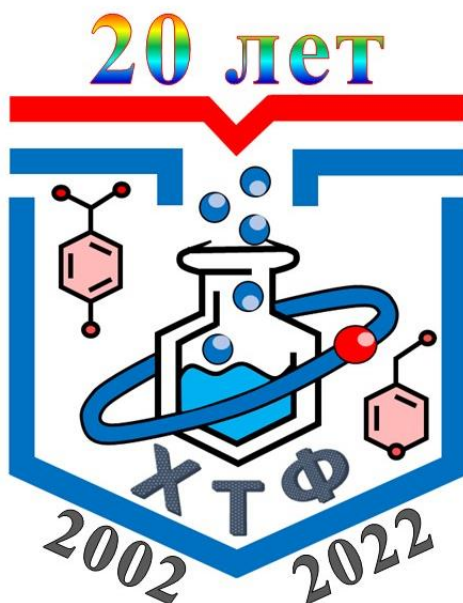


Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Тверской государственный университет»
Химико-технологический факультет



Конкурс научно-исследовательских работ,
посвященный двадцатилетию образования
химико-технологического факультета
20 декабря 2021 года г. Тверь

ТВЕРЬ 2021

УДК 54(082)
ББК Г.я431
К 21

Ответственный за выпуск:
кандидат химических наук Н.П. Русакова

К 21 **Конкурс научно-исследовательских работ, посвященный двадцатилетию образования химико-технологического факультета.** Сборник материалов Конкурса, 20 декабря 2021 г./ – Тверь: Тверской государственный университет, химико-технологический факультет 2021. – 58 с.

В сборнике представлены доклады обучающихся направлений 04.03.01 (Химия, - бакалавриат), 04.05.01 (Фундаментальная и прикладная химия, - специалитет), 04.04.01 (Химия, – магистратура) химико-технологического факультета и общеобразовательных учреждений г. Твери. Рассмотрены результаты научно-исследовательской деятельности и современные проблемы химии, представленные в двух номинациях: «Апробированное научное исследование» и «Юные таланты»

УДК 54(082)
ББК Г.я431

© Авторы статей, 2021
© Тверской государственный университет,
химико-технологический факультет 2021

Оглавление:

АПРОБИРОВАННОЕ НАУЧНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

1.	<i>Баранник А.А.</i> Низкоконцентрированные гидрогели на основе <i>L</i> -цистеина, нитрата серебра и иодида калия, полученные одностадийным методом	7
2.	<i>Буренина А.Ю.</i> Получение и свойства органических фосфатов	9
3.	<i>Волкова В.М.</i> Зеленый синтез наночастиц серебра с использованием водных экстрактов листьев клена	11
4.	<i>Гешко В.В.</i> Зеленый синтез наночастиц серебра с использованием водных экстрактов листьев дуба	13
5.	<i>Дышкант Е.Е.</i> Физико-химические показатели качества сырцовых пряников современного состава	15
6.	<i>Завилейская В.А.</i> Внутримолекулярные эффекты в <i>L</i> -цистеине	17
7.	<i>Зеников Г.Р.</i> <i>L</i> -цистеин - нитрат серебра – хитозан - нанокompозитные гидрогели	19
8.	<i>Зуева А.С.</i> Физико-химический анализ анальгина разных производителей	21
9.	<i>Козлова Р.Р.</i> Тория графов в исследовании корреляций «структура – свойство» гликолей	23
10.	<i>Кудряшова Е. Д., Смирнова И. В.</i> Исследования наличия пищевых добавок в молочном шоколаде	25
11.	<i>Куручкин Г.А.</i> Электронное строение тиофена, пиррола и их производных	27

20 декабря 2021 г.

12. *Мамаев П.В.*
Исследование электропроводности водных растворов тетраалкиламмониевых соединений 29
13. *Матус Я.А.*
Заряды групп α -аминокислот и α -аминоальдегидов 31
14. *Механников И. А.*
Влияние фторид-аниона на процессы самосборки в низкоконцентрированных растворах на основе *L*-цистеина и AgNO_3 33
15. *Моисеева Е.Н.*
Применение пищевых добавок для производства и сохранения качества безеиных тортов 35
16. *Мосолова Д.И.*
Процесс самоорганизации в системе *L*-цистеин/ Ag^+ /ДНК 37
17. *Немченко О.С., Смирнова Е.С.*
Организация работы сети ресторанов быстрого питания «Фреш буфет» 39
18. *Нефедова И.А.*
Влияние заместителя на заряд и объем сульфоновой группы 41
19. *Парфентьева В.В.*
Содержание безопасных пищевых добавок в бисквитных рулетах 43
20. *Паршина М.Н., Платонова А.А.*
Анализ состава сахарного печенья, реализуемого в г. Твери на наличие пищевых добавок 45
21. *Суратова Е.С.*
Влияние структуры пиридиновых ионных жидкостей на их физико-химические свойства 47
22. *Тимофеева Е.В.*
Бензолзамещенные в рамках квантовой теории атомов в молекулах 49
23. *Фёдорова А.А.*
Новый анализ цинка с использованием 8-оксихинолина 51

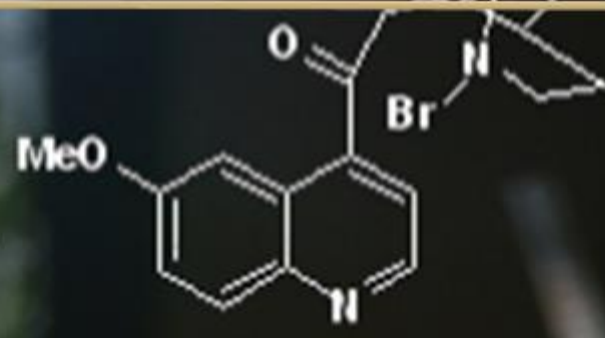
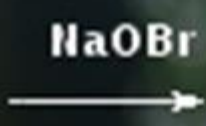
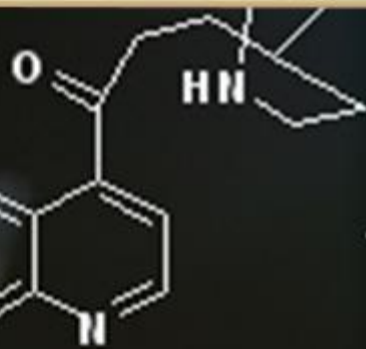
24. *Шачнева К.С.*
Физико-химическое исследование
лекарственных препаратов 53
25. *Щенухина А.С.*
Метилловый красный в квантовой теории
атомов в молекулах..... 55

ЮНЫЕ ТАЛАНТЫ

26. *Барсегян Т.А.*
Влияние уф излучения на процесс формирования
наночастиц серебра в цистеин-серебряном растворе 58
27. *Данилова Ю.А.*
Роль зубной пасты для здоровья человека 60
28. *Ершов Н.А.*
Усовершенствование ферментационно – экстракционной
технологии получения биосредств для растениеводства 62
29. *Журавлева Д.Д.*
Изучение лекарственных свойств растений Соминки 64
30. *Кружков С.М.*
Влияние функциональных добавок на свойства водно-
дисперсионных полиакриловых красок 66



MeO



20 декабря 2021



Конкурс



научно-исследовательских работ, посвященный двадцатилетию образования химико-технологического факультета

Апробированное научное исследование



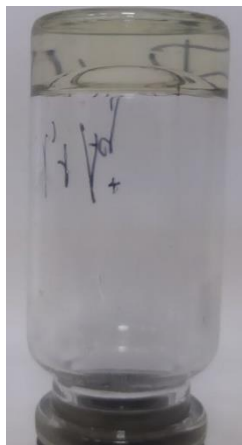
**Низкоконцентрированные гидрогели на основе L-цистеина,
нитрата серебра и иодида калия, полученные
одностадийным методом**

Баранник А.А. (бакалавр, 3 курс)

Научный руководитель: Хижняк С.Д.

Супрамолекулярные гидрогели на основе низкомолекулярных соединений привлекают повышенное внимание исследователей как перспективные материалы биомедицинского назначения и как модельные системы для изучения процессов самосборки. Гелеобразование в таких системах может быть инициировано различными факторами – добавкой электролита, изменением рН, нагреванием, облучением и др. Целью данной работы является изучение процессов гелеобразования в низкоконцентрированных водных растворах аминокислоты L-цистеин (L-Cys), нитрата серебра и иодида калия.

Автору удалось получить прозрачные, устойчивые во времени гидрогели путем смешения в определенной последовательности растворов исходных компонентов. В образцах варьировали концентрацию нитрата серебра при



постоянном содержании аминокислоты, при этом молярное соотношение компонентов (Ag^+/Cys) изменяли в интервале 1.5–2.2, концентрация KI составляла 0.75 мМ. Для исследования процессов гелеобразования были использованы методы вискозиметрии, УФ спектроскопии, динамического светорассеяния (ДСР), сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии (СЭМ и ПЭМ).

В результате исследований было установлено [1, 2], что прочность гидрогелей и их стабильность во времени зависит от содержания AgNO_3 . Следует отметить, что все гель-образцы проявляют тиксотропные свойства. Результаты, полученные на вибрационном вискозиметре, показывают, что уже через 30 мин после смешения исходных компонентов вязкость образцов монотонно возрастает, что свидетельствует о структурировании и формировании

20 декабря 2021 г.

гель-сетки. Согласно данным УФ спектроскопии в спектрах гидрогелей наблюдается поглощение в области ~ 343 - 363 и ~ 406 нм, что может быть связано с формированием супрамолекулярных кластерных цепочек $(-Ag-S-(R)-)_n$, где R – остаток L-Cys, и наночастиц серебра (НЧС). Образование НЧС в гидрогелях подтверждается результатами электронной микроскопии (рисунок, а и б). Исследование методом ДСР показало, что в образцах регистрируются агрегаты, гидродинамический радиус которых зависит от концентрации $AgNO_3$.

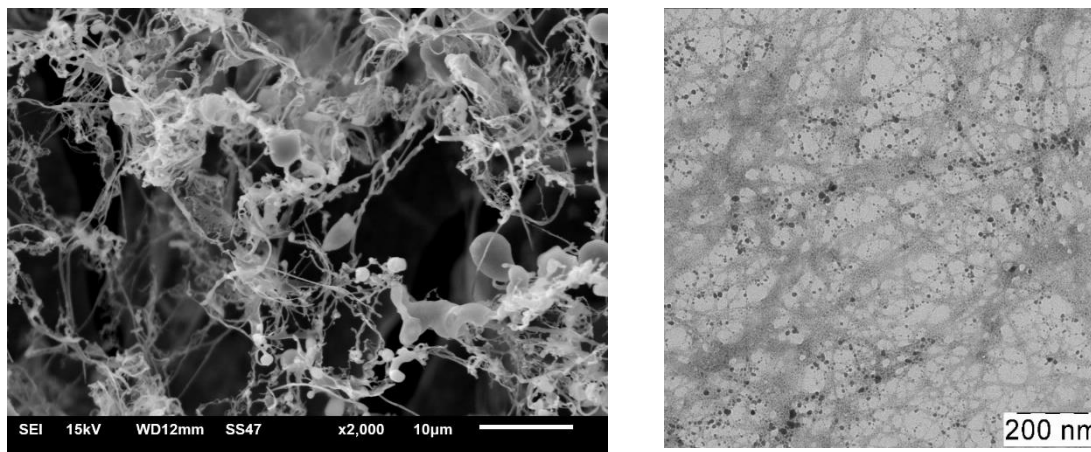


Рисунок:

а - СЭМ изображение образца на основе L-Cys, $AgNO_3$ и KI б - ПЭМ изображение образца на основе L-Cys, $AgNO_3$ и KI

Таким образом, в работе удалось реализовать методологию one-pot синтеза и получить стабильные гидрогели на основе L-Cys– $AgNO_3$, используя в качестве инициатора гелеобразования иодид-анион.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

1. Баранник А.А. Формирование супрамолекулярных гидрогелей под влиянием иодид-иона в L-цистеин- $AgNO_3$ системах // XXVII Каргинские чтения: тезисы докладов. Всероссийская научнотехническая конференция молодых учёных «Физика, химия и новые технологии» Тверь: ТвГУ. 2021. С. 28
2. Баранник А.А., Хижняк С.Д., Пахомов П.М. Супрамолекулярная природа низкоконцентрированных гидрогелей на основе аминокислоты L-цистеин, нитрата серебра и иодида калия // Кластер конференций 2021: тезисы докладов. Иваново. 2021. С. 372–373.

Получение и свойства органических фосфатов

Буренина А.Ю. (магистрант 1 года)

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

Органические фосфаты являются сложными эфирами фосфорной кислоты и спиртов, этоксиатов спиртов, этоксиатовалкилфенолов, эфиров этоксилированных аминов [1,2].

Органические фосфаты применяются в различных областях промышленности, используются в качестве добавок для модификации пластмасс, экстрагентов, флотореагентов, теплоносителей, лекарственных средств. Рассматривая сферы использования органических фосфатов, оказалось, что из прогрессивных технологий – это создание огнезащитных вспучивающихся композиций и покрытий, различного назначения (антикоррозионные, влагозащитные, декоративные). Сегодня это технология ультрафиолетового отверждения, частным случаем которой является технология LED-отверждения [3].

При изучении методов синтеза органических фосфатов выяснили, что наиболее доступным лабораторным методом получения является синтез на основе одно- или двухосновных спиртов и оксида фосфора P_2O_5 . Так же органические фосфаты получают взаимодействием спиртов и фенолов с трихлоридом фосфора PCl_3 , хлороксидом фосфора $POCl_3$ и тиохлоридом фосфора $PSCl_3$ [4].

Сложные эфиры фосфорной кислоты в работе получены реакцией бутандиола-1,4 и глицерина с безводным пентооксидом фосфора по известной методике [4]. Строение полученных соединений подтверждено методом ИК-спектроскопии. Полученные вещества представляют собой продукты, в виде кремовой и темно-коричневой смолы со средней вязкостью и слабым специфическим запахом. Данные эфиры представляют однокомпонентные материалы, отверждаемые под действием повышения температуры, обеспечивая

20 декабря 2021 г.

защиту от огня воспламеняющегося субстрата при нанесении на указанный субстрат. Для подтверждения огнезащитных свойств, проводили испытание под действием огня. Полученные эфиры при нагревании начинали образовывать вспененный слой негорючего материала. Этот негорючий слой служит изоляцией и предотвращает легкий доступ кислорода к материалу, на который его нанесли.

В работе подтвердили высокие (больше 600°C) температуры воспламенения фосфорорганических соединений методом дериватографического анализа.



Рис. Вспененный огнезащитный слой полученного негорючего материала

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Плетнев М. Ю. Поверхностно-активные вещества и композиции. Справочник/ под ред. М. Ю. Плетнева. – М.: Кламель, 2002. – 768 с.
2. Ланге, К.Р. Поверхностно-активные вещества: синтез, свойства, анализ, применение /К.Р. Ланге, Л. П. Зайченко – СПб.: Профессия, 2005. – 240 с.
3. Ненахов С. А., Пименова В. П. Физико-химия вспенивающихся огнезащитных покрытий на основе полифосфата аммония. Пожаровзрывобезопасность, 2010. Т. 19, №8. – с. 48.
4. Пурдела Д. Химия органических соединений фосфора /Д. Пурдела, Р. Вылчану; пер. с рум. – М., 1972. – 381-453 с.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

5. Буренина А.Ю. Изучение свойств органических фосфатов в качестве огнезащитной добавки / А.Ю. Буренина, Н.В. Веролайнен // XXVII Каргинские чтения: тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2021. – стр.38.

Зеленый синтез наночастиц серебра с использованием водных экстрактов листьев клена

Волкова В.М. (бакалавр, 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 - экстракт смешивают с раствором соли металла при комнатной температуре. При этом концентрация растительного экстракта и соли металла, температура, время влияют на скорость образования, количество, размер и другие свойства наночастиц. Кроме того, важно, что наночастицы, синтезированные в экстрактах растений, обладают функционализированной - модифицированной поверхностью, которая может содержать органические лиганды, белки, полисахариды и многоатомные спирты, отсутствующие в наночастицах, синтезированных с помощью физических и химических методов. Присутствие этих биологических компонентов способствует повышению стабильности частиц и определяет их область применения в фармакологии, биомедицине и др. Целью данной работы является зеленый синтез наночастиц серебра с использованием водных экстрактов листьев клена. Образцы для исследования были собраны в различных районах города Твери (указаны в подписи к рисунку) 22-26 сентября 2020 года, высушены и измельчены. Водные экстракты получены при нагревании определенной навески измельченных листьев с дистиллированной водой в термобане (70⁰ С) в течение 12 ч. Кинетику образования НЧС и их стабильность во времени изучали с помощью метода спектроскопии УФ-видимого диапазонов.

На рисунке представлены электронные спектры водных экстрактов листьев клена до (а) и после (б) добавления раствора нитрата серебра. В спектрах исходных образцов (рисунок, а) обнаружены полосы поглощения разной интенсивности с

20 декабря 2021 г.

максимумами поглощения ~285, ~330 нм, которые соответствуют различным биологически активным веществам – простым фенолам, оксибензойным кислотам, флавонам, флаванонам, и др. Добавление раствора нитрата серебра к водным экстрактам листьев приводит к существенным изменениям электронных спектров образцов – появлению полосы плазмонного резонанса НЧС с максимумом ~ 420–430 нм.

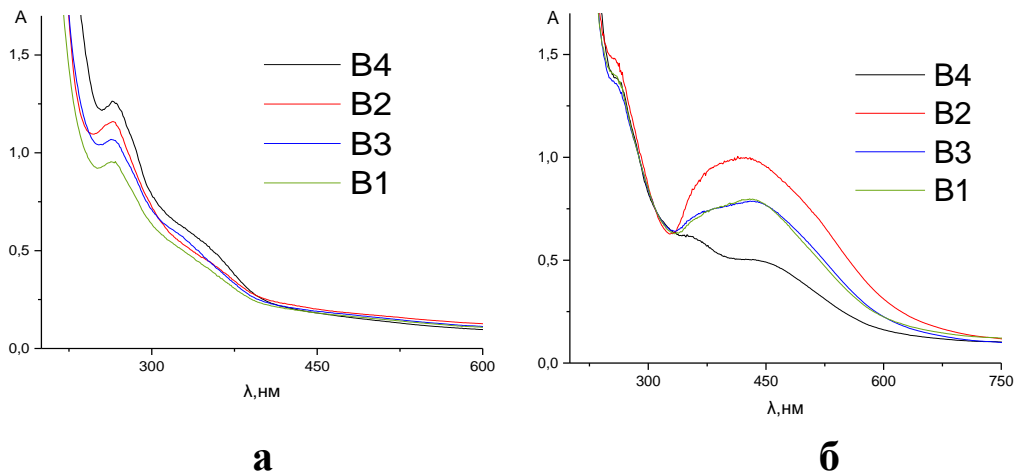


Рис. 1. Электронные спектры водных экстрактов листьев клена с различных мест сбора (B1 – ул. А.Попова, B2 – городской сад, B3 – парк Победы, B4 – ул. Завидова) до (а) и после (б) добавления раствора $AgNO_3$

Как видно из рисунка (б) величины поглощения (A) и максимум полосы плазмонного резонанса зависят от места сбора образца. Таким образом было обнаружено, что методом спектроскопии УФ-видимого диапазонов можно анализировать биоактивные вещества в водных экстрактах листьев клёна, кинетику образование НЧС, их стабильность во времени и воздействие антропогенных факторов, определяющих химический состав растительных образцов.

Вывод: листья клёна можно успешно использовать не только для проведения зеленого синтеза наночастиц серебра, но в качестве биоиндикатора.

СПИСОК АПРОБАЦИЙ:

1. Волкова В.М. Оценка эффекта антропогенных факторов на химический состав листьев клёна // Материалы конференции «XXVII Каргинские чтения», ТвГУ. 2021. С. 46.

Зеленый синтез наночастиц серебра с использованием водных экстрактов листьев дуба

Гешко В.В. (специалист, 4 курс)

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

В настоящий момент наночастицы серебра (НЧС) привлекают повышенное внимание исследователей по причине их экстраординарной способности подавлять рост патогенных микроорганизмов, а также из-за эффекта привыкания к антибиотикам. Именно благодаря этим свойствам НЧС находят применение в различных областях, таких как биомедицина, адресная доставка лекарств, обработка воды, сельское хозяйство и т.д. [1]. В настоящий момент делаются попытки использовать для синтеза НЧС биоактивные вещества различных растений, которые при этом выступают как восстанавливающие и стабилизирующие НЧ агенты. Цель данной работы – получение наночастиц серебра с помощью водных экстрактов листьев дуба и их анализ методами УФ спектроскопии, динамического светорассеяния (ДСР) и сканирующей электронной микроскопии (СЭМ).

Листья дуба были собраны в пяти разных районах города Твери. Образцы НЧС, полученные по «зеленой технологии» путем восстановления ионов серебра в водных экстрактах листьев дуба, показаны на рис. 1. Водные экстракты после добавления AgNO_3 хранились в темноте. Электронные спектры образцов, представленные на рис. 2, были получены на спектрометре «Evolution Array» фирмы «Thermo Scientific».

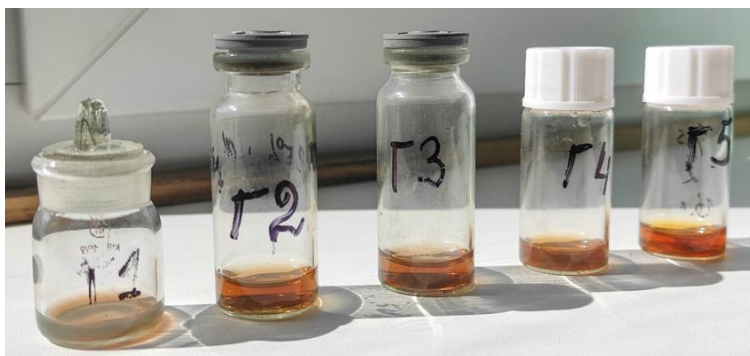


Рис. 1. Фотографии НЧС, полученных с использованием водных экстрактов листьев дуба из различных мест сбора: Г1- Октябрьский проспект, Г2- Бульвар Гусева, Г3- Комсомольский проспект, Г4- Городской парк, Г5- Колледж Коняева

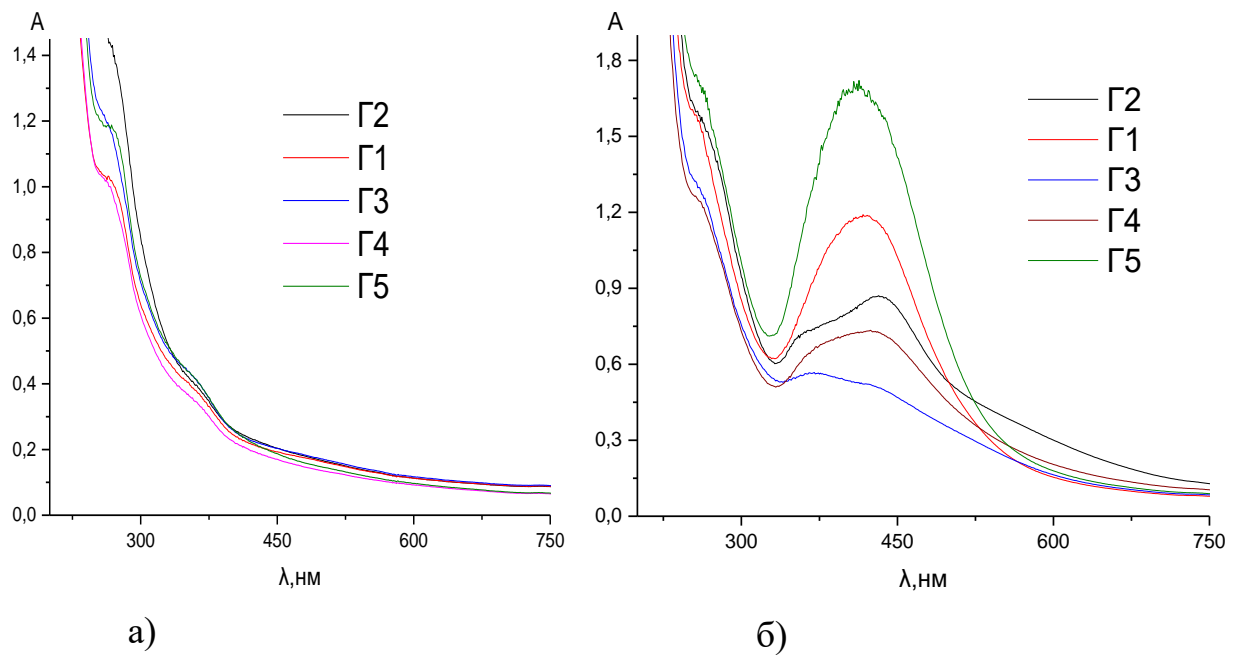


Рис. 2. Электронные спектры водных экстрактов листьев дуба (а) и НЧС, полученных на основе водных экстрактов через 1 день после добавления AgNO_3 (б). Обозначение линий по месту сбора: Г1-Октябрьский проспект, Г2-Бульвар Гусева, Г3-Комсомольский проспект, Г4-Городской парк, Г5-Колледж Коняева

Как мы видим из рис. 2, наночастицам серебра, образованным в водных экстрактах листьев дуба из разных мест сбора, в УФ спектрах соответствует полоса поглощения – полоса плазмонного резонанса – различной интенсивности и формы с максимумом в диапазоне $\sim 410 - 440$ нм. Данные ДСР подтверждают образование в водных экстрактах дуба НЧС [2]. Таким образом, в работе удалось получить НЧС под воздействием биоактивных веществ, содержащихся в водных экстрактах листьев дуба. Установлено, что размер и концентрация НЧС зависят от места сбора образца, т.е. экологического состояния окружающей среды.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Muhammad Nadeem, Bilal Haider Abbasi. A review of the green syntheses and anti-microbial applications of gold nanoparticles // Green Chemistry Letters and Reviews. N. V 2017. P. 218.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

2. Гешко В.В., Хижняк С.Д. «Зеленый синтез» наночастиц серебра с помощью водных экстрактов дуба // XXVII Каргинские чтения, ТвГУ. 2021. С. 51.

Физико-химические показатели качества сырцовых пряников современного состава

Дышкант Е.Е. (бакалавр, 2 курс)

Научный руководитель: ст. преподаватель Брославская М.Н.

Пряник сырцовый – единичное пряничное изделие, с выпуклой верхней гранью, имеет оттиски рисунков на поверхностях, ровной нижней гранью толщиной более 12 мм.

Актуальность темы: необходимо усилить внимание к сохранению и развитию национальной культуры, к возрождению народных традиций своей Родины. В настоящее время, к сожалению, нет такого размаха изготовления пряников, но данное дело все равно привлекает некоторые компании и выявление современных методов определения качества.

Согласно ГОСТа 15810-2014 «Изделия пряничные. Общие технические условия» – это кондитерские изделия на мучной основе (с концентрацией муки в выпеченных полуфабрикатах более 30 %), на сахарной и (или) медовой основе, с пряностями или без таковых, разнообразных форм с выпуклыми верхними поверхностями, с оттисками рисунков на поверхностях или без них, массовой концентрацией влаги от 8,5 до 20 %, массовой концентрацией общего сахара более 24 %, массовой концентрацией жиров менее 15 %.

Для исследования был выбран образец сырцового пряника «Классические мини» мятные, производитель АО «Любимый Край», СПб. Состав данного образца: мука пшеничная хлебопекарная высшего сорта, сахар, патока, вода питьевая, масло растительное рафинированное дезодорированное, яичный меланж, мята сушеная (ароматизатор натуральный), пищевые добавки: разрыхлители E503 (гидрокарбонат аммония) и E500 (гидрокарбонат натрия); влагоудерживающий агент – глицерин (E422); эмульгатор – соевый лецитин (E322); консервант – сорбат калия (E202), регулятор кислотности – лимонная

20 декабря 2021 г.

кислота (Е330) [1]. Эти добавки не влияют на органолептические показатели готового продукта.

Наименование показателя	Характеристики		
	Е500	Е503	Е202
Внешний вид	Белый кристаллический порошок или бесцветные кристаллы	Кристаллы или кристаллический порошок	Кристаллы, кристаллический порошок или гранулы
Цвет	Без цвета	Без цвета	От белого до желтовато-белого
Запах	Без запаха	Лёгкий запах аммиака	Без запаха

Было проведено исследование на определение физико-химических показателей пряников сырцовых согласно данного стандарта. Результаты следующие:

Наименование показателя	Показатель по ГОСТ	Фактический показатель
Массовая доля влаги, %	11,0-16,0	15,4
Массовая доля общего сахара (по сахарозе) в пересчете на сухое вещество, % не менее	24,0	34,1
Плотность, г/см ³	От 0,55 до 0,75	0,63
Намокаемость, %, не менее	180,0	197
Щелочность, градусы, не более	2,0	1,2

Показатель «щёлочность» показывает содержание добавки Е 503 (гидрокарбонат аммония). Она не влияет на качество продукта и продлевает срок годности сырцовых пряников.

Проведя эксперименты, можно сделать вывод, что данный образец сырцового пряника по всем физико-химическим показателям качества соответствует стандарту. В дальнейшем будет проводиться экспертиза ещё четырех образцов других производителей.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

1. Дышкант Е.Е., Брославская М.Н. Пищевые добавки и значимость мятного пряника в сфере туризма тверской области // Пищевые добавки: материал Междунар. науч.-практ. конф., [Донецк], 27 ноября 2021 г., - Донецк : [Изд-во ГО ВО «Донец. нац. ун-та экономики и торговли им. М. Туган-Барановского»], 2021. – С. 55 – 56.

Внутримолекулярные эффекты в *L*-цистеине

Завилейская В.А. (магистр, 2 курс)

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

Методом V3LYP оптимизировано состояние I с двумя водородными связями, близкое к цвиттериону, и состояния II-IV (Рис.). Форма II получена из I вращением карбоновой группы, III и IV формы без водородных связей получены из II в результате вращения тиольной и карбоновой групп соответственно (Рис.). Вычислены заряд ($q(R)$), объем ($V(R)$) и относительная электронная энергия групп ($\Delta E(R)$) в рамках «квантовой теории атомов в молекулах». Водородные взаимодействия в *L*-цистеине и влияние NH_2 на электронные параметры соседних групп частично представлены в работах [1-4].

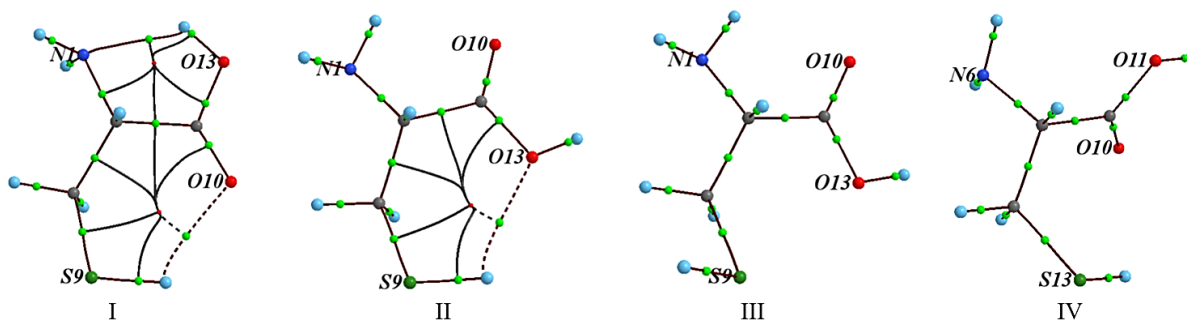


Рис.: Конформеры *L*- цистеина

Наименьшим зарядом обладает аминогруппа в I (Таблица), оттягивая в свой бассейн долю электронной плотности с водорода COOH , наибольший $q(\text{NH}_2)$ в IV. В этом же состоянии $q(\text{COOH})$ ниже на 0,070 а.е., чем в I, что объясняется уменьшением взаимного влияния NH_2 и COOH в IV, вследствие большего разделения их атомных бассейнов в пространстве и увеличения расстояния между ядрами N и O. Электроноакцепторное действие, оказываемое NH_2 и COOH на соседние CH и CH_2 , наоборот усиливается и их $q(R)$ увеличивается, по сравнению с I-III.

Уменьшение влияния NH_2 и COOH друг на друга в IV приводит к значительному увеличению их $V(R)$, по сравнению с I-III (Таблица), т.е. ослаблению стерического эффекта. А воздействие NH_2 и COOH на $V(R)$ соседних CH и CH_2 приводит к уменьшению их $V(\text{CH})$ и $V(\text{CH}_2)$ соответственно.

20 декабря 2021 г.

Увеличение $V(\text{SH})$ в III по отношению к I, II и IV показывает уменьшение стерического эффекта на SH со стороны фрагмента $-\text{CH}(\text{COOH})-\text{NH}_2$.

Таблица:

Заряды $q(R)$, относительные энергии $\Delta E(R)$ и объемы $V(R)$ групп конформеров I, II, III, IV молекулы L-Cys

$q(R)$, а.е.					
конформер	NH ₂	CH	COOH	CH ₂	SH
I	-0,316	0,398	-0,107	0,011	0,014
II	-0,293	0,417	-0,146	0,039	-0,019
III	-0,294	0,409	-0,136	0,046	-0,025
IV	-0,290	0,436	-0,177	0,051	-0,019
$\Delta E(R)$, кДж/моль					
I	0	0	80	0	20
II	30	50	10	20	0
III	40	30	20	20	0
IV	70	0	0	20	10
$V(R)$, Å ³					
I	25,74	13,62	45,24	23,02	38,04
II	26,45	13,77	45,61	22,74	38,38
III	26,52	13,82	45,80	22,61	38,70
IV	26,92	13,25	46,56	22,58	38,66

Полная электронная энергия $E(R)$ конформеров I и IV минимальна, для II она выше на 5 кДж/моль, для III – на 10,5 кДж/моль. Относительные электронные энергии групп $\Delta E(R)$ показывают стабилизацию $E(\text{NH}_2)$ и дестабилизацию $E(\text{COOH})$ в состоянии I (Таблица), тогда как в IV отмечена стабилизация $E(\text{COOH})$ и дестабилизация $E(\text{NH}_2)$.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

1. Завилейская В.А., Русакова Н.П., Туровцев В.В. Сравнение электронных свойств D- и L-конформеров цистеина // XXVII Каргинские чтения. Сборник материалов. 2021. С 65.
2. Завилейская В.А., Русакова Н.П. Электронные параметры конформеров цистеина // XX научная конференция аспирантов и студентов химико-технологического факультета. Сборник материалов. 2021. С 74.
3. Завилейская В.А., Русакова Н.П., Туровцев В.В. Групповые заряды, энергии и объемы конформеров D- и L- цистеина // XXVIII Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных Ломоносов-2021. Секция «Химия». 12-13 апреля 2021. Сборник материалов. 2021. С 861.
4. Завилейская В.А., Русакова Н.П., Орлов Ю.Д., Туровцев В.В. Сравнение электронных свойств конформеров цистеина. // Всероссийская молодежная научно-инновационная школа «Математика и математическое моделирование» 13-15 апреля 2021. Сборник материалов. 2021. С 16.

L-цистеин - нитрат серебра – хитозан - нанокompозитные гидрогели

Зеников Г.Р. (бакалавр, 3 курс)

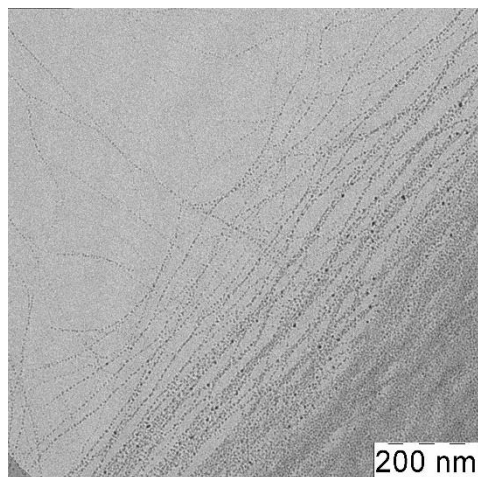
Научные руководители: Хижняк С.Д., Пахомов П.М.

Изучение супрамолекулярных гидрогелей на основе низкомолекулярных соединений (аминокислот, пептидов и т.д.) представляет огромный интерес в связи с возможностью их применения в различных областях – медицине, фармакологии, косметологии и т.д. В данной работе изучается гелеобразование в водных растворах серосодержащей аминокислоты L-цистеин (L-Cys), нитрата серебра и полисахарида хитозана (ХЗ). Биополимер ХЗ обладает рядом уникальных свойств, таких как биосовместимость, способность к биодegradации, нетоксичность, антимикробная активность, что расширяет спектр потенциального применения материалов на основе L-Cys-AgNO₃ гидрогелей.

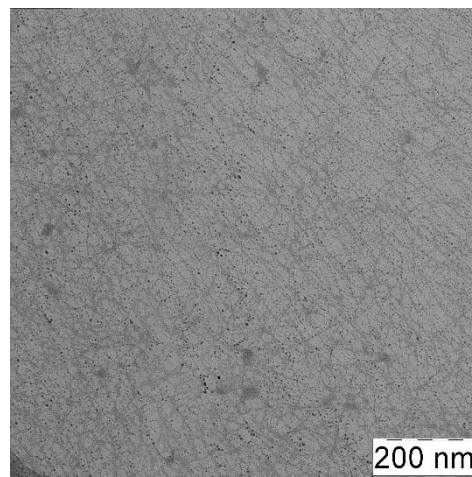
Исследуемые образцы были получены двухстадийным методом: 1 стадия – получение цистеин-серебряного раствора (ЦСР), 2 стадия – введение в ЦСР инициатора гелеобразования. Были синтезированы серии образцов с различной концентрацией низкомолекулярного водорастворимого ХЗ, который, как было установлено в ходе эксперимента, способствует формированию гель-структуры. Для сравнения получены гидрогели, содержащие в качестве инициаторов гелеобразования ХЗ и электролит (сульфат натрия). При этом концентрация L-Cys в образцах составляла 3,0 мМ, нитрата серебра – 3,75 мМ, сульфата натрия – от 0,2 мМ до 0,6 мМ, ХЗ – от 0,01 об.% до 0,05 об.%. Низкое содержание исходных компонентов в гидрогелях (L-cys и AgNO₃) позволяет назвать их низкоконтрированными. Процессы гелеобразования в образцах изучали с помощью методов вискозиметрии и УФ спектроскопии. Результаты, полученные на вибрационном вискозиметре, свидетельствуют о существовании оптимальной

20 декабря 2021 г.

концентрации ХЗ для формирования более прочной, устойчивой во времени гель-структуры.



*а – ПЭМ изображение образца
на основе ЦСП/ХЗ*



*б - ПЭМ изображение образца
на основе ЦСП /Na₂SO₄/ХЗ*

В работах [1-2] установлено, что гидрогели с различной комбинацией гелеобразующих агентов (ХЗ и ХЗ+Na₂SO₄) проявляют свойство тиксотропии, т.е. восстанавливают свою структуру после механического разрушения. Электронные спектры различных образцов свидетельствуют о формировании супрамолекулярных кластерных цепочек на основе молекул меркаптида серебра, что подтверждается результатами ПЭМ (рисунок, а и б).

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

1. Зеников Г.Р., Хижняк С.Д., Пахомов П.М. Супрамолекулярные гидрогели на основе аминокислоты *L*-цистеин, нитрата серебра и хитозана // XXVII Кургинские чтения: тезисы докладов. Всероссийская научно-техническая конференция молодых учёных «Физика, химия и новые технологии», посвященная Году науки и технологий 1-2 апреля 2021 г. / – Тверь: Тверской государственный университет, 2021. С. 68.
2. Зеников Г.Р., Хижняк С.Д., Пахомов П.М. Супрамолекулярные гидрогели на основе аминокислоты *L*-цистеин, нитрата серебра и хитозана // Кластер конференций 2021 : тезисы докладов (г. Иваново, Россия, 20–24 сентября 2021 г.) / Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук. – Иваново, 2021. С. 371-372.

Физико-химический анализ анальгина разных производителей

Зуева А.С. (магистр, 2 курс)

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

Контроль качества лекарственных препаратов – одна из главных проблем современного здравоохранения России. Несоответствие заявленной и фактической дозировки активного вещества в выпускаемых формах, а также фальсифицированные препараты могут повлечь за собой серьёзные осложнения при лечении различных болезней [1].

В качестве объекта исследования был взят метамизол натрия в форме таблеток пяти разных производителей: анальгин ЗАО «МЕДИСОРБ», Россия, анальгин АО «ФП «Оболенское», Россия, анальгин ЗАО «ПФК Обновление», Россия, анальгин-хинин «СОФАРМА АО», Болгария, баралгин М «Сафони Индия Лимитед», Индия.

Методика выполнения окислительно-восстановительного титрования была взята из фармакопейной статьи и переработана под условия лаборатории.

Точку эквивалентности прямого титрования устанавливали йодометрическим методом, около 0,15 г (точная навеска) лекарственного вещества помещали в сухую колбу, прибавляли 20 мл спирта 96 %, 5 мл 0,01 М раствора хлористоводородной кислоты и тотчас титровали 0,05 М раствором йода при перемешивании до появления желтой окраски, не исчезающей в течение 30 с [2]. Количество активного вещества в одной таблетке получено из расчета, что на 1 мл 0,05 М раствора йода соответствует 16,67 мг метамизола натрия.

Точку эквивалентности обратного титрования устанавливали йодатометрическим методом. Около 0,15 г (точная навеска) лекарственного вещества помещали в сухую колбу, прибавляли 20 мл спирта 96 %, 5 мл 0,01 М раствора хлористоводородной кислоты и тотчас титровали 0,1 М раствором йодата калия при перемешивании до появления желтой окраски, не исчезающей

20 декабря 2021 г.

в течение 30 с. Количество активного вещества получено из расчета, что 1 мл 0,1 М раствора йодата калия соответствует 38 мг метамизола натрия.

Результаты количественного анализа представлены в табл. 1.

Таблица 1:

Результаты количественного определения анальгина

Метод анализа	Масса метамизола натрия, мг				
	Теоретические данные	Практические данные			
		Анальгин «Медисорб»	Анальгин «Оболенское»	Анальгин «Обновление»	Баралгин М «Сафони Индия Лимитед»
Йодометрическое титрование	500,00	495,00	490,21	492,54	494,78
Йодатометрическое титрование	500,00	495,42	490,48	492,48	494,79

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Арзамасцев А.П. Выявление фальсифицированных лекарственных средств с использованием современных аналитических методов / А.П. Арзамасцев, В.Л. Дорофеев // Химико-фармацевтический журнал. 2004. № 3 С. 48-51.
2. Государственная фармакопея XIV. Ацетилсалициловая кислота. – М: МЗ РФ, 2018. С.3413.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

3. Зуева А.С. Физико-химический анализ анальгина разных производителей. / А.С. Зуева // Физика, химия и новые технологии. Сборник материалов всероссийской научно-технической конференции молодых учёных в рамках Каргинских чтений. – Тверь, ТвГУ. 2020. С.56.
4. Зуева А.С. Количественное определение анальгина в лекарственных средствах. / А.С. Зуева // XIX научная конференция аспирантов и студентов химико-технологического факультета. Тезисы докладов. – Тверь, ТвГУ. 2020. С.12.

Теория графов в исследовании корреляций «структура – свойство» гликолей

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

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

Актуальной задачей современной химии является установление связи между структурой соединений и их свойствами, т.к. экспериментальных сведений немного и для гликолей в том числе [1]. Для решения данной задачи, были рассмотрены некоторые топологические индексы (ТИ) и зависимости вида $P=f(\text{ТИ})$ [2]. Для гликолей нами были выведены расчётные схемы в третьем приближении [3-5].

$$P_{C_nH_{2n+2}O_2} = a + bn + p_2\Gamma_{CC} + p'_2\Gamma_{CO} + p''_2\Gamma_{OO} + R\Delta_{CCC} + \\ + R'\Delta_{CCO} + R''\Delta_{COO} + p_3\tau_{CC} + p'_3\tau_{CO} + p''_3\tau_{OO} + p_4\omega_{CC} + p'_4\omega_{CO} + p''_4\omega_{OO},$$

здесь p_2, p_3, p_4 – соответственно такие индексы как число путей длины два, три; R – число троек смежных рёбер; n – число атомов углерода; $b, \Gamma_{CC},$ – соответствующие параметры. По данной схеме проведены численные расчеты энтальпии образования двухатомных спиртов, согласующиеся с экспериментом [4]. Это позволило сделать предсказания энтальпии образования для остальных членов гомологического ряда.

При исследовании зависимости вида $P=f(\text{ТИ})$ найдено, что наиболее тесную связь между энтальпией образования (в кДж/моль) гликолей и ТИ имеет следующие уравнение [6]:

$$\Delta_f H^0_{(ж, 298 K)} = -5,203 W + 84,126 p_4 + 33,421 p'_4 + 29,333 p''_4 - 401,532,$$

где W – индекс Винера, а средняя абсолютная ошибка расчета ($|\bar{\varepsilon}|$) и максимальное отклонение (ε_{\max}) соответственно, составляют 3,5 кДж/моль и $\pm 6,1$ кДж/моль.

Топологические индексы можно использовать и при построении графических зависимостей вида «Свойство – ТИ», «Свойство – номер изомера» и «ТИ – номер изомера» [7]. Найдено, что в одних случаях наблюдается

20 декабря 2021 г.

симблатное изменение энтальпии образования и топологического индекса, например, энтальпии образования и индексов p' , H - числа Харари, J - индекса Балабана для изомеров $C_3H_8O_2$, что свидетельствует о хорошей корреляции между свойством и ТИ. В других случаях такой взаимосвязи нет, например между энтальпией образования и W .

С увеличением числа изомеров корреляции между свойством и ТИ усложняются, что необходимо учитывать при аналитическом изучении зависимостей «Свойство – ТИ». Полученные данные могут быть использованы химиками-технологами и инженерами-химиками при проведении ими термодинамических расчётов технологических процессов в нефтехимии и химии топлива.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

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: 15.05.21).
2. M.G. Vinogradova, Yu.A. Fedina, and Yu.G. Papulov. Graph Theory in Structure–Property Correlations//Russian Journal of Physical Chemistry A.–2016.-Vol.90.-No.2.-pp. 411–416.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

3. Козлова Р.Р., Виноградова М.Г. Корреляции «структура – энтальпия образования» двухатомных спиртов. //Математика и математическое моделирование. Сборник материалов XV Всерос. молодёж. научно-инновационной школы. – Саров, Интерконтакт, 2021. С. 34-35.
4. 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.
5. Козлова Р.Р. Теория графов в исследовании корреляций «структура – энтальпия образования» гликолей //XXVII Кургинские чтения. Тезисы докладов Всероссийской научно-технич. конф. молодых учёных, посвящённой Году науки и технологий. Тверь, 2021. С 77.
6. Виноградова М.Г., Козлова Р.Р., Крылов П.Н. Корреляции энтальпия образования – топологические индексы в двухатомных спиртах. // Вестник ТвГУ: Сер. Химия. 2021. № 1 (43). С. 104-108.
7. Виноградова М.Г., Козлова Р.Р. Графические зависимости в исследовании корреляций структура – свойство гликолей. // Вестник ТвГУ: Сер. Химия. 2021. № 3 (45). С. 123-131.

Исследования наличия пищевых добавок в молочном шоколаде

Кудряшова Е. Д., Смирнова И. В. (бакалавриат, 3 курс)

Наручный руководитель: ст. преподаватель, Кудряшова Н. А.

В современном пищевом производстве, основанном на многоступенчатой переработке и длительном хранении продовольственного сырья и пищевой продукции, широко применяются разнообразные технологические приемы: физические, химические, биотехнологические. В ряду используемых приемов особое значение имеют пищевые добавки.

Согласно ГОСТ Р 52499-2005 «Добавки пищевые. Термины и определения»: Пищевые добавки – любое вещество или смесь веществ, не употребляемых человеком непосредственно в качестве пищи, преднамеренно вводимые в пищевой продукт в процессе его производства с технологической целью, включая придание ему определенных органолептических свойств и сохранение качества и безопасности в течение установочного срока годности или хранения.

Идентификация пищевых добавок проводится в соответствии с правилами, установленными Техническим регламентом Таможенного союза «О безопасности пищевой продукции» (Согласно ТР ТС 029/2012 «Требования безопасности пищевых добавок, ароматизаторов и технологических вспомогательных средств»).

В настоящее время установлены гигиенические нормативы безопасности для человека пищевых добавок на этапах разработки нормативной документации и постановки на производство новых видов продукции, при ее производстве, ввозе в страну и обороте. Содержание пищевых добавок в пищевых продуктах должно соответствовать утвержденным требованиям нормативных и технических документов.

Объектом исследования на наличие пищевых добавок явился молочный шоколад «Альпен Гольд» с начинкой со вкусом капучино.

Состав: сахар, какао тертое, сыворотка сухая молочная, жир растительный (масло пальмовое), масло какао, молоко сухое цельное, жир молочный, какао-порошок, эмульгаторы (лецитин соевый, E476), молоко сухое обезжиренное,

20 декабря 2021 г.

порошки фруктовые, йогуртовый порошок, ароматизаторы, регулятор кислотности (кислота лимонная).

По результатам проведенной экспертизы маркировки отобранного образца шоколада установлено, что шоколад «Альпен Гольд» содержит эмульгаторы (лецитин соевый, E476), ароматизаторы, регулятор кислотности (кислоту лимонную) [1]. Особо отметим, что, помимо эмульгатора «лецитин соевый», данный образец шоколада содержит пищевую добавку E476 – Полиглицерил полирицинолеат - его используют как заменитель природного лецитина). Данная пищевая добавка производится из масла клещевины (касторового масла), относится к добавкам вида полирицинолеатов и является стабилизирующим веществом, которое улучшает консистенцию ингредиентов и сохраняет их вязкость. Представляет собой прозрачную густую маслянистую жидкость охристо-жёлтого цвета. В воде вещество не растворяется, в маслах и эфирах растворяется хорошо. Устойчиво к высоким температурам и процессу гидролиза.

Основное применение E476 – производство шоколада, в том числе глазури для мороженого, зефира, конфет, где дорогостоящее масло какао заменяют E476. E476 – поверхностно-активное вещество, снижающее предел текучести шоколада. При его применении масса получается более однородной и вязкой, в ней отсутствуют поры, пузырьки воздуха и пустоты.

Снижение себестоимости продукции – одна из причин появления E476 в кондитерских изделиях. Добавка E476 имеет химическое происхождение и призвана заменять дорогостоящее масло какао в составе продукта. Поэтому, потребителям, для которых важно наличие в продукте натуральных ингредиентов, лучше выбирать шоколад, в составе которого нет пищевой добавки E476.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

1. Кудряшова Е.Д., Смирнова И.В., Кудряшова Н.А. Исследование наличия пищевых добавок в молочном шоколаде // Пищевые добавки: материал Междунар. науч.-практ. конф., [Донецк], 27 ноября 2021 г., - Донецк: [Изд-во ГО ВО «Донец. нац. ун-та экономики и торговли им. М. Туган-Барановского»], 2021. – С. 57 – 58.

Электронное строение тиофена, пиррола и их производных

Курочкин Г.А. (магистр, 2 курс)

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

Исследование интегральных электронных характеристик групп (заряда $q(R)$, объема $V(R)$ и энергии $E(R)$) тиофена, пиррола, их димеров и тримеров (Рис.) стало темой научного исследования в области квантовой химии. Методика вычисления и обработки исследуемых молекул и некоторые результаты ранее были представлены в материалах [1 - 9].

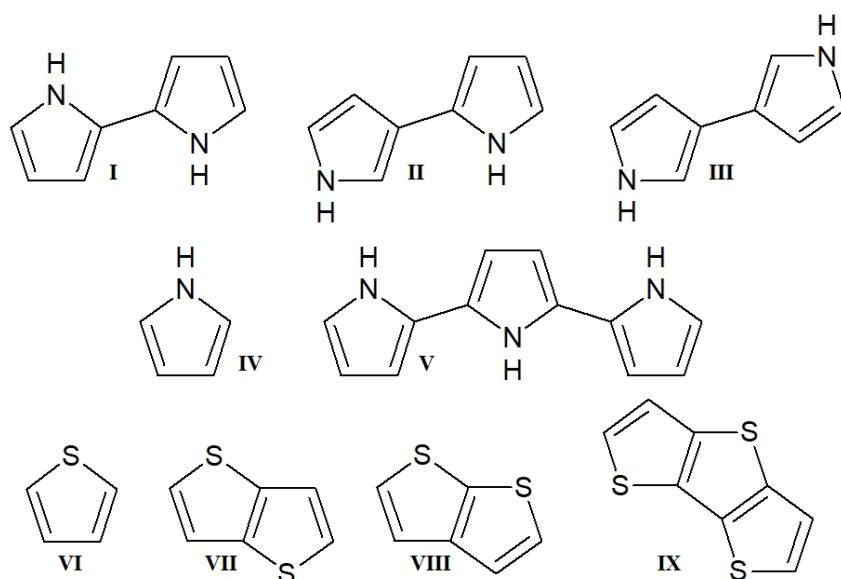


Рис. 1:

Молекула пиррола - I,
димеры пиррола:
2,2'-дипиррол - II,
2,3-дипиррол - III,
3,3'-дипиррол - IV;
тример пиррола - V,
молекула тиофена - VI,
тиено[3,2-*b*]тиофен - VII,
тиено[2,3-*b*]тиофена - VIII,
дитиено[3,2-*b*:2',3'-*d*]тиофена - IX.

Аминогруппа в I-V обладает отрицательной величиной заряда и, оттягивая долю электронной плотности - $\rho(r)$ в свой атомный бассейн с соседних групп (СН и/или С), оказывает на них отрицательный индуктивный эффект. Это влияние NH сопровождается повышением $q(R)$, $E(R)$ и уменьшением $V(R)$ ближайших СН и/или С по сравнению с этими группами, не находящимися под непосредственным воздействием NH. Расстояние между ядрами атомов азота (R_{NN}) влияет на их $q(NH)$, с увеличением R_{NN} взаимное влияние NH уменьшается и их $q(NH)$ снижается. Симметричность геометрии, соответствующая точечной группе C_{2v} , получена для пирролов I, II, IV и V, она нашла отражение и в симметричности распределения $q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$ на их группах.

В молекулах тиофенов (VI, VII, VIII, IX) сера является донором $\rho(r)$ для ближайших атомов С и групп СН, что приводит к положительной величине $q(S)$.

20 декабря 2021 г.

Соединения (VI, VII, VIII, IX) также обладают группой симметрии C_{2v} и распределение $\rho(r)$, и величин $q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$ по C и CH носит симметричный характер относительно S.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

1. Курочкин Г.А., Русакова Н.П., Софронова Ю.И., Туровцев В.В. серосодержащие гетероциклы на основе бензола и гексана с точки зрения квантовой теории атомов в молекулах // Вестник ТвГУ. Серия: Химия. 2020. № 2 (40). С. 53-61.
2. Курочкин Г.А., Русакова Н.П., Орлов Ю.Д. квантово-химическое сравнение геометрии серо и кислородсодержащих трехатомных циклов // XXV Каргинские чтения. Материалы Всероссийской молодежной конференции. Тверь, ТвГУ. 2019. С. 65.
3. Курочкин Г.А., Русакова Н.П., Орлов Ю. Д. Сравнение групповых зарядов бензола и его серосодержащих аналогов // XXVI Каргинские чтения. Материалы Всероссийской молодежной конференции. Тверь, ТвГУ. 2020. С. 74.
4. Курочкин Г.А., Русакова Н.П., Софронова Ю.И. интегральные электронные характеристики циклогексана и его серосодержащих аналогов // XIX Научная конференция аспирантов и студентов химико-технологического факультета. Тверь, ТвГУ. 2020. С. 63.
5. Курочкин Г.А., Русакова Н.П., Туровцев В.В. Электронные свойства димеров пиррола // XXVII Каргинские чтения. Материалы Всероссийской молодежной конференции. Тверь, ТвГУ. 2021. С. 90.
6. Курочкин Г.А., Русакова Н.П., Орлов Ю.Д. Интегральные электронные характеристики моно-, ди- и тримеров тиофена // XI Международная конференция «Химическая термодинамика и кинетика». Великий Новгород. 2021. С. 68-69.
7. Курочкин Г.А., Русакова Н.П., Орлов Ю.Д. Групповые электронные свойства моно-, ди- и тримеров тиофена // XV Всероссийская молодежная научно-инновационная школа «Математика и математическое моделирование». Саров, СарФТИ НИЯУ МИФИ. 2021. С. 21-22.
8. Курочкин Г.А. Моно-, ди- и тримеры тиофена в «квантовой теории атомов в молекулах» // Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов». Москва, МГУ имени Ломоносова. 2021. С. 880.
9. Курочкин Г.А., Русакова Н.П. Интегральные электронные характеристики димеров тиофена // XX Научная конференция аспирантов и студентов химико-технологического факультета. Тверь, ТвГУ. 2021. С. 77.

Исследование электропроводности водных растворов тетраалкиламмониевых соединений

Мамаев П.В. (магистр 1 курса)

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

Четвертичные тетраалкиламмониевые четвертичные соединения (ЧС) вызывают большой интерес в современной химии как уникальные модификаторы поверхностных свойств различных материалов, поверхностно-активные и биологически активные вещества, ионные жидкости. Важной характеристикой ЧС является электропроводность их растворов [1].

Целью данной работы являлось исследование влияния структуры четвертичных аммониевых солей на электропроводность их водных растворов.

Нами исследована серия водных растворов доступных четвертичных тетраалкиламмониевых солей с различным строением углеводородных заместителей у атома азота катиона: бромида тетраметиламмония (ТМАБ), хлоридов N-бензил-N,N,N-триэтиламмония (БТЭА) и N-бензил-N-децил-N,N-диэтиламмония (БДЭА-10) со степенью чистоты 96-98%. Для сравнения исследованы растворы бромида аммония. Удельная электропроводность измерялась с помощью кондуктометра Анион 4120 при температуре 19-22 °С.

Полученные результаты показали возрастание удельной электропроводности от 0 до 4000-8000 мкСм/см с увеличением концентрации раствора от 0 до 0.1 моль/л для всех исследованных соединений, что характеризует исследованные соединения как сильные электролиты. Значение удельной и эквивалентной электропроводности водных растворов всех исследованных тетраалкиламмониевых соединений уменьшается с ростом числа атомов углерода в катионе соли (рис.1), что связано с уменьшением подвижности более объемных катионов [1].

20 декабря 2021 г.

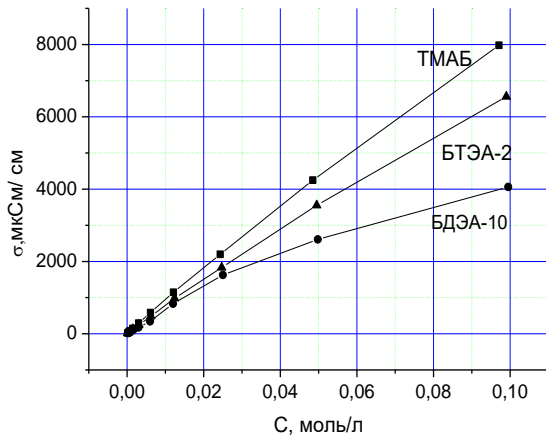


Рис. 1. Зависимость удельной электропроводности водных растворов ЧС от концентрации.

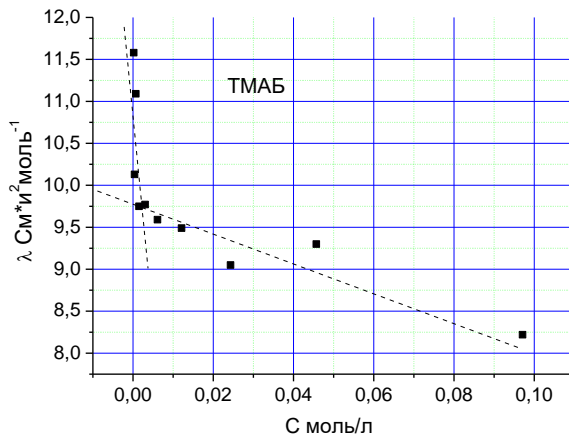


Рис. 2. Зависимость эквивалентной электропроводности водного раствора ТМАБ от концентрации.

Зависимость эквивалентной электропроводности от концентрации для всех исследованных соединений имеет нелинейный вид и резко возрастает в области концентраций выше 0,006 моль/л (рис.2), что указывает на структурные изменения в растворе ЧС в этой области концентраций, характерные для процесса мицеллообразования в растворах поверхностно-активных веществ [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Логинова А.Ю., Максимов В.В. Определение электропроводности и константы диссоциации слабого электролита. - М.: Изд-во МГТУ имени Н.Э. Баумана, 2012. 19 с.
2. Русанов А.И. Мицеллообразование в водных растворах поверхностно-активных веществ. – СПб.: Химия, 1992.

СПИСОК АПРОБАЦИИ

3. Мамаев П.В. Изучение поверхностно-активных веществ с помощью метода кондуктометрии. / XXVII Каргинские чтения. - Сборник материалов. 2021, Тверь. - 103 с.

Заряды групп α -аминокислот и α -аминоальдегидов

Матус Я.А. (специалист, 5 курс)

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

Общая формула исследуемых α -аминокислот $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{COOH})\text{H}-\text{CH}_2-\text{R}$ (Рис. а), где $\text{R} = \text{SH}$ (1), OH (2), C_6H_5 (3), $\text{C}_6\text{H}_4-\text{OH}$ (4), CH_2-COOH (5), $\text{CH}_2-\text{C}(\text{O})-\text{NH}_2$ (6), $\text{C}_2\text{H}_5\text{S}$ (7), CH_3-OH (8), COOH (9) и $\text{C}(\text{O})-\text{NH}_2$ (10); α -аминоальдегидов $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}-\text{CH}_2-\text{R}$, где $\text{R} = \text{SH}$ (1'), OH (2'), C_6H_5 (3'), $\text{C}_6\text{H}_4-\text{OH}$ (4'), CH_2-COOH (5'), $\text{CH}_2-\text{C}(\text{O})-\text{NH}_2$ (6'), $\text{C}_2\text{H}_5\text{S}$ (7'), CH_3-OH (8'), COOH (9') и $\text{C}(\text{O})-\text{NH}_2$ (10'). Отдельные соединения и заряды их групп ($q(\text{R})$) рассмотрены в работах [1-6].

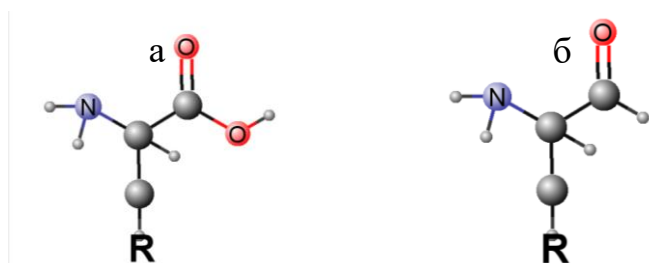


Рис.:

Общая формула для
а) α -аминокислот и
б) α -аминоальдегидов

Таблица:

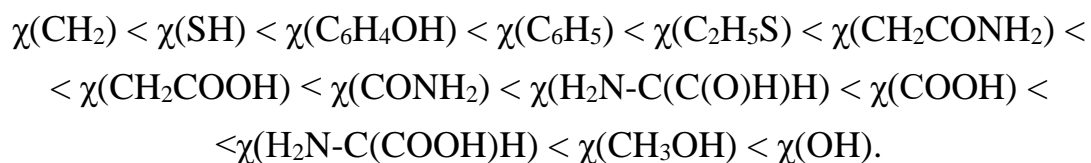
Заряды групп ($q(\text{R})$) α -аминокислот и α -аминоальдегидов, в а.е.

	COOH	CH	NH ₂	CH ₂	CH ₂ /CH ₃	R	R
<i>q(R), в а.е</i>							
1	-0,177	0,436	-0,290	0,051		-0,019	SH
2	-0,160	0,438	-0,297	0,564		-0,545	OH
3	-0,179	0,421	-0,300	0,084		-0,026	C ₆ H ₅
4	-0,182	0,420	-0,301	0,084		-0,021	C ₆ H ₄ OH
5	-0,185	0,418	-0,296	0,111		-0,048	CH ₂ COOH
6	-0,188	0,414	-0,298	0,112	0,040**	-0,079	C(O)NH ₂
7	-0,185	0,420	-0,297	0,091		-0,029	C ₂ H ₅ S
8	-0,135	0,365	-0,299	0,535*	0,081***	-0,547	OH
9	-0,160	0,447	-0,291	0,147		-0,144	COOH
10	-0,171	0,458	-0,297	0,080		-0,071	C(O)NH ₂
	COH	CH	NH ₂	CH ₂	CH ₂ /CH ₃	R	R
1'	-0,069	0,382	-0,298	0,029		-0,044	SH
2'	-0,073	0,389	-0,307	0,542		-0,551	OH
3'	-0,088	0,368	-0,311	0,069		-0,039	C ₆ H ₅
4'	-0,090	0,366	-0,312	0,069		-0,021	C ₆ H ₄ OH
5'	-0,120	0,375	-0,301	0,098		-0,051	CH ₂ COOH
6'	-0,100	0,363	-0,306	0,100	0,017**	-0,074	C(O)NH ₂
7'	-0,092	0,362	-0,305	0,078		-0,043	C ₂ H ₅ S
8'	-0,102	0,382	-0,288	0,516*	0,040***	-0,547	OH
9'	-0,069	0,402	-0,302	0,128		-0,159	COOH
10'	-0,081	0,413	-0,308	0,413		-0,086	C(O)NH ₂

* - в 8 и 8' представлены $q(\text{R})$ группы CH, находящейся в положении группы CH₂ других АМК и альдегидов; **заряд группы CH₂; *** заряд группы CH₃.

20 декабря 2021 г.

Присутствие карбонильной группы в структуре увеличивает электроноакцепторную способность R, что отражено в понижении их заряда в α -альдегидах по сравнению с α -аминокислотами (Таблица). В рассмотренных соединениях сравнением $q(R)$ групп CH_2 , $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$, $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{COOH})\text{H}$, SH , $\text{C}_6\text{H}_4\text{OH}$, C_6H_5 , OH , CH_2COOH , COOH , CONH_2 , $\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$, $\text{C}_2\text{H}_5\text{S}$, CH_3OH и CONH_2 получено соотношение групповых электроотрицательностей $\chi(R)$:



Высокая подвижность электронной плотности CH_2 и CH не позволила получить соотношение $\chi(R)$ между ними, поэтому CH исключена из шкалы $\chi(R)$.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

1. Матус Я.А., Русакова Н.П., Туровцев В.В. Сравнение электронного строения глутамина и глутаминовой кислоты // Сборник: XXVII Каргинские чтения. Тезисы докладов Всероссийской научно-технической конференции молодых учёных, посвященной Году науки и технологий. Тверь, 2021. С. 106.

2. Матус Я.А., Русакова Н.П., Туровцев В.В. Связевые характеристики электронной плотности замещенных бензола // Сборник материалов Всероссийской научно-технической конференции молодых учёных в рамках Каргинских чтений. 2020. С. 88.

3. Матус Я.А., Русакова Н.П., Орлов Ю.Д., Туровцев В.В. Сравнение зарядов и объемов групп для фенилаланина, цистеина, тирозина, серина // Математика и математическое моделирование. Сборник материалов XV Всероссийской молодежной научно-инновационной школы. Саров, 2021. С. 17-18.

4. Матус Я.А., Русакова Н.П. Аспарагин и аспарагиновая кислота в постулатах QTAIM // Сборник тезисов. XX Научная конференция аспирантов и студентов химико-технологического факультета, посвященная 50-тилетию преобразования Калининского государственного педагогического института в Тверской государственной университет. Тверь, 2021. С. 80.

5. Матус Я.А. QTAIM исследование глутамина и глутаминовой кислоты // Материалы Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов2021», секция «Химия». – М.: Издательство «Перо», 2021. С. 890.

6. Матус Я.А., Русакова Н.П., Туровцев В.В. Цистеин, серин, фенилаланин, тирозин, глутаминовая кислота и глутамин. QTAIM исследования // Химическая термодинамика и кинетика. Сборник материалов XI Международной конференции. Великий Новгород, 2021. С.267 - 268.

**Влияние фторид-аниона на процессы самосборки
в низкоконцентрированных растворах на основе
L-цистеина и AgNO₃**

Механников И. А. (бакалавр, 3 курс)

Научный руководитель: Хижняк С. Д.

Процессы гелеобразования в супрамолекулярных системах на основе низкомолекулярных аминокислот вызывают повышенный интерес исследователей, в связи с возможностями их применения в различных областях – косметологии, фармацевтике, биомедицине и др. Известно, что хлориды различных металлов способны инициировать гелеобразование в низкоконцентрированных супрамолекулярных системах на основе серосодержащей аминокислоты *L*-цистеин (*L*-Cys) и нитрата серебра [1]. Такие гидрогели состоят из супрамолекул, образованных в результате самосборки молекул желаторов (gelator) за счет слабых сил межмолекулярного взаимодействия (сил Ван-дер-Ваальса, водородного связывания, электростатического взаимодействия и др.). Нековалентные сшивки супрамолекул и (или) механические зацепления образуют трехмерную сетку, внутри которой находится растворитель. В данной работе изучаются процессы самосборки в *L*-Cys–AgNO₃ системах под воздействием фторид-анионов. По причине малого радиуса фторид-анион обладает высокой плотностью заряда и, как следствие, образует очень прочную водородную связь. Выяснить, способен ли ион фтора инициировать образование гидрогеля в *L*-Cys–AgNO₃ системе является целью данного исследования.

Фторид-анион занимает особое место в химии человека, поскольку играет важную роль в различных биохимических процессах. Хорошо известно о его положительной роли в стоматологии – фторсодержащие зубные пасты, но в то же время этот анион в повышенных концентрациях в организме оказывает отрицательное влияние на обмен веществ и вызывает хроническую интоксикацию.

20 декабря 2021 г.

Образцы для исследования были получены, так называемым, одностадийным методом – путем последовательного смешения компонентов в определенном порядке при интенсивном перемешивании. Молярное соотношение исходных компонентов ($\text{Ag}^+/\text{L-Cys}$) в образцах варьировало в интервале 1,5 – 2,0 мМ; содержание фторид-аниона в виде NaF и CsF изменяли в пределах 0,25 – 1,00 мМ; концентрация L-Cys составляла 3,0 мМ.

Процессы самосборки в системах изучали с помощью методов УФ-, Фурье-ИК спектроскопии, динамического светорассеяния (ДСР) и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Установлено, что при одинаковых условиях (концентрации, молярном соотношении исходных компонентов) фторид-анион, в отличие от хлорида, не инициирует образование геля, однако после смешения компонентов образуются прозрачные образцы с желтоватым оттенком. Электронные спектры фторидсодержащих образцов свидетельствуют о формировании супрамолекулярных кластерных цепочек типа $[\text{---Ag-S(R)---Ag-S(R)---}]_n$, где R – фрагмент цистеина, которые удалось визуализировать с помощью ПЭМ. Эти результаты не отрицают возможность использования фторид-аниона в качестве инициатора гелеобразования при особых условиях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. М.М. Овчинников, В.С. Лагусева, С.Д. Хижняк, П.М. Пахомов. Одностадийный метод желирования L-цистеин-серебряных растворов // Вестник ТвГУ, Серия: Химия. 2017, N4, С.135–145

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

2. Механников И. А. Процессы самосборки в L-Цистеин-нитрат серебра супрамолекулярных системах, инициированные фторид анионом // XXVII Кургинские чтения: тезисы докладов. Всероссийская научно-техническая конференция молодых учёных «Физика, химия и новые технологии»/ – Тверь: Тверской государственный университет, 2021. С. 109.
3. . Механников И.А., Лагусева В.С., Хижняк С.Д., Пахомов П.М. Процессы самосборки, инициированные фторид-анионом, в низкоконтрированных растворах на основе L-Цистеина и AgNO_3 // Кластер конференций 2021: тезисы докладов / Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук [и др.]. – Иваново, 2021. С. 373.

Применение пищевых добавок для производства и сохранения качества безеиных тортов

Моисеева Е.Н. (бакалавр, 2 курс)

Научный руководитель: ст. преп. Брославская М.Н.

Торт – это кондитерское изделие, состоящее из одного или нескольких коржей, пропитанных кремом или джемом. Сверху торт украшают кремом, глазурью, фруктами. Несмотря на то, что основное сырье остаётся неизменным, классическим, в качестве дополнительного сырья используется множество пищевых добавок с целью улучшения состава и сохранения свойств и сроков годности. Безе – это полуфабрикат для производства торта «Киевский».

Актуальность темы: пищевые добавки оказывают большое влияние на сохранение качества и удлинение срока годности. Цель: выявить наличие пищевых добавок в составе пяти образцов торта «Киевский» разных производителей. Задача: изучить по информации для потребителя состав пяти образцов и сделать вывод о количестве применяемых добавок. Были проанализированы пять образцов торта «Киевский» разных производителей [1, 2]:

Производители торта «Киевский»	Пищевые добавки
ООО «Венский Цех», Россия, г. Москва	Красители - медные комплексы хлорофиллов (E141), кармин (E120), каротин (E160a) Консерванты - сорбиновая кислота (E200) Регуляторы кислотности – лимонная кислота (E330)
ООО «Компания у Палыча», Россия, г. Москва	Разрыхлители – сода пищевая (E500) Красители - бета-каротин (E160a), кармин (E120) Консерванты - сорбиновая кислота (E200) Регуляторы кислотности – лимонная кислота (E330)
ООО «Север-Метрополь», Россия, г. Санкт-Петербург	Эмульгаторы - моно- и диглицериды жирных кислот (E471), лецитин (E322) Красители – анатто (E160b), куркумин (E100), «Кармин» (E120), «Хлорофилл» (E140) Консерванты - сорбат калия (E202) Регуляторы кислотности – лимонная кислота (E330)
ООО «Филли-Бейкер», Россия, г. Москва	Эмульгаторы – лецитин (E322) Красители – кармин (E120), экстракт анатто (E160b), хлорофилл (E140), куркумин (E100) Консерванты - сорбиновая кислота (E200) Регуляторы кислотности – уксус столовый (E260)
ООО «Шантилико. Вкус-Вилл», Россия, г. Тверь	Производитель не указал информацию о пищевых добавках

20 декабря 2021 г.

Выявлен худший образец, им оказался торт производителя ООО «Шантилико. Вкус-Вилл», Россия, г. Тверь. В своей маркировке производитель не указывает пищевые добавки. За счет чего срок годности 5 суток можно только догадываться, производитель вводит покупателя в заблуждение.

Исследования продолжаются, следующим этапом будет проведение экспертизы пяти образцов торта «Киевский» по органолептическим и физико-химическим показателям.

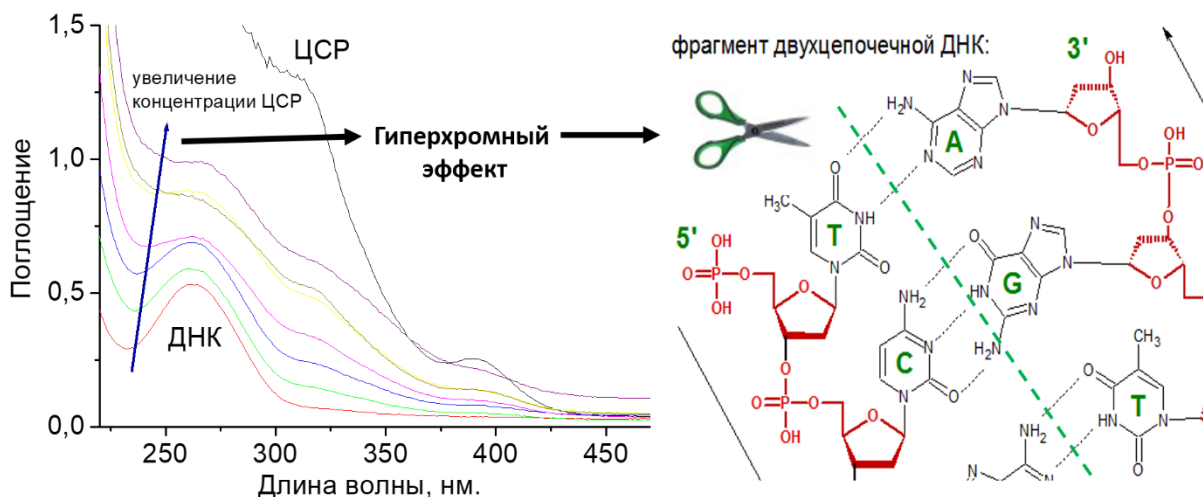
СПИСОК АПРОБАЦИИ:

1. Моисеева Е.Н., Брославская М.Н. Пищевые добавки, используемые при производстве торта «Киевский» // Пищевые добавки: материал Междунар. науч.-практ. конф., [Донецк], 27 ноября 2021 г., - Донецк : [Изд-во ГО ВО «Донец. нац. ун-та экономики и торговли им. М. Туган-Барановского»], 2021. – С. 87 – 88.
2. Моисеева Е.Н., Кудряшова Н.А. Применение новых ингредиентов в производстве торта «Киевский» // «Инновационные технологии в АПК региона: достижения, проблемы, перспективы развития»: сборник научных трудов по материалам Национальной научно-практической конференции 9-11 февраля 2021 г.– Тверь: ФГБОУ ВО Тверская ГСХА, 2021. – С. 248 – 250.

Процесс самоорганизации в системе *L*-цистеин/ Ag^+ /ДНК

Мосолова Д.И. (специалист, 5 курса)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Вишневецкий Д.В.



Недавно в экспериментах *in vitro* было показано, что система на основе водных растворов *L*-цистеина и солей серебра – цистеин-серебряный раствор обладает способностью подавлять раковые клетки карциномы молочной железы человека при отсутствии цитотоксического действия по отношению к клеткам легочной ткани человека эмбриональным фибробластам [1]. Известно, что одним из механизмов гибели клетки является угнетение активности ДНК.

Ранее, автор показал, что введение *L*-цистеин/ AgNO_3 системы в раствор ДНК (D3159, $M=10-30$ кДа) наблюдается подавление ее активности [2]. Однако, влияние химической природы соли серебра на данный процесс не было установлено. Таким образом, в настоящей работе на модельной системе была изучена самоорганизация при смешении *L*-цистеин/ AgNO_2 водного раствора и водного раствора ДНК при разных соотношениях исходных компонентов, а также проведено сравнение с *L*-цистеин/ AgNO_3 системой.

Методом УФ-спектроскопии установлено, что при введении в раствор ДНК исследуемых цистеин-серебряных систем (ЦСР) и увеличения содержания последних, происходит постепенное увеличение оптической плотности

20 декабря 2021 г.

максимума при 260 нм, отвечающей поглощению азотистых оснований в ДНК. Наблюдаемое явление связано с гиперхромным сдвигом, в результате которого двух-цепочечная молекула ДНК переходит в форму одно-цепочечной. При этом ЦСР на основе нитрата серебра обладает более выраженным эффектом. Введение же раствора чистой соли в раствор ДНК не оказывает данного эффекта. Изучение систем с помощью динамического рассеяния света (ДРС) показало, что размеры молекул ДНК уменьшаются при введении ЦСР систем, при этом система на основе нитрата серебра оказывает воздействие сильнее, чем на основе нитрита серебра. Определена область растворимых и нерастворимых комплексов при смешении данных растворов. Измерены значения дзета-потенциала частиц в исходных и смешанных системах. Показано, что чем больше заряд агрегатов ЦСР системы, тем сильнее происходит подавление активности ДНК, что хорошо согласуется с методами УФ-спектроскопии и ДРС. Исследование систем методом сканирующей электронной микроскопии выявило сильную компактизацию молекул ДНК при введении ЦСР систем.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. D.V. Vishnevetskii, A.R. Mekhtiev, T.V. Perevozova, D.V. Averkin, A.I. Ivanova, S.D. Khizhnyak and P.M. Pakhomov. *L-cysteine/AgNO₂ low-molecular weight gelators: self-assembly and suppression of MCF-7 breast cancer cells.* // *Soft Matter*. 2020. 16. 9669-9673. doi.org/10.1039/D0SM01431A.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

2. Мосолова Д.И., Вишневецкий Д.В., Андрианова Я.В. Исследование взаимодействия низкомолекулярной ДНК с *L*-цистеин/AgNO₃ супрамолекулярной системой // XXVII Каргинские чтения. Сб. мат. Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых «Физика, химия и новые технологии», Тверь, 2021, стр. 118.

Организация работы сети ресторанов быстрого питания «Фреш буфет»

Немченко О.С., Смирнова Е.С. (бакалавры, 3 курс)

Научный руководитель: доцент, канд.техн.наук Бондарчук А.Ф.

В настоящее время все больше и больше среди молодежи набирает популярность движение ЗОЖ, которое не может не включать в себя правильное питание. Что же значит правильное питание в жизни человека? Для каждого эта концепция питания своя. Существуют различные теории питания, такие как: теория сбалансированного питания, теория рационального питания, и т.д. Все перечисленные теории имеют главную общую черту - упор на разнообразие, количество потребляемых макро и микронутриентов, калорийность разную для каждого организма.

Сеть «Фреш Буфет» благодаря своей направленности охватывает большую целевую аудиторию: жители больших городов, простые семьи, работники различных сфер деятельности, от офисных служащих до фрилансеров, студенты и школьники, люди, имеющие различные заболевания и придерживающиеся определенных диет, а также спортсмены. Средний чек составляет около 300-400 российских рублей за обед из трех блюд, напитка и пирожка, что является достаточно привлекательным для большинства населения.

Сеть «Фреш Буфет» позиционирует себя не только как ресторан быстрого, но и полезного питания. Рекламная кампания содержит в себе слоган «ресторан взвешенной еды», который скрывает в себе и принцип работы предприятия, и «взвешенность», то есть уравновешенность и сбалансированность пищи. Главная мысль принципа работы ресторана изложена в его названии, вся выбранная еда взвешивается перед оплатой. Данная концепция хорошо поддерживает идею о здоровом и сбалансированном питании, т.к. каждый посетитель сам выбирает нужное количество еды и её набор. Все известные рестораны быстрого питания используют концепцию «кассир-покупатель»: первый предлагает на выбор блюдо из меню, второй лишь выбирает и оплачивает без возможности выбора размера и состава, чаще всего набор шаблонный, изредка появляются новые позиции. Большим плюсом выбранного заведения является наличие разнообразного меню, не подверженного тенденциям фастфуда: жирной, калорийной, «пустой» пище. Все блюда подобраны под

20 декабря 2021 г.

разные типы питания, от диетического до высококалорийного. «Фреш Буфет» предоставляет своим клиентам большой выбор супов, горячих блюд, гарниров, салатов, напитков, десертов, мороженого. Заведение дает возможность заказать дополнительно блюдо из списка доступных на кухне, которое приготовят в течение нескольких минут, а также есть бар, в котором можно заказать коктейли и другие напитки из барной карты. Процесс осуществления выбора еды происходит непосредственно покупателем: он сам может посмотреть состав и оценить внешний вид блюда, а также ему не нужно знакомиться с меню, чтобы выбрать желаемую пищу только по описанию. Лотки с пищей располагаются на специальных стойках, которые нагреваются или охлаждаются в зависимости от вида пищи. Такие продукты, как мороженое и десерты находятся в специальных холодильниках и морозильных камерах с открытыми стенками. В качестве посуды и приборов, используется многоразовые, что является экологичным решением в наши дни. Наряду с употреблением пищи в заведении, её также можно взять с собой в индивидуальной упаковке.

В современном мире очень важными стали вопросы, связанные с санитарно-эпидемиологическими нормами. В данной ситуации наиболее выигрышным оказался подход сети ресторанов быстрого питания «Фреш Буфет. Ресторан взвешенной еды». Благодаря инновационному подходу к ведению ресторанной технологии, потоки посетителей не пересекаются друг с другом, а также кассиры не контактируют с подносами покупателей, тем самым сокращая риски передачи вируса. Меры по предотвращению передачи и распространения коронавирусной инфекции начинаются уже на входе в заведение, там стоят контейнеры с одноразовыми масками, перчатками и антисептиком для посетителей в целях индивидуальной защиты, а также проводится измерение температуры каждого клиента. На кассе взвешивание еды проводится непосредственно покупателем, под присмотром кассира, но без его контакта с подносом и тарелками. Оплата также проводится бесконтактно, посредством пластиковых карт и телефонов с функцией NFC. Также «Фреш Буфет» осуществляет доставку блюд на дом, принимая заказы по телефону, через интернет, что исключает передачу вируса во время еды в стенах заведения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Немченко О.С., Смирнова Е.С., Бондарчук А.Ф. Организация работы сети ресторанов быстрого питания «Фреш Буфет»// Пищевые добавки: материал Междунар. науч.-практ. конф. (27 ноября 2021 г., Донецк): Изд-во ГО ВО «Донец. нац. ун-та экономики и торговли им. М. Туган-Барановского», 2021. С. 194 – 195.

Влияние заместителя на заряд и объем сульфоновой группы.

Нефедова И.А. (специалист, 4 курс)

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

Целью данного фрагмента научной работы по изучению электронного строения сульфонов является исследование электронных характеристик групп и сборка шкалы групповых электроотрицательностей ($\chi(R)$) молекул диметил-, диэтилсульфона ((CH₃)₂SO₂, (C₂H₅)₂SO₂) и их гидридов (CH₃SO₂H, C₂H₅SO₂H) (Рис.). Используемые методы и подходы применимо к сульфонам подробно рассмотрены в материалах [1-2]. Некоторые результаты темы раскрыты в [3-6].

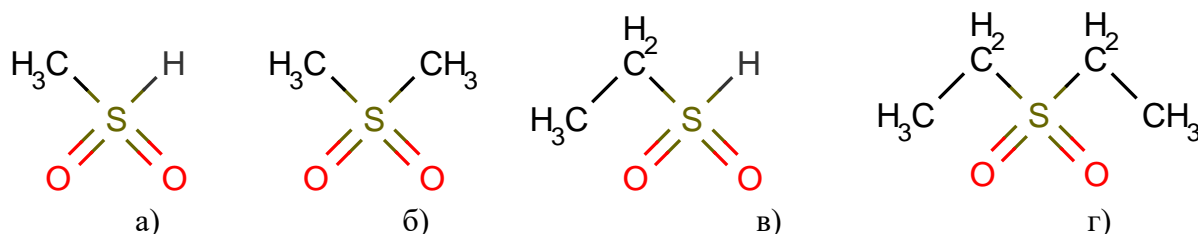


Рис.: а) метилгидридсульфон (CH₃SO₂H), б) диметилсульфон ((CH₃)₂SO₂), в) этилгидрид сульфон (C₂H₅SO₂H), г) диэтилсульфон (C₂H₅)₂SO₂).

Получены электронные параметры объем $V(R)$ и заряд $q(R)$ для функциональных групп: SO₂, CH₃, C₂H₅ и атома Н (Табл.). Выяснено, что заряды кислорода в исследуемых молекулах не зависят от замены одного из фрагментов структуры (CH₃ или C₂H₅) на водород, однако смена заместителя CH₃ на C₂H₅ приводит к снижению $q(O)$ на 0,015 а.е., что говорит о большем оттоке электронной плотности ($\rho(r)$) к кислороду в случае (C₂H₅)₂SO₂ и C₂H₅SO₂H.

Таблица:

Заряды и объемы групп ($q(R)$, $V(R)$) и атомов ($q(\Omega)$, $V(\Omega)$) в (CH₃)₂SO₂, (C₂H₅)₂SO₂, CH₃SO₂H, C₂H₅SO₂H*

	CH ₃	C ₂ H ₅	S(O) ₂	H	S	1O	2O
$q(R)$, в а.е.				$q(\Omega)$, в а.е.			
CH ₃ SO ₂ H	0,058	–	0,011	-0,069	2,672	-1,330	-1,330
(CH ₃) ₂ SO ₂	0,045	–	-0,089	–	2,602	-1,331	-1,331
C ₂ H ₅ SO ₂ H	–	0,096	-0,028	-0,069	2,639	-1,345	-1,345
(C ₂ H ₅) ₂ SO ₂	–	0,078	-0,156	–	2,536	-1,346	-1,346
$V(R)$, в Å ³				$V(\Omega)$, в Å ³			
CH ₃ SO ₂ H	31,83	–	49,23	7,97	7,89	20,67	20,67
(CH ₃) ₂ SO ₂	31,76	–	48,26	–	7,06	20,60	20,60
C ₂ H ₅ SO ₂ H	–	55,05	49,07	6,93	7,87	20,69	20,51
(C ₂ H ₅) ₂ SO ₂	–	54,91	47,82	–	7,02	20,40	20,40

* погрешность расчета $q(R)$ составляет 0,001 а.е., $V(R)$ – 0,01 Å³

20 декабря 2021 г.

Сравнение $V(\text{SO}_2)$ показало увеличение $V(R)$ при замене одной из функциональных групп на водород (Таблица), это свидетельствует о наличии стерического эффекта, проявляемого со стороны CH_3 и C_2H_5 на SO_2 . Уменьшение параметра $V(\text{SO}_2)$ в случае $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{SO}_2$ по сравнению с $\text{C}_2\text{H}_5\text{SO}_2\text{H}$ составило $1,25 \text{ \AA}^3$, что на $0,26 \text{ \AA}^3$ больше, чем в паре $(\text{CH}_3)_2\text{SO}_2$ и $\text{CH}_3\text{SO}_2\text{H}$. Таким образом, стерическое влияние C_2H_5 выше на $V(\text{SO}_2)$, чем воздействие, оказываемое CH_3 .

Сопоставление групповых зарядов исследуемых молекул $q(R)$ дало соотношение: $q(\text{H}) < q(\text{SO}_2) < q(\text{CH}_3) < q(\text{C}_2\text{H}_5)$, исходя из которого собрана шкала $\chi(R)$: $\chi(\text{C}_2\text{H}_5) < \chi(\text{CH}_3) < \chi(\text{SO}_2) < \chi(\text{H})$. Следует отметить, что атомные заряды группы SO_2 показывают высокую подвижность $\rho(r)$ серы, которая вместе с достаточно большим $V(\text{SO}_2)$ могут оказывать сильное влияние на $\rho(r)$ водорода и его интегральные характеристики $V(\text{H})$ и $q(\text{H})$, поэтому $\chi(\text{H})$ убрана из общей шкалы $\chi(R)$:

$$\chi(\text{C}_2\text{H}_5) < \chi(\text{CH}_3) < \chi(\text{SO}_2)$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Котомкин А.В. Электронное строение радикалов эфиров сульфосиловой кислоты. // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. 2019. Т. 62. № 10. С. 96–102.
2. Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Сравнительный анализ электронного строения и конформационного строения моноалкилсульфонов // Вестник Казанского технологического университета 2014. Т.17. №23. С.28-31.

АПРОБАЦИЯ:

3. Нефедова И.А., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Влияние сульфоновой группы на групповой заряд в изомерах положения декансульфона // Математика и математическое моделирование. Сборник материалов XV Всероссийской молодёжной научно-инновационной школы. Саров. 2021. С. 24–25.
4. Нефедова И.А., Русакова Н.П., Туровцев В.В. Электронное строение декансульфона // Сборник: XXVII Каргинские чтения. Тезисы докладов Всероссийской научно-технической конференции молодых учёных, посвященной Году науки и технологий. Тверь. 2021. С. 123.
5. Нефедова И.А. Заряды и объемы групп изомеров декансульфона // Материалы Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2021», секция «химия». Москва. 2021. С. 892.
6. Нефедова И.А. QТАИМ исследования изомеров декансульфона // XX Научная конференция аспирантов и студентов химико-технологического факультета, посвященная 50-ти летию преобразования калининского государственного педагогического института в тверской государственный университет. Тверь. 2021. С. 81.

Содержание безопасных пищевых добавок в бисквитных рулетах

Парфентьева В.В. (бакалавр, 2 курс)

Научный руководитель: ст. преп. Брославская М.Н.

Рулет – мучное кондитерское изделие, изготовленное из свернутого выпеченного полуфабриката и отделочного(ых) полуфабриката(ов), с отделкой поверхности или без нее, с содержанием муки в выпеченном полуфабрикate не менее 25%.

Актуальность данной темы заключается в том, что полуфабрикат – бисквитное тесто – характеризуется неустойчивостью воздушной фазы, и поэтому применяют пищевые добавки, улучшающие качество выпеченного изделия. Целью данной работы является сравнительная оценка качества рулетов, вырабатываемых различными предприятиями-изготовителями. Для достижения данной цели поставлены задачи: анализ пищевых добавок, присутствующих в изделиях, и проведение органолептической и физико-химической оценки качества. В качестве образцов исследования взяты 3 рулета, с классификацией внесённых пищевых добавок [1]: **О** – опасная, **ОО** – очень опасная, **С** – сыпь **РК** – кишечные расстройства.

ООО «Раменский кондитерский комбинат», Рулет бисквитный «Красная цена» с кремом и фруктово-ягодной начинкой клубника. Образец №1	ООО «Раменский кондитерский комбинат» Рулет бисквитный «рулет домашний» с кремом и фруктово-ягодной начинкой клубника Образец №2	АО «Русский бисквит Рулет бисквитный «клубничный» Образец №3
Е163 (антоцианин)	Е163(антоцианин)	Е120 (кармин) С
Е200 (сорбиновая кислота)	Е200 (сорбиновая кислота)	Е200 (сорбиновая кислота)
Е202 (сорбат калия)		Е220 (диоксид серы) ОО
Е322 (лецитин соевый)	Е322 (лецитин соевый)	Е322 (лецитин соевый)
	Е330 (Лимонная кислота)	Е330 (Лимонная кислота)
		Е331 (Цитраты натрия)
		Е341iii(ортофосфат кальция) О РК
Е422 (глицерин)	Е422 (глицерин)	Е407 (каррагинан) О РК
Е433(полисорбат)	Е440 (пектин)	Е420(сорбит)
Е440 (пектин)	Е450i (дигидропирофосфат натрия) О	Е422 (глицерин)
Е450ii (моногидропирофосфат натрия) О	Е471 (моно-и диглицериды жирных кислот)	Е433 (полисорбат 80) О

20 декабря 2021 г.

E470 (соли жирных кислот)		E440 (пектин)
E471(моно-и диглицериды жирных кислот)		E450 пирофосфат) 4 группа О
E475 (эфиры полиглицерид жирных кислот)		E470 (соли жирных кислот)
E476 (полиглицерин)		E471 (моно-и диглицериды жирных кислот)
E477 (пропиленгликоля и жирных к-т эфира)		E475(эфиры полиглицерид жирных кислот)
E492 (сорбитантристеарат) О		E476 (полиглицерин)
		E477(пропиленгликоля и жирных к-т эфира)
		E492(сорбитантристеарат) О
E500 (Гидрокарбонат натрия)	E500ii (Гидрокарбонат натрия)	E500ii (Гидрокарбонат натрия)
		E1422(ацетиловый дикрахмаладиат)

На основе проделанной работы лучшим образцом оказался № 2, в своем производстве использует меньшее количество пищевых добавок. Аутсайдером является образец №3, который используется большое количество антиокислителей – 4, стабилизаторы консистенции – 12, опасных – 5 и очень опасных – 1 пищевых добавок, которые пагубно влияют на организм человека.

Органолептическая оценка качества показала в образце №1. присутствует отклонение в форме – повреждение поверхности, а также полуфабрикат неравномерен по толщине и крошится. Остальные два образца соответствуют требованиям ГОСТа.

В процессе физико-химических исследований выявили содержание сорбиновой кислоты в составе клубничной кремовой начинки.

Наименование показателя	Показатель по ОСТ	Фактический показатель		
		Образец 1	Образец 2	Образец 3
Массовая доля сорбиновой кислоты, %	0,18±0,02	0,001	0,01	0,09

По данному показателю все образцы соответствуют требованиям стандарта.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

1. Парфентьева В.В., Брославская М.Н. Влияние на организм человека пищевых добавок на примере бисквитных рулетов // Пищевые добавки: материал Междунар. науч.-практ. конф., [Донецк], 27 ноября 2021 г., - Донецк : [Изд-во ГО ВО «Донец. нац. ун-та экономики и торговли им. М. Туган-Барановского»], 2021. – С. 77 – 78.

Анализ состава сахарного печенья, реализуемого в г. Твери на наличие пищевых добавок

Паршина М.Н., Платонова А.А. (бакалавры, 3 курс)

Научный руководитель: ст. преподаватель Кудряшова Н.А.

Согласно ГОСТ 24901-2014: Печенье – это мучное кондитерское изделие разнообразной формы, массовой долей влаги не более 16,0%.

Объектом исследования явились образцы печенья сахарного, вырабатываемого ЗАО «Хлеб», г. Тверь: Печенье сахарное «Тверское» со злаками, Печенье сахарное «Искра», Печенье сахарное «Тверской коктейль» классический.

По результатам анализа состава выше представленных образцов можно выделить следующие пищевые добавки, используемые при производстве печенья: сахарин, сода пищевая, аммоний углекислый, лецитин, ароматизаторы [1]. Для получения выводов о качестве продукции, в которую добавляются данные пищевые добавки, необходимо составить характеристику этих добавок.

Таблица 1.

Характеристика пищевых добавок, наиболее часто применяемых
для производства сахарного печенья

Название	Кодировка	Характеристика	Органолептические показатели	Польза	Вред
Сахарин	Е-954	Подсластитель.	Внешний вид: кристаллы, порошок. Запах: без запаха или слабо выраженный. Вкус: интенсивный сладкий.	Отсутствует	Развитие рака провоцируют большие дозы продукта.
Сода пищевая	Е-500	Пищевая добавка Е-500 – относится к добавкам, препятствующим слеживанию и комкованию, разрыхлителям и регуляторам кислотности.	Мелкокристаллический порошок белого цвета, хорошо растворим в воде; нерастворим в этаноле.	Могут устранить боль, при гастрите, язвенной болезни	При чрезмерном: затруднение дыхания, обморок, резкая желудочная боль
Ароматизаторы	Е-600-637	Продукт, не употребляемый человеком непосредственно в пищу, предназначенный для придания пищевой продукции аромата и/или вкуса	Внешний вид: прозрачный или непрозрачный. Однородная порошкообразная, капсулированная или гранулированная смесь. Цвет: бесцветные или окрашенные. Запах: характерный для ароматизатора конкретного наименования.	Польза отсутствует	Вред отсутствует

20 декабря 2021 г.

Название	Кодировка	Характеристика	Органолептические показатели	Польза	Вред
Аммоний	Е-503 (1) Е-503 (2)	Представляет собой смесь карбоната аммония, гидрокарбоната аммония, предназначенную для использования в пищевой промышленности как регулятор кислотности, разрыхлитель пищевых продуктов.	Внешний вид, цвет: кристаллический белый порошок. Запах: слабый запах аммиака.	Отсутствует	Способность вещества выделять аммиак, который провоцирует легочные расстройства при слабой дыхательной системе.
Лецитин	Е-322 (1) Е-322 (2)	Пищевая добавка, представляющая собой гомогенную текучую жидкость от светло-желтого до темно-коричневого цвета, содержащую не менее 60% веществ, нерастворимых в ацетоне, и около 40% триацилглицеринов свободных жирных кислот и других сопутствующих веществ.	Консистенция: однородная вязкая жидкость, порошок, гранулы. Цвет: от светло-желтого до темно-коричневого. Запах: характерный для сырья, из которого получен. Вкус: характерный для сырья, из которого получен.	Эффективно борется с большим показателем холестерина, является средством для профилактики возникновения и развития атеросклероза	При употреблении Е322 в небольших количествах, он способен принести только положительный эффект.

На основе полученных данных можно сделать вывод, что пищевые добавки, вносимые в популярное у жителей г. Твери сахарное печенье, разрешены в использовании пищевыми предприятиями на территории Российской Федерации и не оказывают негативного воздействия на организм потребителей при их употреблении в установленных нормативными документами дозах. И это можно отметить, как положительную характеристику, так как существуют недобросовестные производители, которые используют запрещенное сырье, для удешевления продукции.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

1. Паршина М.Н., Платонова А.А., Кудряшова Н.А. Анализ состава сахарного печенья, реализуемого в г. Твери, на наличие пищевых добавок // Пищевые добавки: материал Междунар. науч.-практ. конф., [Донецк], 27 ноября 2021 г., - Донецк: [Изд-во ГО ВО «Донец. нац. ун-та экономики и торговли им. М. Туган-Барановского»], 2021. – С. 74 – 77.

Влияние структуры пиридиниевых ионных жидкостей на их физико-химические свойства

Суратова Е.С. (1 год магистратуры)

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

Ионные жидкости (ionic liquids, ИЖ) – это органические соли, находящиеся в жидком состоянии при температурах ниже 100°C. Большой интерес представляют электрохимические свойства ионных жидкостей, а именно электропроводность [1,2].

В данном исследовании были получены ионные жидкости на основе четвертичных солей пиридиния. На основе кондуктометрических измерений растворов полученных ИЖ были рассчитаны константы ионной ассоциации (K_a), предельные молярные электропроводности (λ_0), а также энергия Гиббса ассоциации ΔG методом Ли–Уитона [3]. В качестве теоретических зависимостей для коэффициентов активности и электропроводности использовали второе приближение теории Дебая—Хюккеля и уравнение Ли—Уитона:

$$\lambda = \alpha \left\{ \lambda_0 [1 + C_1 \beta k + C_2 (\beta k)^2 + C_3 (\beta k)^3] - \frac{\rho k}{1+t} \left[1 + C_4 \beta k + C_5 (\beta k)^2 + \frac{1}{12} \right] \right\},$$

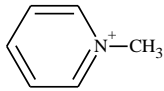
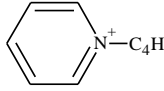
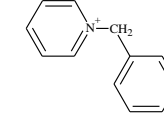
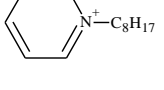
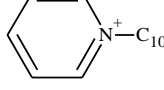
где: λ – молярная электропроводность электролита, $\text{См}^*\text{см}^2/\text{моль}$; λ_0 – предельная молярная электропроводность, α – степень диссоциации электролита.

Энергию Гиббса ассоциации рассчитывали по формуле: $\Delta G = -RT \ln K_a$ [3] (Таблица). Значения K_a ионных жидкостей с одинаковым катионом в большинстве случаев увеличивается в ряду $\text{BF}_4^- \approx \text{PF}_6^- < \text{Hal}^-$. Значение ΔG находятся в пределе от -9,4 до -12,0 кДж/моль. Для галогенидов N-алкилпиридиния K_a в большинстве случаев уменьшается с увеличением длины алкильного заместителя в катионе. Для тетрафторборатов N-алкилпиридиния такой зависимости не прослеживается. Эти различия свидетельствуют о том, что значение K_a зависит не только от размера и природы катиона, но и от размера и природы аниона в структуре ионных жидкостях. Исходя из значений K_a и

20 декабря 2021 г.

энергии ΔG , можно назвать самое ассоциированное соединение – тетрафторборат N-бензилпиридиния.

Таблица: Значения констант ионной ассоциации (K_a), предельных молярных электропроводностей (λ_0), энергий Гиббса ассоциации ΔG

№	Катион	Анион	M, г/МОЛЬ	λ_0 , См*см ² *моль ⁻¹	K_a , л/МОЛЬ	$-\Delta G$, кДж/МОЛЬ
1		I	221,0	231±1	100±3	11,4
2		BF ₄	181,0	197±1	72±2	10,6
3		PF ₆	239,0	208±2	44±3	9,4
4		Br	216,1	207±1	98±2	11,4
5		BF ₄	223,0	200±1	80±3	10,9
6		PF ₆	281,0	189±1	49±3	9,7
7		Cl	205,5	166±1	104±3	11,5
8		BF ₄	257,0	237±3	123±5	11,9
9		PF ₆	315,0	197±1	62±2	10,2
10		Br	272,0	199±1	126±3	12,0
11		BF ₄	279,0	192±1	75±2	10,7
12		PF ₆	337,0	196±1	62±2	10,2
13		Cl	255,6	162±1	86±3	11,0
14		BF ₄	307,0	206±1	79±3	10,8
15		PF ₆	365,0	190±1	57±2	10,0

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Решетов, С. А. Ионные жидкости как разделяющие агенты /Тонкие химические технологии. – 2009. – № 3. – с. 27-44.
2. Eva Aguilera-Herrador. Sample Treatments Based on Ionic Liquids / Eva Aguilera-Herrador, Rafael Lucena
3. Журавлев О. Е. Исследование электропроводности растворов пиридиниевых ионных жидкостей // Вестник ТвГУ. Серия: Химия. – 2017. – № 4. с. 85–90

АПРОБАЦИЯ РАБОТЫ:

4. Суратова Е. С. Синтез ионных жидкостей на основе четвертичных солей N-алкилпиридиния с неорганическими анионами и их свойства // Сб. тезисов докладов XX научной конференции аспирантов и студентов химико-технологического факультета ТвГУ. Тверь. 2021. – С. 67.
5. Суратова Е. С. Синтез ионных жидкостей на основе четвертичных солей N-алкилпиридиния с неорганическими анионами / /Каргинские чтения. Тверь. 2021 – С. 156.

Бензолзамещенные в рамках квантовой теории атомов в молекулах

Тимофеева Е.В. (специалист, 5 курс)

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

Распределение электронной плотности ($\rho(r)$) равновесных состояний тиофенола (I), хлорбензола (II), фторбензола (III), анилина (IV), толуола (V), бензойной кислоты (VI), фенола (VII) и амфетамина (VIII) (Таблица), общей формулой C_6H_5-R (Рис) получено методом V3LYP с использованием программы Gaussian03. Интегральные электронные характеристики групп (заряды $q(R)$ и объемы $V(R)$) (Таблица) суммированы из соответствующих атомных параметров, найденных с помощью «квантовой теории атомов в молекулах». Данные научного исследования ранее представлялись в работах [1-3].

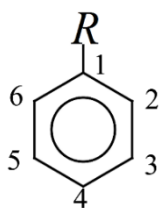


Рис. Общая структурная формула рассматриваемых соединений, где $R = SH$ (I), Cl (II), F (III), NH_2 (IV), CH_3 (V), $COOH$ (VI), OH (VII), C_3H_8N (VIII); нумерация атомов углерода по ароматическому кольцу

Среди рассматриваемых соединений наибольшими зарядами обладают функциональные фрагменты SH , CH_3 и C_3H_8N , проявляя электронодонорные свойства и отдавая электронную плотность ($\rho(r)$) в бассейн бензольного кольца (Таблица). Это приводит к увеличению объема ароматического цикла в целом по сравнению с $V(C_6H_5)$ остальных соединений. Наибольшим значением $V(C_6H_5) = 109,7 \text{ \AA}^3$ обладает толуол ($C_6H_5-CH_3$), что объясняется более слабым стерическим (S) влиянием $V(CH_3)$ на $\rho(r)$ бензола, чем в $C_6H_5-C_3H_8N$ и C_6H_5-SH , где S -эффект выражен более ярко (чем больше $V(R)$ заместителя, являющегося донором $\rho(r)$ для C_6H_5 , тем меньше $V(C_6H_5)$). Функциональные группы Cl , F , NH_2 , $COOH$, OH являются акцепторами $\rho(r)$, стягивая ее с C_6H_5 и понижая свой $q(R)$. В случае с Cl , F , NH_2 , $COOH$, OH на фоне $-I$ -эффекта этих групп выделить S -воздействие на C_6H_5 не представляется возможным.

20 декабря 2021 г.

Сопоставление групповых зарядов исследуемых соединений позволило составить качественную шкалу электроотрицательностей групп:

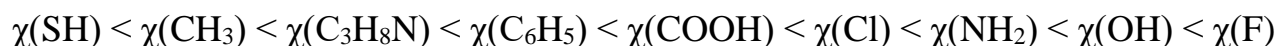


Таблица:

Заряды ($q(R)$), энергии ($E(R)$) и объемы ($V(R)$) групп замещенных бензола $\text{C}_6\text{H}_5\text{-}R$, где $R = \text{SH}, \text{Cl}, \text{F}, \text{NH}_2, \text{CH}_3, \text{COOH}, \text{OH}, \text{C}_3\text{H}_8\text{N}$

молекула	R	R	1C	2CH	3CH	4CH	5CH	6CH	C_6H_5
	$q(R)$, в а.е								
I	SH	0,065	-0,138	0,022	0,015	0,006	0,012	0,019	-0,065
II	Cl	-0,245	0,071	0,060	0,020	0,014	0,020	0,060	0,245
II	F	-0,670	0,505	0,055	0,022	0,012	0,022	0,055	0,670
IV	NH_2	-0,350	0,388	-0,018	0,003	-0,009	0,003	-0,018	0,350
V	CH_3	0,042	0,002	-0,017	-0,003	-0,003	-0,003	-0,017	-0,042
VI	COOH	-0,158	-0,005	0,050	0,017	0,014	0,020	0,062	0,158
VII	OH	-0,555	0,513	0,035	0,012	0,001	0,012	-0,017	0,555
VIII	$\text{C}_3\text{H}_8\text{N}$	0,041	0,002	-0,028	-0,008	-0,007	-0,005	0,005	-0,041
$V(R)$, Å ³									
I	SH	38,2	10,9	19,5	19,7	19,9	19,7	19,5	109,0
II	Cl	32,4	10,3	19,2	19,6	19,8	19,6	19,2	107,8
II	F	16,5	9,2	19,5	19,6	19,9	19,6	19,5	107,2
IV	NH_2	27,1	9,1	20,0	19,7	20,2	19,7	20,0	108,6
V	CH_3	32,6	10,4	19,8	19,9	20,0	19,9	19,8	109,7
VI	COOH	46,7	10,8	18,7	19,7	19,6	19,7	18,7	107,3
VII	OH	21,6	8,9	19,6	19,7	20,0	19,7	19,9	107,9
VIII	$\text{C}_3\text{H}_8\text{N}$	96,8	10,0	19,8	19,9	19,9	19,8	19,4	108,8

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

1. Безлепкина Е.В., Русакова Н.П., Орлов Ю.Д. Квантовохимическое сравнение бензолзамещенных // Сборник материалов Всероссийской научно-технической конференции молодых учёных в рамках Каргинских чтений. 2020. С.18.
2. Тимофеева Е.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В. Монозамещенные бензола в рамках квантовой теории атомов в молекулах // Сборник: XXVII Каргинские чтения. Тезисы докладов Всероссийской научно-технической конференции молодых учёных, посвященной Году науки и технологий. Тверь, 2021. С. 160.
3. Тимофеева Е.В. Электронные параметры монозамещенных бензола // Материалы Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов2021», секция «Химия». – М.: Издательство «Перо», 2021. С. 905.

Новый анализ цинка с использованием 8-оксихинолина

Фёдорова А.А. (магистр, 1 курс)

Научный руководитель: профессор, Никольский В.М.

В процессе контроля металлов-загрязнителей в воде, почве, технологических растворах, растениях, пище, живых организмах определение цинка в большинстве случаев осуществляется с использованием 8-оксихинолина.

Кроме того, известен способ колориметрического определения содержания цинка в водных растворах, основанный на образовании окрашенного в красный цвет соединения цинка с дитизоном с дальнейшим извлечением дитизоната цинка в слой четыреххлористого углерода при $\text{pH}=1,8-4,5$ и колориметрированием в области 535 нм [1].

Недостатком способа является необходимость экстракции окрашенного продукта органическим растворителем.

Также известен способ определения цинка в водных растворах по реакции «родамина С» с ионами цинка с образованием окрашенного комплексного соединения, которое экстрагируют диэтиловым эфиром и измеряют светопоглощение образующегося коллоидного водного раствора [2].

Недостаток - высокая погрешность и длительность определения.

Известен и способ определения цинка с антраниловой кислотой осаждением $\text{Zn}(\text{C}_7\text{H}_6\text{NO}_2) \cdot x\text{H}_2\text{O}$ из нейтральных и слабокислых растворов [3].

К недостаткам способа относится мешающее определению присутствие других металлов, кроме щелочных и щелочноземельных.

Определение цинка 8-оксихинолином в виде желтого кристаллического осадка $\text{Zn}(\text{C}_9\text{H}_6\text{NO}_2) \cdot x\text{H}_2\text{O}$ обычно осуществляют из уксуснокислых растворов. Осаждению не мешают алюминий, хром, железо, свинец, висмут, олово, мышьяк, кобальт, никель и марганец, но медь требуется маскировать тиомочевинной [3].

20 декабря 2021 г.

Нами предложено определение цинка 8-оксихинолином осуществлять после удаления мешающей определению меди электролизом. Полноту осаждения меди удобно контролировать помещением 2-3 капель исследуемого раствора на часовое стекло с прибавлением 2 капель ацетата натрия и 2 капель раствора желтой кровяной соли. Если не появляется красновато-бурый осадок $[\text{Cu}_2\text{Fe}(\text{CN})_6]$, осаждение меди на катоде можно считать законченным [4].

Осаждение меди электролизом обеспечивает надежное определение цинка 8-оксихинолином, упрощает процесс анализа и сокращает расход реагентов.

По созданной методике в Роспатент подана заявка на изобретение [5].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Ахметова Т.И. «Способ определения цинка в воде» / Патент РФ 2125724, опубл. 27.01.1999.
2. Лурье Ю.Ю. Аналитическая химия промышленных сточных вод. М.: Химия, 1984, С.164.
3. Основы аналитической химии. Практическое руководство. Учебное пособие для вузов. М., Высшая школа, 2001, С. 221-222.
4. Садименко Л.П. «Методическое пособие к практическим занятиям по аналитической химии. Количественный анализ. Часть 1. (Гравиметрический и электрогравиметрический анализ), Р/Д, 2004. <http://window.edu.ru/catalog/pdf2txt/974/19974/3187>

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

5. Фёдорова А.А., Никольский В.М. «Способ определения цинка 8-оксихинолином» / Заявка №2021114903 от 26.05.2021 г. на выдачу патента на изобретение.

Физико-химическое исследование лекарственных препаратов

Шачнева К.С. (магистр, 1 курс)

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

Контроль качества лекарственных препаратов – одна из главных проблем современного здравоохранения России. Несоответствие заявленной и фактической дозировки активного вещества в выпускаемых формах, а также фальсифицированные препараты могут повлечь за собой серьезные осложнения при лечении различных болезней.

В настоящей работе проведено исследование подлинности лекарственного нестероидного препарата парацетамол (п-ацетаминофен) следующих производителей: ОАО «Фармастандарт-Лексредства», АО «Производственная фармацевтическая компания Обновление» и АО «Татхимфармпрепараты».

Количественный анализ выполняли обратным цериметрическим методом, основанным на предварительном кислотном гидролизе п-ацетаминофена и последующем окислении п-аминофенола избытком раствора $\text{Ce}(\text{SO}_4)_2$, и спектрофотометрическим методом. В спектрофотометрическом анализе в качестве растворителя использовали 0.1 н раствора NaOH . Удельный коэффициент равен 715. Спектры снимали в УФ области. В ходе спектрофотометрического анализа в УФ области было выяснено (рис.1), что максимальное поглощение парацетамола происходит при длине волны равной 257 нм. ИК-спектроскопический анализ проводился на ИК-Фурье спектрометре фирмы Bruker и были получены ИК-спектры парацетамола в области 400-4000 cm^{-1} . Путем сравнения полученных ИК-спектров с ИК-спектром стандартного образца было произведено соотнесение полос поглощения функциональных групп. Известно, что парацетамол существует в трех кристаллических модификациях: (I) – моноклинная, которая является самой стабильной формой

20 декабря 2021 г.

при естественных условиях, (II) – ромбическая метастабильная, (III) – аморфная форма неустойчива и не имеет практического значения.

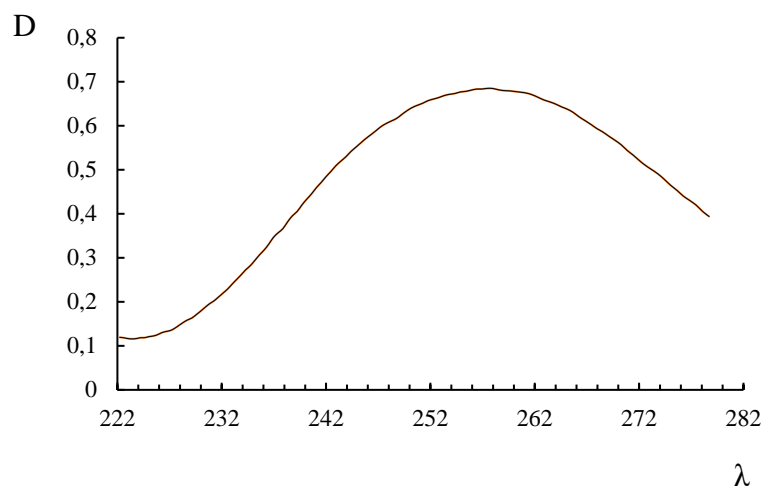


Рис. 1. УФ-спектр п-ацетаминофена (парацетамола)

Ранее автором были опубликованы данные количественного анализа в работе [1]. Количественное содержание соответствует заявленному производителем. Данные ИК-спектроскопического и спектрофотометрического анализа представлены в материалах [2].

В полученных ИК-спектрах можно выделить характеристические полосы поглощения: ν - CH_3 группы 2926 см^{-1} и σ $1470\text{-}1430\text{см}^{-1}$, $1175\text{-}1165\text{см}^{-1}$, $1380\text{-}1370\text{см}^{-1}$; ν - C=O группы $1820\text{-}1650\text{см}^{-1}$; ν - NH группы $3500\text{-}3100\text{см}^{-1}$ и σ $1580\text{-}1490\text{см}^{-1}$; ν Ar-NH-R группы $1350\text{-}1280\text{см}^{-1}$; ν - OH группы $3636\text{-}3150\text{см}^{-1}$ и σ $1450\text{-}1200\text{см}^{-1}$, $<700\text{см}^{-1}$; ν ароматического кольца $3080\text{-}3030\text{см}^{-1}$, $1625\text{-}1575\text{см}^{-1}$ и σ $1225\text{-}1175\text{см}^{-1}$, $1125\text{-}1090\text{см}^{-1}$, $860\text{-}800\text{см}^{-1}$. Сдвигов в области валентных и деформационных колебаний не наблюдалось. В результате механического воздействия (перетиранья) моноклинная (I) форма не переходила в ромбическую (II).

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

1. Шачнева К.С. Обратное цериметрическое определение п-ацетаминофена в лекарственных средствах // XXVII Кургинские чтения. Сборник материалов. 2021. С. 171.
2. Шачнева К.С. Физико-химическое определение подлинности парацетамола // V Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых. Сборник докладов. Донецк, ДонНУ. 2021. С. 64-68.

Метилловый красный в квантовой теории атомов в молекулах

Щенухина А.С. (бакалавр, 4 курс)

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

Исследование зарядов и объёмов проведено для шести изомеров метилового красного с *транс*- (I–III) и *цис*- (IV–VI) положением ароматических колец относительно диазогруппы -N=N- (Рис. 1). В таблице показаны заряды $q(R)$ и объёмы $V(R)$ групп (COOH, CH) и атомов (N, C), дающие вклад в образование внутримолекулярных слабых взаимодействий (ВМСВ). Методика квантово-химических вычислений и некоторые результаты научной работы представлены в материалах [1–4].

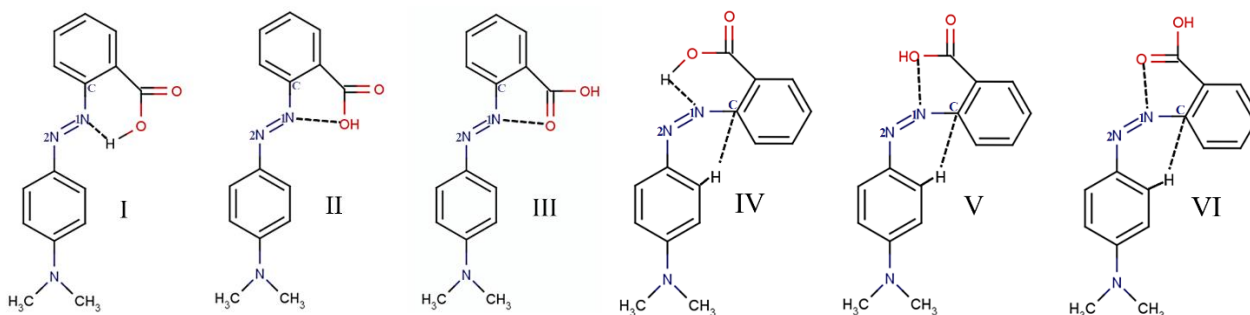


Рис. Изомеры метилового красного. Пунктиром показаны ВМСВ.

Наименьшей энергией (E_{total}) среди *транс*- структур (I–III) обладает I, а среди *цис*- (IV–VI) – состояние IV. В I и IV между атомами N1 и H присутствует ВМСВ. Взаимодействие N \cdots H характеризуется самым высоким значением $q(\text{COOH})$ и самым маленьким $V(\text{COOH})$ (Таблица). Образование ВМСВ между N1 и O (II, III, V, VI) сопровождается понижением $q(\text{COOH})$. Отличие в E_{total} между I и остальными *транс*-формами составило 24 кДж/моль. Расчет E_{total} *цис*-состояний показал её повышение на 66 кДж/моль для IV и 77 кДж/моль в случае остальных конформеров.

Светоиндуцированный переход из I–III в IV–VI сопровождается возникновением стерических внутримолекулярных взаимодействий между ароматическими циклами и к увеличению воздействия бензольного фрагмента

20 декабря 2021 г.

на собственный заместитель. Например, в VI объем COOH меньше на $0,35 \text{ \AA}^3$, чем $V(\text{COOH})$ в III (Таблица), а в V – на $0,27 \text{ \AA}^3$, чем в II.

Таблица. Заряд $q(R)$ и объем $V(R)$ групп метилового красного, образующих ВМСВ*.

	$q(R)$, а.е.					$V(R)$, \AA^3				
	COOH	1N	2N	C	CH	COOH	1N	2N	C	CH
I	-0,112	-0,530	-0,482	0,333	0,053	45,54	13,26	14,83	9,43	18,60
II	-0,132	-0,448	-0,474	0,352	0,062	46,50	14,26	15,06	9,23	18,69
III	-0,140	-0,441	-0,473	0,356	0,072	46,46	14,17	15,09	9,18	18,60
IV	-0,093	-0,475	-0,422	0,283	0,047	45,48	13,49	15,05	8,68	18,09
V	-0,144	-0,389	-0,402	0,294	0,044	46,23	14,13	15,09	8,33	18,19
VI	-0,149	-0,386	-0,395	0,302	0,049	46,11	14,10	15,08	8,31	18,15

* погрешность расчета $q(R)$ составляет 0,001 а.е., $V(R)$ – $0,01 \text{ \AA}^3$; 1N – азот у фрагмента бензойной кислоты, 2N – у диметанилинового.

Присутствие в IV-VI взаимодействия $\text{H}^{\delta+}\text{C}$ между атомом C фрагмента бензойной кислоты и H диметиланилина приводит к оттоку электронной плотности от C в бассейн CH, что сопровождается уменьшением $q(\text{CH})$ (Таблица). Стерический эффект, оказываемый на CH со стороны бензойного участка молекулы (при условии $\text{N}^{\delta-}\text{O}$) сопровождается уменьшением $V(\text{CH})$ в VI по сравнению с V и увеличением R_b (с $5,172 \text{ \AA}$ в V до $5,632 \text{ \AA}$ в VI).

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

7. Щенухина А.С., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Внутримолекулярные слабые взаимодействия в метиловом красном // Математика и математическое моделирование. Сборник материалов XV Всероссийской молодежной научно-инновационной школы. Саров. 2021. С. 31–33.
8. Щенухина А.С., Русакова Н.П., Туровцев В.В. QТАИМ характеристики слабых взаимодействий метилового красного // Сборник: XXVII Каргинские чтения. Тезисы докладов Всероссийской научно-технической конференции молодых учёных, посвященной Году науки и технологий. Тверь. 2021. С. 178.
9. Щенухина А.С. Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Распределение электронной плотности в конформерах метилового красного // Химическая термодинамика и кинетика. Сборник материалов XI Международной конференции. Великий Новгород, 2021. С. 412–413.
10. Щенухина А.С. Сравнение энергий некоторых конформеров метилового красного // XX Научная конференция аспирантов и студентов химико-технологического факультета, посвященная 50-ти летию преобразования калининского государственного педагогического института в тверской государственный университет. Тверь. 2021. С. 85.

20 лет



20 декабря 2021



Тверской
государственный
университет

Конкурс

**научно-исследовательских работ,
посвященный двадцатилетию образования
химико-технологического факультета**

Юные таланты



20 декабря 2021 г.

Влияние УФ излучения на процесс формирования наночастиц серебра в цистеин-серебряном растворе

Барсегян Т.А. (бакалавр, 4 курс)

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

В настоящее время наиболее актуальной проблемой является поиск и создание лекарственных препаратов, имеющих выраженное антибактериальное действие. Как известно, соли серебра, а также цистеин-серебряный раствор (ЦСР) обладают антисептическими свойствами [1,2]. Однако возникает задача усиления этих свойств путем создания в ЦСР наночастиц серебра (НЧС).

В данной работе проведены исследования по формированию НЧС в ЦСР, с помощью различных физико-химических методов полученных растворов. В ходе УФ облучения ЦСР с различными солями серебра (нитрат, нитрит и ацетат) обнаружено (рис. 1), что растворы по-разному окрашены. Это может свидетельствовать о разной степени восстановления металлического серебра в ЦСР в зависимости от типа аниона.



Рис. 1. Фотографии образцов ЦСР, подвергнутых УФ облучению в течение 1 час, на основе ацетата (1), нитрата (2) и нитрита серебра (3).

Доказательством образования НЧС в ЦСР при облучении свидетельствуют данные УФ спектроскопии. При УФ облучении ЦСР с различными солями серебра основные полосы поглощения 314 нм и 394 нм, свидетельствующие о

наличии супрамолекулярных цепей из молекул меркаптида серебра [2], исчезали и вместо них появлялись новые полосы с максимумами 405 и 460 нм. Их появление обусловлено плазмонным резонансом свободных электронов на поверхности образующихся НЧС разного размера [3]. Исследования растворов показывают рост значения рН при УФ облучении, что свидетельствует о переходе из кислой в более нейтральную среду. Это может происходить в результате разрушения супрамолекулярных цепочек в ЦСР и восстановлении L-цистеина при формировании НЧС.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. О.А. Baranova, N.I. Kuz'min, T.I. Samsonova, I.S. Rebetskaya, O.P. Petrova, P.M. Pakhomov, S.D. Khizhnyak, P.V. Komarov, and M.M. Ovchinnikov. // *Fibre Chemistry*, 2011. V. 43, N1, P.90-103. <https://doi.org/10.1007/s10692-011-9313-4>.
2. П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк, М.М. Овчинников, П.В. Комаров. Супрамолекулярные гели. Тверь: ТвГУ. 2011. 269с.
3. А.Н. Адамян, А.И. Иванова, Е.М. Семенова, М.Д. Малышев, С.Д. Хижняк, П.М. Пахомов. Влияние освещения на процесс самоорганизации в цистеин-серебряном растворе // *Вестник ТвГУ, Серия «Химия»*. 2021. С. 60-68.

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

20 декабря 2021 г.

Роль зубной пасты для здоровья человека

Данилова Ю.А. (10 класс, МБОУ СОШ №6 г. Торжок)

Руководитель: учитель химии Курова О.Г.

Красивая улыбка — это свидетельство здоровья [1]. На протяжении веков человечество испробовало самые разнообразные средства для чистки зубов [2]. Зубная паста сегодня является основным универсальным средством ухода за полостью рта. На сегодняшний день производители предлагают широкий ассортимент зубных паст. Люди покупают зубную пасту, исходя из своих возможностей.

Цель исследования: изучение состава и свойств зубных паст от разных производителей. *Гипотеза:* если правильно ухаживать за зубами, то у вас всегда будет красивая улыбка

Объектами нашего исследования являются зубные пасты импортного и отечественного производства. **Предметом исследования:** качественный состав зубных паст. В своей работе мы использовали методы - социологического опроса, определения органолептических свойств зубных паст, наблюдения, метод сравнения.

По результатам опроса установили, что наибольшей популярностью у респондентов пользуются пасты: SPLAT, Colgate, Blend-a-med, Лесной бальзам. Ошибкой при выборе пасты является то, что более трех четвертей не смотрят на состав пасты. Следят за состоянием зубов и посещают стоматолога для консультаций лишь 30% респондентов. Основным критерием выбора зубной пасты для учащихся являются родители.

При изучении и анализе информации с упаковки выявили: - из семи паст имеют химический состав только на английском языке, что согласно закону РФ «О защите прав потребителей» просто недопустимо; - две из всех паст под маркой SPLAT и Новый жемчуг имеют описание условий хранения, что является необходимым фактором согласно ГОСТу.

Нас интересовал основной состав паст — это абразивные вещества, пенообразователь, антибактериальные вещества, фтористая система и наличие красителей [3]. В состав всех выбранных для исследования паст входит пенообразователь лаурилсульфат натрия; фтор не содержится в пастах Новый Жемчуг и Splat; не содержат синтетических красителей пасты Лесной бальзам; Новый Жемчуг и Splat.

При изучении качественного состава зубных паст увидели - все образцы зубных паст обладают хорошим пенообразованием, за исключением зубного порошка, так как в состав всех паст входит лаурилсульфат; плохую растворимость имеют Blend-a-med, Colgate; ионы фосфата не обнаружены в пастах Colgate, Blend-a-med, Лесной бальзам. **При** определении кислотности зубных паст индикаторной бумагой установили, что все образцы имеют кислотность в соответствии ГОСТом.

Рекомендации:

1. Перед походом в магазин, узнайте, какой тип зубной пасты вам необходим [4].
2. Помните, что в первую очередь необходимо определиться, какие цели вы преследуете, подбирая зубную пасту.
3. Если у вас возникли сомнения, то лучше посетите стоматолога. Он сможет определить, какие проблемы с зубами или деснами у вас есть, и посоветует, какую пасту стоит выбрать [5].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Самуйлова Л.В., Пучкова Т.В. Косметическая химия. Изд. «Гелиос», М. 2005г., 217с.
2. Щербинин Д. Откуда что взялось? – М.: Аквилегия-М, 2009г., 251с.
3. Знакомьтесь зубная паста. – М.: ЗАО «Натусана», 2008г, с 228 - 236.
4. Озерная О. С. «Уход за зубами», изд. «ОНИКС 21 век», Санкт-Петербург, 2008 г., 176 с.
5. Малышева А.Н. Классификация средств индивидуальной гигиены полости рта /А.Н. Малышева //Зубной доктор. — 2007. №10. — 15-16с.

20 декабря 2021 г.

Усовершенствование ферментационно – экстракционной технологии получения биосредств для растениеводства

Ершов Н.А. (специалист, 2 курс)

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

Для нормальной жизнедеятельности растениям необходимы различные питательные вещества, обеспечение которыми, в первую очередь, идет за счет почвы. Но в почве может быть их дефицит и поэтому применяют жидкофазные биосредства содержащие необходимые элементы.

Существует множество технологий производства жидких биосредств, но одной из перспективных является ферментационно-экстракционная технология. Усовершенствование данной технологии является актуальным направлением, поскольку, используя новые технологические решения обеспечивается получение нового качественного биосредства и разумная утилизация возобновляемых отходов, именно отходов животноводства и трудно гидролизуемого сырья растительного происхождения.

Таблица 1

Численность микроорганизмов на различных стадиях ферментации

Образец	Использующие органические формы азота, млн КОЕ/г		Использующие минеральные формы азота, млн КОЕ/г		Микроскопические грибы, тыс. КОЕ/г		Энтеробактерии, млн КОЕ/г	
	Т:Н ^{*1}	Т:П ^{*2}	Т:Н	Т:П	Т:Н	Т:П	Т:Н	Т:П
Исходное сырье	224,8	857,0	147,4	1000,0	6,0	2,3	1,7	32,7
Спустя 2 суток инкубации	4921,0	928,8	1175,8	6080,0	5,2	5,2	162,4	176,0
После пастеризации	38,1	63,4	22,0	128,6	0	0	0,7	0
Спустя 5 суток инкубации	44,6	75,9	94,2	120,0	0	0	0	0
Стабилизный продукт ферментации	189,6	564,1	263,2	744,5	0	0	0	0

Т:Н^{*1} торф - навоз. Т:П^{*2} торф – помет.

В ходе ферментационно-экстракционного процесса получают готовое жидкое биосредство, содержащие в себе необходимые питательные вещества, а также микроорганизмы. В базовой ферментационно-экстракционной технологии в качестве исходного сырья выступают навоз крупно рогатого скота, торф и зола. Однако известно, что в птичьем помете содержится большее количество микроорганизмов и по химическому составу в 3-4 раза богаче, чем навоз крупного рогатого скота. В таблице 1 приведена сравнительная характеристика численность микроорганизмов на различных стадиях ферментации, в которой видно, что в исходной торфо-пометной смеси численность тестируемых микроорганизмов существенно выше.

По каждой технологии жидкофазное биосредство было проанализировано на комплекс микробиологических и биохимических показателей, приведенных в таблице 2.

Таблица 2

Характеристика жидкофазных биосредств

Жидкофазное биосредство	Использующие органические формы азота, млн КОЕ/мл	Использующие минеральные формы азота, млн КОЕ/мл	Каталазная активность, см ³ О ₂ /мл/мин	Дегидрогеназная активность, мг ТФФ/мл/24 ч
По базовой технологии	17,2·10 ⁸	1,3·10 ⁹	0,19	0,46
По усовершенствованной технологии	45,1·10 ⁸	22,5·10 ⁹	0,25	0,74

Подводя итог всему выше сказанному, необходимо отметить, что замена органического сырья в ферментационно-экстракционной технологии получения жидкофазных биосредств способствовало более активному процессу ферментации, а полученное после дальнейшей экстракции жидкофазное биосредство по изученным микробиологическим и биохимическим параметрам превосходит жидкофазное биосредство, полученное по базовой технологии.

20 декабря 2021 г.

Изучение лекарственных свойств растений Соминки

Журавлева Д.Д. (ученик, 9 класса, школа № 34, г.Тверь)

Научные руководители: Виноградова Т.С., Панкова В.П.

Растительный мир богат и разнообразен. На территории нашей страны произрастает большое количество различных видов растений, многие из которых обладают лечебными свойствами. Растения являются источником для получения разнообразных лекарственных веществ. Известно, что свыше 30% всех лекарственных препаратов получается из растений. Лекарственные растения издавна применяются человеком и составляют почти половину лекарственных средств современной медицины.

Самыми распространенными растениями Соминки оказались: крапива, ромашка, подорожник, мята, календула, одуванчик. Все они обладают лекарственными свойствами.

Рассмотрим по отдельности полезные свойства некоторых растений:

1. Подорожник обыкновенный. Листья подорожника содержат индикановый гликозид адкубин, горькие и дубильные вещества, каротин, 20,7-42,2 мг % аскорбиновой кислоты. Свежие листья содержат 0,01-0,02% флавокоидов, много углеводов, лимонную и олеаноловую кислоты. Семена содержат до 44% слизи, около 20% жирного масла и 0,16-0,17% углеводов плантеозы.

Настой листьев применяют в качестве отхаркивающего средства. Клинически установлено, что сок свежих листьев подорожника большого оказывает положительное влияние на заживление ран, эффективен при длительно протекающих хронических колитах, оказывает влияние на усиление секреторных функций желудка. Экстракт листьев оказывает успокаивающее снотворное действие, понижает артериальное давление. Эссенцию из свежего растения применяют в гомеопатии.

2. Ромашка аптечная. В цветочных корзинках ромашки содержится: эфирное масло синего цвета (0,2-0,8%), апиин, салициловая кислота глицериды

жирных кислот, аскорбиновая кислота, каротин, горечи, слизи и камедь. Основную ценность все эфирных маслах представляет хамазулен. В медицине препараты ромашки применяют внутрь как спазмолитическое средство при заболеваниях органов пищеварения, спастических и хронических колитах, сопровождающихся брожением в кишечнике, анацидных гастритах и как желчегонное средство. Наружно ромашку используют в качестве слабого вяжущего, противовоспалительного и антисептического средства для полосканий, примочек, ванн и клизм. Входит в состав желудочных и смягчительных сборов.

3. Календула или ноготки лекарственные. В медицине используют цветочные корзинки ноготков. Они содержат каротиноиды (около 3%), эфирное масло (0,02%), смолы (до 3,4%), слизь (до 4%) органические кислоты. Обладая противомикробным, противовоспалительным, вяжущим, «кровоочистительным» и успокаивающим действием, а также способностью понижать кровяное давление, ноготки занимают видное место среди лекарственных растений. Препараты из ноготков (настойка, настой и мазь) в качестве дезинфицирующих и ранозаживляющих средств широко применяют для наружного лечения ушибов, ссадин, гнойных и длительно незаживающих ран и язв, пролежней, сыпей, ожогов, обморожений, карбункулов, фурункулов, угрей, лишаев.

Целебные свойства лекарственных растений обусловлены действующими или фармакологически активными веществами. Именно они наиболее ценны, хотя и содержатся в растениях в минимальных количествах. Изучению многовекового опыта народа в использовании растений с лечебной целью в нашей стране придается большое значение. Из применяющихся в современной научной медицине лечебных препаратов более одной трети их получают из растительного сырья, а при лечении некоторых заболеваний удельный вес препаратов растительного происхождения резко возрастает.

20 декабря 2021 г.

Влияние функциональных добавок на свойства водно-дисперсионных полиакриловых красок

Кружков С.М. (магистр, 1 курс)

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

Функциональные добавки — это вспомогательные вещества, применяемые для улучшения процессов пленкообразования и нанесения лакокрасочных материалов (ЛКМ), повышения стабильности и долговечности красок и покрытий, а также для придания им каких-либо специальных свойств. Основные используемые в настоящее время добавки можно разделить по их назначению на следующие группы: коалесценты, загустители, пеногасители, смачивающие или диспергирующие агенты, нейтрализующие агенты, консерванты.

Коалесценты позволяют снижать температуру пленкообразования водных дисперсий (ВД), влияют на время высыхания и твердость покрытия, на вязкость и смачиваемость ЛКМ и на устойчивость покрытия к мокрому истиранию.

В данной работе в качестве связующего для ЛКМ использовали полиакриловую дисперсию АКРИЛАН 101, минимальная температура пленкообразования (МТП) которой 13-19°C. В качестве коалесцирующего агента использовали такие вещества как этиленгликоль, тексанол, DPnB. Эффективность их влияния на пленкообразующие свойства дисперсий оценивали по зависимости МТП композиции от их количества.

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. Полученные пленки характеризуются при этом различными значениями блеска, что связано с различной шероховатостью поверхности.

В ходе работы было выявлено, что коалесцент тексанол является наиболее эффективным, так как он придает высокую прочность пленки и наибольший показатель блеска.

Таблица:

Практические показатели блеска покрытий

Коалесцент	Тексанол	Этиленгликоль	Dowanol DPnB
Содержание, % к массе дисперсии	3,5	4,8	5
Блеск, %	66	43	57

Помимо этого, он снижает МТП при минимальном введении.

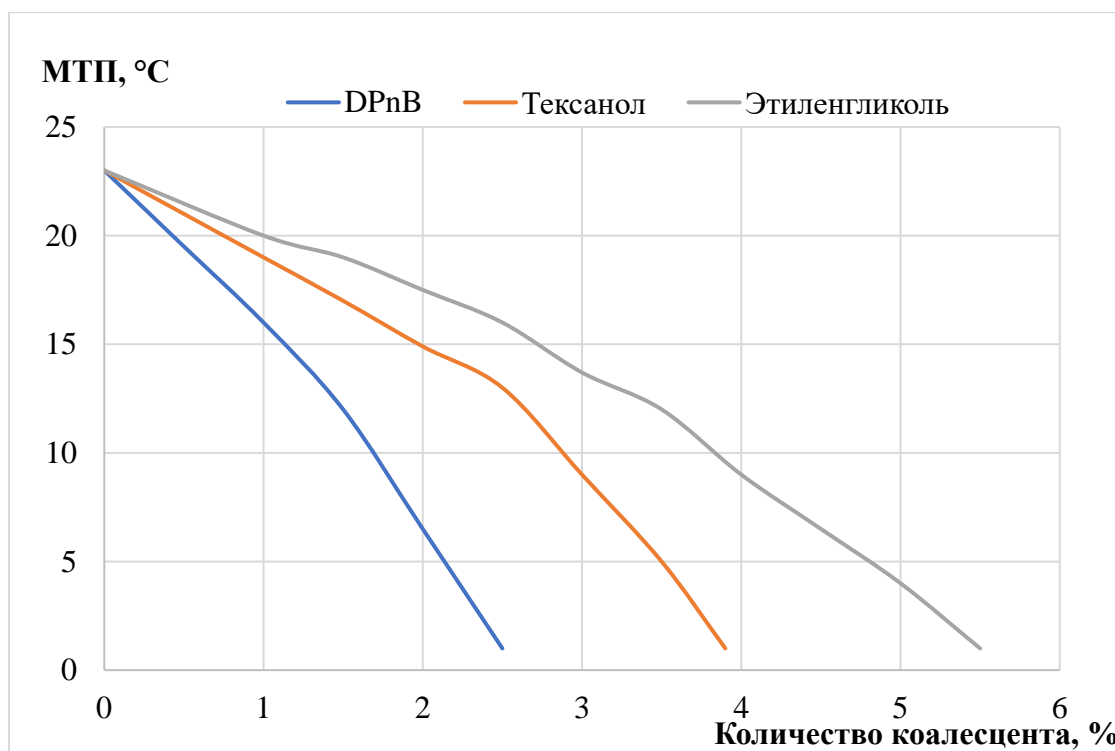


Рис. Зависимость МТП (°C), от количества коалесцента (%)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Klein, D.R. Organic chemistry as a second language: second semester topics / D.R. Klein. – 4 изд. – US: Wiley, 2016. – 400 с.
2. Брок Т. Европейское руководство по лакокрасочным материалам и покрытиям / Т. Брок, М. Гротэклаус, П. Мишке; пер. с англ. / под ред. Л. Н. Машляковского. – М.: ООО «Пейнт-Медиа», 2004. – 552 с.
3. Елисеева В.И. Полимерные дисперсии / В.И. Елисеева. – М.: Химия, 1980. – 296 с.