.32184.

2. Stezowski J.J., Countryman R., Hoard J.L. // Inorganic Chemistry. 1973. Vol.12. № 8. P.1749–1754.



## **Идентификация морской капусты по содержанию йода**

Козликова Е.Е. (студент, 4 год обучения)

Научный руководитель: профессор, д.х.н. Никольский В.М.

Морская капуста имеет уникальный сбалансированный состав и содержит важнейшие для организма витамины, минералы, микроэлементы. Среди них важнейшим считается йод. Благодаря его биологическому происхождению йод из морской капусты эффективно усваивается организмом. Это отличная добавка для профилактики и лечения проблем щитовидной железы, также делает крепким иммунитет. Этот химический элемент очень востребован человеком, однако, его избыточное поступление в организм чревато негативными последствиями. Он постепенно накапливается и вызывает гипотериоз (синдром снижения уровня гормонов щитовидной железы), поскольку суточная потребность человека в йоде не превышает 200 мкг.

Чтобы морская капуста, как пищевая добавка, приносила пользу и не вызвала функционального расстройства, необходимо тщательно контролировать в ней содержание йода. Дело в том, что разные типы морской капусты содержат разное количество йода. Например, ламинария - 56,12 мкг/100 г сырья, а фукус - 65,46 мкг/100 г сырья [1].

В нашем эксперименте содержание йода определяли в аптечной (сухой) морской капусте (российский производитель ЗАО Ст.-Медиафарм) и в магазинной морской капусте (сухой) NoriChips (российского бренда SenSoy). В результате мы получили данные: аптечная морская капуста – 247,6 мг I- на 100 г продукта; NoriChips – 216 мг I- на 100 г. Эти данные соответствуют справочным материалам: аптечная морская капуста (сухая) от 200-250 мг/100 г; магазинная морская капуста (сухая) 50-220 мг/100 г.

1. Ламинария: полезные свойства // Траволечение и питание: электронный журнал. URL: <https://poltava-krimsan.ru/pro-edu/laminariya-yaponskaya.html>

## Спектрофотометрическое определение ЭДТА в воде

Козлова Е.Д. (студентка 4 курса)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Мантров Г.И.

На данный момент одной из актуальных проблем являются комплексоны и способы их определения. Все более широкое использование ЭДТА в качестве комплексообразователя обуславливает необходимость разработки более совершенных методов анализа. Спектрофотометрический метод анализа имеет ряд преимуществ среди методов определения ЭДТА. Он обладает высокой чувствительностью и селективностью. Также спектрофотометрический метод является экспрессным методом анализа с возможностью автоматизации и компьютеризации.

В данной работе рассматривается спектрофотометрический метод определения количества ЭДТА в питьевых водах. Он основан на взаимодействии ЭДТА с фторидными комплексами железа (III). ЭДТА вытесняет фториды из  $\text{FeF}^{3-n}_n$  благодаря высокой устойчивости комплекса ЭДТА с железом (III). Определению не должны мешать сульфаты, хлориды и фосфаты, так как они образуют менее устойчивые комплексы с Fe (III), чем фториды ( $\lg$  констант образования сульфатного и фторидного комплексов Fe(III) составляют соответственно 7,4 и 13,4). Для эксперимента использовали растворы  $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$ , ЭДТА, NaF, а также растворы HCl и  $\text{NH}_4\text{OH}$  для контроля pH, значение pH измеряли на иономере И-135, спектры поглощения – на спектрофотометре СФ-2000. Растворы  $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$  и ЭДТА были стандартизированы для проведения достоверного исследования.

1. Комплексоны и комплексоны металлов/ Н.Д. Дятлова, В.Я. Темкина, К.И. Попов. – М.: Химия, 1988. – 544 с.

## Физико-химические методы анализа комбинированных лекарственных средств

Кравец О.Б. (бакалавр, 4-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Баранова Н. В.

**Цель исследования:** ИК-спектроскопический анализ препаратов, содержащих аскорбиновую и никотиновую кислоты. **Объекты исследования:** аскорбиновая кислота (ОАО «Фармстандарт-УфаВИТА»), драже правильной шарообразной формы жёлтого цвета; «Витрум Вижн Плюс Vitrum Vision Plus» (ООО "Такеда Фармасьютикалс"), таблетки покрытые пленочной оболочкой желтого цвета, овальные; препарат Ундевит (ЗАО «Алтай Витамины») – драже правильной шарообразной формы жёлтого цвета. **Методы:** ИК-спектры регистрировались на ИК-Фурье спектрометре Bruker ALPHA в области 400-4000  $\text{см}^{-1}$ . Таблетирование проводилось с использованием бромида калия.

**Результаты и обсуждение:** На полученном ИК-спектре были отмечены следующие полосы поглощения для аскорбиновой кислоты: частоты валентных колебаний –СН группы находятся 2918 и 2942  $\text{см}^{-1}$  для каждого препарата соответственно; колебания С-С в области 1069, 1064, 1069  $\text{см}^{-1}$ ; валентные колебания –ОН группы 3389, 3487, 3361  $\text{см}^{-1}$ ; и деформационные 1279, 1297, 1280  $\text{см}^{-1}$ ; валентные колебания -С=О группы 1755, 1764, 1725  $\text{см}^{-1}$ ; -С=C группы 1674, 1651, 1674  $\text{см}^{-1}$ , -С-О 1128, 1136, 1129  $\text{см}^{-1}$ . Для никотиновой кислоты: частоты валентных колебаний –СН группы находятся на значениях 3361  $\text{см}^{-1}$ ; а деформационных 642  $\text{см}^{-1}$ ; валентные колебания –ОН группы 3361  $\text{см}^{-1}$  и деформационные 1346  $\text{см}^{-1}$ ; валентные колебания -С=О группы 1630  $\text{см}^{-1}$ ; -С=C группы 1667  $\text{см}^{-1}$ , -С-О 1129  $\text{см}^{-1}$ ; валентные колебания –NH<sub>2</sub> группы 3361  $\text{см}^{-1}$  и деформационные колебания 1600,732  $\text{см}^{-1}$ ; валентные колебания групп -С=N 1600  $\text{см}^{-1}$  и -С-N 1323  $\text{см}^{-1}$ .

**Выводы:** наличие всех основных полос поглощения для функциональных групп на инфракрасном спектре свидетельствует о наличии аскорбиновой и никотиновой кислот в таблетке. Препараты являются подлинными.

## Выбор функционала и базиса для DFT расчёта двугранного угла в молекуле дифенила

Крылов А.А. (молодой ученый)

Научный руководитель: профессор, д.х.н. Алексеев В.Г.

При компьютерном моделировании структуры и физико-химических характеристик молекул, содержащих сопряжённые ароматические циклы, важной задачей является правильный расчёт торсионного угла. Известно, что при расчёте методом DFT результаты в значительной степени зависят не только от базиса, но и от функционала. Проведён расчёт молекулы дифенила с использованием функционалов различных типов: GGA (B97-D3, OLYP-D3, BLYP-D3), meta-GGA (SCAN, TPSS, M06-L), meta-NGA (MN12-L, MN15-L), hybrid GGA (B3LYP-D3, PW6B95-D3, M05-2X-D3, M06-2X-D3, MN15). Показано, что наилучшее совпадение результатов расчёта с экспериментальными данными обеспечивает использование функционалов  $\omega$ B97X-D, M05-2X-D3, M06-2X-D3 и базиса 6-311G\*\*++.

Функционал / базис	Торсионный угол, град
Экспериментальные данные	44.4
$\omega$ B97X-D / 6-31G**++	42.5
$\omega$ B97X-D / 6-311G**++	43.3
M05-2X-D3 / 6-31G**++	41.8
M05-2X-D3 / 6-311G**++	42.3
M05-2X-D3 / cc-pVDZ++	40.9
M05-2X-D3 / def2-SVPD	36.1
M06-2X-D3 / 6-31G**++	40.9
M06-2X-D3 / 6-311G**++	41.3
M06-2X-D3 / cc-pVDZ++	39.4
M06-2X-D3 / def2-SVPD	34.5

## Ионоселективный электрод для определения сотагексала в фармацевтических препаратах

Ксенофонтова С.Д. (студент, 5 курс)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Мантров Г.И.

Потенциометрия с ионоселективными электродами (ИСЭ) является перспективным методом определения органических веществ. В связи с этим необходимо исследование основных принципов функционирования мембран ИСЭ, позволяющих прогнозировать их селективные свойства [1, С. 159]. Целью исследования явилось создание ИСЭ с оптимальными параметрами для потенциометрии, разработка методики ионометрического определения сотагексала (N-[4-[1-Гидрокси-2-[(1-метилэтил)амино]этил]фенил]метансульфонамида (в виде гидрохлорида)).

Состав использованной пластифицированной мембраны (% по массе): поливинилхлорид (ПВХ) – 40, дибутилфталат (ДБФ) – 55, ЭАВ (ионный ассоциат с фосфорномолибденовой кислотой (ФМК)) – 5. Для определения электродных характеристик изготовленного ИСЭ использовался иономер И-130 и электрохимическая ячейка, изображённая на схеме:



Изготовленный электрод обладал хорошими потенциометрическими характеристиками. Интервал линейности электродной функции находится в промежутке 1-5 рС, крутизна электродной функции близка к теоретическому значению (45 мВ для ФМК), время отклика составляло 6-7с. Показано, что потенциал ИСЭ не изменяется в интервале рН 2 – 6. Определение соталолола в готовых фармацевтических препаратах показало работоспособность созданного ИСЭ.

1. Никольский Б.П. Ионоселективные электроды / Б.П. Никольский, Е.А. Матерова. – Ленинград: изд. Химия, 1980 – 240 с.

Компьютерное моделирование комплексов лантаноидов с ампициллином

Макарова Е. А. (магистрант 2-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Минина М. В.

Методом DFT/M-06-HF/CSDZ++\*\* в программе Maestro проведен расчет структуры и энергии (в единицах Хартри) комплексных соединений ампициллина с лантаном, церием, иттербием и лютецием (рис.).

Согласно имеющимся литературным данным для лантаноидов характерно образование с ампициллином гидроксокомплексов. Последовательное введение в систему молекул воды показало, что ионы  $\text{La}^{3+}$ ,  $\text{Ce}^{3+}$ ,  $\text{Yb}^{3+}$ ,  $\text{Lu}^{3+}$  помимо анионов  $\text{OH}^-$  и  $\text{Amp}^-$  могут координировать до 5 молекул воды, что соответствует типичному для Ln (III) КЧ = 8.

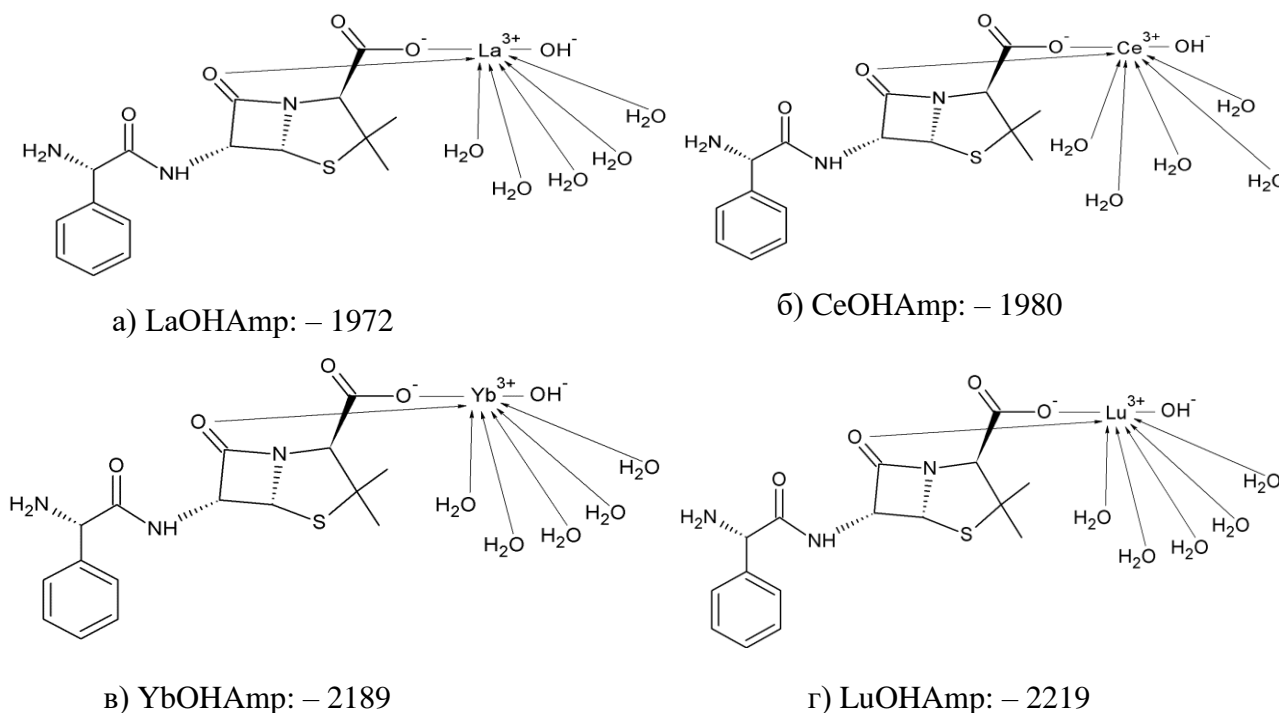


Рис. Структуры и значения энергии (в единицах Хартри) комплексов ампициллина с лантаном (а), церием (б), иттербием (в) и лютецием (г)

По результатам компьютерного моделирования можно сделать вывод, что анион  $\text{Amp}^-$  бидентатно координирован с образованием семичленного хелатного цикла.

## Количественное определение микроэлементов в продуктах питания

Автор: Попова В. А. (магистр, 2-й год обучения)

Научный руководитель: д.х.н., профессор Никольский В. М.

Большинство тяжелых заболеваний в человеческом организме связано с нарушением баланса необходимых концентраций йода в составе солей йодидов и йодатов. Поэтому исследование и разработка продуктов питания, богатых йодом, и грамотный количественный анализ этого элемента являются актуальной задачей, стоящей перед современной наукой.

В качестве объекта исследования были выбраны образцы пищевой йодированной соли от разных производителей. Количественное определение йода проводили титриметрическим методом [1]. Результаты исследования представлены в таблице.

Марка	Эксперимент №1		Эксперимент №2		Эксперимент №3		Средняя концентрация в пробе, мг/кг
	Показания шкалы бюретки $V_1 - V_2$ , мл	Концентрация в пробе, мг/кг	Показания шкалы бюретки $V_1 - V_2$ , мл	Концентрация в пробе, мг/кг	Показания шкалы бюретки $V_1 - V_2$ , мл	Концентрация в пробе, мг/кг	
«Валетек»	3,5	37,00	3,6	38,05	3,7	39,11	38,05
«Славяна»	3,7	39,11	3,8	40,17	3,8	40,17	39,82
«4 life»	4,6	48,62	4,3	45,45	4,4	46,51	46,86
«Setra»	2,8	29,60	2,5	26,43	2,6	27,48	27,84

В результате проведенного эксперимента можно сделать вывод о соответствии заявленного производителями и фактического количества йода в пищевой соли, что подтверждает качественное производство данных товаров.

1. ГОСТ Р 51575–2000 «Соль поваренная пищевая йодированная. Методы определения йода и тиосульфата натрия».



## **Интенсификация скорости сорбции редкоземельных элементов под влиянием электрогидродинамических эффектов второго рода.**

Салазкин Н.С. (Магистрант, 1-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Мантров Г.И.

Редкоземельные металлы (РЗЭ) играют важную роль в современном мире [1]. Несмотря на то, что РЗЭ присутствуют во многих минералах, их средняя концентрация в земной коре достаточно низка. Поэтому поиск путей эффективного концентрирования РЗЭ имеет важное научное и практическое значение.

В настоящей работе было исследовано влияние электрогидродинамических эффектов второго рода, возникающих в окрестности ионитов [2], на скорость сорбции РЗЭ ионообменными смолами.

В исследованиях использовали катионит марки КУ 2-8, р-ры нитрата лантана и формиата церия, платиновые электроды, генератор переменного тока. Для определения концентраций исследуемых растворов применяли спектрофотометрические и комплексонометрические методы анализа.

Эксперименты проводили в статическом режиме - без влияния на систему ионит – р-р РЗЭ переменного электрического поля, и в динамическом режиме – воздействуя на систему переменным электрическим полем.

Согласно полученных результатов было показано, что влияние переменного электрического поля приводит к увеличению скорости сорбции РЗЭ в 7-10 раз, в зависимости от параметров электрического поля (частота, напряжение), по сравнению со статическими условиями сорбции.

1. Кудреватых Н.В. Физика металлов. Редкоземельные металлы и их соединения / Н.В. Кудреватых, А.С. Волегов. — М.: Юрайт, 2019. — 197 с.
2. Гамаюнов Н. И., Мантров Г. И., Мурцовкин В. А. // Коллоидн. Журн. 1992. Т. 54. № 1, 168

## Сравнительный анализ воды питьевого назначения из разных источников Москвы

Свидерская О.В. (магистр 1 года)

Научный руководитель: к. х. н., доцент Феофанова М.А.

В качестве объектов исследования были выбраны образцы вод центрального водоснабжения из разных округов Москвы: западный округ - ул. Производственная, северный округ - ул. 2-ая Магистральная и центральный административный округ - ул. Дубининская. Пробы были проанализированы по следующим показателям: водородный показатель (рН), перманганатная окисляемость, содержание растворенного кислорода.

Водородный показатель определялся потенциометрическим методом (рН-метр-иономер HANNA HI 2210-02). Перманганатная окисляемость определялась титриметрическим методом (методом Кубеля). Растворенный кислород определялся амперометрическим методом (оксиметр HANNA HI 9142). В таблице представлены результаты количественного анализа, из которой следует, что при сопоставлении полученных результатов с допустимыми значениями, а также между собой все образцы вод, используемые для питьевых целей, по рассматриваемым показателям соответствуют норме.

Таблица 1.

Показатели качества образцов питьевой воды

Образцы вод	рН, единиц рН	Перманганатная окисляемость, мг О <sub>2</sub> /дм <sup>3</sup>	Содержание растворенного кислорода, мг/л
<i>Допустимые значения/ СанПиН 2.1.3684-21</i>	6 – 9	<i>не более 5</i>	<i>не менее 4</i>
ул. Производственная	6,9	4,0	7,2
ул. 2-ая Магистральная	6,7	4,4	7,4
ул. Дубининская	6,8	4,2	7,8

## **Синтез и спектроскопическое исследование твердого комплекса иттербия с гепарином**

Скобин М.И. (молодой учёный), Крюков Т.В. (молодой учёный)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Феофанова М.А.

Твердый комплекс  $[\text{Yb}(\text{H}_2\text{O})_4\text{Hep}]_n$  был синтезирован смешением растворов  $\text{YbCl}_3$  и  $\{\text{Na}_3\text{Hep}\}_n$  в эквимольных количествах, с последующим доведением объема раствора до 50 мл при оптимальном значении  $\text{pH} = 4.5$ , установленном по диаграмме распределения комплексных форм. Добавлением ацетона в объемном соотношении 1:2 получали гелеобразный осадок, который после промывания ацетоном отделяли центрифугированием с последующей сушкой на воздухе.

ИК-спектры образцов-таблеток с KBr записывали на приборе фирмы Bruker «Equinox 55» в диапазоне  $450 - 4000 \text{ см}^{-1}$ . Интерпретацию характеристических полос поглощения в ИК-спектре  $[\text{Yb}(\text{H}_2\text{O})_3\text{Hep}]_n$  проводили сопоставлением со спектральными характеристиками натриевой соли гепарина.

Исследование комплекса методом ИК-спектроскопии показало смещение полос комплекса  $[\text{Yb}(\text{H}_2\text{O})_4\text{Hep}]_n$  относительно спектра  $\{\text{Na}_3\text{Hep}\}_n$  у гидроксильной ( $\nu(\text{O}-\text{H})$ ) от  $3443$  до  $3437 \text{ см}^{-1}$ , карбоксилатной ( $\nu_s(\text{C}=\text{O})$ ) от  $1424$  до  $1440 \text{ см}^{-1}$ , сульфатной и аминосульфатной групп ( $\nu_{as}(\text{S}=\text{O})/\nu_s(\text{S}=\text{O})$ ) от  $1235/1028$  до  $1230/1034 \text{ см}^{-1}$ .

На спектре комплекса гепарина с иттербием в диапазоне  $1140 - 1100 \text{ см}^{-1}$  характеристического пика группы С-О-Н не наблюдается, вероятно, в результате его смещения, вызванного координацией кислорода гидроксильной группы с иттербием.

В диапазоне частот ниже  $1000 \text{ см}^{-1}$  можно выделить валентные асимметричные колебания С-О-С при  $884$  (в моносахаридном кольце) и  $941 \text{ см}^{-1}$  (гликозидные связи).



## **Анализ стеаратов П-А подгруппы в мезиме и панкреатине**

Уварова С.С. (студент, 4 курс)

Научный руководитель: профессор, д.х.н. Никольский В.М.

Панкреатин компенсирует недостаточную активность собственных ферментов, способствует улучшению процесса пищеварения. Выпускается под разными торговыми наименованиями: «Фестал», «Креон», «Мезим» и др.

Федеральная служба по надзору в сфере здравоохранения РФ письмом от 13 октября 2021 г. отмечает, что под разными торговыми названиями одного препарата может производиться фальсифицикат, например, установлено, что препарат «Креон®» серии 58890, на вторичных упаковках которого указан производитель «Эбботт Лэбораториз ГмбХ, Германия» имеет признаки фальсификации [1]. Фальсификация препаратов, пользующихся массовым спросом, создает угрозу для жизни и здоровья населения. Это требует проведения эффективного анализа популярных лекарственных средств.

Для быстрого и надежного определения таких компонентов мезима и панкреатина как стеараты элементов П-А подгруппы в качестве комплексонометрического титранта нами предложены созданные на кафедре неорганической и аналитической химии ТвГУ экологически безопасные комплексоны, производные дикарбоновых аминокислот.

Для анализа были взяты препараты: МЕЗИМ® ФОРТЕ 10000 немецкого производителя Берлин-Хеми АГ и ПАНКРЕАТИН отечественной фирмы ПАО «Биосинтез».

При исследовании лекарственных средств было установлено содержание стеарата магния в 1 таблетке мезима – 1,867 мг, содержание стеарата кальция в 1 таблетке панкреатина – 3,120 мг. Это соответствует данным состава, представленного в инструкции к препарату.

1. РОСЗДРАВНАДЗОР // Медарго: информационный портал. URL: <https://www.medargo.ru/rzn.php?letter=43036> (дата обращения: 23.02.2022)

## **Метод анализа цинка оксихинолином в присутствии меди**

Фёдорова А.А. (магистрант, 1-го года обучения)

Научный руководитель: профессор, д.х.н. Никольский В.М.

Известен способ определения цинка в водных растворах по реакции «родамина С» с ионами цинка с образованием окрашенного комплексного соединения [1]. Этот способ неудобен из-за высокой погрешности и длительности определения.

Описан гравиметрический анализ цинка 8-оксихинолином в виде осадка  $Zn(C_9H_6NO_2) \cdot xH_2O$ . Медь приходится маскировать тиомочевинной [2].

Маскирование меди требует приготовления и использования тиомочевины. Мы предложили и запатентовали экспресс-анализ цинка без использования дополнительных реактивов и затраты времени. Медь удаляется электролитическим осаждением [3].

Полнота осаждения меди контролируется раствором желтой кровяной соли. Если не появляется красновато-бурый осадок  $[Cu_2Fe(CN)_6]$ , осаждение меди на катоде можно считать законченным. Для анализа цинка раствор после электролиза обрабатывали раствором 8-оксихинолина и кипятили до коагуляции осадка. Осадок отфильтровывали, промывали и сушили до постоянной массы. Вес осадка отвечает содержанию цинка в соединении  $Zn(C_9H_6NO)_2$ .

1. Лурье Ю.Ю. Аналитическая химия промышленных сточных вод. М.: Химия, 1984, С. 164.
2. Основы аналитической химии. Практическое руководство. Учебное пособие для вузов. М.: Высшая школа, 2001, С. 220-221.
3. Патент РФ на изобретение №2768487, опубл. 24.03.2022 «Способ определения цинка 8-оксихинолином»/ Авторы: Никольский В.М., Фёдорова А.А.

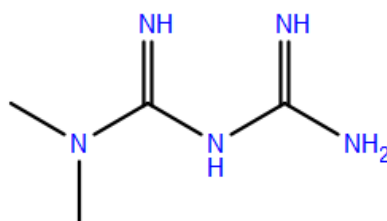
## Квантово-химическое исследование процессов

### комплексообразования N,N-диметилбигуанидина с катионами d-металлов

Автор: Филатова М. А. (магистр, 2-й год обучения)

Научный руководитель: к.х.н., доцент Веселов И. Н.

Метформин или N,N-диметилбигуанид – является главным препаратом, используемым при лечении сахарного диабета. Исследование свойств такого важного и часто используемого гипогликемического препарата как метформин, является важной задачей для медицины и химии, так как сахарный диабет до сих пор является широко распространенным серьезным заболеванием, которое влияет на качество жизни миллионов людей во всем мире.



В настоящее время многие свойства молекул некоторых классов веществ и химические явления можно изучать, не прибегая к эксперименту, без использования дорогостоящего оборудования и реактивов. Есть возможность получить данные, не всегда доступные в опытах. Поэтому для исследования комплексов N,N-диметилбигуанида с катионами d-металлов был выбран квантово-химический метод DFT. Целью работы ставился анализ влияния выбора пары «функционал — базисный набор» на воспроизводимость геометрии и частот колебаний функциональных групп для комплексов Cu(II), Co(II), Ni(II), Zn(II), Cd(II) с N,N-диметилбигуанидом.

В результате были получены данные отклонения расчетных параметров от экспериментальных и определены наиболее подходящие пары «функционал — базисный набор» для использования в квантово-химических расчетах для этих комплексов.

## **Спектрофотометрическое и титриметрическое определение сульфаниламида в лекарственных препаратах**

Шачнева К.С. (Магистр 1-го года обучения)

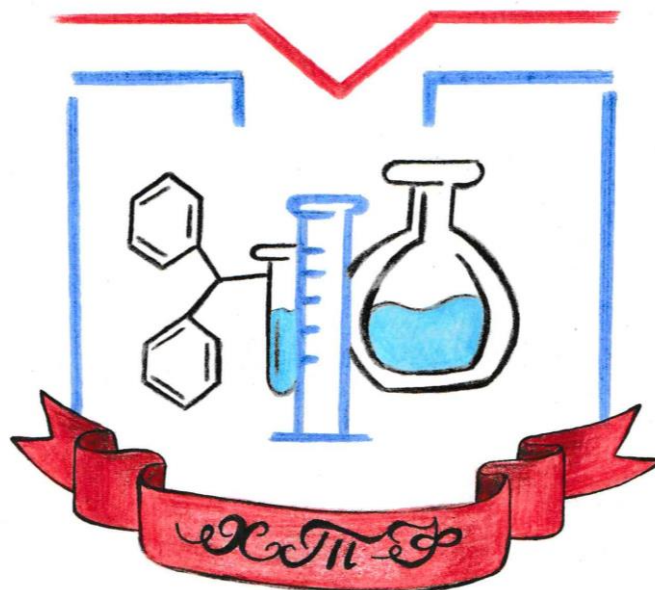
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Баранова Н.В.

В связи с возрастающим количеством новых лекарственных веществ как никогда актуальна проблема их идентификации и определения. Несоответствие заявленной дозировки активного вещества, а также фальсифицированные препараты могут повлечь за собой серьёзные осложнения при лечении различных болезней.

В качестве объекта исследования были выбраны препараты, которые содержат сульфаниламид и сульфаниламид натрия в качестве действующего вещества. Качественное определение исследуемых образцов проводили спектрофотометрическим методом в щелочной и кислой средах. Спектр поглощения полученного раствора в щелочной среде в области длин волн от 220 до 350 нм имел максимум при 251 нм. Спектр поглощения полученного раствора в кислой среде в области длин волн от 220 до 350 нм имел максимумы при 264 нм и 271 нм, минимумы при 241 нм и 268 нм, плечо от 257 до 267 нм.

Количественное определение активного вещества проводили нитритометрическим методом, основанным на способности первичных ароматических аминов образовывать в кислой среде диазосоединения [1]. Количество активного вещества в порошке получено из расчета, что на 1 мл 0,095 н раствора  $\text{NaNO}_2$  приходится 16,359 мг сульфаниламида. Количество действующего вещества в линименте получено из расчета, что на 1 мл 0,095 н раствора  $\text{NaNO}_2$  приходится 27,36 мг сульфаниламида натрия. В результате проведенного анализа можно сделать вывод о подлинности этих препаратов.

1. Перевощикова Н.Б. Методы идентификации и количественного определения антибактериальных химиотерапевтических препаратов сульфаниламидного ряда // Журнал Вестник удмуртского университета. – 2014. – №4. – С. 72-78.



## **Секция органической химии**



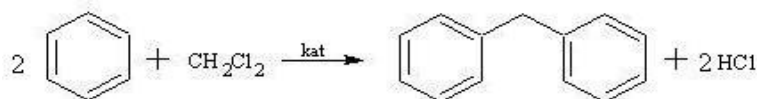
## Изучение каталитической активности хлоралюминатных ионных жидкостей в реакции алкилирования бензола дихлорметаном

Арефьев А. А. (студент, 4-ый курс)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Журавлев О. Е.

Ионные жидкости, обладающие кислотностью по Льюису, могут выступать в качестве альтернативы классическим катализаторам реакции Фриделя-Крафтса, при этом они не обладают их недостатками.

Целью данной работы было сравнить каталитическую активность ряда хлоралюминатных ионных жидкостей. Модельной реакцией для изучения каталитической активности была выбрана реакция алкилирования бензола дихлорметаном:



В качестве катализаторов использовались хлоралюминатные ионные жидкости и хлорид алюминия. Результаты представлены в таблице.

Таблица

Выход целевого продукта в зависимости от катализаторов и времени реакции

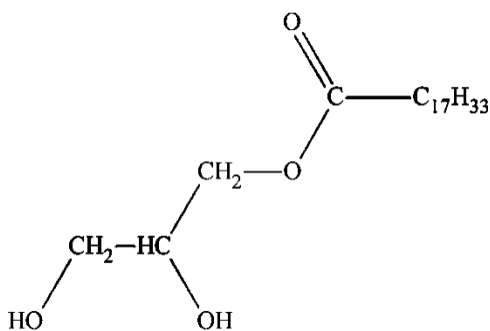
Катализатор \ Время, ч	0,5	1	1,5	2	2,5	3	3,5	4	4,5
	Выход дифенилметана, г (%)								
AlCl <sub>3</sub>	-	-	1,46 (67)	-	-	1,5 (69)	-	-	1,54 (71)
Et <sub>3</sub> NHCl·2AlCl <sub>3</sub>	-	-	0,61 (28)	-	-	0,82 (38)	-	-	1,1 (51)
[PyC <sub>10</sub> H <sub>21</sub> ]Cl·2AlCl <sub>3</sub>	0 (0)	0 (0)	0 (0)	0 (0)	0 (0)	0 (0)	0 (0)	0 (0)	0 (0)
[PyH]Cl·2AlCl <sub>3</sub>	0,04 (4)	0,05 (5)	0,05 (5)	-	0,05 (5)	-	-	-	-
[Me <sub>2</sub> NH(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> OH]Cl·2AlCl <sub>3</sub>	0,16 (15)	0,17 (16)	0,2 (18)	0,21 (19)	-	0,27 (25)	-	0,32 (29)	-

## Получение со-эмульгатора на основе олеиновой кислоты и исследование его свойств

Барсукова В.В. (студент, 4 курс)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Егорова И.Ю.

Актуальной проблемой современного органического синтеза является подбор оптимального метода получения со-эмульгатора на основе олеиновой кислоты, который широко используется в парфюмерно-косметической промышленности, в роли стабилизатора. Восстанавливает липидный слой кожи, улучшает проницаемость кожи для других веществ, содержащихся в косметическом продукте. В связи с этим интересен вопрос его получения.



Исследуемое соединение получали методом азеотропной этерификации, взаимодействием олеиновой кислоты с глицерином в присутствии катализатора *n*-толуолсульфокислоты. Температуру реакционной среды контролировали

добавлением в колбу смеси изомеров ксилола в количестве 6 % от массы олеиновой кислоты. Ксилол также использовался для образования низкокипящей, азеотропной смеси с водой. Реакционную массу нагревали в течение 4 часов при температуре 150°C. Окончание реакции контролировали по прекращению накопления воды в насадке Динна-Старка. После отгонки ксилола остаток представлял собой вязкую жидкость янтарного цвета с температурой плавления 35-36°C.

Исследована растворимость и поверхностное натяжение водных растворов полученного соединения, которое представляет собой малорастворимое неионогенное поверхностно-активное вещество, плохо растворяющееся в воде и хорошо растворяющееся в этаноле и ацетоне при нагревании. Строение синтезируемого соединения подтверждено данными ИК-спектроскопического анализа.

## Разделение пигментов листа наперстянки пурпурной методом бумажной хроматографии

Барсукова Е.В. (магистрант, 1-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.б.н. Левина А.С.

Основным источником сердечных гликозидов является лист наперстянки пурпурной. В связи с этим представляет интерес состояние пигментной системы листа. В основном, разделение пигментов проводится методом бумажной хроматографии. Сложный состав биологически-активных веществ наперстянки пурпурной потребовал дополнительных уточнений в методике.

1. Раствор пигмента с остатками мякоти листа наносим пипеткой на лист хроматографической бумаги (размер 80x200 мм), отступая от нижнего края листа бумаги 1,5-2 см. Ширина наносимой полоски не более 0,5 см. После нанесения вытяжки на хроматографическую бумагу, подсушиваем на воздухе и на это же место опять наносим вытяжку пигментов (7-8 раз). *Полоска имеет яркий зеленый насыщенный цвет.*

2. Хроматографическую бумагу опускаем в стакан, предварительно налив бензин в таком количестве, при котором его уровень ниже нанесенной полоски пигментов. Стакан закрываем половинкой чашки Петри. Разделение пигментов происходит в течение 20-30 минут. Вынимаем хроматограмму из стакана, подсушиваем и определяем пигменты, образующие цветные полосы. Из анализа хроматограммы видно, что *над стартовой полосой находится хлорофилл-в (темно-зеленый), над ним хлорофилл-а (зеленый), затем ксантофилл (желтый) и выше всех  $\beta$ -каротин (светло-оранжевый)*, что хорошо согласуется с теорией и говорит о хорошем состоянии листьев наперстянки пурпурной, взятых для апробации методики.

1. Фитохимический анализ и стандартизация лекарственного растительного сырья. Воронеж. Издательский дом ВГУ, 2017. – 78 с.

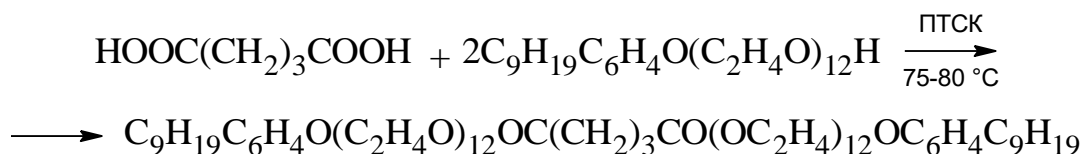
## Получение димерного поверхностно-активного вещества ацилированием неонола 9-12

Васильева Д.В. (студент, 4 курс)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Темникова С.А.

Димерные поверхностно-активные вещества (ПАВ), которые в последнее время привлекают внимание химиков, отличаются от их традиционных мономерных аналогов «необычными» свойствами: более высокой поверхностной активностью, меньшей критической концентрацией мицеллообразования.

Синтезировано димерное ПАВ на основе неионогенного ПАВ неонола 9-12 по методике [1]. В качестве ацилирующего агента использовали глутаровую кислоту, в качестве катализатора – *n*-толуолсульфокилоту. Схема реакции:



Полученную смесь моно- и диэфиров не разделяли перегонкой, выход составил 70%. Исследованы физико-химические характеристики водных растворов исходного неонола 9-12 и синтезированного димерного ПАВ. Определены температуры помутнения 1%-ных водных растворов: для неонола — 86°C, что соответствует литературным данным, для ацильного производного — 47°C. Установлены зависимости поверхностного натяжения от концентрации растворов неонола 9-12 и его эфира. Полученные данные позволяют утверждать, что при наличии димерной структуры ПАВ сильнее понижает поверхностное натяжение воды уже при более низких концентрациях.

1. Ломинога Е.А., Бурмистров К.С., Гевод В.С. Синтез димерных поверхностно-активных веществ на основе синтанола ДС-10 и адипиновой кислоты // Изв. вузов. Химия и хим. технология. – 2018. – Т. 61. – Вып. 2. – С. 91–96.

## Получение и исследование свойств

### *N*-додеканоилоксиэтил-*N,N*-диметиламмонийпропионата

Веролайн В.А. (студентка 4-го года обучения)

Научный руководитель: к.х.н., доцент Темникова С.А.

В настоящее время широко востребованные области, такие, как, фармация, косметология, пищевая и другие нуждаются в веществах специального и вспомогательного назначения, обладающих комплексом уникальных полезных свойств. Такими свойствами, как высокая биоразлагаемость, слабое раздражающее действие, низкая токсичность, совместимость с другими классами поверхностно-активных веществ, мылами и электролитами обладают амфотерные поверхностно-активные вещества (АмПАВ) на основе *N,N*-диметиламиноэтанола.

В настоящей работе осуществлен синтез *N*-додеканоилоксиэтил-*N,N*-диметиламмонийпропионата и исследованы коллоидно-химические свойства его водных растворов. Ацилирование *N,N*-диметиламиноэтанола проводили додекановой кислотой при температуре 20°C. Синтезированный эфир очищали перегонкой при давлении 10 мм рт. ст. Далее проводили реакцию между полученным сложным эфиром и акриловой кислотой. Строение полученного амфотерного ПАВ было подтверждено качественными реакциями и методом ИК-спектроскопии. ИК-спектры полученного *N*-додеканоилоксиэтил-*N,N*-диметиламмонийпропионата содержат полосу валентных колебаний карбоксилат аниона при 1560 см<sup>-1</sup>.

Для водных растворов полученного АмПАВ были измерены удельная электропроводность, поверхностное натяжение, определена эмульгирующая способность. Стабилизирующий структурированный слой эмульсий оливкового масла получен при концентрации 1\*10<sup>-2</sup> моль/л. Спектры эмульсий зарегистрированы на УФ-спектрометре EvolutionArray в диапазоне 200–1200 нм.

## **Получение алкилполигликозидов ферментативным способом**

Веселова А. В. (магистрант 2-ого года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Веролайн Н.В.

Алкилполигликозиды (АПП) являются простыми эфирами, которые образованы длинноцепочечными спиртами и фрагментами углеводов (мальтозы, глюкозы и др.). Они играют важную роль в качестве чистящих, смачивающих, диспергирующих, эмульгирующих, пенообразующих веществ во многих продуктах, включая моющие средства, кондиционеры для белья, эмульсии, мыло, средства личной гигиены и тд.

Для синтеза алкилполигликозидов были выбраны 4 метода, наиболее эффективным оказался – ферментативный. Полученные АПП - желтоватые вязкие жидкости, которые плохо растворяются в этаноле и практически не растворяются в диэтиловом эфире, но стабильны в щелочной среде. Состав и строение полученных соединений подтверждены данными ИК-спектроскопии. Доказано, что алкилполигликозиды обладают аномальной температурой помутнения (температура помутнения отсутствует), имеют синергетический эффект с анионными ПАВ, положительно влияя на пенообразующие свойства (повышают и стабилизируют пену), а также являются хорошими диспергаторами, обладают хорошей смачивающей способностью и гидролизуются при pH ниже 3.

### Литература

1. Прохорова Г.В. Коллоидно-химические свойства смесей анионных ПАВ с алкилполигликозидами.: дис. . на соискание ученой степени канд. хим. наук. - М., 2012. - 116 с.
2. Sheldon, R.A. Biocatalysis and biomass conversion: enabling a circular economy / R.A. Sheldon, S. Marinkovic, B. Estrine // Philos. Trans. R. Soc.Math. Phys. Eng. Sci.. – 2020. – . – № 378. – P. 20190274

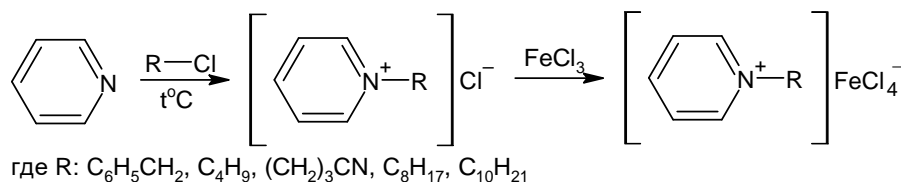
## Синтез и исследование электропроводности тетрахлорферратов N-алкилпиридиния

Воробьева А.О. (студент, 4 курс)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Журавлев О.Е.

Ионные жидкости (ИЖ) используются как электролиты в электрохимических процессах из-за их высокой удельной электропроводности.

Целью работы является синтез ИЖ с катионом N-алкилпиридиния и тетрахлорферрат-анионом с различной длиной алкильных заместителей и исследование их электропроводности. ИЖ были получены по схеме:



Для прогнозирования свойств был проведен кондуктометрический анализ ИЖ в ацетонитриле при 25°C в интервале концентраций 10<sup>-2</sup>-10<sup>-3</sup> моль/л.

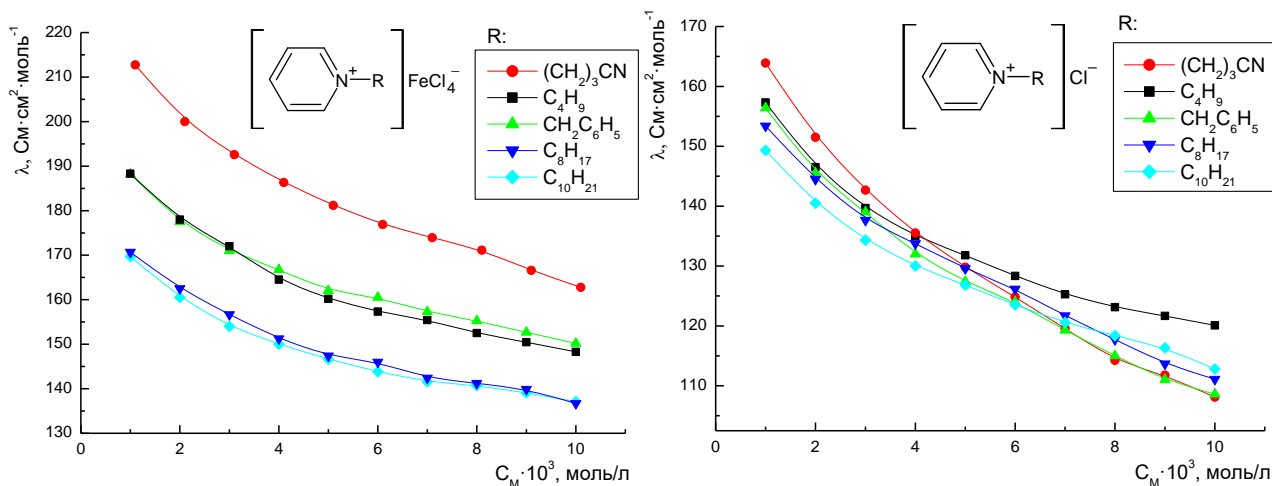


Рис.1. Зависимость эквивалентной электропроводности (ЭЭП) растворов тетрахлорферратов и хлоридов N-алкилпиридиния от концентрации.

Полученные результаты указывают на то, что наличие FeCl<sub>4</sub><sup>-</sup>-аниона в структуре ИЖ приводит к увеличению ЭЭП их растворов, в сравнении с Cl<sup>-</sup>-анионом. При увеличении длины алкильного заместителя у тетрахлорферратов значения ЭЭП снижаются в ряду: (CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>CN > CH<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>H<sub>5</sub> > C<sub>4</sub>H<sub>9</sub> > C<sub>8</sub>H<sub>17</sub> > C<sub>10</sub>H<sub>21</sub>.



## **Микроэмульгирование гидрофобных растворителей в водных растворах Твин-80**

Гальцова В.В. (студент, 4-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Веролайнен Н.В.

В настоящее время разработка методов применения трёхкомпонентных микроэмульсий, на основе поверхностно-активных веществ (ПАВ) для очистки природных объектов от токсичных загрязнений является важной и актуальной задачей. Особый интерес представляют экологически безопасные, биоразлагаемые неионогенные поверхностно-активные вещества (НПАВ), которые являются эффективными солюбилизаторами. Солюбилизация растворителей с помощью поверхностно-активных веществ даёт возможность очищать сточные воды и технологические жидкости.

Цель данной работы состоит в получении прямых трёхкомпонентных микроэмульсий и исследовании их солюбилизирующей способности.

На основе трёхкомпонентных систем Твин-80 – вода – растворитель в области концентрации НПАВ 0,1 моль/л, проведены исследования зависимости солюбилизирующей способности при введении различного количества растворителя в систему. Размерность микроэмульсий определяли методом электронной микроскопии. Определение солюбилизации проводили рефрактометрическим методом, измеряя показатели преломления растворов. Метод основан на том, что коэффициент рефракции раствора возрастает по мере увеличения количества растворённого в нём углеводорода. Измерения проводили с такими растворителями как гептан, гексан, толуол. На основании полученных данных строили графики зависимости показателя преломления от объёма добавленного углеводорода.

Исследования показали, что показатель преломления увеличивается с добавлением большего объёма растворителя. В ряду гептан – гексан – толуол величина солюбилизационной ёмкости возрастает.



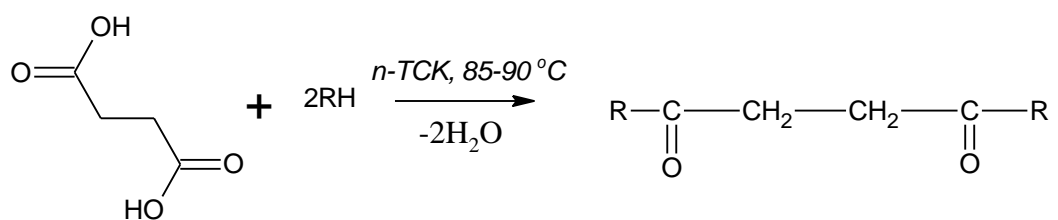
## Синтез диэфиров на основе неионогенных поверхностно-активных веществ и янтарной кислоты

Данилова Д.А. (специалист, 5-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Темникова С.А.

В последние десятилетия резко возрос интерес к классу димерных поверхностно-активных веществ (ДПАВ). Димерные ПАВ представляют собой соединения, состоящие из двух гидрофильных головных групп и двух гидрофобных хвостов, соединенных мостиком (спейсером). По сравнению с обычными ПАВ димерные аналоги обладают рядом специфических свойств.

В данной работе синтезированы димерные поверхностно-активные вещества с использованием неионогенных ПАВ (ОП-10, неонол АФ-9,10) и янтарной кислоты. Реакция протекает по схеме:



где R = C<sub>9</sub>H<sub>19</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>O(C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O)<sub>10</sub>O- или C<sub>9</sub>H<sub>19</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>O(C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O)<sub>10</sub>-.

Строение синтезированных веществ подтверждено данными ИК-спектроскопии. Исследованы коллоидно-химические свойства водных растворов исходных неионогенных ПАВ и полученных димерных ПАВ.

1. Е.А. Ломинога, К.С. Бурмистров, В.С. Гевод. Синтез димерных поверхностно-активных веществ на основе синтанола ДС-10 и адипиновой кислоты // Изв. вузов. Химия и хим. Технология. 2018, Т. 61. Вып.2, С.91-95.
2. R. Zana, J. Xia Gemini surfactants. Synthesis, interfacial and solutionphase behavior, and applications. Sur- factant Science Series – Marcel Dekker, 2004 – 331 p.

## Влияние высокочастотного электромагнитного поля на свойства поверхностно-активных веществ

Жевлакова Я. А. (студентка, 5 курс)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Веролайнен Н. В.

Цель работы — установление влияния высокочастотного (ВЧ) электромагнитного поля на физико-химические свойства растворов ПАВ и на процессы ассоциации в них при концентрациях ниже критической концентрации мицеллообразования (ККМ). Были выбраны анионный ПАВ лаурилсульфоацетат натрия, катионный ПАВ гексадецилтриметиламмоний хлорид и неионогенный ПАВ моноэтаноламид олеиновой кислоты.

Воздействие ВЧ поля на растворы мицеллообразующих поверхностно-активных веществ приводит к инициированию процессов ассоциации ионов в мицеллы при существенно более низких концентрациях по сравнению с ККМ. Данный эффект наблюдается при бесконтактном наложении поля в диапазоне частот 70, 90 и 120 МГц. Наибольшее снижение ККМ наблюдается после облучения раствора полем определенных частот, зависящих от природы ПАВ. Эффективность воздействия зависит от времени и концентрации раствора. Регистрацией удельной электропроводности растворов от времени облучения установлено постепенное изменение измеряемой величины на протяжении 30–90 минут.

Удельная электропроводность растворов поверхностно-активных веществ при воздействии высокочастотного электромагнитного поля

ПАВ	Удельная электропроводность, $\lambda_0$ См/м	Удельная электропроводность после облучения, $\lambda$ , См/м		
		Частота, f, МГц		
		70	90	120
АПАВ	226	247	259	261
КПАВ	103,5	111	114,1	118,8
НПАВ	142	141,6	141,9	140,1

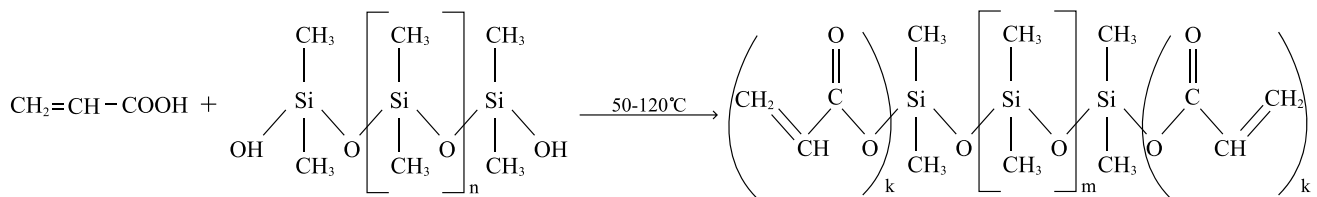
При воздействии ВЧ поля на АПАВ удельная электропроводность значительно увеличивалась. Меньшее увеличение удельной электропроводности наблюдалось у КПАВ. При воздействии ВЧ излучения на НПАВ значения удельной электропроводности уменьшаются. Под воздействием электромагнитного поля в растворах мицеллярных ПАВ происходят процессы самоорганизации системы при значительно более низких концентрациях, чем в его отсутствие.

## Исследование влияния силиконакрилового поверхностно-активного вещества на устойчивость суспензий ментола

Ковальчук К.М. (магистрант 2-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Веролайнен Н. В.

В настоящей работе был проведен ряд синтезов силиконакрилового поверхностно-активного вещества (ПАВ) при различных температурах от 50 °С до 120 °С с дальнейшим исследованием его стабилизирующих свойств. Для эффективного улучшения свойств конечного продукта синтеза проводили методом гибридной безэмульсионной сополимеризации акриловой кислоты и полидиметилсилоксана с реакционноспособными ОН-группами. Схема синтеза представлена ниже.



Строение полученного силиконакрилового ПАВ подтверждали качественными реакциями на наличие эфирных и двойных связей.

Исследование стабилизирующей способности проводилось в дисперсной системе ментол – вода с дальнейшим определением зависимости концентрации стабилизатора от показателя устойчивости раствора. Для определения степени агрегативной устойчивости суспензий была проведена оценка качества с помощью исследования таких факторов, как однородность частиц дисперсной фазы, высота отстоявшегося слоя, ресуспендируемость и седиментативная устойчивость. Для проведения сравнительной характеристики были исследованы суспензии с добавлением таких стабилизаторов, как твин-80, олеокс-7, олеокс-9 и лаурокс-9. Было установлено, что полученный силиконакриловый ПАВ обладает наиболее эффективным стабилизирующим действием в исследуемой коллоидной системе.

## **Четвертичные соли N-метилморфолина**

Кофейникова А. М. (студент, 4-го года обучения)

Научный руководитель: д.х.н. профессор Ворончихина Л. И.

Известно, что четвертичные соли морфолина, широко применяют, как бактерициды, ингибиторы коррозии, фармацевтические препараты. Соли с длинноцепочечными радикалами являются поверхностно-активными веществами (ПАВ), а также перспективными ионными жидкостями. В настоящей работе были получены четвертичные соли N-метилморфолина с длинноцепочечным радикалом, принадлежащие к классу катионных ПАВ. Исходный N-метилморфолин получен путем алкилирования морфолина с метилойодистым в соотношении реагентов 2:1. На его основе реакцией нуклеофильного замещения были получены четвертичные соли при кипячении в абсолютном ацетоне в течение 8–10 часов. Выходы составили 40–70%. Чистота продуктов подтверждена данными тонкослойной хроматографии, строение данными ИК-спектроскопии, наличие галогенидов – пробой Бейльштейна. Продукты после перекристаллизации представляют собой белые кристаллические вещества. Сняты изотермы поверхностного натяжения водных растворов синтезированных соединений, рассчитаны ККМ и проведено сравнение данных с величинами  $\sigma$  и ККМ солей пиридиния. В отличие от плоской полярной головной группы пиридиния, у солей морфолина головная группа имеет форму кресла, что может представлять трудности упаковки в мицелле, из-за чего значения ККМ солей морфолина выше по сравнению с солями пиридиния [1].

1. Бурмист М.В. Современное состояние и основные тенденции развития перспективных ионных жидкостей / М.В. Бурмист, О.С. Свердловская // Журнал Вестник Удмуртского университета. – 2012. – № 1. – С. 55–68.

## **Функциональные добавки и их влияние на свойства водно-дисперсионных полиакриловых красок**

Кружков С.М. (магистрант 1 года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Темникова С.А.

В данной работе изучены свойства и установлена зависимость влияния функциональных добавок на конечные свойства покрытия. В качестве вводных материалов использовали полиакриловую дисперсию АКРИЛАН 101, минимальная температура пленкообразования (МТП) которой 13–19°C. В качестве коалесцирующего агента использовали этиленгликоль, тексанол, DPnB.

Значение МТП определяли нанесением однородного слоя полимерной дисперсии, содержащей различные количества коалесцента, на поверхность с контролируемым градиентом температуры. Минимальное количество коалесцентов устанавливали по отсутствию трещин при формировании пленок.

В ходе работы было выявлено, что очень эффективными для пленкообразования дисперсии Акрилан-101 из исследованных коалесцентов выступают DPnB и тексанол. Покрытия, которые были сформированы при участии DPnB отличаются хорошей твердостью и деформационно-прочностными свойствами, близкими к свойствам пленок, которые получены без коалесцентов. Наименьшим влагопоглощением и наилучшей паропроницаемостью обладают свободные пленки, которые сформированы также при участии DPnB. Это даёт основание считать, что на базе исследуемой дисперсии и DPnB можно изготавливать высококачественные материалы для наружных работ.

1. Klein, D.R. Organic chemistry as a second language: second semester topics / D.R. Klein. – 4 изд. – US: Wiley, 2016. – 400 с.

2. Stoye D., Freitag W. Paints Coating and Solvents, 2nd Edition, Wiley VCH, Weinheim, 1998; Chapter 4, Pigments and Extenders. P. 143–158.

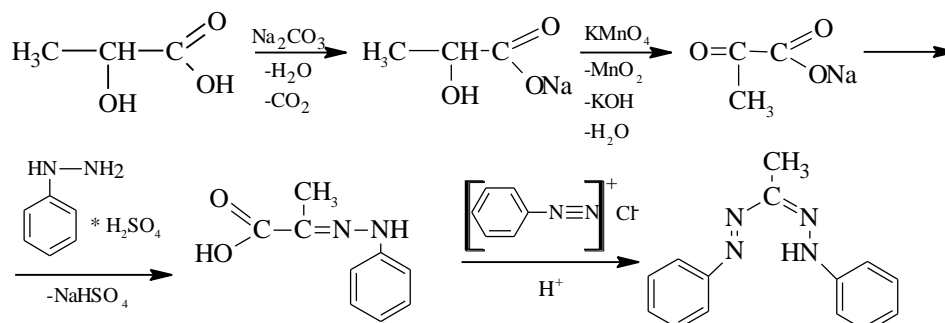
## Получение азогидразонов на основе 2-гидроксипропановой кислоты

Кудряшова Е.А. (магистр, 1-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Егорова И.Ю.

Особенность строения азогидразонов - наличие в фармазановой цепи двух кратных связей и атома азота с неподелённой электронной парой обуславливает возможность образования единой сопряженной системы и их способность образовывать различные производные. Формазаны широко применяются как комплексообразователи, используются при изучении ферментативных процессов в клетках. С ионами переходных металлов формазаны образуют ярко окрашенные хелатные комплексы, которые применяются как свето- и термостойкие красители для полиэфирных и полиамидных волокон, а также шерсти. Представленная работа посвящена получению азогидразонов на основе 2-гидроксипропановой кислоты.

Методом синтеза формазанов является реакция азосочетания арилдиазониевых солей с гидразонами альдегидов и  $\alpha$ -кетокислот, а также с соединениями, содержащими активированную электроакцепторными заместителями метиленовую группу, протекающим через образование соответствующих гидразонов. В данной работе последовательным взаимодействием фенилгидразина и фенилдиазония хлорида с окисленной до 2-окси-пропановой (пировиноградной) кислоты 2-гидроксипропановой (молочной) кислотой получен 1,5-дифенил-3-метилазогидразон.



Определены температура плавления и растворимость полученного соединения, с помощью ИК-спектроскопического анализа подтверждено строение полученного азогидразона.

## Влияние структуры аммониевых ионных жидкостей на эквивалентную электропроводность их растворов

Лебедев И. И. (студент, 5 курс)

Научный руководитель: к.х.н., доцент Журавлев О. Е.

Ионные жидкости (ИЖ) класс соединений, состоящих исключительно из ионов и имеющих, как правило, низкие температуры плавления (ниже 100 °С). Ионные жидкости могут использоваться в органическом синтезе в качестве растворителей. В связи с этим появляется большой интерес в изучении влияния структуры ионной жидкости и используемого растворителя на свойства их растворов.

В данной работе была исследована зависимость электропроводности (ЭП) растворов ИЖ тетрафторборатов N-алкилтриэтиламмония с различной длиной алкильного заместителя в ацетоне и ацетонитриле.

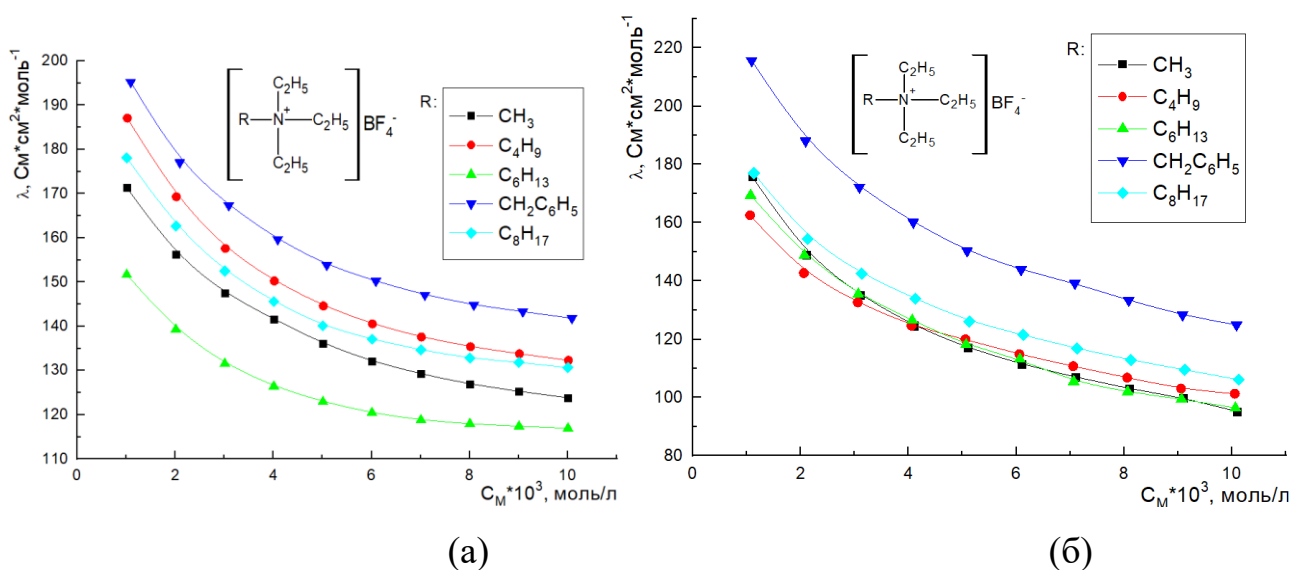


Рис. 1. Зависимость эквивалентной ЭП разбавленных растворов тетрафторборатов N-алкилтриэтиламмония от концентрации в ацетонитриле (а) и ацетоне (б) при 25°С.

Эквивалентная ЭП изученных ИЖ увеличивается с разбавлением раствора. ЭП исследованных ИЖ в ацетонитриле ниже, чем в ацетоне. Этот факт объясняется более высоким показателем вязкости для ацетонитрила.

## Исследование антирадикальной активности природных и синтетических антиоксидантов

Автор: Машкин Л.О (Магистрант 1-го года обучения)

Научный руководитель: доцент к.х.н. Рыжков Ю.А.

Регулирование процессов окисления и уровня, накапливающихся при этом в клетках организма активных форм кислорода (АФК), осуществляется защитной антиоксидантной системой – одним из звеньев сложной системы адаптации организма. Под влиянием на организм человека неблагоприятных экологических факторов, защитная антиоксидантная система перестает справляться со своей функцией регулятора содержания окислителей, вследствие этого, накапливается избыточное количество АФК – развивается окислительный стресс, при котором требуется применение веществ, обладающих антиоксидантными свойствами [1]. Необходимо владеть информацией как о состоянии антиоксидантной системы организма, так и об антиоксидантной активности (АОА) потребляемых препаратов. Существует ряд методов определения антиоксидантной активности. Одним из доступных является потенциометрический метод определения АОА. Медиатором служит система  $K_3[Fe(CN)_6]/K_4[Fe(CN)_6]$ .

Данным методом была определена АОА в аскорбиновой кислоте, цистеине, пирогаллоле, пирокатехине.

Антиоксидант	T, K	АОА·10 <sup>4</sup>
Аскорбиновая кислота	298	2,84
Цистеин	298	5,66
Пирогаллол	302	2,14
Пирокатехин	302	6,31

1. Шарова Е. И. Антиоксиданты растений: учеб. пособие. — СПб.: Изд-во С.-Петербур. ун-та. 2016. — 140 с.



## Исследование свойств четвертичных солей аминов с металлосодержащим комплексным ионом.

Михайлова В. А. (специалист, 5 курс)

Научный руководитель: д.х.н., профессор Ворончихина Л.И

Металлосодержащие ионные жидкости известны уже несколько десятилетий, и область их применения постоянно расширяется. Атом металла влияет на свойства ионных жидкостей. Придание новых свойств ионным жидкостям приводит к получению многофункциональных материалов.

Структурный блок  $[MX_4]^{2-}$  типичен для множества металлосодержащих ИЖ, называемых также галогенометаллатными ионными жидкостями. [1].

Нами были синтезированы ИЖ с тетрахлорпалладат анионом и катионом N-алкилпиридиния с различной длиной алкильных заместителей. Схема реакций представлены ниже.



где  $\mathbf{R}^1$ :  $\text{C}_4\text{H}_9$ -,  $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$ -,  $\text{C}_{12}\text{H}_{25}$ -,  $\text{C}_{16}\text{H}_{33}$ -;  $\mathbf{Hal}$ :  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$ .

Строение полученных соединений подтверждены данными УФ- и ИК-спектроскопии. Также определена электропроводность разбавленных растворов ИЖ в ацетонитриле. По результатам исследований заключены выводы о влиянии природы катиона на электропроводность тетрахлорпалладатов N-алкилпиридиния.

1. Zazybin A.G., Rafikova Kh., Zolotareva Yu. D., Дембицкий В.М., Sasaki T. Металлосодержащие ионные жидкости: современные представления и применение // Успехи химии. 2017. Т. 86. №12. С. 1254-1256.

## Исследование пенообразующих свойств растворов кокамидопропил бетаина

Просьяник Ю.А.(магистрант, 2-го года обучения)

Научный руководитель: к.х.н, доцент Веролайнен Н.В.

В настоящей работе исследованы пенообразующие свойства водных растворов кокамидопропил бетаина, данные представлены в таблице.

Концентрация ПАВ, М	Кратность пены	Устойчивость пены	
		Без обработкиУЗ	С обработкойУЗ
0,05	1,294	1	1,1
0,01	1,235	1,111	1,167
0,001	0,647	1,087	1,309

В ходе исследования осуществлялась обработка растворов ультразвуком посредством ультразвуковой мойки Teshrap TYPE UM-2, с рабочей частотой 25кГц и мощностью 150 Вт. В течение времени эксперимента (60 мин) раствор кокамидопропил бетаина с концентрацией 0,05М (а) при естественном осаждении потерял 4,5% от общего объема пены, растворы 0,01М(а)и 0,001М(а) -19% и 12% соответственно (рис.).

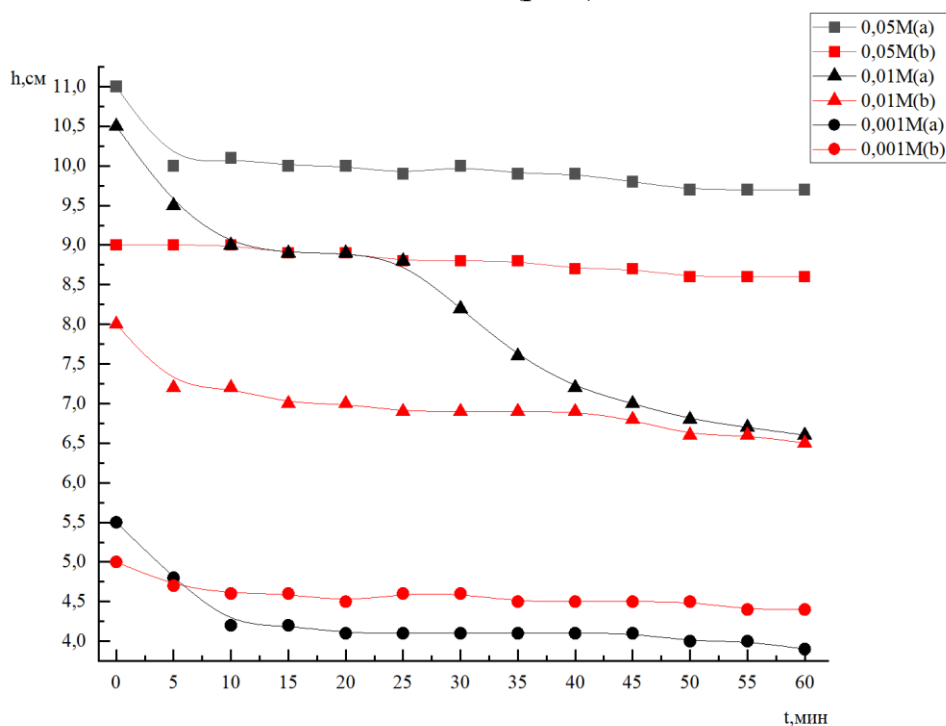


Рис. Зависимость высоты пены кокамидпропил бетаина (h) от времени (t) оседания.

Исследование показало, что воздействие ультразвуковых колебаний ускорило разрушение пены в 2 раза во всех случаях.



## **Влияние природы аниона в пиридиниевых ионных жидкостях на размер наночастиц сульфида цинка**

Рассказова Н.Ю. (магистрант, 2-го года обучения)

Научный руководитель: к.х.н., доцент Журавлев О. Е.

Сульфид цинка относится к наиболее распространенным и хорошо известным полупроводниковым материалам, которые излучают в видимой области спектра при оптическом или электрическом возбуждении. Интерес к таким соединениям постоянно растет на протяжении последних двух десятилетий из-за возможности их использования в наноразмерных кристаллов – квантовых точек, обладающих уникальными оптическими свойствами.

В настоящей работе проведено исследование влияния концентрации и природы ионных жидкостей на размеры наночастиц сульфида цинка в золях. В качестве ионных жидкостей были использованы гексафторфосфаты и тетрафторбораты N-алкилпиридиния в растворе ацетонитрила. Для оценки среднего размера наночастиц полупроводника по величине сдвига края фундаментального поглощения спектральным методом были записаны спектры поглощения в УФ-области золь сульфида цинка. Для золь сульфида цинка полученных в растворах гексафторфосфата N-додецилпиридиния, величина среднего размера наночастиц возрастает с ростом концентрации ZnS в золе, о чем свидетельствует смещения полос поглощения в спектрах при увеличении концентрации прекурсоров. Поэтому, можно говорить о дорастивании наночастиц при добавлении очередных порций реагентов. С другой стороны, рост размера относительно не велик, т.е. вероятнее всего одновременно происходит образование и рост новых частиц. Таким образом, для получения наночастиц сульфида цинка с минимальным отклонением размеров наночастиц целесообразно использование 20%-ного раствора ионной жидкости – гексафторфосфата N-додецилпиридиния в ацетонитриле.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда*

*№ 22-23-20084, <https://rscf.ru/project/22-23-20084/>*

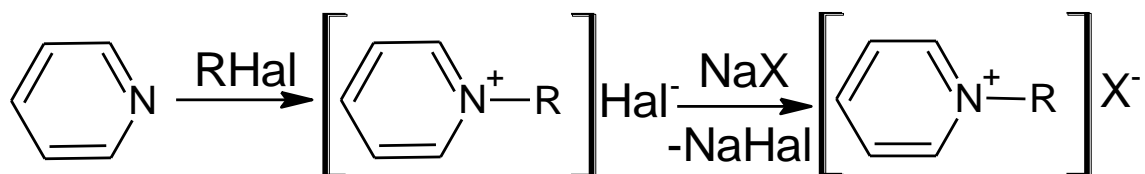
## Получение пиридиниевых ионных жидкостей для их использования в синтезе наночастиц

Суратова Е.С. (магистрант, 1 года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Журавлев О.Е.

В современной химии ионные жидкости весьма широко используются в качестве растворителей, катализаторов, электролитов для аккумуляторных батарей. Большой интерес представляет использование ионных жидкостей в процессах получения наночастиц в частности наночастиц полупроводников – квантовых точек.

Нами были синтезированы ИЖ с гексафторфосфат- и тетрафторборат-анионами и катионом N-алкилпиридиния с различной длиной алкильных заместителей ( $\text{CH}_3$ ,  $\text{C}_4\text{H}_9$ ,  $\text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ ,  $\text{C}_8\text{H}_{17}$ ,  $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$ ). Схема реакций получения представлена ниже. Полученные ионные жидкости с длинноцепочечными заместителями ( $\text{C}_8\text{H}_{17}$ ,  $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$ ) в катионе предлагается использовать в качестве стабилизаторов для получения наночастиц полупроводников в смесях с органическими растворителями.



где R:  $\text{CH}_3$ ,  $\text{C}_4\text{H}_9$ ,  $\text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ ,  $\text{C}_8\text{H}_{17}$ ,  $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$ .

Hal: I, Br.

X<sup>-</sup>:  $\text{BF}_4$ ,  $\text{PF}_6$ .

1. Петров, Б. И. Современное состояние экстракционного метода : учебное пособие / Б. И. Петров, А. Е. Леснов. – Санкт-Петербург : Лань, 2021. – 356 С.

2. Ионные жидкости: теория и практика (Проблемы химии растворов) / Отв. Ред. А.Ю. Цивадзе. – Иваново: АО «Ивановский издательский дом», 2019. – С.672.

## Получение биоразлагаемого олигомера молочной кислоты

Сурнина В.А (студент, 5-ог года обучения)

Научный руководитель: к.х.н., доцент Веролайнен Н.В.

В настоящее время экологическая обстановка остро нуждается в сохранении природных ресурсов и создании разлагаемых и биоразлагаемых полимеров. Поэтому целью настоящей работы является разработка метода синтеза олигомера молочной кислоты на основе молочной кислоты с помощью реакции поликонденсации.

В результате проведения экспериментов был получен олигомер молочной кислоты. Состав и строение полученного соединения доказаны с помощью кислотного числа и данных ИК-спектроскопии.

Таблица

Основные характеристики полученных олигомеров

Азеотроп	Катализатор	Время олигомеризации, мин	Масса олигомера, г	Выход олигомера, %	Мк.ч.
$C_7H_8$	ZnO	32	35,671	59,37	264,45
$CCl_4$		45	14,864	24,83	165,52
$C_7H_8$	$Zn(CH_3COO)_2$	34	39,874	61,58	350,03
$CCl_4$		50	25,343	42,17	277,85

В ИК спектре образца наблюдается снижение интенсивности полосы поглощения функциональной группы О–Н в области спектра  $3458-3000\text{ см}^{-1}$ , что свидетельствует о процессе поликонденсации раствора молочной кислоты. Достаточно интенсивная полоса находится в области валентных колебаний  $1764,43\text{ см}^{-1}$  свидетельствует о наличии связи С=О. Наличие полос в области  $1400-1000\text{ см}^{-1}$  характеризуют связь С–О. Если сравнить между собой два катализатора, большие выходы продукта наблюдались у олигомера, полученного с катализатором ацетатом цинка.

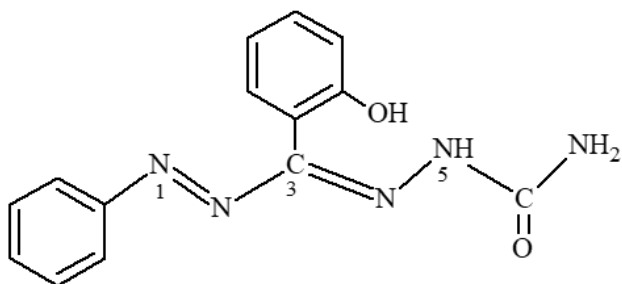
## Синтез азотсодержащих лигандов на основе семикарбазида

Сырова Е. М. (студентка, 5 курс)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Егорова И. Ю.

Формаза́ны – это соединения, содержащие азогидразонную систему связей  $-N=N-C=N-N-$ . Они биологически активны, широко применяются как комплексообразователи, образуют с ионами переходных металлов ярко окрашенные хелатные комплексы, которые применяются как свето- и термостойкие красители, а также их рассматривают в качестве катализаторов. Представленная работа посвящена получению металлокомплексов на основе азотсодержащих лигандов – 1,3-дифенил- и 1-фенил-3-(2'-гидроксифенил)-5-аминокарбонилформаза́нов и сульфата меди (II).

Синтез металлокомплексов проходил в три стадии. На первой стадии взаимодействием бензальдегида и салицилового альдегида с гидрохлоридом семикарбазида получили семикарбазоны бензальдегида и салицилового альдегида. На второй стадии реакцией азосочетания семикарбазонов с фенилдиазоний хлоридом синтезированы 1,3-дифенил- и 1-фенил-3-(2'-гидроксифенил)-5-аминокарбонилформаза́ны. Структурная формула аминокарбонилформаза́на на основе салицилового альдегида представлена ниже:



На третьей стадии на основе аминокарбонилформаза́нов получены металлокомплексы с медью (II): бис-1,3-дифенил-5-аминокарбонил- и бис-1-фенил-3-(2'-гидроксифенил)-5-аминокарбонилформаза́наты.

Полученные соединения представляют собой кристаллические вещества темно-фиолетового и темно-коричневого цветов. Исследована растворимость и температура плавления. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопического анализа.

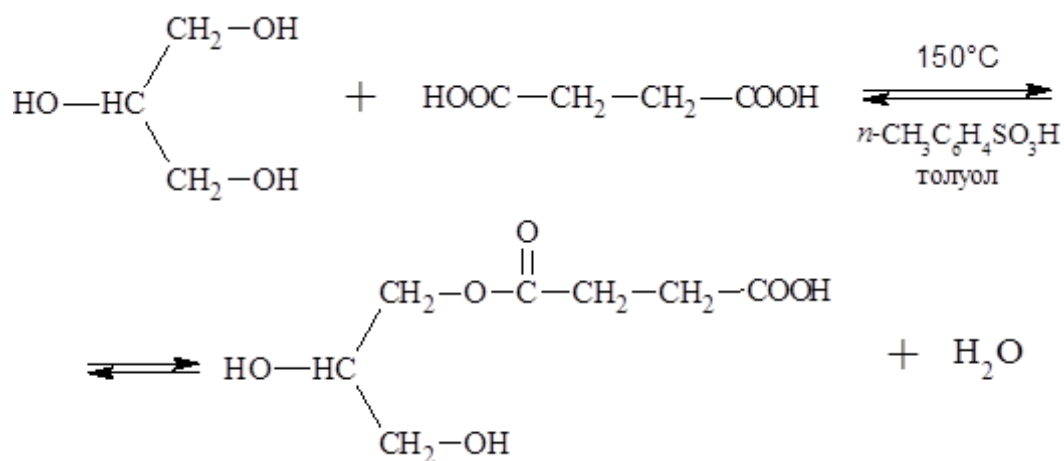
## Синтез сукцинилглицерида методом азеотропной этерификации

Тарабанова А.А. (студент, 4 курс)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Егорова И.Ю.

Общим свойством, объединяющим эмульгаторы и отличающим их от других пищевых добавок, является поверхностная активность. Благодаря огромному многообразию свойств и специфичности действия в пищевых продуктах, одними из наиболее широко используемых ПАВ являются моноглицерины жирных кислот. Все глицериды являются неионогенными эмульгаторами. В группу пищевых добавок глицеридной природы входят неполные ацилглицерины (глицериды). Представленная работа посвящена получению эмульгатора на основе глицерина и янтарной кислоты.

Синтез сукцинилглицерида проведен при 150°C на основе взаимодействия глицерина и янтарной кислоты в присутствии *n*-толуолсульфокислоты по следующей схеме:



Реакция этерификации протекает с образованием основного продукта и отделением азеотропной смеси толуола с водой в водоотделительной ловушке.

Полученное соединение представляет собой вязкое вещество коричневого цвета. Исследованы физико-химические свойства, растворимость и определена температура плавления. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопического анализа.

## Влияние степени наполнения полимера лестосила на его термическую стабильность.

Шамарина К.А. (студентка 4-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Веролайнен Н.В.

Для применения полимерных композитов в условиях повышенных температур большое значение имеет их термическая стабильность, которая характеризует химическую устойчивость полимера при высоких температурах в различных атмосферах. Термическая деструкция полимера сопровождается выделением летучих продуктов, вследствие этого имеют место потери в весе исследуемого материала.

Изготовленные плёнки лестосила, с процентным наполнением карбонильным железом от 20 до 50% были исследованы на дериватографе Termoscan-2, методом термогравиметрического анализа.

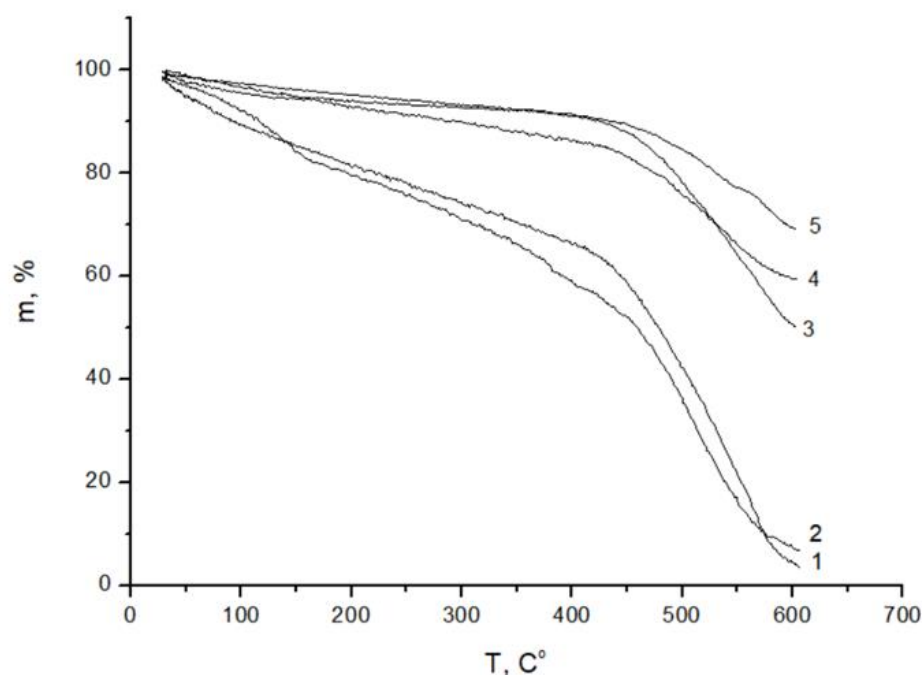


Рис.1. Кривые потери массы образцов (1-20%, 2-0%, 3-30%, 4- 40% , 5-50% наполненность).

Показано, что наполненные композиты устойчивы до 450°C, а в интервале 450-600°C происходит быстрая потеря массы. До 400°C ненаполненный материал разлагается постепенно и быстро после 450°C. Таким образом, содержание наполнителя в полимере значительно повышает его термическую стабильность.



## Определение содержания полифенолов в различных сортах пива

Шамахов В.И. (специалитет 5 курс)

Научный руководитель: к.х.н., доцент Рыжков Ю.А.

Пиво — это ферментированный напиток, производимый из воды, солода (и его добавок), хмеля и дрожжей, все эти компоненты создают большое разнообразие веществ в конечном продукте. Среди этих веществ выделяются полифенолы, которые характеризуются присутствием более чем одной функциональной группы в молекуле.

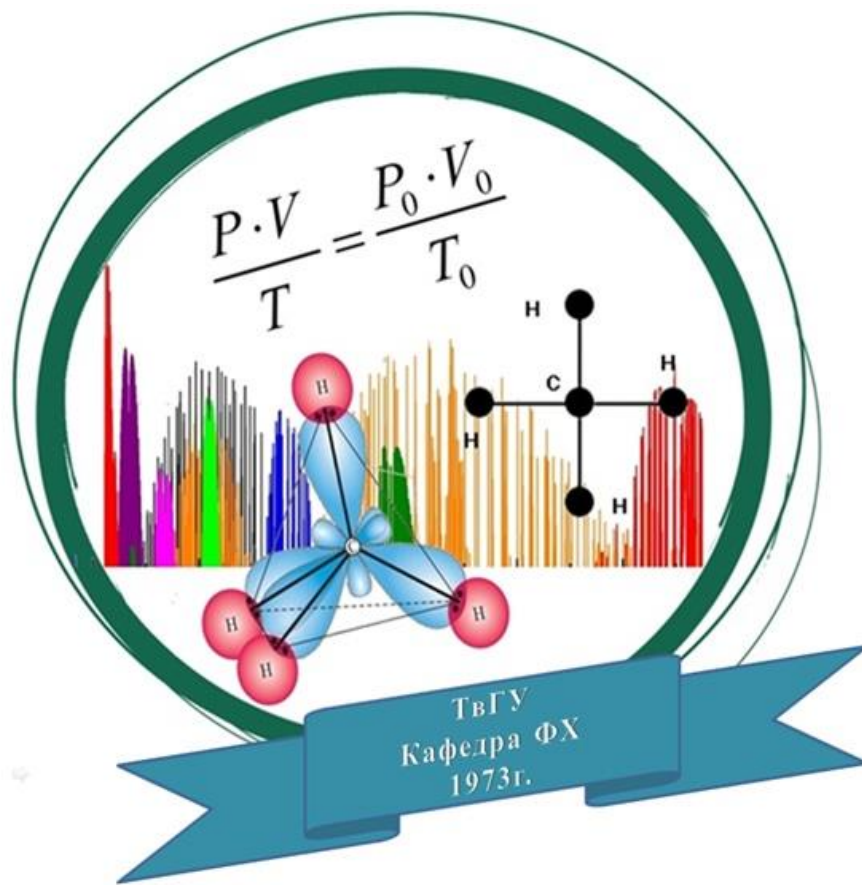
Метод определения основан на реакции полифенолов с ионами железа в щелочном растворе. Измерения поглощения красного окрашенного раствора проводилось с использованием спектрометра Perkin Elmer Lambda 25 при 600 нм относительно холостой пробы [1]. Результаты анализа представлены в таблице.

Таблица  
Содержание полифенолов (Р) и отличительные характеристики пива.

Сорт пива	Отличительные черты	Р, мг/л
IPA	Значительное сухое охмеление	249,5
Медовуха	Добавление мёда	43,9
Lager	Солод, ячмень и хмель	106,9
Сидр	Добавление яблочного сока	117,4
Пшеничное	Добавление пшеницы, кориандра и апельсиновой цедры	147,0
Тёмное	Добавление жжёного и карамельного солодов	241,7

Больше всего полифенолов содержится в образцах, где присутствуют большее количество хмеля и жжёного с карамельным солодом.

1. Kennedy A. Laboratory Measurements and Methods: PhysChem Methods: Wort and Beer. Quallity Pillar – 2005, С. 1-3.



## Секция физической химии



## **Формирования наночастиц серебра в цистеин-серебряном растворе под действием УФ излучения в сравнение с действием видимого излучения**

Барсегян Т.А. (бакалавр, 4 курс)

Научный руководитель: профессор, д.х.н. Пахомов П. М.

В работе проведены исследования по формированию НЧА<sub>Ag</sub> в ЦСР, с помощью различных физико-химических методов. В ходе УФ облучения ацетатного ЦСР обнаружено, что растворы окрашиваются с различной интенсивностью в зависимости от продолжительности облучения. Аналогично с УФ излучением, влияет и видимое излучение на ЦСР, существенное различие заключается лишь в том, что в данном случае процесс более медленный и занимает дни.

Впоследствии было установлено, что в растворах происходит процесс самоорганизации под действием излучения с образованием НЧА<sub>Ag</sub>. Доказательством образования НЧА<sub>Ag</sub> в ЦСР при облучении свидетельствуют данные УФ спектроскопии. При облучении ЦСР, основные полосы поглощения 314 нм и 394 нм, свидетельствующие о наличии супрамолекулярных цепей из молекул меркаптида серебра, исчезали и вместо них появлялись новые полосы с максимумами 405 и 460 нм. Их появление обусловлено плазмонным резонансом свободных электронов на поверхности образующихся НЧА<sub>Ag</sub> разного размера. Можно сделать вывод, что использование УФ излучения, с целью формирования в ЦСР наночастиц, наиболее эффективный метод, по сравнению с видимым освещением.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №20-33-90096) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.*

Кислые L-аминокислоты. Квантовая теория атомов в молекулах.

Бойкова С.С. (студентка, 3 курс)

Научный руководитель: к.х.н. Русакова Н.П.

Исследованы конформеры глутаминовой и аспарагиновой кислот (Рис.):

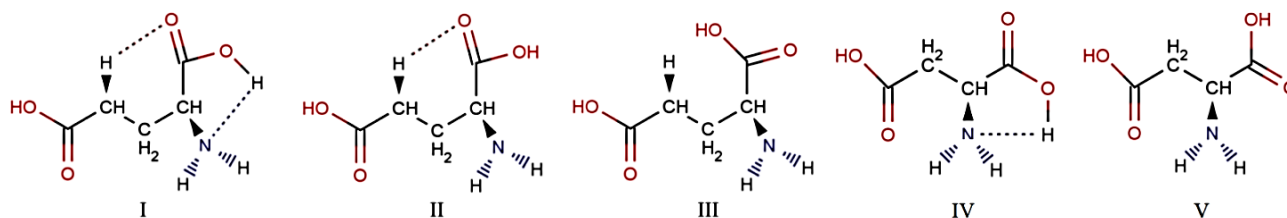


Рис.: Конформер L-глутаминовой кислоты с водородными связями N<sup>⋯</sup>H и O<sup>⋯</sup>H – I, с O<sup>⋯</sup>H – II, без слабых взаимодействий – III; L-аспарагиновая кислота с N<sup>⋯</sup>H – IV, без – V

Среди конформеров I–III наименьшей  $E_{total}$  обладает конформер I, а среди IV–V минимальное значение  $E_{total}$  соответствует IV, что делает их наиболее энергетически выгодными состояниями.

Наличие водородной связи (ВС) в I и IV приводит к оттоку электронной плотности с 2COOH в сторону азота аминогруппы, что сопровождается увеличением  $q(2COOH)$  по отношению к аналогичным характеристикам в остальных структурах (Таблица). Отсутствие данной ВС в II, III и V характеризуется наиболее высоким значением  $q(NH_2)$ . Вторая ВС в I между кислородом 2COOH и водородом 1CH<sub>2</sub>, приводит к обеднению  $\rho(r)$  атомного бассейна 1CH<sub>2</sub> и значительным увеличением ее  $q(1CH_2)$ .

Таблица:

Заряды  $q(R)$  групп\* глутаминовой и аспарагиновой кислот.

	1COOH	1CH <sub>2</sub>	2CH <sub>2</sub>	CH	2COOH	NH <sub>2</sub>
$q(R)$ , а.е.						
I	-0,162	0,145	0,078	0,370	-0,116	-0,316
II	-0,160	0,116	0,109	0,378	-0,148	-0,296
III	-0,151	0,103	0,111	0,414	-0,185	-0,296
IV	-0,144	0,108	–	0,424	-0,098	-0,320
V	-0,137	0,134	–	0,454	-0,161	-0,290

\*Нумерация групп COOH и CH<sub>2</sub> по молекуле в порядке расположения слева направо



## **Исследование полимерных пористых материалов методом**

### **ИК спектроскопии**

Ватаманюк В.О. (студент 4 курса)

Руководитель: Пахомов П.М.

Цель данной работы - исследование структуры пористых пленок из полиэтилена (ПЭ), подвергнутых крейзингу с разной степенью вытяжки методом ИК спектроскопии [1].

В качестве образцов - 6 пленок из ПЭ с разной степенью пористости, полученные методом крейзинга на кафедре высокомолекулярных соединений МГУ. Регистрация ИК спектров в режиме пропускания проводили на спектрометре «Vertex-70» фирмы Bruker. Общая пористость, средний размер пор и их распределение в полимерной матрице по размерам осуществляли в соответствии с методикой, разработанной в лаборатории спектроскопии ЦКП ТвГУ [2]. Для контроля применялся метод СЭМ. Микроснимки поверхности образца получали с помощью микроскопа «JEOL JSM-6610LV» (Япония).

В ходе проведенных спектроскопических исследований оценена общая пористость образцов, средний размер пор, их распределение по размерам. Данные исследования сложно осуществить другими методами. ИК спектроскопические данные согласуются с результатами метода СЭМ.

*Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования ТвГУ.*

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Ярышева А.Ю., Багров Д.В., Рухля Е.Г. и др. // Высокомолек. Соед. Сер. А. 2012. Т. 54. №10. С. 1507-1515.
2. P. M. Pakhomov, M. N. Malanin, S. D. Khizhnyak. // Polymer Sci., 2005, V.47B, N 5-6, P. 194- 199.



## **Зелёный синтез наночастиц серебра с использованием водных экстрактов листьев клёна**

Волкова В.М. (студент, 4 курс)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Хижняк С.Д.

Синтез наночастиц серебра (НЧС) с помощью экстрактов различных растений является перспективным, экономически выгодным методом, который предполагает и крупномасштабное производство. Главное преимущество использования растительных экстрактов для синтеза наночастиц в простоте метода. Кроме того, важно, что наночастицы, синтезированные в экстрактах растений, обладают функционализированной - модифицированной поверхностью. Целью данной работы является изучение кинетики зеленого синтеза наночастиц серебра с использованием водных экстрактов листьев клена.

В данной работе НЧС были получены с помощью зеленого синтеза с использованием водных экстрактов листьев клёна, собранных в июле 2021 г. в г. Феодосия, г. Кимры, дер. Полустово, г. Твери на Вагжановском переулке и в районе Мамулино. Анализ водных экстрактов после добавления нитрата серебра с помощью УФ спектроскопии показал, что наиболее интенсивная полоса плазмонного резонанса, отвечающая за формирование НЧС, соответствует образцу листьев, собранных в микрорайоне Мамулино г. Твери. Для оценки влияния концентрации  $Ag^+$  на скорость образования и размер НЧС были приготовлены образцы из листьев, собранных в Мамулино, в которых варьировали соотношение объема водного экстракта и  $Ag^+$  следующим образом: 1:1; 1:0,5; 1:2. Электронные спектры этих экстрактов дают представление о кинетике роста НЧС. Через 7 дней концентрация НЧС в образцах увеличилась почти в 2 раза. Результаты сканирующей электронной микроскопии подтверждают разницу в размере частиц в зависимости от содержания нитрата серебра.

*Работа выполнена на оборудовании лабораторий спектроскопии и электронной микроскопии ЦКП ТвГУ.*



## **Спектроскопический подход для оценки стабильности прямых эмульсий**

Воробьев А.А. (студент 4 курса)

Руководители: П. М. Пахомов

Работа направлена на разработку нового спектроскопического подхода в оптическом диапазоне длин волн (в видимой и УФ областях) для оценки стабильности эмульсий. Объектом исследования послужила природная прямая эмульсия – сливки (М/В), капли молочного жира (дисперсная фаза), диспергированные в воде (дисперсная среда), концентрацией 0,00025%.

Эмульсию готовили с помощью мешалки WiseMix VM-10. Основными методами исследования являлись УФ спектроскопия, для контроля использовали метод динамического светорассеяния (ДСР). Регистрация УФ спектров эмульсий осуществлялась в кварцевой кювете толщиной 1 см на УФ спектрометре «EvolutionArray» фирма «ThermoScientific», размеры капель и их распределение в эмульсии определяли с помощью метода ДСР на приборе «Zetasizer ZS» фирмы «MaivernInstrumentsLtd».

Стабильность эмульсии контролировалась посредством определения изменения во времени размеров капель и их распределения в эмульсии. Электронные спектры, полученные в ходе эксперимента, обработаны по методике, представленной в работе.

Установлено, что рассматриваемые эмульсии являются средами, сильно рассеивающими свет. Показано, что интенсивность электронных спектров, снятых через равный интервал времени. Снижается прямо пропорционально уменьшению размеров капель молочного жира в эмульсиях.

Сопоставляя средние размеры капель и их распределения, полученные УФ спектроскопическим методом, с данными метода ДСР установили хорошую корреляцию, что подтверждает правильность разрабатываемого спектроскопического метода для оценки стабильности эмульсий.

*Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования ТвГУ.*

## Теория графов в изучении корреляций структура – теплоёмкость двухатомных спиртов

Козлова Р.Р. (магистр, 1 год обучения)

Научный руководитель: профессор, д.х.н. Виноградова М.Г.

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций «структура – теплоёмкость» в двухатомных спиртах. Для достижения поставленной цели, были рассмотрены некоторые топологические индексы (ТИ) и зависимости вида  $P=f(\text{ТИ})$ , наиболее точно коррелирующие с теплоёмкостью гликолей. Для гликолей нами были выведены расчётные схемы в третьем приближении [1]:

$$P_{C_nH_{2n+2}O_2} = p_1b + p_1'b' + p_2\Gamma_{CC} + p_2'\Gamma_{CO} + p_2''\Gamma_{OO} + R\Delta_{CCC} + \\ + R'\Delta_{CCO} + R''\Delta_{COO} + p_3\tau_{CC} + p_3'\tau_{CO} + p_3''\tau_{OO} + p_4\omega_{CC} + p_4'\omega_{CO} + p_4''\omega_{OO}$$

Здесь  $p_1, p_2, p_3, p_4, \dots$  – соответственно такие индексы как число путей длины один, два, три;  $R$  – число троек смежных рёбер;  $b, \Gamma_{CC}, \dots$  – соответствующие параметры. По данной схеме проведены численные расчёты  $C_p^0$  (ж, 298 К) гликолей. Получены новые данные, согласующиеся с экспериментом [2]. Средняя абсолютная ошибка расчета ( $|\bar{\epsilon}|$ ) и максимальное отклонение ( $\epsilon_{\max}$ ) соответственно, составляют 2,1 Дж/мольК и  $\pm 3,0$  Дж/мольК.

1. Виноградова М.Г., Козлова Р.Р., Савельева Т.А. Энтальпия образования двухатомных спиртов. Численные расчёты и основные закономерности. // Вестник ТвГТУ. Серия «Строительство. Электротехника и химические технологии». 2021. № 1 (9). С. 71-79.
2. Lange's Handbook of Chemistry / Editor: J.A. Dean. (15th Edition), McGraw-Hill. 1999. [Электронный ресурс]. — URL: <http://fptl.ru/biblioteka/spravo4niki/dean.pdf> (дата обращения: 20.12.21).



## Атомно-абсорбционный метод определения марганца в створах Иваньковского водохранилища

Мананникова М.Д. (магистр, 1 год обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Павлов А.С.

Целью настоящей работы является – количественное определение содержания марганца в воде Иваньковского водохранилища.

Отбор проб осуществлялся на четырех створах: 1.) г. Тверь выше города, 0,6 км выше моста окружной дороги; 2) г. Тверь, ниже города, 15 км ниже впадения р. Тверца; 3) д. Безбородово (Конаковский район), в черте деревни; 4.) г. Конаково, 0,3 км ниже города. Работа проводилась с помощью атомно-абсорбционного спектрофотометра «КВАНТ-2А». Результаты исследования сведены в таблицу.

Таблица: Содержание марганца (мг/л) в пробах, взятых в 2021 г. в створах Иваньковского водохранилища

Место отбора проб	Концентрация марганца (мг/л)	
	ПДК	Эксперимент
1.	0,01	0,0448
2.		0,0473
3.		0,12
4.		0,0881

Во всех створах в 2021 году наблюдалось значительное превышение ПДК. Такие высокие концентрации марганца характерны для Иваньковского водохранилища из-за значительной заболоченности водосборного бассейна, а также поступления марганца в результате выщелачивания железомарганцевых руд и других минералов, содержащих данный элемент; в процессе разложения остатков водных и растительных организмов, особенно сине-зеленых, диатомовых водорослей и высших водных растений.

## Топологический подход в изучении энтальпии образования карбоновых кислот

Москаленко А.Б. (студент, 4 курс)

Научный руководитель: профессор, д.х.н. Виноградова М.Г.

Экспериментальных значений энтальпии образования карбоновых кислот мало, поэтому разработка методов их расчета является актуальной. Целью данной работы является – установление количественных корреляций “структура – энтальпия образования” в карбоновых кислотах.

Получены аналитические зависимости  $P=f(\text{ТИ})$  наиболее точно коррелирующие с энтальпией образования карбоновых кислот и также рассмотрены графические зависимости "Свойство- номер изомера" и "ТИ - номер изомера", "Свойство  $P$  – ТИ". Найдено, что в одних случаях наблюдается симбатное изменение  $\Delta_f H^0_{298(\text{ж})}$  и ТИ, как  $\Delta_f H^0_{298(\text{г})}$  и  $W$ , что свидетельствует о хорошей корреляции между  $P$  и ТИ. В других случаях такой корреляции нет.

В работе также дана теоретико-графовая интерпретация аддитивных схем расчёта. Так в четвёртом приближении для карбоновых кислот имеем:

$$P_{C_n H_{2n+1} COOH} = p_1 b + p'_1 b' + p_2 \Gamma_{CC} + p'_2 \Gamma_{CO} + p''_2 \Gamma_{OO} + R \Delta_{CCC} + \\ + p_3 \tau_{CC} + p'_3 \tau_{CO} + p_4 \omega_{CC} + p'_4 \omega_{CO} + p_5 \nu_{CC} + p'_5 \nu_{CO}$$

Здесь  $p_1, p_2, p_3, p_4, \dots$  – соответственно такие индексы как число путей длины один, два, три, ...;  $R$  – число троек смежных рёбер;  $b, b', \Gamma_{CC}, \dots$  – соответствующие параметры. По данной схеме проведены численные расчёты  $\Delta_f H^0_{298(\text{ж})}$  карбоновых кислот, согласующиеся с экспериментом [1]. Получены новые данные.

1. Lange's Handbook of Chemistry / Editor: J.A. Dean. (15th Edition), McGraw-Hill. 1999. [Электронный ресурс]. — URL: <http://fptl.ru/biblioteka/spravo4niki/dean.pdf> (дата обращения: 20.12.21).

## Заряд сульфогруппы в сульфонах и влияние на него заместителя

Нефедова И.А. (студент 4 курса, направление 04.05.01)

Шостак М.С. (студент 3 курса, направление 04.05.01)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Русакова Н.П.

Целью данной работы является получение зарядов функциональных групп ( $q(R)$ ) и оценка заместителей на донорно-акцепторные свойства  $SO_2$  в сульфонах I-V(Рис).

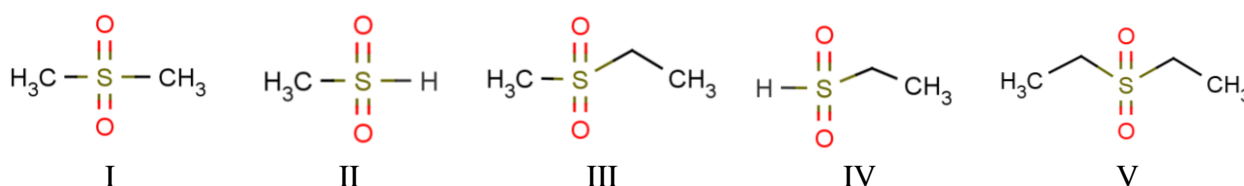


Рис:

Диметилсульфон - I; метилгидридсульфон-II; этилметилсульфон - III; этилгидридсульфон - IV; диэтилсульфон - V.

Атом серы в группе  $SO_2$  является донором электронной плотности ( $\rho(r)$ ) в молекуле метилгидридсульфона, поскольку проявляет положительное значение  $q(SO_2) = 0,011$  а.е (Таблица). При смене метилового заместителя на Н в II заряд  $q(CH_3)$  увеличивается на 0,013 а.е., что поскольку водород является акцептором  $\rho(r)$ , проявляя отрицательные значения  $q(H)$  (в II, IV  $q(H) = -0,069$  а.е.).

Акцепторные свойства сульфогруппы наиболее выражены в молекуле диэтилсульфона, что следует из наименьшей величины  $q(SO_2) = -0,156$  а.е. в V. Замена этильного заместителя на атом водорода в IV увеличивает значение заряда сульфогруппы на 0,126 а.е., подвижность  $\rho(r)$   $SO_2$  и соответственно ее электронодонорные свойства.

Таблица: Заряд групп ( $q(R)$ ) молекул сульфонов I-V

Молекула	$CH_3$	$C_2H_5$	$SO_2$	H
I	0,045	-	-0,089	-
II	0,058	-	0,011	-0,069
III	0,042	0,081	-0,123	-
IV	-	0,100	-0,030	-0,070
V	-	0,078	-0,156	-

## Квантовохимическое моделирование пентамера винилиденфторида

Родькин В.А (бакалавр, 4-го года обучения)

Научный руководитель: к.х.н., доцент Русакова Н.П.

Методом V3LYP оптимизирована геометрия пентамера винилиденфторида и получено распределение электронной плотности, соответствующее равновесному положению ядер атомов (Рис). Заряды, относительные энергии и объемы групп ( $q(R)$ ,  $\Delta E(R)$ ,  $V(R)$ ) молекулы (Таблица) получены в QTAIM с помощью программы AIMAll.

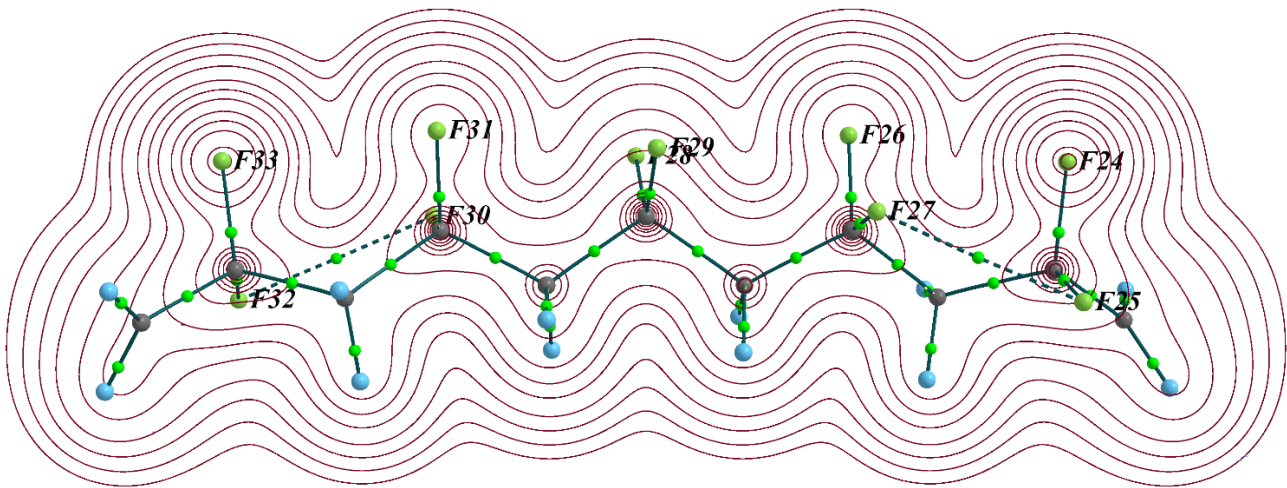


Рис.: изолинии электронной плотности в пентавинилиденфториде.

Наименьший групповой заряд у  $CF_2$ , расположенной в крайних фрагментах молекулы (Таблица), он на 0,028 а.е. меньше, чем у остальных  $CF_2$ . Значение  $\Delta E(CF_2)$  показывает дестабилизацию энергии краевых  $CF_2$ , отражающуюся в ее повышении на 50 кДж/моль по сравнению с другими  $CF_2$ , что в свою очередь сопровождается уменьшением их  $V(CF_2)$  на  $1,34 \text{ \AA}^3$ .

Таблица: Заряд групп  $q(R)$ , относительная энергия  $\Delta E(R)$  и объем  $V(R)$  пентавинилиденфторида

	CH <sub>2</sub>	CF <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub>	CF <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub>	CF <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub>	CF <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub>	CF <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub>
$q(R)$ , а.е.	0,077	-0,139	0,117	-0,111	0,112	-0,112	0,112	-0,111	0,117	-0,139	0,077
$\Delta E(R)$ , кДж/моль	240	50	30	0	0	0	0	0	30	50	240
$V(R)$ , $\text{\AA}^3$	22,97	35,51	21,93	34,17	21,96	34,16	21,96	34,17	21,93	35,51	22,97

## **Исследование механической прочности пленок на основе водных растворов L-цистеина, нитрата серебра и поливинилового спирта**

Смирнова К.А. (аспирант, 1-го года обучения)

Научный руководитель: профессор, д.х.н. Пахомов П.М.

На кафедре физической химии впервые синтезирован супрамолекулярный гидрогель на основе L-цистеина и ряда солей серебра [1]. Этот гель обладает высокими антимикробными свойствами и может проявлять высокую цитотоксическую активность [1], то есть использоваться в медицинских целях при лечении ран и ожогов или онкологических заболеваний. Так как гель получают из низкомолекулярных соединений и низкоконцентрированных водных растворов (~0.01%), он обладает низкими прочностными свойствами. В ряде случаев из подобных гелей желательнее получать прочные бактерицидные пленки, пластыри и бинты. Для этого нами предпринята попытка добавлять в цистеин-серебряный раствор (ЦСР) водорастворимые полимеры, как поливиниловый спирт (ПВС), которые обладают хорошей биосовместимостью и уже используются в медицине.

Поэтому целью настоящей работы является изучение совместимости ЦСР с ПВС и получение на основе этих смешанных водных растворов прочных пленок, обладающих бактерицидными свойствами.

В ходе данной работы были приготовлены образцы ПВС-ЦСР и чистого ПВС различных концентраций, из которых методом отлива из раствора в чашке Петри были получены плёнки. Растворы ПВС и ПВС-ЦСР были исследованы с помощью метода ротационной вискозиметрии. Полученные плёнки были подвержены механическим испытаниям на базе МГУ.

1. П. М. Пахомов, С. Д. Хижняк, М. М. Овчинников, П. В. Комаров, Супрамолекулярные гели, Тверской гос. ун-т, Тверь, 2011, 269 с.

*Выражаем благодарность Кузьмину Н.И. (ВНИИСВ) и Трофимчук Е.С. (МГУ) за помощь в проведении эксперимента.*

## Флуориметрическое определение нефтепродуктов в реках г. Твери

Соловьёва Е.Д. (магистр, 1 год обучения)

Научный руководитель: профессор, д.х.н. Виноградова М.Г.

Нефтепродукты относятся к числу наиболее распространенных и опасных веществ, загрязняющих поверхностные и грунтовые воды. Главным инструментом оценки их содержания в воде является флуориметрический метод анализа.

Целью настоящей работы является – определение нефтепродуктов в реках города Твери.

Работа проводилась на анализаторе жидкости «ФЛЮОРАТ-02-3М», предназначенным для измерения массовой концентрации неорганических и органических примесей в воде, а также воздухе, почве, технических материалах.

В данной работе исследовалась вода из водоемов г. Тверь: р. Тьмака, п. Первомайский, зона отдыха; р. Тверца, зона отдыха у Тверецкого моста по ул. Красина; р. Волга, городской пляж, наб. А. Никитина. Результаты исследования водоемов на нефтепродукты (суммарно) приведены в таблице.

Таблица:

Содержание нефтепродуктов (мг/л) в реках г. Твери

Место отбора проб	Концентрация железа (мг/л)	
	ПДК	Эксперимент
р. Волга, городской пляж, наб. А. Никитина	0,3	0,027±0,009
р. Тьмака, п. Первомайский, зона отдыха		0,027±0,009
р. Тверца, зона отдыха у Тверецкого моста по ул. Красина		0,0290±0,0102

В результате исследований выяснилось, что на конец сезона (август 2021 г.), полученные значения содержания нефтепродуктов в выбранных объектах не превысили значение ПДК.

## Распределение электронной плотности в 2-(метиламино)-1-(4-метилфенил) этаноне

Тимофеева Е.В. (студентка, 5-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Русакова Н.П.

Анализ распределения электронной плотности ( $\rho(r)$ ) в 2-(метиламино)-1-(4-метилфенил) этаноне (Рис) позволяет оценить влияние заместителей на электронные параметры (заряд  $q(R)$ , энергия  $E(R)$  и объем  $V(R)$ ) топологических групп С и СН ароматического кольца.

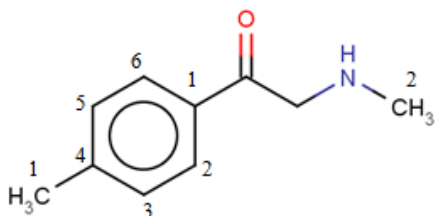


Рис.: нумерация групп 2-(метиламино)-1-(4-метилфенил) этанона

Отрицательным зарядом обладают: группа NH и O, на соседние с NH фрагментах  $\text{CH}_2$  и  $\text{CH}_3$  положительный  $q(R)$  (Таблица). Это говорит о том, что NH и O стягивают на себя  $\rho(r)$  с соседних групп, проявляя таким образом индуктивный эффект. Заместитель  $1\text{CH}_3$  проявляет электронодонорные свойства, отдавая электронную плотность в атомный бассейн соседних СН ароматического цикла.

Таблица:

Заряды групп  $q(R)$  (а.е.), энергии  $E(R)$  (а.е.) и объемы  $V(R)$  ( $\text{\AA}^3$ )  
2-(метиламино)-1-(4-метилфенил) этанона

	1C	2CH	3CH	4C	1CH <sub>3</sub>	5CH
$q(R)$ , в а.е.	-0,028	0,027	-0,006	0,002	0,056	-0,005
$E(R)$ , в а.е.	-38,133	-38,722	-38,722	-38,100	-39,884	-38,722
$V(R)$ , в $\text{\AA}$	10,9	18,6	19,7	10,4	32,5	19,7
	6CH	C	O	$\text{CH}_2$	NH	2CH <sub>3</sub>
$q(R)$ , в а.е.	0,051	0,986	-1,135	0,355	-0,651	0,347
$E(R)$ , в а.е.	-38,713	-37,468	-76,009	-39,153	-55,703	-39,725
$V(R)$ , в $\text{\AA}$	18,7	7,1	20,0	22,1	19,2	31,8

Симметричность распределения  $\rho(r)$  отмечена на группах 3CH и 5CH ароматического цикла, она проявляется в идентичности их  $q(R)$ ,  $E(R)$  и  $V(R)$ .

## QТАИМ заряды групп метилового красного

Щенухина А.С. (студент 4-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Русакова Н.П.

В рамках QТАИМ проведено исследование двух изомеров метилового красного с *транс*- (I) и *цис*- (II) положением ароматических колец относительно диазогруппы  $-N=N-$  (Рис.). Для рассматриваемых изомеров получены внутримолекулярные слабые взаимодействия двух типов:  $N^{\cdots}H$  и  $C^{\cdots}H$  (Рис.). При этом  $C^{\cdots}H$  характерна для *цис*-формы и принимает участие в стабилизации пространственной структуры.

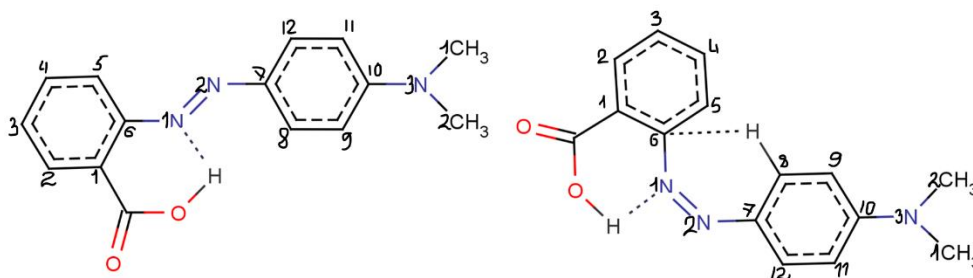


Рис.: Транс-изомер метилового красного - I, *цис*-форма – II

Расчёт полных электронных энергий конформеров ( $E_{total}$ ) показал, что наиболее энергетически выгодной является форма I. Отличие в  $E_{total}$  между I и II составляет 66 кДж/моль. В результате взаимной пространственной ориентации и взаимодействия электронной плотности  $\rho(r)$  ароматических циклов в области диазогруппы в *цис*-состояниях происходит понижение  $q(5CH)$ ,  $q(6C)$ ,  $q(7C)$  и  $q(8CH)$ , а также повышение  $q(1N)$  и  $q(2N)$ .  $q(CH)$  3, 4, 9 - 11,  $q(3N)$ ,  $q(CH_3)$  изменяется незначительно. В форме II азогруппы  $q(1N=2N)$  увеличивается на 0,115 а.е. по сравнению с I. Заряд группы  $COOH$  увеличивается с появлением второго взаимодействия  $C^{\cdots}H$  в II.

Таблица:

Заряды групп  $q(R)^*$  шести форм метилового красного

	COOH	1C	2CH	3CH	4CH	5CH	6C	1N	2N
I	-0,112	-0,028	0,079	0,017	0,020	0,056	0,333	-0,530	-0,482
II	-0,093	-0,022	0,077	0,018	0,021	0,036	0,283	-0,475	-0,422
	7C	8CH	9CH	10C	11CH	12CH	3N	1CH <sub>3</sub>	2CH <sub>3</sub>
I	0,387	0,053	0,006	0,441	-0,005	0,046	-1,142	0,432	0,430
II	0,329	0,047	0,003	0,435	-0,003	0,051	-1,137	0,427	0,426

\*номер группы в таблице соответствует номеру топологического атома на Рис.