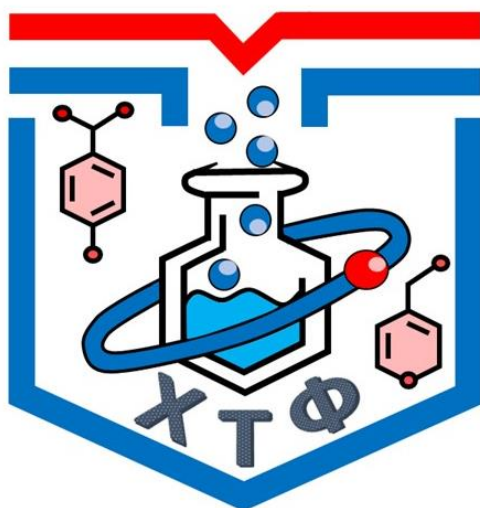


Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Тверской государственный университет»



XXII НАУЧНАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ
АСПИРАНТОВ И
СТУДЕНТОВ ХИМИКО-
ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО
ФАКУЛЬТЕТА

Тезисы докладов

ПОСВЯЩЕНА
ПЯТИДЕСЯТИЛЕЮ
ОБРАЗОВАНИЯ
КАФЕДРЫ
ФИЗИЧЕСКОЙ
ХИМИИ ХИМИКО-
ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО
ФАКУЛЬТЕТА

1 июня, Тверь
2023 г.

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

В сборнике представлены тезисы докладов научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов химико-технологического факультета Тверского государственного университета 2023 года в количестве 62 материалов. Доклады сгруппированы по секциям, соответствующим научным направлениям кафедр.



Оглавление

Секция биохимии и биотехнологий.....	6
1. <u>Булкина А.Э.</u> Сравнительный физико-химический анализ мармелада с добавлением витаминного премикса	7
2. <u>Вольга А.А.</u> Производства конфет пралине на основе сиропа топинамбура	8
3. <u>Графова Е.С.</u> Технология изготовления зефира на основе фруктозы и яблочной клетчатки.....	9
4. <u>Дементьев М.М.</u> Технология производства батончика к чаю с добавлением семян подсолнечника	10
5. <u>Дышкант Е.Е.</u> Оценка показателей качества пряников сырцовых	11
6. <u>Егоров Е.А.</u> Технология производства сдобного печенья	12
7. <u>Егоров Е.С.</u> Совершенствование технологии производства желейного мармелада.....	13
8. <u>Ефимов Е.В.</u> Технология производства и физико-химические показатели качества затяжного печенья	14
9. <u>Киреев Е.С.</u> Влияния дополнительного сырья различной технологической обработки на качество макаронных изделий	15
10. <u>Королева М.Н.</u> Разработка функционального изделия из пшеничной муки	16
11. <u>Кудряшова Е.Д.</u> Производство старинных хлебобулочных изделий в современных условиях	17
12. <u>Лысов Т.Е.</u> Органолептический анализ пастилы «Осенняя» с добавлением тыквенного пюре и ламинарии	18
13. <u>Майоров В.В.</u> Оценка качества хлебобулочного изделия пониженной влажности по физико-химическим показателям	19
14. <u>Матвеевкова Л.В.</u> Технология производства макаронных изделий с использованием нетрадиционных видов сырья	20
15. <u>Моисеева Е.Н.</u> Разработка балльной шкалы для оценки эстетических показателей качества тортов	21
16. <u>Немченко О.С.</u> Применение технологии отложенной выпечки слоеных изделий, на примере пирога «Вульфовский»	22
17. <u>Оболенский Н.Н.</u> Технология производства сахарного печенья с добавлением рыжикового масла.	23
18. <u>Орловская А.А.</u> Оценка качества хлебобулочного изделия из пшеничной муки по физико-химическим показателям	24
19. <u>Парфентьева В.В.</u> Изучение технологии производства куличей и определение массовой доли влаги в готовых изделиях	25
20. <u>Пешехонов Д.Р.</u> Способы повышения биологической ценности макаронных изделий	26



21. [Платонова А.А.](#) Применение муки амаранта для обогащения пряничных изделий27
22. [Рожков А.П.](#) Технология производства пастильных изделий28
23. [Слепцов Д.Д.](#) Технология производства макаронных изделий быстрого приготовления с добавлением соевой муки29
24. [Смирнова Е.С.](#) Органолептический анализ кекса «Столичный Безглютеновый»30
25. [Смирнова И.В.](#) Сравнительный физико-химический анализ булочки сдобной, изготовленной по классической рецептуре и булочки сдобной, обогащенной растительными ингредиентами.....31
26. [Чикинев Д.В.](#) Использование сухих функциональных смесей в технологиях хлебобулочных изделий32

Секция неорганической и аналитической химии.... 33

27. [Акопян Т.П.](#) Физико-химическое определение аскорбиновой кислоты в продуктах растительного происхождения.....34
28. [Вебер Н.В.](#) Определение содержания цинка в косметических препаратах, содержащих гиалуроновую кислоту35
29. [Глебова А.Г.](#) Анализ содержания титана в титановых белилах.....36
30. [Лисицкий Т.М.](#) Определение азотосодержащих веществ в воде37
31. [Перепелица О.В.](#) Анализ металлов в микроудобрениях38
32. [Петров М.Э.](#) Анализ смеси, полученной после пиролиза отходов сшитого полиэтилена39
33. [Салазкин Н.С.](#) Интенсификация процессов сорбции на развитых поверхностях с помощью электрогидродинамических эффектов 2-го рода40
34. [Свидерская О.В.](#) Количественное определение бромид-ионов в питьевой воде.....41
35. [Севлякин Л.Д.](#) Экспериментальное и теоретическое исследование мурексида.....42
36. [Смирнова В.И.](#) Ионоселективный электрод с откликом на винпоцетин43
37. [Хомякова К.Н.](#) Использование методик мокрого озоления при определении летучих элементов в хвое полевого.....44
38. [Шачнева К.С.](#) Влияние таблетирования с бромидом калия на ИК-спектры индометацина45

Секция органической химии 46

39. [Арефьев А.А.](#) Влияние пиридиниевых ионных жидкостей на размер наночастиц сульфида цинка полученных взаимодействием тиомочевины с ацетатом цинка47
40. [Арзамасова А.Ю.](#) Исследование огнезащитных свойств фосфорорганических соединений48



41.	Балотина А.В. Получение сложных эфиров сахарозы и исследование их свойств	49
42.	Баржеев А.Д. Получение и исследование свойств 1-(4-сульфофенил)-3,5-дифенилформаза.....	50
43.	Воробьева А.О. Синтез и идентификация ионных жидкостей на основе N-алкилпиридиния с анионами переходных металлов	51
44.	Дорожинская Е.С. Получение монопальмитилглицерилтартрата	52
45.	Иванова В.Е. Получение формазанов на основе семикарбазонов оксосоединений	53
46.	Ким О.Т. Получение производных молочной кислоты	54
47.	Кудряшова Е.А. Получение сульфанилсодержащего азогидразона.....	55
48.	Кулакова А.Н. Получение 5-аминокарбанилсодержащего формазана	56
49.	Крупнов В.М. Исследование влияния анионного поверхностно-активного вещества на растворы желатина	57
50.	Павлова С.А. Производные п-аминобензойной кислоты с хлорангидридами гидроксibenзойных кислот	58
51.	Родионова М.В. Влияние неионогенных поверхностно-активных веществ на устойчивость дисперсий сахарозы	59
52.	Серегин И.В. Исследование эффективности составов на удаление продуктов коррозии с поверхности сплавов на основе меди	60
53.	Харкунова М.К. Алканол амины на основе фенилглицидилового эфира.....	61
54.	Чистякова М.М. Влияние строения спейсера на свойства димерных поверхностно-активных веществ.....	62
55.	Шамарина К.А. Применение модели Дерягина-Мюллера-Топорова для вычисления адгезионных характеристик полиэтиленисукцината	63

Секция физической химии 64

56.	Барсукова В.В. Топологические индексы в изучении корреляции «структура-свойство» карбоновых кислот	65
57.	Иванова А.А. Слабые взаимодействия в комплексе этилендиаминтетраацетатоаквамагния: QTAİM анализ	66
58.	Нефедова И.А. Электронные свойства изомеров положения декансульфона, симметричных диалкилсульфонов, белого стрептоцида и аминбензола	67
59.	Ткаченко Д.С. Моделирование гидратации L-цистеина. Свойства критических точек.....	68
60.	Шелестова С.С. Интегральные электронные характеристики L-глутамина	69
61.	Шостак М.С., Нефедова И.А. Заряды групп бензолзамещённых сульфонов ...	70
62.	Щенухина А.С. Сравнение 2-оксипиррола и 4-винил-2-оксипиррола в квантовой теории атомов в молекулах.....	71



Дополнительные материалы.....72

63. [Исаев И.Д.](#) Исследование комплексообразования цефтриаксона с Ni(II) и Co(II).....72
64. [Торопыгина К.О.](#) Компьютерное моделирование оптических изомеров этилендиамин-N,N'-диянтарной кислоты и их кальциевых комплексов.....73
65. [Зеников Г.Р.](#) Супрамолекулярные гидрогели на основе аминокислоты L-цистеин, нитрата серебра и низкомолекулярного хитозана74
66. [Механников И.А.](#) Влияние бромид- и фторид-анионов на процессы самосборки в L-цистеин-нитрат серебра системах75



Секция биохимии и биотехнологий



Сравнительный физико-химический анализ мармелада с добавлением витаминного премикса

Булкина А.Э. (студентка, 3-го года обучения)

Научный руководитель: ст. преп. Лихуша П.С.

Мармелад – это сахаристое кондитерское изделие студнеобразной консистенции, имеющее определенную заданную форму, получаемое увариванием желирующего фруктового и (или) овощного сырья и (или) раствора студнеобразователя с сахаром, с добавлением или без добавления патоки, пищевых добавок, ароматизаторов, массовой долей фруктового и (или) овощного сырья для фруктового (овощного) мармелада не менее 30%, для желеино-фруктового (желеино-овощного) – не менее 15%, массовая доля влаги в котором составляет не более 33% от массы кондитерского изделия.

Цель работы – провести сравнительный физико-химический анализ мармелада с добавлением витаминного премикса (образец №1) и мармелада, изготовленного по классической рецептуре (образец №2). Результаты анализа представлены в таблице 1.

Табл. 1 – Сравнительный анализ физико-химических показателей качества изделий

Наименование показателя	Требования ГОСТ	Фактические значения показателя		
		Образец №1	Образец №2	Соответствие/ несоответствие требованиям ГОСТ
Массовая доля влаги, %	15-22	$15,9 \pm 0,4$	$19,5 \pm 0,4$	Соответствует
Кислотность, град	3,1-3,3	3,12	3,09	Соответствует

В результате проведенного физико-химического анализа установлено, что мармелад с добавлением витаминного премикса и мармелад, изготовленный по классической рецептуре соответствуют ГОСТ 6442-2014 «Мармелад. Общие технические условия» по следующим физико-химическим показателям: «Массовая доля влаги» и «кислотность».



Производства конфет пралине на основе сиропа топинамбура

Вольга А.А. (студентка 3-го года обучения)

Научный руководитель: ст.преп Лихуша П. С.

По официальной статистике, в 2021 году число диабетиков в РФ составляло 5,2 млн. Поэтому так важно заниматься профилактикой. Первым шагом будет изменения в рационе питания. Однако, резкая отмена сахара белого может привести к психологическому стрессу. Чаше всего предлагают альтернативу: сироп топинамбура. Данный сироп имеет самый низкий гликемический индекс – 13-15 единиц, также плоды топинамбура содержат инулин.

В качестве пищевого волокна был выбран псиллиум. Этот продукт показан при сахарном диабете 2 типа, так как помогает замедлить рост сахара в крови за счёт плавного усвоения углеводов.

Производство пралиновых масс состоит из следующих стадий: очистка ореховых ядер, обжарка, получение тертой ореховой массы, смешивание рецептурных компонентов, измельчение, формование.

В сравнение с классической, изначальной рецептурой, изменённая конфетная масса количество белка увеличилось на 9%, содержание углеводов снизилось на 27%, а энергетическая ценность уменьшилось на 11%.

В процессе работы была проверена массовая доля влаги двух образцов.

Наименование показателя	Образец №1	Образец №2
Массовая доля влаги	4,0	3,9

Массовая доля влаги соответствует показателям ГОСТ, не более 4 %.

1. Павлова Н. С. Сборник основных рецептур сахаристых кондитерских изделий / Н. С. Павлова. – СПб: ГИОРД, 2000. – 232 с. – ISBN 5901065-20-0;



Технология изготовления зефира на основе фруктозы и яблочной клетчатки

Графова Е.С. (студентка 3-го года обучения)

Руководитель: к.х.н., доцент Рыжков Ю.А.

В данной работе главной целью работы является разработка технологии зефира на агар-агаре подъемной силы 900 блум, обогащение его функциональным ингредиентом таким как пищевые волокна: клетчатка яблочная, с заменой сахара на фруктозу и постараться максимально сохранить пищевую ценность продукта.

Для оценки качества полученного продукта были изготовлены два образца, 1- зефир ванильный, изготовленный по традиционной технологии; 2- зефир, функционального назначения на основе сахарозаменителя фруктозы и студнеобразователя – агар-агара.

В условиях лаборатории были проведены физико-химические и органолептические исследования по ГОСТ 6441-2014. Были рассмотрены такие факторы как: вкус и запах цвет, консистенция, структура, форма, поверхность, плотность, массовая доля влаги.

Наименование показателя	Требования ГОСТ	Фактические значения показателя	
		Образец	Соответствие/несоответствие Требованиям ГОСТ
Плотность, г/см ³ , не более	0,6	0,54	Соответствует
Массовая доля влаги, %, не более	25	13	Соответствует

Вывод: в результате проведенных исследований и физико-химического анализа установлено, что качество полученного продукта соответствует требованиям ГОСТ 26441-2014 «Изделия кондитерские пастильные. Общие технические условия».



Технология производства батончика к чаю с добавлением семян подсолнечника

Дементьев М.М. (студент, 4 курс)

Научный руководитель: доцент, Парфентьева Н.В.

Выпечка и хлебопекарная продукция — это неотъемлемая часть в жизни человека. И посей день ассортимент хлебопекарной продукции расширяется, и за спроса на хлебопекарные изделия. Производители хлебопекарной продукции расширяют свои предприятия, открывают новые пекарни, а также разрабатывают новую рецептуру, которую пытаются насытить полезными и нужными для человека веществами, такие как: белки, жиры, углеводы, и прочие ферменты. Для достижения нужной рецептуры, они добавляют в продукт нужное сырьё и ингредиенты, прорабатывая нужную дозировку, исходя из нужд потребителя. И только после утверждения рецептуры, и дальнейшего производства изделия, продукция может появляться на полках магазина, или на прилавке, где обычные граждане смогут выбрать нужную им изделие.

Исходя из ГОСТ Р 57937-2017 и ГОСТ 24557-89 батончик к чаю - это хлебобулочные изделия, изготавливаемое из пшеничной муки высшего и первого сортов, а также и другого сырья, с содержанием по рецептуре сахара и жиров в сумме от 14% и более. Данное изделие, выпекается в хлебопекарной форме, с массой изделия менее 200 г.

В своей выпускной квалификационной работе планируется изучить характеристику изделия, технологию приготовления сдобной булочки, проанализировать результаты по химико-физическому показателю, а далее рассмотреть органолептические показатели. В конце проделанной работы будет сделан вывод о том, на сколько сильно обогатилась пищевая ценность булочки.



Оценка показателей качества пряников сырцовых

Дышкант Е.Е. (студент, 3-го года обучения)

Научный руководитель: Кудряшова Н.А.

Пряник – единичное пряничное изделие с добавлением или без добавления меда, с выпуклой поверхностью (за исключением пряников, имеющих оттиск рисунка или надписи на поверхности) и ровной нижней поверхностью толщиной не менее 12 мм. В лаборатории кафедры была проведена пробная выпечка экспериментального образца, в результате которой было получено 24 пряника общим весом 1 кг.

Таблица 1: Рецепт сыровых пряников «Мятные» №58 на 100 грамм

Наименование сырья	Массовая доля сухих веществ, %	Расход сырья на 100 гр	Расход сырья на 1000 гр	Расход сырья на 1000 гр
		в натуре	в сух. в-в.	в натуре
Мука пшеничная в.с.	85,5	53,23	45,5	532,3
Мука пшеничная в.с. (на подпыл)	85,5	4,15	3,55	41,5
Сахар - песок	99,85	37,26	37,2	372,6
Масло растительное	100	3,99	3,99	39,9
Масло мятное	-	0,035	-	0,35
Углеаммонийная соль	-	0,052	-	0,5
Итого	-	99,49	90,26	-
Выход	88	100	88	

Экспериментальные образцы оценивались по органолептическим и физико-химическим показателям. Органолептически оценивали: вкус и запах, структуру, цвет, вид в изломе, поверхность, форму.

Таблица 2: Результаты определения физико-химических показателей пряничного изделия, произведенного в лабораторных условиях

Наименование показателя	Показатель по ГОСТ 15810-2014	Значение показателя
Массовая доля влаги, %	8,5-16,0	14,1
Щелочность, градусы не более	2,0	1,5
Соответствие / несоответствие требованиям ГОСТ 15810-2014		Соответствует

Результаты органолептических и физико-химических показателей соответствуют требованиям ГОСТа 15810-2014 «Изделия кондитерские. Изделия пряничные. Общие технические условия».



Технология производства сдобного печенья

Егоров Е.А. (студент 3-го года обучения)

Научный руководитель: ст. преподаватель Лихуша П.С.

Пищевая промышленность постоянно развивается, появляются новые технологии для улучшения качества продукции, эффективности производства и удовлетворенности потребителей. Внедрение технологий в производственный процесс доказало свою эффективность в обеспечении стабильного качества и снижении производственных затрат.

Основными этапами производства сдобного печенья является: подготовка сырья и полуфабрикатов (Сырье, поступающее на производство, должно отвечать требованиям действующих стандартов или технических условий), приготовление теста, формование, отделка пласта теста (если предусмотрено рецептурой), выпечка (В зависимости от группы сорта производят в электрических или газовых конвейерных печах непрерывного действия, в печах со стационарными и выдвижными подами. Продолжительность и температура выпечки могут меняться в зависимости от конструкции печи, степени ее заполнения, сорта изделий, влажности теста и других факторов), охлаждение (При охлаждении градиенты влажности в изделиях уменьшаются, и структура становится более твердой), отделка (Если предусмотрено рецептурой), расфасовка, упаковывание и хранение осуществляется в соответствии с действующей нормативной документацией.

В практической части были определены органолептические и физико-химические показатели отобранного образца, сделан анализ маркировки в соответствии с действующей нормативной документацией.

В данной работе подчеркивается важность использования передовых технологий в производстве сдобного печенья для обеспечения высокого качества продукции, отвечающей ожиданиям потребителей.



Совершенствование технологии производства желейного мармелада

Егоров Е.С. (студент, 4 года обучения)

Научный руководитель: Парфентьева Н.В.

Желейный мармелад - это популярный десерт, который любят многие люди во всем мире. Однако, как и многие другие продукты, технология производства желейного мармелада постоянно совершенствуется.

Одна из основных тенденций в современном производстве желейного мармелада - это использование натуральных ингредиентов и отказ от искусственных красителей и консервантов. Это связано с растущим спросом потребителей на продукты, которые не содержат вредных добавок.

Еще одна тенденция - это разработка новых вкусов и текстур желейного мармелада. Например, многие производители добавляют в мармелад экзотические фрукты или специи, чтобы создать новые и интересные вкусы.

Одним из новых направлений в современном производстве желейного мармелада является использование инновационных ингредиентов, которые могут улучшить качество продукта.

Таким образом, производство желейного мармелада продолжает развиваться и совершенствоваться. Новые тенденции, технологии и инновационные ингредиенты позволяют создавать новые вкусы и текстуры, а также улучшать качество продукта. Несмотря на то, что традиционный рецепт желейного мармелада остается популярным, новые инновации в производстве могут привести к созданию новых и уникальных вкусов, которые будут любимы многими людьми во всем мире [1].

1. Совершенствовать технологии производства мармеладов. // Иванова Г.В., Никулина Е.О.: Кондитерское производство. – 2010. – №1. – С. 11-12.



Технология производства и физико-химические показатели качества затяжного печенья

Ефимов Е.В. (студент 3 курса)

Научный руководитель: ст. преподаватель Кудряшова Н.А.

Цель работы изучение технологии производства и физико-химические показатели качества одного из видов мучного кондитерского изделия - печенья затяжного.

Затяжное печенье – это печенье плоской формы, переслоенное начинкой или без нее, со сквозными проколами на поверхности, сухой, слоистой структуры, массовой долей общего сахара не более 20%, массовой долей жира не более 30%, массовой долей влаги не более 9%.

Технологический процесс производства затяжного печенья состоит из следующих этапов: подготовка сырья к производству, замес теста, прокатка теста, вылеживание теста, вторичная прокатка, формование, выпечка, охлаждение; укладка, упаковка и маркировка печенья. Основным сырьем являются мука пшеничная, сахар, крахмал, цельное или сухое молоко, жиры, разрыхлители, меланж, яичный порошок, соль, ванилин.

Технические требования к качеству печенья регламентированы ГОСТ 24901-2014. Методы исследования: определение массовой доли влаги, щёлочности и намокаемости затяжного печенья трех образцов.

Результаты физико-химических показателей качества исследованного печенья трех образцов:

Наименование показателя	Показатель по ГОСТу	Фактический показатель		
		Образец №1	Образец №2	Образец №3
Массовая доля влаги, %	не более 9.0	1,6	3,8	2,9
Щелочность, град.	не более 2.0	1,2	0,5	0,7
Намокаемость, %	не менее 180	315	267	279
Соответствие/несоответствие требованиям ГОСТ24901-2014		Соответствует	Соответствует	Соответствует

Выводы: физико-химические показатели качества всех трех образцов соответствуют ГОСТ 24901-2014.



Влияния дополнительного сырья различной технологической обработки на качество макаронных изделий

Киреев Е.С. (студент, 3-го года обучения)

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

Работа посвящена определению влияния дополнительного сырья разной технологической обработки на качество готовых изделий в производстве макаронных изделий на примере продукции с добавлением моркови.

Проанализированы органолептические показатели такие как: вкус, запах, цвет, сохраняемость формы после варки и физико-химические показатели: содержание белка сущность метода определения основана. Сущность метода заключается в минерализации органического вещества серной кислотой в присутствии катализатора с образованием сульфата аммония, разрушении сульфата аммония щелочью с выделением аммиака, отгонке аммиака водяным паром в раствор серной или борной кислоты с последующим титрованием, определение золы в пересчете на сухое вещество Сущность метода состоит в сжигании пробы для анализа макаронных изделий до полного озоления органического вещества с последующим количественным определением полученного остатка, кислотность готового изделия метод основан на титровании гидроокисью натрия водной взвеси размолотых макаронных изделий

Изученные образцы по органолептическим показателям соответствуют требованиям ГОСТ, а дополнительное сырье влияет на такие показатели как запах и вкус. Так как производитель не указывает группу и сорт макаронных изделий с помощью физико-химических показателей мы определили, группу и сорт готовых изделий. После исследования показателей можно сделать такие выводы как: при добавление сушеных овощей увеличивается значение показателей золы в присчёте на сухое вещество и кислотность готового изделия, в то время как при использовании овощных соков куда меньше влияет на данные показатели.



Разработка функционального изделия из пшеничной муки

Королева М.Н. (студент, 4-го года обучения)

Научный руководитель: Карасева Е.Н.

Цель работы: разработать функциональное хлебобулочное изделие с применением пюре шпината, томатной пасты и семян льна

Проведена разработка функционального изделия батон «Австралийский». При разработке изделия были использованы натуральные обогащающие ингредиенты: шпинат в виде замороженного пюре, томатная паста, семя льна, измельченное непосредственно перед приготовлением теста. При этом наиболее полно сохраняются все полезные вещества.

Разработка изделия проведена в соответствии с ГОСТ 15.015 «Хлеб и хлебобулочные изделия. Система разработки и постановки продукции на производство». Разработаны документы Технологическая рецептура РЦ и Технологическая инструкция ТИ.

Показатели качества готового изделия установлены в ходе пробных лабораторных выпечек. Изделие соответствует требованиям ГОСТ 31805-2018 «Изделия хлебобулочные из пшеничной хлебопекарной муки. Общие технические условия», РЦ и ТИ на изделие.

Таблица 1. Результаты органолептической оценки качества

Наименование показателя	Фактический показатель
Внешний вид	правильной формы, не расплывчатая, продолговато овальная.
Цвет мякиша	светло-коричневый при разрезе выделяется спираль зеленого, оранжевого, и спираль с включениями молотого льна
Вкус	Свойственный не кислый, не пресный, с привкусом томата, шпината, льна, без постороннего.
Запах	Без постороннего запаха, с ароматом, шпината, томата, и льна.
Состояние мякиша	Пропеченный, эластичный, при легком надавливании пальцами принимает первоначальную форму.

Вывод: по результатам оценки качества батона «Австралийский» изделие соответствует требованиям ГОСТ 31805-2018, РЦ и ТИ на изделие.

Функциональное изделие имеет оригинальный внешний вид и вкус.



Производство старинных хлебобулочных изделий в современных условиях

Кудряшова Е.Д. (бакалавр, 4-го года обучения)

Научный руководитель: старший преподаватель Карасева Е.Н.

Россия всегда славилась своим хлебом. Известными и в России, и в Европе изделиями являлись калачи и ситнички московские. Они готовились по особенной технологии, вручную, с длинным периодом брожения теста на холоде. Отличались отменным вкусом, долго сохраняли свежесть.

В погоне за прибылью современное производство старается минимизировать ручной труд. Не найдя замену ручному труду калачи и ситнички просто убрали из ассортимента. В последнее время вырос интерес производителей к «холодным» технологиям.

Цель исследования - рассмотреть возможность выпуска калачей и ситничков московских на современном технологическом оборудовании.

На кафедре биохимии и биотехнологии Химико-технологического факультета ТвГУ были проведены пробные выпечки калачей с использованием брожения при «положительном» холоде в течение 150 минут.

Проведена оценка качества данных изделий. Органолептические и физико-химические показатели качества калачей и ситничков московских соответствовали требованиям ГОСТ 27844-88 «Изделия булочные. Технические условия».

В результате проведенных пробных выпечек, органолептического и физико-химического анализа было установлено, что современное технологическое оборудование позволяет возродить производство калачей и ситничков московских в современных условиях, при этом их качество соответствует требованиям ГОСТ 27844-88 «Изделия булочные. Технические условия».

1. ГОСТ 27844-88 «Изделия булочные. Технические условия» [Текст]. – Введ. 1990-01-01. – М: Стандартинформ, 2009. – 9 с.



Органолептический анализ пастилы «Осенняя» с добавлением тыквенного пюре и ламинарии

Лысов Т.Е. (студент, 4-го года обучения)

Научный руководитель: ст. преподаватель Кудряшова Н.А.

Цель работы – разработка рецептуры и органолептический анализ пастилы «Осенняя» с добавлением тыквенного пюре и ламинарии. Пастила «Осенняя» разрабатывалась в трех различных содержаниях добавляемого сырья: Образец №1 – яблочное пюре (50%) и тыквенное пюре (50%), Образец №2 - тыквенное пюре (100%), Образец №3 - яблочное пюре (49%), тыквенное пюре (49%), ламинария (2%). Оценка готовых изделий по органолептическим показателям проводилась на соответствие требованиям ГОСТ 6441-2014. Органолептически в пастильных изделиях оценивают вкус и запах, цвет, консистенцию, структуру, форму и поверхность [1].

Таблица 1 - Органолептическая оценка качества образцов №1, №2, №3 пастилы «Осенняя»

Наименование показателя	Соответствие ГОСТ 6441-2014.		
	Образец №1	Образец №2	Образец №3
Вкус и запах	Соответствует	Соответствует	Соответствует
Цвет	Соответствует	Соответствует	Соответствует
Консистенция	Соответствует	Соответствует	Соответствует
Структура	Соответствует	Соответствует	Соответствует
Форма	Соответствует	Соответствует	Соответствует
Поверхность	Соответствует	Соответствует	Соответствует

Все образцы соответствуют требованиям ГОСТ 6441-2014.

1. ГОСТ 6441-2014. Изделия кондитерские пастильные. Общие технические условия. - Москва : Стандартинформ, 2019. - 7 с. - [Электронный ресурс]. - URL: <https://docs.cntd.ru/> (дата обращения: 20.05.2023).



Оценка качества хлебобулочного изделия пониженной влажности по физико-химическим показателям

Майоров В.В. (студент 3-го года обучения)

Научный руководитель: старший преподаватель Торская А.Н.

Хлебобулочное изделие - изделие, вырабатываемое из основного сырья для хлебобулочного изделия или основного сырья для хлебобулочного изделия и дополнительного сырья для хлебобулочного изделия. Цель работы - теххимический контроль изделия хлебобулочного из пшеничной муки высшего сорта.

В качестве объектов исследования отобраны образцы: Образец №1 – «Изделие хлебобулочное из пшеничной муки сушки «кроха» с маком», ТУ 10.72.19-028-00346201-2017 - ЗАО «Останкинский завод хлебобулочных изделий»; Образец №2 – «Сушка маковая от АО «Фирма Невская сушка», ГОСТ 32124-2013. Образец №3 – «Сушка Ладожский малышок» от ООО «Комбинат Волхов Хлеб», ГОСТ 32124-2013.

Физико-химические показатели качества изделия хлебобулочного из пшеничной муки должны соответствовать требованиям ГОСТа 31805-2018. Результаты анализа представлены в таблице 1.

Таблица №1: Физико-химические показатели образцов изделия хлебобулочного из пшеничной муки высшего сорта.

Наименование показателя	Требования ГОСТа	Фактически		
		Образец №1	Образец №2	Образец №3
Влажность, %	9,0—13,0	9,3	9,4	9,5
Кислотность, град.	не более 3,5	2,4	2,48	2,8



Технология производства макаронных изделий с использованием нетрадиционных видов сырья

Матвееenkova Л.В. (студент, 5 курс)

Научный руководитель: доцент, к.б.н. Парфентьева Н.В.

Целью исследования является изучение технологии производства макаронных изделий с использованием нетрадиционных видов сырья и оценка качества готовых изделий.

В ходе проведения эксперимента были составлены и посчитаны рецептуры для производства макарон в лабораторных условиях по традиционной технологии и с добавлением 5 % муки тыквы, приготовлены и исследованы образцы на качество по органолептическим и физико-химическим показателям, а также рассчитана и проанализирована энергетическая, пищевая и биологическая ценность.

Органолептическая и физико-химическая экспертизы показали, что приготовленные образцы соответствуют требованиям стандарта. Кроме того, у образца с добавлением муки тыквы в положительную сторону изменяется вкус, цвет и запах.

Расчет энергетической ценности и последующий сравнительный анализ показал, что за счет введения 5 % муки из тыквы в традиционную рецептуру макаронных изделий повышает относительное количество белков, а жиров и углеводов снижает, тем самым уменьшается калорийность готового продукта.

В ходе проведения сравнительного анализа минерально-витаминного комплекса выявлено, что в образце с добавленной мукой тыквы значительно повышаются показатели витаминов А, С, каротина, ретинола и пищевых волокон.

Из результатов исследования можно сделать вывод, что тыквенную муку целесообразно применять при производстве макаронных изделий.



Разработка балльной шкалы для оценки эстетических показателей качества тортов

Моисеева Е.Н. (студентка, 3-го года обучения)

Научный руководитель: ст. преподаватель Брославская М.Н.

Художественное оформление помогает передать творческий замысел, отразить чувства и эмоции различного характера, увеличить спрос, повысить конкурентоспособность в целом. Особенно это важно, когда проходят выставки, разрабатывается и внедряется новый дизайн тортов. Балльная шкала позволяет выявить как достоинства, так и недостатки художественного оформления. Исследование проходило в три этапа. Первый этап: определение эстетических показателей, описание их характеристик, построение градации баллов. Второй этап: расчет отклонений баллов, определение их характеристик. Третий этап: проведение балльной оценки эстетических показателей качества торта «Киевский» пяти производителей с учетом полученных результатов. Согласно результатам балльной оценки, образцы заняли следующие места в рейтинге: 1 место – образец № 2 «У Палыча» 98 баллов. Фирменный торт очень высокого качества. 2 место – образец № 3 «Север-Метрополь» 97 баллов, образец № 4 «Филли-Бейкер» 97 баллов. Фирменные торты очень высокого качества. 3 место – образец № 1 «Венский Цех» 96 баллов. Фирменный торт очень высокого качества. 4 место – образец № 5 «Вкус-Вилл» 74 балла. Фирменный торт высокого качества.

1. ГОСТ 10-060-95 «Торты и пирожные. Технические условия» от 1 мая 1995 г.
2. Моисеева Е. Н., Брославская М.Н. Определение основных показателей качества воздушно-ореховых тортов на примере торта «Киевский» трех производителей // Материал: 4-ая Международная конференция «Проблемы конкурентоспособности потребительских товаров и продуктов питания» [Курск], 13 апреля 2022 года. – С.157-163.



Применение технологии отложенной выпечки слоеных изделий, на примере пирога «Вульфовский»

Немченко О.С. (студент, 4-го года обучения)

Научный руководитель: Брославская М.Н.

Цель: определить влияние процесса замораживания и дефростации на органолептические показатели качества пирога «Вульфовский».

Пирог "Вульфовский" изготавливается из слоеного теста, начинка-карамелизированные яблоки с корицей, залитые сметанно-яичной смесью. В процессе работы необходимо определить влияние процесса замораживания и дефростации на органолептические показатели качества пирога. Для этого применялись следующие методы исследования: замораживание готового изделия при $t=-18^{\circ}\text{C}$ в морозильной камере «No Frost»; дефростация в духовом шкафу при $t=200^{\circ}\text{C}$; определение органолептических показателей качества согласно ГОСТу 31805-2018 «Изделия хлебобулочные из пшеничной хлебопекарной муки. Общие технические условия».

Таблица 1. Результаты органолептической оценки качества после дефростации.

Наименование показателя	Фактический показатель
Внешний вид	правильной формы, без деформации
Цвет	светло-коричневый
Начинка	яблоки дольками, распределены равномерно, выложены в правильном порядке
Вкус	сметанный, карамелизированных яблок, меда
Запах	свежей выпечки, яблочный, коричный
Состояние мякиша	не влажный, с пышными слоями

Вывод: По результатам органолептической оценки качества пирога "Вульфовский" после дефростации показатели качества не изменились.

1. ГОСТ 31805-2018 «Изделия хлебобулочные из пшеничной хлебопекарной муки. Общие технические условия»



Технология производства сахарного печенья с добавлением рыжикового масла.

Оболенский Н.Н. (бакалавр, 4 года обучения)

Научный руководитель: Парфентьева Н.В.

Одной из проблем, стоящих перед кондитерской отрасли в России, является повышение качества и ассортимента мучных кондитерских изделий, обогащенных физиологически функциональными ингредиентами, способных обеспечивать потребности организма в незаменимых нутриентах [1].

Сладости всегда были неотъемлемой частью нашей культуры и кулинарного наследия. Однако, в последние годы мы все более осознаем важность здорового питания и стремимся найти способы сделать наши любимые десерты более полезными. Один из таких способов - добавление рыжикового масла в сахарное печенье.

Рыжиковое масло получают путем экстрагирования масла из плодов рыжика, который является натуральным источником антиоксидантов и полиненасыщенных жирных кислот. Это масло содержит витамины А, Е и D, а также омега-3 и омега-6 жирные кислоты, которые являются необходимыми для здоровья организма.

Целью добавления рыжикового масла в сахарное печенье является придание не только богатого аромата, но и улучшения питательной ценности десерта. Рыжиковое масло обладает нежным ореховым вкусом, который отлично сочетается с сладостью печенья. Его добавление способствует повышению содержания полезных жирных кислот и антиоксидантов в десерте.

1. Фосфолипиды рыжикового масла в производстве печенья. / Рензеева Т.В., Резниченко И.Ю., Новоселов С.В., Дмитриева Е.В. /Ползуновский вестник №1, 2018. 37с.



Оценка качества хлебобулочного изделия из пшеничной муки по физико-химическим показателям

Орловская А.А. (студентка 3-го года обучения)

Научный руководитель: старший преподаватель Кудряшова Н.А.

Хлебобулочное изделие - изделие, вырабатываемое из основного сырья для хлебобулочного изделия или основного сырья для хлебобулочного изделия и дополнительного сырья для хлебобулочного изделия [1]. Цель работы - теххимический контроль изделия хлебобулочного из пшеничной муки высшего сорта.

В качестве объектов исследования отобраны образцы: Образец №1 – «Изделие хлебобулочное из пшеничной муки: батон из пшеничной муки высшего сорта с пшеничными отрубями, нарезанное в упаковке», ТУ 10.71.11-249-05747152-2018 - ЗАО «ХЛЕБ»; Образец №2 – «Батон из пшеничной муки высшего сорта с пшеничными отрубями, нарезанный (ломти) в упаковке», ТУ 9115-249-05747152-2003 - АО «Волжский пекарь».

Физико-химические показатели качества изделия хлебобулочного из пшеничной муки должны соответствовать требованиям ГОСТа 31805-2018 [2]. Результаты анализа представлены в таблице 1.

Таблица №1: Физико-химические показатели образцов изделия хлебобулочного из пшеничной муки высшего сорта.

Наименование показателя	Требования ГОСТа 31805-2018	Факт	
		Образец №1	Образец №2
		31,9	20,9
Влажность мякиша, %	19,0—52,0		
Кислотность мякиша, град.	не более 3,5	1,6	2,1

В результате проведенного физико-химического анализа установлено, что исследуемые образцы соответствуют требованиям ГОСТа 31805-2018.

1. ГОСТ 32677-2014 «Изделия хлебобулочные. Термины и определения».
2. ГОСТ 31805-2018 ««Изделия хлебобулочные из пшеничной хлебопекарной муки. Общие технические условия».



Изучение технологии производства куличей и определение массовой доли влаги в готовых изделиях

Парфентьева В.В. (студентка 3-го года обучения)

Научный руководитель: ст. преп. Кудряшова Н.А.

Производство пасхального кулича и его появление на столе – одна из главных пасхальных традиций, которая сохраняется уже тысячелетиями. Куличи готовят из дрожжевого теста безопарным или опарным способами, выпекаются высокой цилиндрической формы.

В основе технологии приготовления опары и теста для куличей лежит процесс дрожжевого брожения. Компоненты куличей, такие как сахар, масло, используются в большом количестве, угнетают дрожжевые клетки и задерживают процесс брожения. Сдобное куличное тесто готовят в несколько стадий, постепенно вводя масло, сахар, яйцо. Тесто должно подойти не менее трех раз.

Для оценки качества куличей отобраны три образца (таблица 1). Определение массовой доли влаги осуществлялось по ГОСТу 5900-2014. Принцип метода заключается в высушивании анализируемой пробы продукта при определенной температуре.

Таблица 1. Результаты физико-химической экспертизы

Наименование показателя	Требования ГОСТа 15052-2014	Кекс Пасхальный ООО «Элита-Хлеб-Сервис». РФ, г. Рязань	Кулич пасхальный АО фирма ОРТ «Универсал» Россия, г. Тверь	Кулич от Палыча ООО «Компания у Палыча» РФ, г. Москва.
Массовая доля влаги, не более, %	18,0 -30,0	18,2	19,8	23,2
Соответствие / несоответствие требованиям		Соответствует	Соответствует	Соответствует

В ходе проведения работы были сделаны выводы, что качество изделий напрямую зависит от технологического процесса, а также качества сырья. В результате проведённых исследований все три выбранных образца по показателю "массовая доля влаги" соответствуют требованиям стандарта.



Способы повышения биологической ценности макаронных изделий

Пешехонов Д.Р. (студент 4-го года обучения)

Научный руководитель: ст. преподаватель Кудряшова Н.А.

Как способ повышения биологической ценности макаронных изделий можно отметить белки пищевых продуктов. Рассмотрим аспекты:

1. Изучение состава белков макаронных изделий: некоторые типы белков присутствуют в макаронных изделиях и какие-то определенные аминокислоты составляют их структуру. Также можно рассмотреть данные о биологической ценности различных источников белка.
2. Влияние технологических процессов на белки: изменения происходят в белках макаронных изделий во время процессов приготовления и обработки. Это может рассматриваться как влияние тепловой обработки, сушки или экструзии на структуру и свойства белков.
3. Обогащение макаронных изделий белком: вполне возможно добавление протеинов растительного или животного происхождения. Может предлагать различные исследования и результаты, связанные с этими методами.
4. Использование натуральных добавок: можно рассмотреть использование натуральных добавок для повышения биологической ценности макаронных изделий. Это может включать экстракты зеленых водорослей, злаковых культур или других природных источников биологически активных веществ.
5. Влияние различных видов муки: существуют исследования о различных видах муки, которые используются в производстве макаронных изделий, и их влияние на биологическую ценность продукта. Это может включать исследования, связанные с содержанием белка и других питательных веществ в различных типах муки.



Применение муки амаранта для обогащения пряничных изделий

Платонова А.А. (бакалавр, 4 года обучения)

Научный руководитель: Карасева Е.Н.

В Российской Федерации пряничные изделия вырабатываются согласно ГОСТ 15810 – 2014 Изделия кондитерские. Изделия пряничные. Общие технические условия.

Пряничное изделие – это мучное кондитерское изделие на основе муки (с содержанием муки в выпеченном полуфабрикате не менее 30%), сахаров и/или меда, с содержанием пряностей или без них, разнообразной формы, с выпуклой верхней поверхностью, с оттиском рисунка на поверхности или без него, массовой долей влаги от 8,5% до 20%, массовой долей общего сахара не менее 24%, массовой долей жира не более 15%.

В настоящее время ведется большое количество научных разработок новых рецептур пряников с целью создания продуктов лечебно-профилактического и диетического питания и использования нетрадиционного сырья. Это позволит улучшить качество продукта, так как в этих видах сырья содержится большое количество минеральных веществ, витаминов, пищевых волокон, которые необходимы для организма человека.

Амарант весьма питателен, по своим целебным свойствам превосходит многие бобовые и злаковые культуры. Он является диетическим продуктом, так как его белковый и микроэлементный состав идеально сбалансирован.

1. ГОСТ 15810-2014 «Изделия кондитерские. Изделий пряничные. Общие технические условия»
2. Матвеева, Т. В., С.Я. Корячкина. Мучные кондитерские изделия функционального назначения.



Технология производства пастильных изделий

Рожков А.П. (студент, 3-го года обучения)

Научный руководитель: ст. преподаватель Кудряшова Н.А.

Пастильные изделия – это сбивные кондитерские изделия, изготавливаемые из фруктово-ягодного пюре, сахара или его заменителей, патоки, пенообразователей, студнеобразователей, с добавлением или без добавления пищевых добавок и ароматических веществ.

В её составе содержатся грубые волокна и пектин, которые выводят из организма токсины и шлаки, приводят в норму холестерин. При регулярном употреблении улучшится работа желудочно-кишечного тракта, укрепятся кости, ногти и волосы.

Разновидности пастилы:

- клеевая – делается на основе агарового или пектинового сиропа;
- без клеевая – используется пюре яблок, белок и сахар;
- заварная – на основе мармеладной фруктовой или смешанной сахарной массы.

Главное достоинство пастилы – натуральные ингредиенты и способ приготовления, который позволяет сохранить многие полезные элементы.

Таблица 1.

Результаты физико-химической экспертизы

Наименование показателя	Требования госта 6441-2014	Фактические значения показателя	
		ОБРАЗЕЦ №1	ОБРАЗЕЦ №2
Массовая доля влаги, не более, %	25	11	7
Плотность, г/см ³ , не более	0,9	0,8	0,8
Соответствие / несоответствие требованиям		Соответствует	Соответствует

Вывод: по результатам исследований можно сделать вывод о том, что все образцы соответствуют требованиям ГОСТа по физико-химическим показателям качества.



Технология производства макаронных изделий быстрого приготовления с добавлением соевой муки

Слепцов Д.Д. (студент, 4 курс)

Научный руководитель: доцент, Парфентьева Н.В.

Без питания человек не может существовать, так как пища является объектом жизнедеятельности человечества. Но сейчас у человечества настала эра нехватки времени из-за обилия проблем и конфликтов. Несвоевременное принятие пищи приводит к нарушению обмена веществ в организме, результатом чего являются истощение, ожирение и даже тяжелые заболевания, которые сокращают жизнь. Чтобы этого избежать были разработаны технологии, рецептуры и способы получения продуктов, которые позволяли бы ускорить и облегчить процесс приготовления пищи и тем самым освободить себя от стресса. Одним из таких продуктов стали макаронные изделия быстрого приготовления.

Такие свойства макаронных изделий быстрого приготовления, как вкус, питательность, удобство, безопасность, более длительный срок хранения и разумная цена, сделали их популярными. Поэтому для привлечения внимания потребителя производитель пытается изменить состав, пищевую и энергетическую ценность продукции, ассортимент вкусов.

Исходя из ГОСТ 31749-2012 Макаронные изделия быстрого приготовления – это изделия, изготовленные из пшеничной муки и воды с использованием дополнительного сырья и высушенные в масле.

В своей выпускной квалификационной работе планируется изучить характеристику изделия, технологию приготовления макаронных изделий, проанализировать результаты по физико-химическим показателям, рассчитать аминокислотный скор, а далее рассмотреть органолептические показатели. В конце проделанной работы будет сделан вывод о том, на сколько сильно обогатилась пищевая ценность макаронного изделия быстрого приготовления.



Органолептический анализ кекса «Столичный Безглютеновый»

Смирнова Е.С. (студент, 4-го года обучения)

Научный руководитель: Кудряшова Н.А.

Цель работы - разработка рецептуры и органолептический анализ кекса «Столичный Безглютеновый». Кекс был разработан с заменой глютенного сырья на безглютеновое. В качестве заменяемого сырья использовалась нетрадиционная мука, не содержащая глютен, трех видов: рисовая (МР), люпиновая (МЛ) и из семян чиа (МЧ).

Кекс «Столичный Безглютеновый» в трех различных содержаниях заменяемой муки: Образец №1 - МР (78%), МЛ (17%), МЧ (5%), Образец №2 - МР (82%), МЛ (15%), МЧ (3%), Образец №3 - МР (88%), МЛ (10%), МЧ (2%). Оценка готовых изделий по органолептическим показателям проводилась на соответствие требованиям ГОСТ 15052-2014. Органолептически в кондитерских изделиях оценивают вкус и запах, поверхность, вид в изломе, структуру и форму [1].

Таблица 2 - Органолептическая оценка качества образцов №1, №2, №3 кекса «Столичный Безглютеновый»

Наименование показателя	Соответствие ГОСТ		
	Образец №1	Образец №2	Образец №3
Вкус и запах	Соответствует	Соответствует	Соответствует
Поверхность	Соответствует	Соответствует	Соответствует
Вид в изломе	Соответствует	Соответствует	Соответствует
Структура	Соответствует	Соответствует	Соответствует
Форма	Соответствует	Соответствует	Соответствует

Все образцы соответствуют требованиям ГОСТ 15052-2014.

1. ГОСТ 15052-2014. Кексы. Общие технические условия. - Москва : Стандартинформ, 2015. - 7 с. - [Электронный ресурс]. - URL: <https://docs.cntd.ru/> (дата обращения: 20.05.2023).



**Сравнительный физико-химический анализ булочки сдобной,
изготовленной по классической рецептуре и булочки сдобной,
обогащенной растительными ингредиентами**

Смирнова И.В. (бакалавр, 4-го года обучения)

Научный руководитель: ст. преп. Кудряшова Н.А.

К сдобным изделиям относятся хлебобулочные изделия с содержанием по рецептуре сахара и/или жиров 14% и более к массе муки [1]. Цель работы – провести сравнительный физико-химический анализ классического (образец №1) и разработанного (образец №2) изделия. Результаты анализа представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Сравнительный анализ физико-химических показателей качества изделий

Наименование показателя	Требования ГОСТ	Фактические значения показателя		
		Образец №1	Образец №2	Соответствие/ несоответствие требованиям ГОСТ
Влажность мякиша, %, не более	34	12	23	Соответствует
Кислотность мякиша, град, не более	2,5	0,9	2,2	Соответствует
Массовая доля сахара, %, не более	19,5±1,0	20,3	18,8	Соответствует

В результате проведенного физико-химического анализа установлено, что сдобная булочка, изготовленная по классической рецептуре и сдобная булочка, обогащенная растительным сырьем, соответствует ГОСТ 24557–89 «Изделия хлебобулочные сдобные. Технические условия» по следующим физико-химическим показателям: «влажность мякиша», «кислотность мякиша», «массовая доля сахара». Наилучшие значения показал образец №2.

1. ГОСТ 24557-89 «Изделия хлебобулочные сдобные. Технические условия» [Текст]. – Введ. 01.07.90. – Москва: Стандартинформ, 2008. 7 с.



Использование сухих функциональных смесей в технологиях хлебобулочных изделий

Чикинев Д.В. (бакалавр, 4-го года обучения)

Научный руководитель: Рыжков Ю. А.

Обогащение витаминно-минеральными комплексами (ВМК) хлебобулочных изделий проводится с целью максимальной сохранности микронутриентов в массовых сортах хлебобулочных изделий, а также с целью сокращения недостаточности незаменимых микронутриентов в питании населения за счет ежедневного употребления в пищу.

Поскольку хлеб — продукт ежедневного питания, придание ему функциональных свойств имеет огромное социальное значение. Применение сухих функциональных смесей позволяет сократить технологический цикл производства эмульсионных смесей, расширить ассортимент, стабилизировать качество готовой продукции, а также способствует расширению ассортимента выпускаемых пищевых продуктов.

Так, в зависимости от физиологического воздействия на организм, хлебные изделия делятся на: традиционные, диетические, профилактические, изделия оздоровительного действия, изделия специального назначения.

Введение в его рецептуру компонентов, придающих лечебные и профилактические свойства, позволит эффективно решить проблему профилактики и лечения различных заболеваний.



Секция неорганической и аналитической химии



Физико-химическое определение аскорбиновой кислоты в продуктах растительного происхождения

Акопян Т.П. (специалитет, 5-го года обучения)

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

Цель исследования: определение содержания аскорбиновой кислоты в выбранных образцах на основе окислительно-восстановительных свойств витамина С.

Объекты исследования: соки детские «Сады Придонья», «Агуша», «Фрутоняня» и яблоки 3-х сортов «Голден», «Красное», «Грин Смит».

Результаты потенциометрического титрования объектов раствором сульфата меди 0,1М представлены в таблице 1.

Таблица 1

Содержание аскорбиновой кислоты в объектах исследования

№	Название объекта исследования	Содержание аскорбиновой кислоты, мг
1	Яблоко «Грин Смит»	35
2	Яблоко «Голден»	52
3	Яблоко «Красное»	37
4	Сок «Сады Придонья» (детский)	35
5	Сок «Агуша» (детский)	35
6	Сок «Фрутоняня» (детский)	17

На основании полученных данных можно сделать вывод, что наибольшее содержание аскорбиновой кислоты наблюдается в яблоках сорта «Голден». Наименьшее содержание аскорбиновой кислоты зарегистрировано в соке «Фрутоняня», это обусловлено тем, что здесь она может использоваться в качестве консерванта.

1. Богданова В.А. Применение потенциометрического титрования к определению витамина С. Гигиена и санитария / В.А. Богданова // Поиск.— 1948.—№10.— С. 33.

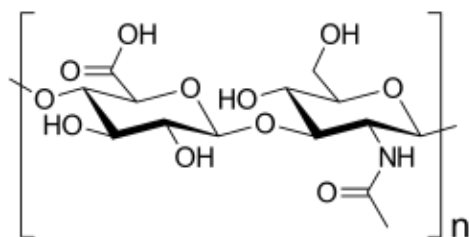


Определение содержания цинка в косметических препаратах, содержащих гиалуроновую кислоту

Вебер Н.В. (магистрант 2-го года обучения)

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

Гиалуроновая кислота – несulfированный гликозаминогликан, входящий в состав соединительной, эпителиальной и нервной тканей, являющийся одним из основных компонентов внеклеточного матрикса, который принимает активное участие в пролиферации и миграции клеток :



Это вещество с огромным спектром действия, так как обладает антимикробными и регенерирующими действиями и широко используется в виде гиалураната и его солей в офтальмологии, хирургической травматологии, а также в косметологии, оказывая местное противовоспалительное, ранозаживляющее и иммуномоделирующее действие. Данные эффекты могут быть значительно усилены, если использовать комплекс гиалуроновой кислоты с катионами металлов и в частности с катионом цинка. Ионы цинка формируют с гиалуронатом стабильный комплекс, обладающий мощным противовоспалительным, антиоксидантным и регенераторным потенциалом.

На сегодняшний день в косметологии широко используют препараты на основе комплекса гиалуроновой кислоты и цинка, при этом производители данных препаратов не всегда указывают содержание компонентов, входящих в состав смеси. Отсюда, актуальной становится задача количественного определения содержания цинка в данных косметических препаратах.

Для решения данной задачи в работе было апробированы методики количественного определения цинка в препаратах, содержащих гиалуроновую кислоту, внесены корректировки в процедуру анализа с учетом особенностей состава препарата.



Анализ содержания титана в титановых белилах

Глебова А.Г. (бакалавр, 4 курс)

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

С древних времен были известны свинцовые белила, однако они токсичны. В 1780 году Б. Куртуа приготовил белила цинковые. Они экологически безопасны, но долго сохнут и со временем растрескиваются. В 20 веке появились титановые белила, которые оказались стойкими к химическому воздействию, нетоксичными и с хорошей кроющей способностью. Титановые белила сегодня занимают первое место по востребованности во всем мире.

Для количественного анализа содержания диоксида титана в титановых белилах были взяты титановые белила перманентные художественные производства фирм «Гамма» и «Спектр». Анализ основного вещества осуществляли весовым и колориметрическим методами. Подготовка образцов к анализу для весового метода осуществлялась прокаливанием (для удаления органических компонентов) с последующим взвешиванием оставшегося диоксида титана на аналитических весах. Для спектрофотометрического анализа образцы краски после прокаливании растворяли в соляной кислоте, добавляли пероксид водорода для образования комплексного соединения и, фотометрировали на длине волны 425 нм.

Результаты эксперимента показали, что в краске фирмы «Гамма» содержание диоксида титана составило почти 50%, а гуашь фирмы «Спектр» содержит 23% искомого вещества. Полученный результаты соответствуют требованиям нормативной документации (НД) на краски.



Определение азотосодержащих веществ в воде

Лисицкий Т.М. (студент, 5-го года обучения)

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

Существует множество методик определения нитратов и нитритов. Однако все методики обладают своими преимуществами и недостатками. Поставленной целью являлась нахождение наиболее оптимальной методики.

В данной работе были использованы следующие методики: ГОСТ 33045-2014, ПНД Ф 14.1:2:4.4-95 и фенольная методика. Работа проводилась на спектрофотометре СФ-2000.

В ходе эксперимента установлено, что хлорид-ионы с концентрацией от 0,01 н. повышают оптическую плотность раствора независимо от выбранной методики. Так же использование ацетата свинца позволяет нейтрализовать присутствующие в растворе хлорид-ионы вместо сульфата серебра, не оказывая существенного влияния на проведение качественного и количественного анализа, что сказывается на меньшей стоимости проведения анализа, однако в таком случае несколько изменяется методика проведения эксперимента.

После проведенного анализа были получены следующие результаты:

Метод ГОСТ 33045-2014 позволяет определять азотосодержащие соединения с наименьшей погрешностью, но не обладает достаточной экспрессностью при проведении эксперимента. Чувствительность обнаружения нитратов – 10^{-4} .

Метод ПНД Ф 14.1:2:4.4-95 обладает наибольшей экспрессностью и наименее опасный для человека. Чувствительность обнаружения нитратов – 10^{-4} .

Фенольный метод обладает наибольшей чувствительностью – 10^{-5} , однако присутствие нитрит-ионов в образце создают существенную погрешность оптической плотности.



Анализ металлов в микроудобрениях

Перепелица О.В. (студентка бакалавриата 4-го года обучения)

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

Для нормального роста и развития растений кроме макроколичеств азота, фосфора и калия необходимо присутствие микроэлементов [1]. Так, марганец активно участвует в процессе фотосинтеза и играет основную роль в переносе электронов. Слабо связанная в хлоропластах форма марганца участвует в генерации кислорода, а прочно связанная форма – в переносе электронов. Для восполнения недостатка марганца в почве применяются соответствующие микроудобрения. Содержание марганца нами определялось колориметрическим методом по СТ СЭВ 3366-81 [2] в удобрении фирмы Green Belt (ЗАО «ТПК Техноэкспорт», ТУ 2189-160-42315284-2015). Суть метода заключается в окислении катиона двухвалентного марганца до семивалентного катиона в кислой среде под действием йоднокислого калия, с последующим определением оптической плотности раствора в кювете 0,5 см. На спектрофотометре с помощью градуировочного графика определяли оптическую плотность раствора удобрения. По оптической плотности раствора удобрения устанавливали концентрацию марганца в испытуемом растворе с последующим расчетом процентного содержания марганца в выбранном удобрении.

В исследованном образце удобрения фирмы Green Belt обнаружено 12% по массе марганца, тогда как по ТУ 2189-160-42315284-2015 нормируется содержание марганца не менее 13%.

1. Логинова Е.С., Никольский В.М., Смирнова Т.И., Толкачева Л.Н. Создание и применение комплексных микроэлементных удобрений / Сб. докладов круглого стола в рамках XX Менделеевского съезда по общей и прикладной химии. 2016. С. 18-20.
2. СТ СЭВ 3366-81. Удобрения с микроэлементами. Методы определения содержания марганца, 1981, 8 с.



Анализ смеси, полученной после пиролиза отходов сшитого полиэтилена

Петров М.Э. (магистрант 2-го года обучения)

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

Необходимость утилизации отходов пластиков связана в первую очередь с их негативным влиянием на окружающую среду. Важно отметить актуальность исследований, направленных на усовершенствование и разработку эффективного метода термической переработки отходов сшитого полиэтилена, поскольку благодаря этому может быть успешно решена проблема контроля конверсии вторичных полимеров в газообразные и жидкие продукты, способные найти применение в качестве замены традиционных топлив [1]. В данной работе были проведены анализы как исходных образцов полимерных отходов, так и продуктов их пиролиза. Для анализа исходных образцов были задействованы методы как ИК-спектроскопии, так и ТГА. Данные методы позволили нам более подробно изучить функциональные группы и получить данные об изменении массы образца при изменении температуры его.

Для изучения продуктов пиролиза использовался хроматографический метод (для газообразных веществ), рентгенофлуоресцентный, а так же метод низкотемпературной адсорбции азота (для твердых веществ). Определены оптимальные условия химической предобработки и процесса термолиза для сшитого полиэтилена; исследована активность, стабильность металлсодержащих алюмосиликатных катализаторов в процессах изомеризации и деоксигенирования летучих продуктов. Была осуществлена частичная замена благородных металлов на активные в процессе деоксигенирования переходные металлы, а также произведена замена синтетических цеолитов на природные алюмосиликаты, что в целом позволило уменьшить стоимость каталитических систем на несколько порядков.

1. Научная школа с международным участием «Новые материалы и технологии переработки полимеров» / Коллектив авторов. – М.: Бибком, 2012. – 274 с.



Интенсификация процессов сорбции на развитых поверхностях с помощью электрогидродинамических эффектов 2-го рода

Салазкин Н.С. (Магистрант, 2-го года обучения)

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

Редкоземельные металлы (РЗЭ) используются во многих областях промышленности и науки [2]. Несмотря на то, что РЗЭ присутствуют во многих минералах, их средняя концентрация в земной коре достаточно низка. Поэтому поиск путей эффективного концентрирования РЗЭ имеет важное научное и практическое значение. В настоящей работе было исследовано влияние электрогидродинамических эффектов второго рода, возникающих в окрестности ионитов [1], на скорость сорбции РЗЭ ионообменными смолами.

В исследованиях использовали катионит марки КУ 2-8, растворы нитрата лантана и формиата церия, платиновые электроды, генератор переменного тока. Для определения концентраций исследуемых растворов применяли спектрофотометрические и комплексонометрические методы анализа. Эксперименты проводили в статическом режиме - без влияния на систему ионит – раствор РЗЭ переменного электрического поля, в присутствии перемешивании РЗЭ, и в динамическом режиме – воздействуя на систему переменным электрическим полем. Согласно полученных результатов было показано, перемешивание влияет незначительно на скорость сорбции, по сравнению с влиянием переменного электрического поля, которое приводит к увеличению скорости сорбции РЗЭ в 7-10 раз, в зависимости от параметров электрического поля (частота, напряжение), по сравнению со статическими условиями сорбции.

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



Количественное определение бромид-ионов в питьевой воде

Свидерская О.В. (магистрант 2-го года обучения)

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

Бромид-ион, являющийся микрокомпонентом природных и поверхностных вод, можно отнести к гигиенически значимым неорганическим анионам, влияющих на состав побочных продуктов трансформации, образующихся при реагентной обработке воды сильными окислителями, в частности хлором или озоном. В процессе обеззараживания питьевой воды под действием окислителей существует вероятность повреждения бромид-ионов в гипобромиты и броматы и последующего их взаимодействия с гумусовыми веществами с образованием броморганических соединений [1]. В данной работе проведены исследования на содержание бромид-ионов в минеральных питьевых водах: Нарзан, Новотерская и Ессентуки-4. Испытания проведены двумя методами: КЭФ (метод капиллярного электрофореза) и ИВА (метод инверсионной вольтамперометрии). Кроме того, проведено сравнение двух методов анализа, а также выявлены их преимущества и недостатки. В процессе работы подобраны оптимальные условия для определения бромид-ионов методом инверсионной вольтамперометрии.

Бромид-ион, являющийся микрокомпонентом природных и поверхностных вод, можно отнести к гигиенически значимым неорганическим анионам, влияющих на состав побочных продуктов трансформации, образующихся при реагентной обработке воды сильными окислителями [1].

Установлено, что характерным мешающим воздействием на методы являются хлорид-ионы. Подобраны условия для проведения анализа минеральных вод с высокой минерализацией на содержание бромид-ионов методом ИВА.

1. Малышева А.Г., Абрамов Е.Г., Растянников Е.Г. // Вестн. РАМН. 2006. №4. С. 27-31.

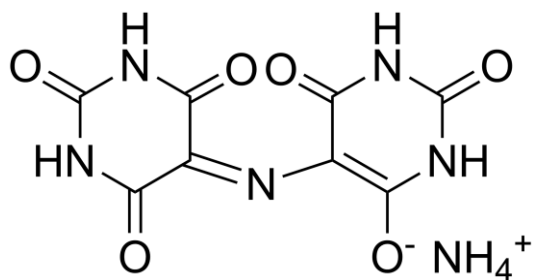


Экспериментальное и теоретическое исследование мурексида

Севлякян Л.Д. (студентка, 5 год обучения)

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

Мурексид – это органический азокраситель, он служит важным инструментом контроля и анализа технологических процессов во многих областях промышленности: металлургической, химической, текстильной, пищевой, а также в сельском хозяйстве. В настоящее время мурексид широко применяется в аналитической химии как металлоиндикатор, в частности, для комплексонометрического определения никеля (рН 9,5-10), меди (рН 8-10), скандия (рН 2,6), кальция (рН 10,8-13,2), марганца (рН 10), тория (рН 2,5) и других ионов.



Структурная формула мурексида

Спектры мурексида были записаны в видимой области. Для этого 0,02% спиртовой раствор мурексида измерили на спектрофотометре, относительно холостой пробы в диапазоне длин волн

400-800 нм. С помощью квантово-химических расчетов (DFT TPSS/6-31G++**) были определены колебательные спектры, распределение электронной плотности и значения энергий для НОМО и LUMO орбиталей.

Экспериментальные данные		Расчетные данные	
λ_{max} , нм	λ_{max} , нм	λ_{max} , нм	λ_{max} , нм
410	516	445	530

В ходе работы установлено хорошее соответствие экспериментально полученных данных и значений, полученных с использованием функционала TPSS.



Ионоселективный электрод с откликом на винпоцетин

Смирнова В.И. (студентка, 5-го года обучения),

Крюков Т.В. (ведущий инженер)

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

На сегодняшний день часто встает вопрос о создании методик качественного и количественного анализа лекарственного препарата – винпоцетина. В настоящее время для анализа лекарственных препаратов предложены надежные ионоселективные электроды (ИСЭ), которые являются удобным, простым и экспрессным современным методом анализа.

В работе использовали винпоцетин фармакопейной чистоты, фосфорномолибденовую (ФМК) и фосфорновольфрамовую (ФВК) кислоты ч.д.а., диоктилфталат (ДОФ) ч.д.а., поливинилхлорид (ПВХ) марки С-70 х.ч. Электродноактивные вещества (ЭАВ) получали осаждением винпоцетина, в силу его амфотерности, из водных растворов вышеуказанными гетерополикислотами.

Пластифицированные мембраны имели следующий состав (в масс. %): ПВХ-35, ДОФ-60, ЭАВ-5.

Изготовленные электроды обладали хорошими метрологическими характеристиками. Интервал линейности электродной функции находится в промежутке 1-4 pC, крутизна электродной функции близка к теоретическому значению, время отклика составляло 5-10 с. Показано, что потенциал ИСЭ не изменяется в интервале pH 3 - 6, что делает этот интервал наиболее подходящим для определения винпоцетина. Определение винпоцетина в готовых лекарственных формах показало работоспособность созданного ИСЭ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Е. М. Rakhmanko, V. V. Yegorov, A. L. Gilevich, Ion-Sel. Electrode Rev. 1992. P. 5-11
2. Комиссаренков А.А. Потенциометрия / А.А. Комиссаренков, Г.Ф. Пругло, В.А. Фёдоров – СПб.: СПбГТУРП, 2013 – 65 с.



Использование методик мокрого озоления при определении летучих элементов в хвоще полевом

Хомякова К.Н. (студентка 4 курса)

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

Одним из основных источников поступления макро- и микроэлементов в организм человека являются растения. Они способны захватывать из почвы различные неорганические соединения и переводить их в доступные для других звеньев пищевой цепи формы. Достаточное содержание азота в растении определяет не только его нормальный рост и развитие, но и является важнейшим фактором биосинтеза пигментов, являющихся антиоксидантами. Способность растений концентрировать эссенциальные микроэлементы, такие как селен, определяет их биологическую значимость и придает им лечебные свойства.

Однако количественное определение азота и селена сопровождается рядом трудностей, связанных со значительными потерями данных элементов в процессе сжигания. Поэтому важным этапом в анализе растений является подбор подходящих методик мокрого озоления, исключающих потери азота и селена.

Для проведения данной работы были использованы побеги хвоща полевого, являющегося растением-концентратором селена. Перед проведением анализа растительный материал был высушен до воздушно-сухого состояния.

Для определения азота была выбрана методика озоления навески смесью концентрированной серной кислоты и перекиси водорода в присутствии селена в качестве катализатора. Азотистые соединения при участии катализатора селена окисляются атомарным кислородом до углекислого газа, воды и аммиака, который связывается с серной кислотой и определяется фотометрически индофенольным методом.

Для перевода селена в раствор использовалась смесь концентрированных серной и азотной кислот в соотношении 1:1. Для ускорения процесса минерализации в смесь вводился 42%-ый раствор хлорной кислоты. Из полученного минерализата готовился коллоидный раствор элементарного селена, концентрация которого также определялась фотометрически.



Влияние таблетирования с бромидом калия на ИК-спектры индометацина

Шачнева К.С. (Магистр 2-го года обучения)

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

Учёт и рациональное использование явления полиморфизма веществ имеют большое значение для медицинской практики. Практически от того, какая кристаллическая модификация субстанций содержится в лекарственном препарате, зависит его стабильность и эффективность.

В качестве объекта исследования был выбран противовоспалительный препарат индометацин. Известно, что субстанция индометацина существует в нескольких кристаллических модификациях. Механическое воздействие может приводить к полиморфным превращениям и аморфизации вещества. Для предотвращения рекристаллизации индометацина использовался эксипиент полиэтиленгликоль 6000 а.е.м. в соотношении 1:1 и 1:3.

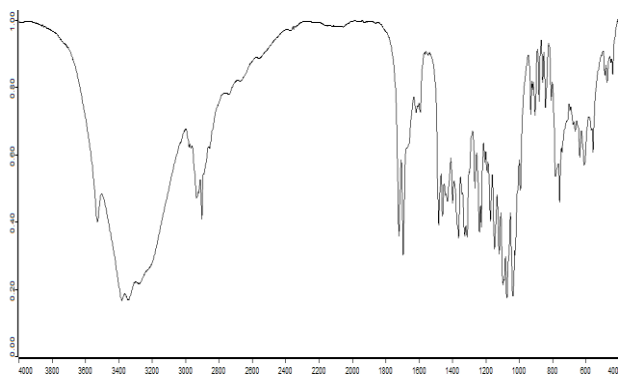


Рис.1. ИК-спектр индометацина (ООО «Озон»)

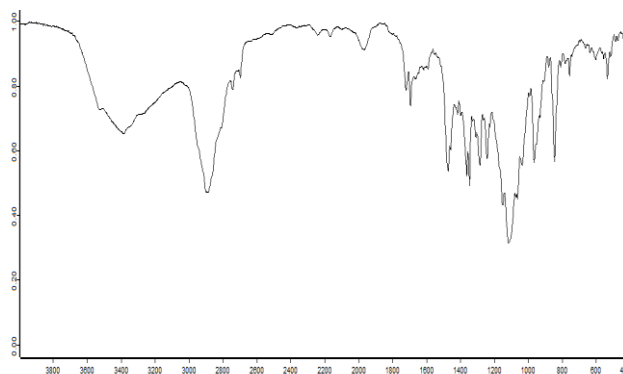
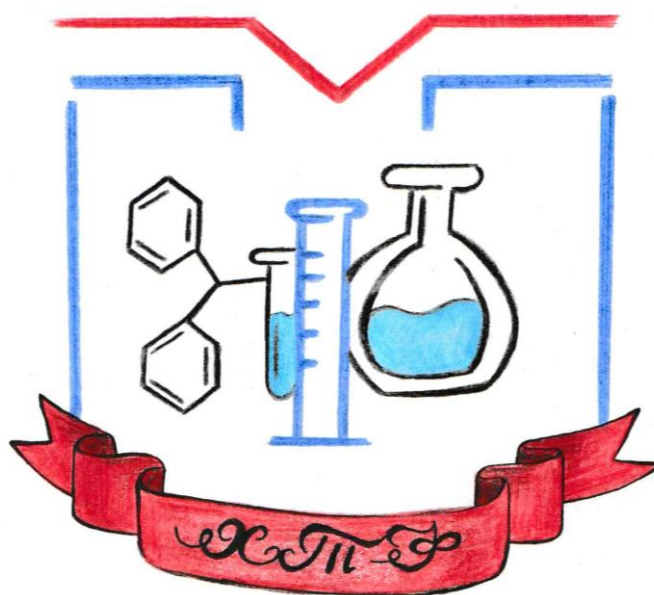


Рис.2. ИК-спектр индометацина с ПЭГ 1:3

Изменения в ИК-спектре свидетельствуют о том, что в данных условиях происходит ослабление системы водородных связей в индометацине или образование новых, более прочных. Рекомендуется использовать ПЭГ-6000 с целью стабилизации индометацина при таблетировании с КВг в соотношении 1:3.

1. Федотов А.П. О влиянии таблетирования с бромидом калия на инфракрасные спектры поглощения индометацина. Химико-фармацевтический журнал / А.П. Федотов и др. – 2009. – Т.43. – №1. – С.50-52.



Секция органической химии



Влияние пиридиниевых ионных жидкостей на размер наночастиц сульфида цинка полученных взаимодействием тиомочевины с ацетатом цинка

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

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

Наночастицы полупроводников являются востребованными соединениями из-за их большой области применения. Их свойства, например фотолюминесценция, сильно зависят от размеров, что позволяет изменять свойства материала в зависимости от потребностей.

Целью данной работы было изучить влияние пиридиниевых ИЖ на размер образующихся наночастиц сульфида цинка, полученных взаимодействием тиомочевины с ацетатом цинка.

В качестве прекурсоров использовали водно-спиртовые (1:1) растворы тиомочевины и ацетата цинка, pH системы довели до 10. Используемые стабилизаторы и их концентрации указаны в таблице 1. Для установления размера наночастиц использовали методы УФ-спектроскопии и динамического светорассеяния (ДСР). Полученные результаты представлены в таблице.

Таблица

Размеры наночастиц сульфида цинка с использованием пиридиниевых ИЖ, измеренные методами УФ-спектроскопии и ДСР

Стабилизатор	C, моль/л	d частиц по данным УФ-спектроскопии, нм	d частиц по данным ДСР, нм
$\text{PyC}_{10}\text{BF}_4$	0,005	2,94	58,8
$\text{PyC}_{10}\text{BF}_4$	0,015	2,83	78,9
$\text{PyC}_{10}\text{BF}_4$	0,03	2,91	164
$\text{PyC}_{10}\text{PF}_6$	0,005	2,94	98,65
$\text{PyC}_{16}\text{BF}_4$	0,005	2,86	142



Исследование огнезащитных свойств фосфорорганических соединений

Арзамасова А.Ю. (магистрант 2-го года обучения)

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

Отличительной особенностью органических фосфатов является их высокая огнестойкость. Температура воспламенения многих фосфатов выше 600°C , они медленно горят в пламени, не поддерживая горение и не распространяя пламя. Фосфаты обладают достаточной термической и окислительной стабильностью, высокой смазочной способностью, хорошими вязкостно-температурными свойствами.

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 [1].

Данный метод мы использовали в работе. В качестве первого компонента взяли 1,4-бутандиол (3 моль) и провели реакцию с безводным P_2O_5 (2 моль) при температуре 45°C и выдержали в течение 4-х часов. Для подтверждения огнезащитных свойств нанесли полученные вещества на легковоспламеняющийся предмет, на лист бумаги. В результате эксперимента наблюдали то, что лист бумаги, где не было нанесено полученное вещество, сгорел полностью, а на месте с полученным органическим фосфатом — осталась целостность продукта. Полученный сложный эфир фосфорной кислоты представляет собой однокомпонентный продукт, отверждающийся при нагревании, который обеспечивает защиту от огня воспламеняющегося субстрата при нанесении их на указанный субстрат.

1. Патент РФ 2005134554, 10.05.2004. Способ получения полимерного материала
// Патент RU 2370503 C2 / Аслин Д.Ч



Получение сложных эфиров сахарозы и исследование их свойств

Балотина А.В. (студент, 5-го года обучения)

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

Сложные эфиры сахарозы используются в качестве веществ специального и вспомогательного назначения. Они хорошо биоразлагаемы, применяются в качестве стабилизаторов эмульсий, проявляют эффективность в жесткой воде и высокие моющие способности, обладают низкой токсичностью.

Настоящая работа посвящена получению и исследованию коллоидно-химических свойств сложных эфиров сахарозы, полученных на основе высших карбоновых кислот: терефталевой, стеариновой, пальмитиновой, лауриновой и каприновой кислот. Реакции этерификации по получению жирсахаров проведены в мольном соотношении кислота к сахарозе 2:1, в качестве растворителя использован раствор диметилсульфооксида, а в роли катализатора применен тионилхлорид. Время каждого синтеза составило 180 минут при температуре 55 – 60 °С.

Методом ИК-спектроскопии подтверждено строение полученных жирсахаров, например, ИК-спектр лаурата сахарозы содержит полосу валентных колебаний сложноэфирной связи равную 1718 см⁻¹. Для подтверждения полноты прохождения реакций определены кислотные и эфирные числа всех полученных соединений, значения кислотных чисел составляют от 5,41 до 8,87 мг/г, эфирных от 48,87 до 59,09 мг/г. Исследована эмульгирующая способность синтезированных сложных эфиров сахарозы. Выявлено, что эмульгирующие свойства повышаются с увеличением длины гидрофобной части молекулы. Определено, что самой устойчивой является эмульсия при концентрации 0,003 моль/л типа терефталат сахарозы/масло виноградной косточки.



Получение и исследование свойств 1-(4-сульфофенил)-3,5-дифенилформазана

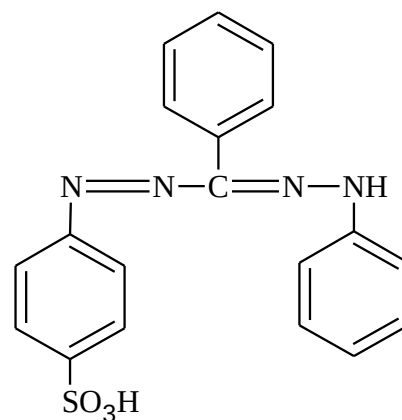
Баржеев А.Д. (студент 4 курса)

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

К производным гидразина относятся формазаны – азогидразоны муравьиной кислоты, которые являются π -сопряженными N-донорскими лигандами. Азогидразоны имеют широкое применение в органическом синтезе и аналитической химии, используются как красители для различных материалов и т.д. Применение обуславливается наличием в соединениях сопряженной системы из азо- и гидразонной групп, а также соединяющего их атома углерода. Представленная работа посвящена получению и изучению свойств 1-сульфофенилсодержащего формазана.

Синтез формазана проведен в три стадии. Стадия 1 – получен фенилгидразон бензальдегида взаимодействием солянокислого фенилгидразина с бензальдегидом в кислой среде ($\text{pH}=1$) в присутствии водного раствора ацетата натрия. Стадия 2 – синтезирована соль диазония методом обратного диазотирования. Стадия 3 – получен 1-(4-сульфофенил)-3,5-дифенил-формазан реакцией азосочетания щелочно-спиртового раствора фенилгидразона бензальдегида с N-[(4-аминофенил)сульфидом натрия при температуре $0-3^\circ\text{C}$, интенсивном перемешивании смеси в течение 2 часов и постепенным прибавлением к реакционной массе карбоната натрия для поддержания pH среды 9-10. Структурная формула полученного соединения представлена ниже.

Синтезированное соединение представляет собой мелкокристаллический осадок темно-вишневого цвета. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопического анализа и температурой плавления.



Синтез и идентификация ионных жидкостей на основе N-алкилпиридиния с анионами переходных металлов

Воробьева А.О. (магистрант, 1-го года обучения)

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

Окислительно-восстановительные особенности переходного металла в составе металлных ИЖ обеспечивают доступ ко многим свойствам, например, к увеличению электрохимической стабильности или каталитической активности, появлению парамагнитных свойств из-за возможного локального упорядочения магнитных анионов и оптических свойств обуславливающих яркую окраску четвертичных солей переходных металлов.

Целью работы является синтез металлных ИЖ с катионом N-алкилпиридиния и тетрахлорферрат-, тетрахлорманганат и тетрахлорникелат-анионами с различной длиной алкильных заместителей (Рис.1).

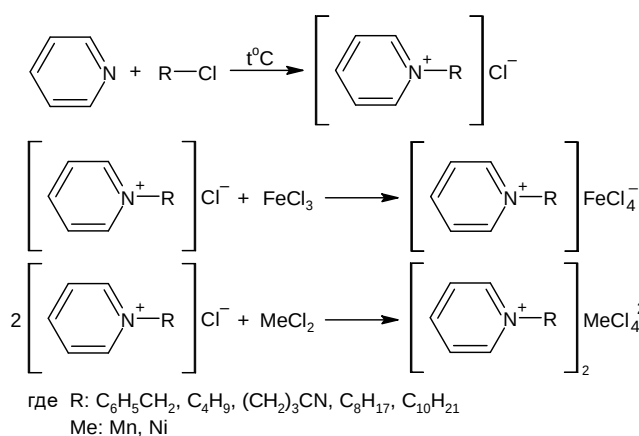


Рис.1. Схемы реакций синтеза металлных ионных жидкостей.

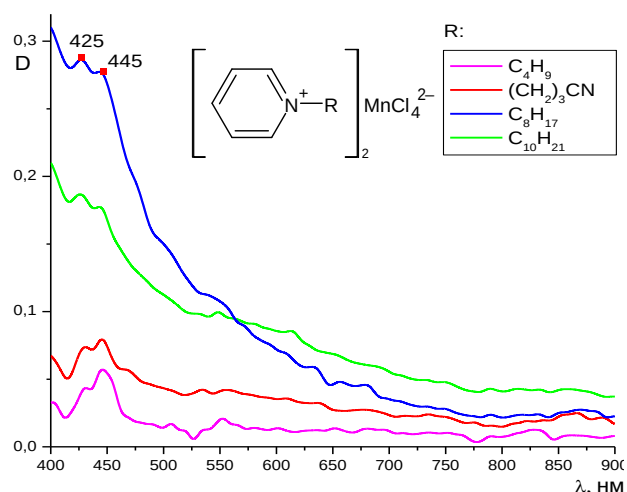


Рис.2. Спектры в видимой области для тетрахлорманганат-аниона.

Структуры органического катиона и комплексных анионов переходных металлов в составе металлных ИЖ подтверждены данными ИК-спектроскопии и спектроскопии в видимой области. На спектрах в видимой области тетрахлорманганаты N-алкилпиридиния имеют две характеристические полосы поглощения 425 и 445 нм характерные для MnCl₄²⁻-аниона (Рис.2).



Получение монопальмитилглицерилтартрата

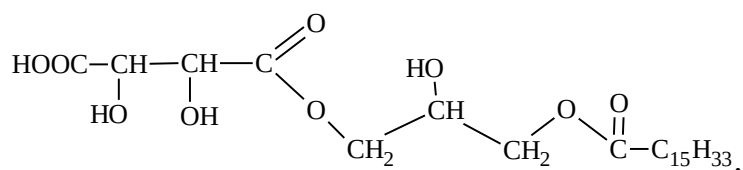
Дорожинская Е.С. (студентка, 4 курс)

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

Актуальной проблемой современного органического синтеза является подбор оптимального метода получения эмульгатора, который широко используется в пищевой промышленности в качестве загустителя и стабилизатора. Применение данной группы добавки связано с созданием новых видов пищи, соответствующих современным направлениям развития науки о питании. В связи с этим интересен вопрос получения эмульгатора монопальмитилглицерилтартрата, чему и посвящена представленная работа.

Исследуемое соединение получали методом азеотропной этерификации в две стадии. На первой – получен эфир монотартрилглицерида взаимодействием винной кислоты с глицерином в присутствии катализатора *n*-толуолсульфокислоты. Температуру кипения контролировали добавлением к реакционной массе толуола, который также использовался для образования низкипящей азеотропной смеси с водой. Реакционную массу нагревали в течение 4 часов при температуре 110°C. На второй стадии получен эфир монопальмитилглицерида винной кислоты, взаимодействием монотартрилглицерида с пальмитиновой кислотой. Условия течения реакции аналогичны первой стадии.

Полученное соединение представляет собой вязкую жидкость темно-янтарного цвета с температурой плавления 55-58°C. Исследованы растворимость и поверхностное натяжение водных растворов монопальмитилглицерилтартрата, структурная формула которого представлена ниже:



Полученные данные говорят о принадлежности синтезированного эмульгатора к неионогенным поверхностно-активным веществам, обеспечивающие создание эмульсий масла в воде.



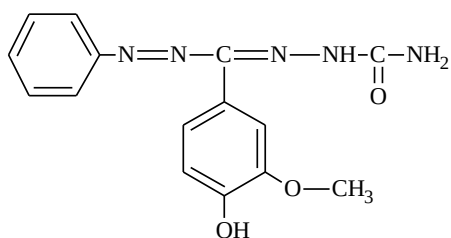
Получение формазанов на основе семикарбазонов оксосоединений

Иванова В.Е. (студентка 5 курса)

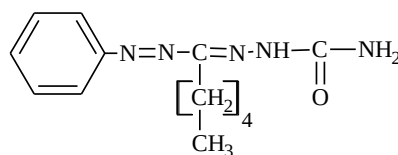
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Егорова И.Ю.

Формазаны, или азогидразоны, относятся к производным гидразина, которые содержат структурный фрагмент $-N=N-C=N-N-$. Производные формазана широко применяются в лакокрасочной промышленности, а также в зависимости от используемых реагентов на этапе синтеза формазанов, конечный продукт может быть синтезирован с необходимыми функциональными группами, придающими формазанам биологическую активность. Представленная работа посвящена получению и исследованию формазанов на основе семикарбазонов ванилина и гексаналя.

Синтез формазанов протекает в 3 стадии. На первой стадии происходит взаимодействие ванилина и гексаналя с хлористым семикарбазидом с получением соответствующих семикарбазонов. На второй стадии происходит взаимодействие семикарбазонов ванилина и гексаналя с солью диазония. Реакция протекает при соблюдении условий реакции: температурный режим и pH среды. Структурные формулы аминокарбонилформазана на основе соответствующих альдегидов представлена ниже:



1-фенил-3-(4-гидрокси-3-метоксифенил)-5-аминокарбонилазогидразон



1-фенил-3-пентил-5-аминокарбонил-азогидразон

Полученные соединения представляют собой кристаллические вещества темно-фиолетового и прозрачного цвета. Определены растворимость и температуры плавления. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопического анализа.



Получение производных молочной кислоты

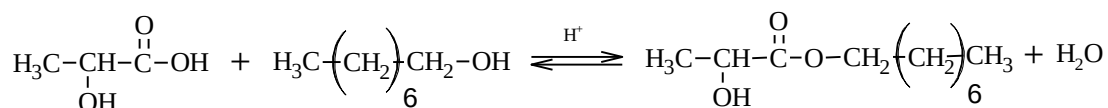
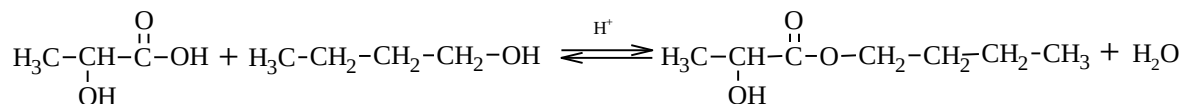
Ким О.Т. (студентка, 4-ого года обучения)

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

Алкиллактаты – сложные эфиры молочной кислоты, экологически безопасный материал, находят широкое применение в качестве растворителей, пищевых добавок, очищающих и обезжиривающих средств, помимо этого они могут выступать в роли промежуточного соединения для получения биоразлагаемого и биосовместимого полимера – полилактида.

Объектами исследования в данной работе являлись: молочная кислота (80% водный раствор), бутанол-1, октанол-1, катализатор – *n*-толуолсульфоновая кислота, азеотропообразователи – бензол и тетрахлорметан.

В ходе работы были получены линейные сложные эфиры молочной кислоты – бутиллактат и октиллактат. Применяли известную методику азеотропной этерификации [1]. Реакции протекали по следующим схемам:



Бутиллактат и октиллактат выделяли вакуумной перегонкой, перед этим нейтрализовали реакционную смесь раствором гидрокарбоната натрия.

Для определения полноты прохождения реакции определены эфирные числа синтезированных алкиллактатов. По полученным данным рассчитаны значения практических молекулярных масс синтезированных веществ. С помощью метода ИК-спектроскопии подтверждено строение выделенных сложных эфиров, определены показатели преломления алкиллактатов.

1. Беккер Г., Бергер В., Домшке В. и др. Практикум по органической химии. Москва: Мир. 2008. Т.1. 504 с.



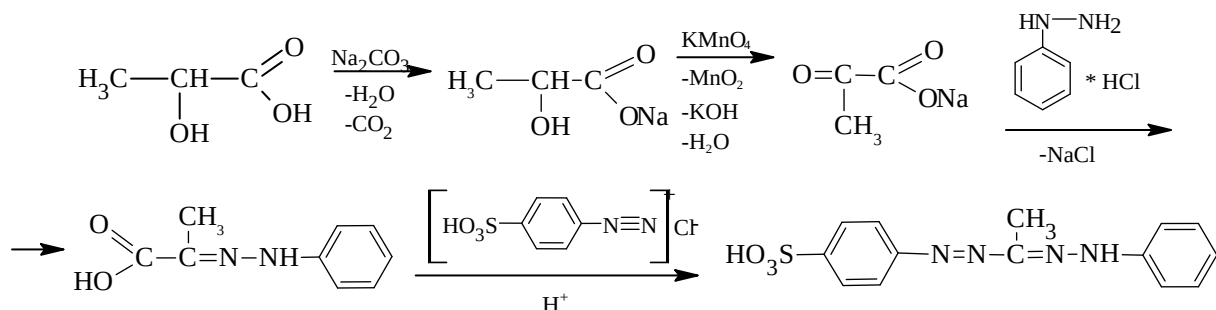
Получение сульфанилсодержащего азогидразона

Кудряшова Е.А. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Особенность строения азогидразонов - наличие в цепи соединения двух кратных связей и атома азота с не поделённой электронной парой, обуславливающая возможность образования единой сопряженной системы и их способность образовывать различные производные, широко применяющиеся в качестве термо- и фотохромных веществ, а также в биохимии и медицине. Образующиеся при взаимодействии формазанов с ионами переходных металлов ярко окрашенные хелатные комплексы применяются как свето- и термостойкие красители тканей и красители технического назначения. Представленная работа посвящена получению азогидразонов на основе 2-гидроксипропановой кислоты.

Синтез формазанов проводится путем реакции азосочетания арилдиазониевых солей с гидразонами альдегидов и α -кетокислот, а также с соединениями, содержащими активированную электроакцепторными заместителями метиленовую группу, протекающей через образование соответствующих гидразонов. В работе в результате последовательного взаимодействия 2-оксо-пропановой кислоты с фенилгидразином и хлоридом сульфобензолдиазония был синтезирован 1-сульфанил-5-фенил-3-метилазогидразон.



Определены температура плавления и растворимость синтезированного сульфобензолазогидразона, с помощью ИК-спектроскопического анализа подтверждено строение полученного соединения, а также исследована его хелатирующая способность.



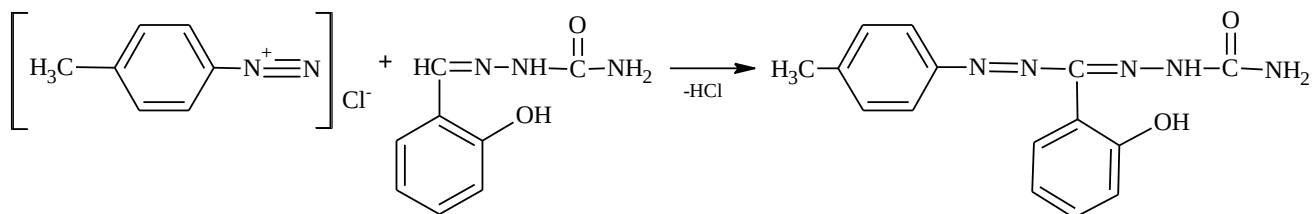
Получение 5-аминокарбанилсодержащего формазана

Кулакова А.Н. (студент, 5 курс)

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

Формазаны – доступный класс органических соединений, которые нашли широкое применение как красители, люминофоры, термо- и фотохромные вещества, комплексоны и др. Особенно плодотворно они используются в биохимии, медицине, аналитической химии. Это обусловлено наличием в них сопряженной системы, состоящей из азо- и гидразонной групп, и соединяющего их атома углерода [1].

Синтез 5-аминокарбанилсодержащего формазана проходил в три стадии. На первой стадии взаимодействием салицилового альдегида и семикарбазида получен карбамоилгидразон салицилового альдегида. На следующей стадии получена соль диазония, взаимодействием *n*-аминотолуола с азотистой кислотой. На заключительной стадии синтезирован 5-аминокарбонилформазан, взаимодействием *n*-метилфенилдиазония хлорида с карбамоилгидразоном салицилового альдегида. Схема реакции представлена ниже:



Строение синтезированных соединений подтверждено данными ИК-спектроскопии. Исследованы хелатирующие способности синтезированного аминокарбонилформазана.

1. Прогресс в химии формазанов: синтез-свойства-применение / Г.Н. Липунова и др.; подред. И.Н. Липуновой, Г.И. Сигейкина. – М.: Научныймир, 2009. – 296 с.



Исследование влияния анионного поверхностно-активного вещества на растворы желатина

Крупнов В.М. (бакалавр, 4 года обучения)

Руководитель: Н.В. Веролайн

Высокое прикладное значение для исследования влияния амфифильных веществ на биологические объекты имеет изучение систем поверхностно-активное вещество – белок. Молекулы белков и поверхностно-активных веществ (ПАВ) взаимодействуют между собой в виду дифильного строения обоих.

В результате проведения лабораторных испытаний, установлена минимальная концентрация раствора желатина, необходимая для проведения исследования - 2 %. В случае уменьшения концентрации, вязкость раствора желатина уменьшается в соответствии с разбавлением (рис.)

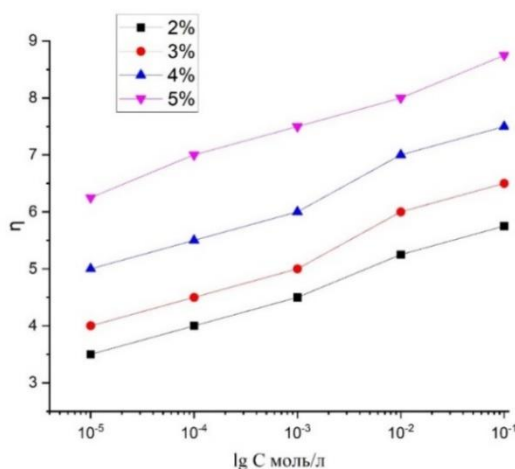


Рис. Зависимость относительной вязкости растворов желатина от концентрации добавленного додецилсульфата натрия; концентрация желатина (снизу вверх): 0, 2.0, 3.0, 4.0, 5.0 мас. %

В результате исследования образцов, были сделаны электронные фото растворов 4 % желатина с додецилсульфатом натрия концентрациями 10^{-1} и 10^{-2} . Проведены исследования по измерению средних размеров частиц исследуемых растворов, которые составили 0.139 мкм (1) и 0.128 мкм (2)



Производные п-аминобензойной кислоты с хлорангидридами гидроксibenзойных кислот

Павлова С.А. (студент, 5-го года обучения)

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

Фармацевтическая промышленность стремительно развивается, увеличивается число производимых лекарственных средств. Производные бензойной кислоты часто используются в качестве одного из компонентов лекарственных веществ. Поэтому изучение производных гидроксibenзойных кислот является актуальной темой для исследования.

В работе осуществлен синтез N-(гидроксibenзоил)-4-аминобензойных кислот с помощью реакции N-ацилирования. Гидроксibenзойные кислоты предварительно были переведены в хлорангидриды с использованием хлористого тионила, избытки которого впоследствии отгоняли. Далее проводили N-ацилирование пара-аминобензойной кислоты в щелочной среде с помощью хлорангидрида гидроксibenзойной кислоты. Полученные вещества были идентифицированы с помощью метода ИК-спектроскопии.

После полученные N-(гидроксibenзоил)-4-аминобензойные кислоты были переведены в литиевые и калиевые соли. Процесс происходил с помощью добавления к бензолу металлического калия или LiOH и полученной кислоты. Смесь кипятили в течение двух часов, после чего отгоняли остатки бензола. Соли N-(гидроксibenзоил)-4-аминобензойных кислот обладают низкой токсичностью и проявляют высокую биологическую активность [1].

1. Брель А.К. Синтез производных гидроксibenзойных кислот с п-аминобензойной кислотой / А.К. Брель, Е.Н. Жогло // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2016. – № 8. – С. 370-373.



Влияние неионогенных поверхностно-активных веществ на устойчивость дисперсий сахарозы

Родионова М.В. (студент, 4 курс)

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

В нынешнее время широко используются лиофобные дисперсные системы для изготовления большого ассортимента косметических продуктов разного вида и назначения. Эти продукты, помимо красивого внешнего вида, должны иметь коллоидную и термическую стабильность. До сих пор не существует стандартных методик получения всех дисперсных систем, поэтому для каждой модели необходим индивидуальный подход и подбор условий [1].

В нынешней работе в качестве модели для исследования были выбраны: масло ши, полисорбат-80, полисорбат-20. Для исследования стабильности дисперсных систем, было изготовлено несколько проб эмульсий с разными концентрациями и смесями НПАВ. Потом их оставляли на 24 часа, для полного осаждения эмульсионного слоя, и отмечали его высоту.

Для получения более стабильных эмульсий используют разные смеси полисорбатов, в зависимости от их ГЛБ. Лучшим эмульгатором масла ши показала себя смесь полисорбата-80 с полисорбатом-20 в соотношении 2:1.

В исследуемую систему эмульсии масла ши в смеси полисорбатов был добавлен сахар, который образовал косметический продукт, имеющий форму скраба.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Плётнёва М.Ю.// Поверхностно-активные вещества и композиции. Справочник. М. 2002. 768 с.



Исследование эффективности составов на удаление продуктов коррозии с поверхности сплавов на основе меди

Серегин И.В. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Под воздействием окружающей среды металлические изделия подвергаются коррозии, результатом которой являются не только массовые потери металла, но и изменение потребительских свойств изделий. В настоящее время исследователи продолжают работу по составлению доступных и недорогих составов, позволяющих очистить металлические изделия от продуктов коррозии [1].

В настоящей работе в качестве объектов исследования были выбраны наиболее доступные изделия из медных сплавов – монеты. Отобраны восемь образцов, отличающихся номиналом, годом выпуска, а также составом сплава.

В качестве составляющих очищающих составов выбраны растворы оксиэтилидендифосфоновой кислоты (ОЭДФ), динатриевой соли этилендиаминтетрауксусной кислоты (трилон Б), этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТУК), а также нитрилотриуксусной кислоты. Объектом для очистки послужили монеты выполненные из Нейзильбер-10, Марганцовистой латуни и ЛМц58-2.

Наиболее эффективным, из применявшихся в ходе эксперимента, оказался раствор, содержащий ОЭДФ. Монеты из Нейзильбера приобрели более светлый оттенок, монеты из Марганцовистой латуни и ЛМц58-2 приобрели более золотистый оттенок. Так же в результате действия этих реагентов монеты приобрели металлический блеск. Потеря массы в результате очистки не превышала 0,4%.

1. О. А. Чепкасова, А. А. Селезнева, А. И. Садилов, С. В. Хмелев. Коррозия металлов // Молодой ученый. – 2015. – № 23 (103). – С. 260-261.



Алкоаноламины на основе фенилглицидилового эфира

Харкунова М.К. (студент)

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

Алкоаноламины — эффективные сшивающие агенты для изоцианатсодержащих систем. Подбирая соответствующие соотношения олигомера и отвердителя, можно регулировать свойства полиуретановых эластомеров. Важной задачей является подбор условий синтеза алкоаноламинов с хорошими выходами.

В данной работе исследован процесс взаимодействия фенилглицидилового эфира (ФГЭ) с *N*-нуклеофилами — этилендиамином (ЭДА) и моноэтаноламином (МЭА) при различных условиях. Синтезы проводились с использованием различных катализаторов, соотношений субстрата и нуклеофила, температурных режимов.

Определены основные характеристики алкоаноламинов (полиэфирполиолов) — гидроксильное и кислотное числа — по ГОСТ 25261-82 и ГОСТ 25210-82 соответственно. Результаты представлены в таблице.

Таблица

Гидроксильное и кислотное числа синтезированных полиэфирполиолов

субстрат	нуклеофил	Соотношение субстрат: нуклеофил	Кол-во ОН- групп продукта	Гидроксильное число, мг КОН на г	Кислотное число, мг КОН на г
ФГЭ	ЭДА	1:1	1	150	1,69
ФГЭ	ЭДА	2:1	2	172	1,81
ФГЭ	МЭА	2:1	3	254	3,56

Полиэфирполиолы, выпускаемые промышленно, могут иметь гидроксильное число в пределах от 32-36 мг КОН на г до 430-480 мг КОН на г и кислотное число в пределах от 0,05 мг КОН на г до 1 мг КОН на г.

Полученные результаты по гидроксильным числам коррелируют с литературными данными. Значения кислотных чисел незначительно превышают значения для промышленных образцов.

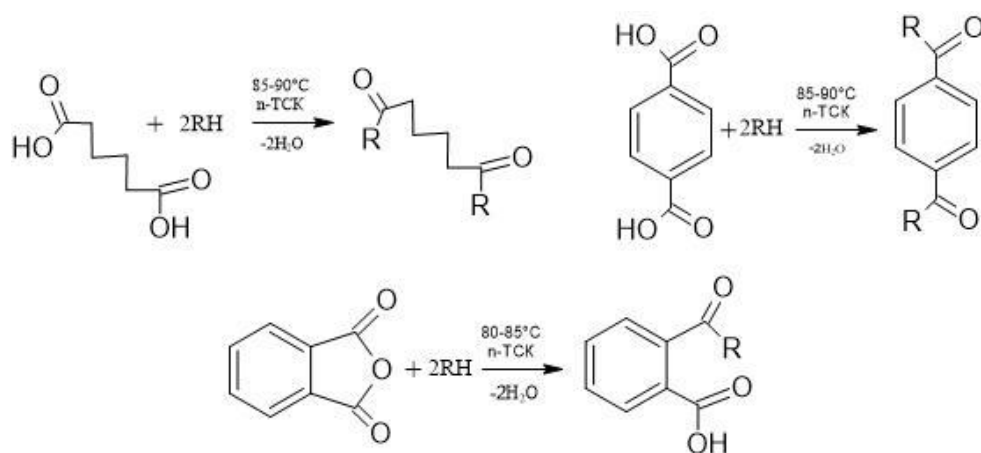
Влияние строения спейсера на свойства димерных поверхностно-активных веществ

Чистякова М.М. (специалист, 5-го года обучения)

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

Димерные поверхностно-активные вещества (ПАВ) образованы двумя углеводородными цепочками и полярными группами, связанными между собой спейсером. Данные соединения обладают низкими значениями критической концентрации мицеллообразования (ККМ), усиливают диспергирование твердых веществ, обладают антибактериальными свойствами [1].

В данной работе синтезированы димерные ПАВ — диэфиры на основе адипиновой, терефталевой кислот, фталевого ангидрида и неионогенных ПАВ — АЛМ-3 и ДС-4. В качестве катализатора использовали *n*-толуолсульфокислоту (п-ТСК).



где $\text{R} = \text{C}_{10-13}\text{H}_{21-27}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_3\text{O}-$, $\text{C}_{10-18}\text{H}_{21-37}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_4\text{O}-$.

Рис 1. Синтез димерных ПАВ

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

1. R. Zana, J. Xia Gemini surfactants. Synthesis, interfacial and solution phase behavior, and applications. Surfactant Science Series – Marcel Dekker, 2017 – 331p.



Применение модели Дерягина-Мюллера-Топорова для вычисления адгезионных характеристик полиэтиленисукцината

Шамарина К.А. (магистрант 1-го года обучения)

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

Ранее было проведено исследование упругости плёнки полиэфира на основе янтарной кислоты и этиленгликоля методом контактной спектроскопии на установке сканирующего зондового микроскопа Solver P47 [1]. На полученных силовых кривых отвода зонда (рис. 1) наблюдается гистерезис (который проявляется как изгиб вниз от исходного равновесного состояния), связанный с адгезией. Этой частью силовой кривой можно воспользоваться для оценки поверхностной энергии и для измерения силы адгезии согласно модели контактного взаимодействия Дерягина-Мюллера-Топорова.

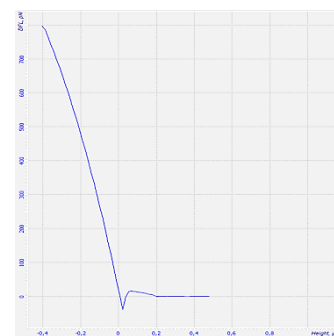


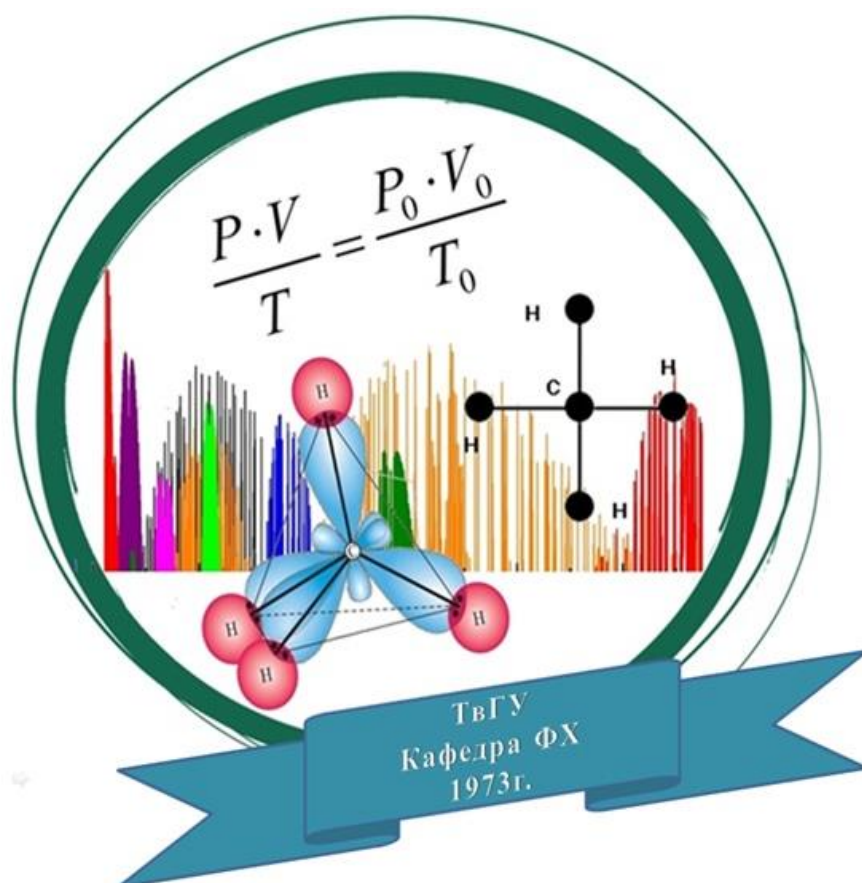
Рис.1. Силовая кривая

В данной работе были вычислены значения силы адгезии и получены значения удельной поверхностной энергии по формуле:

$$\gamma = F_{ad} / (2\pi R), \text{ где } F_{ad} - \text{сила адгезии; } R - \text{радиус наконечника зонда.}$$

Показано, что приближенное значение силы адгезии составило $1,6 \cdot 10^{-9}$ Н, а удельной поверхностной энергии – 0,0255 Н/м.

1. Шамарина К.А. Получение локальных значений модуля Юнга на поверхности полимеров методом контактной силовой спектроскопии // XXIX Российская конференция по электронной микроскопии RCEM-2022 – Москва, 2022. – С.565-566



Секция физической химии



Топологические индексы в изучении корреляции «структура-свойство» карбоновых кислот

Барсукова В.В. (магистр, 1-й год обучения)

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

Актуальной проблемой современной химии является изучение структуры и реакционной способности карбоновых кислот, которые широко применяются в пищевой промышленности, в фармации и органическом синтезе. В связи с этим интересен вопрос их исследования.

В работе применяются метод теории графов, метод статистической обработки данных, МНК и другие. Были рассмотрены такие индексы, как индекс Винера: $W = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n d_{ij}$, где (d_{ii}, d_{ij}) – элементы матрицы расстояний); число W' определяемое по аналогии с W : $W' = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n (d_{ij})^2$; индекс Харари: $H = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n (d_{ij})^{-2}$; индекс Балабана: $J = \left\{ \frac{m}{\gamma+1} \right\} \sum_{\text{все ребра}} (D_r D_t)^{-\frac{1}{2}}$.

Были построены матрицы расстояний и рассчитаны некоторые топологические индексы ТИ для ряда карбоновых кислот.

Топологические индексы ряда карбоновых кислот

Молекула	W	W'	H	J
HCOOH	2,75	2,09	41,68	2,694
CH ₃ COOH	6,88	8,05	43,53	15,344
CH ₃ CH ₂ COOH	12,06	26,11	45,09	31,761
CH ₃ CH ₂ CH ₂ COOH	28,13	65,70	46,61	78,829
CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ COOH	47,25	137,41	38,13	130,633
CH ₃ (CH ₂) ₄ COOH	73,38	254,36	49,66	207,670
CH ₃ (CH ₂) ₅ COOH	107,50	431,56	51,20	298,674
CH ₃ (CH ₂) ₆ COOH	150,63	686,02	52,75	440,172
CH ₃ (CH ₂) ₇ COOH	203,75	1036,72	54,30	598,918
CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COOH	433,13	2886,33	59,01	1327,622



Слабые взаимодействия в комплексе

этилендиаминтетраацетатаквамагния: QTAИМ анализ

Иванова А.А. (магистрант 1-го года обучения)

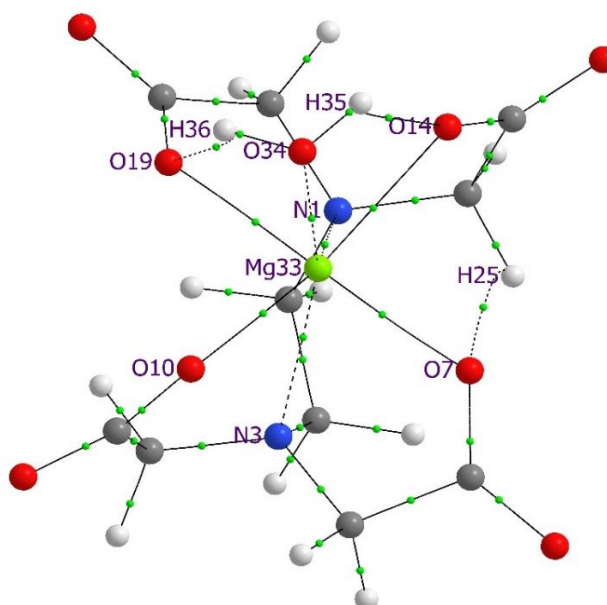
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Русакова Н.П.

В данной работе рассматриваются внутримолекулярные взаимодействия в комплексе $[\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})\text{edta}]^{2-}$ с использованием подхода QTAИМ. Методом DFT ранее было проведено моделирование данного комплекса.

Связевой путь O7 – Mg33 является более прочным, как видно по распределению электронной плотности на линиях координационных взаимодействий между металлом и атомами кислорода молекулы этилендиаминтетраацетата (Таблица). Величина электронной плотности в критической точке соответствующего связующего пути (КТ (3;-1)), его длина (R), меньшая эллиптичность и большее значение лапласиана электронной плотности, по сравнению с остальными O – Mg так же это показывают. Самое слабое взаимодействие наблюдается на Mg33 - O34.

Таблица. Параметры электронной плотности ($\rho_b(r)$, в а.е.), эллиптичности (ε) и длины связующего пути (L , в Å) слабых и координационных взаимодействий КТ (3;-1) внутри комплекса этилендиаминтетраацетатаквамагния

КТ(3;-1)	$\rho_b(r)$	ε	L
N3 - Mg33	+0.021	+0.079	+2.41
N1 - Mg33	+0.019	+0.031	+2.46
O7 - Mg33	+0.038	+0.025	+2.08
O19 - Mg33	+0.032	+0.031	+2.14
O10 - Mg33	+0.035	+0.027	+2.11
O14 - Mg33	+0.028	+0.028	+2.21
Mg33 - O34	+0.023	+0.029	+2.27
O7 - H25	+0.006	+0.463	+2.86
O14 - H35	+0.031	+0.264	+1.89
O19 - H36	+0.021	+0.532	+2.15





Электронные свойства изомеров положения декансульфона, симметричных диалкилсульфонов, белого стрептоцида и аминокбензола

Нефедова И.А. (студент, 5-го года обучения)

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

Алкилсульфоны и их производные являются одними из важных объектах исследования в органической химии в наше время. Они играют важную роль в биохимических процессах и используются в медицине. Исследование свойств серосодержащих соединений проводится как классическими методами, так и с помощью теоретических подходов квантовой химии. Целью данного исследования стало получение интегральных электронных характеристик групп (зарядов, объемов, энергий) изомеров положения декансульфона, симметричных диалкилсульфонов, белого стрептоцида и аминокбензола, построение качественной шкалы групповых электроотрицательностей

Расчет равновесной геометрии и распределение электронной плотности молекул $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_k\text{-R-(CH}_2)_l\text{-CH}_3$, где $\text{R} = \text{S(O)}_2$, $0 \leq k, l \leq 8$, были получены с помощью программы GAUSSIAN 03 методом B3LYP/6-311++G(3df, 3pd). Заряды и объемы топологических атомов вычислены в постулатах квантовой теории атомов в молекулах (QTAIM) с использованием программы AIMALL.

Получено распределение электронной плотности 13 сульфонов, соответствующее минимуму потенциальной энергии (равновесной геометрии). Вычислены интегральные электронные характеристики групп CH_3 , CH_2 , SO_2 , NH_2 , C_6H_5 – заряды $q(\text{R})$, энергии $E(\text{R})$, объемы $V(\text{R})$ исследуемых соединений. Показано влияние группы SO_2 на интегральные электронные характеристики близлежащих групп CH_3 , CH_2 , NH_2 , C_6H_5 . Отмечены электронодонорные свойства SO_2 , по отношению к соседним CH_2 и CH_3 , проявляющиеся в уменьшении заряда и увеличении их объема. Определена дальность влияние сульфогруппы, которая затрагивает восемь групп CH_2 (по четыре ближайшие CH_2 в обе стороны вдоль алкильной цепи от SO_2).

Моделирование гидратации *L*-цистеина. Свойства критических точек.

Ткаченко Д.С. (студент, 3-го года обучения)

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

Моделирование гидратации проводилось поочередным «опусканием» молекул воды со стороны кислорода COOH *L*-цистеина (*L*-cys). Оптимизация геометрии гидратированных молекул (Рис.) проведена функционалом B3LYP, параметры электронной плотности ($\rho(r)$) в критических точках связевых путей (Таблица) получены в рамках «квантовой теории атомов в молекулах»

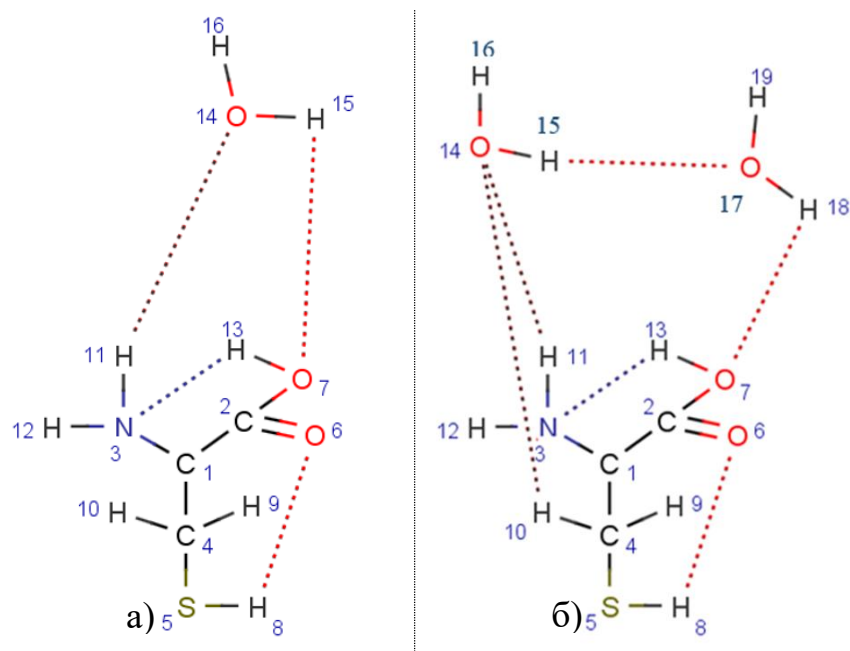


Рис.:
Молекула цистеина, гидратированная а) одной, б) двумя молекулами воды; пунктиром показаны слабые внутри- и межмолекулярные взаимодействия.

Добавление молекулы H_2O приводит как к геометрическим изменениям, так и перераспределению $\rho(r)$ внутри *L*-cys: удлиняются внутримолекулярные слабые взаимодействия (ВМСВ) $3\text{N}-13\text{H}$ и $6\text{O}-8\text{H}$. Из взаимодействий $\text{O}-\text{H}$ в случае а) самым прочным (по $\rho(r)$) – было ВМСВ $6\text{O}-8\text{H}$, в б) межмолекулярные водородные связи $15\text{H}-17\text{O}$, $11\text{H}-14\text{O}$ и $15\text{H}-17\text{O}$ (Таблица).

Таблица:

Электронная плотность ($\rho(r)$), эллиптичность (ε) и длина связующего пути (L) в критических точках слабых взаимодействий в гидратированном *L*-цистеине

Слабые взаимодействия	Одна молекула H_2O			Две молекулы H_2O		
	$\rho(r)$, а.е.	ε	L , Å	$\rho(r)$, а.е.	ε	L , Å
$3\text{N}-13\text{H}$	0,037	0,21	1,90	0,040	0,18	1,95
$11\text{H}-14\text{O}$	0,011	0,04	2,35	0,018	0,06	2,12
$6\text{O}-8\text{H}$	0,016	0,21	2,42	0,013	0,23	2,44
$15\text{H}-7\text{O}$	0,010	0,31	2,54	-	-	-
$15\text{H}-17\text{O}$	-	-	-	0,032	0,03	1,87
$18\text{H}-7\text{O}$	-	-	-	0,019	0,12	2,10
$14\text{O}-10\text{H}$	-	-	-	0,004	0,54	3,02

Интегральные электронные характеристики *L*-глутамина

Шелестова С.С. (студентка, 4 курс)

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

Материалы рассматривают электронные свойства трех конформеров *L*-глутамина (Рис.). Среди конформеров I–III энергетически наиболее выгодным является состояние I, его полная электронная энергия (E_{total}) минимальна. Конформеры I и II обладают слабыми внутримолекулярными взаимодействиями.

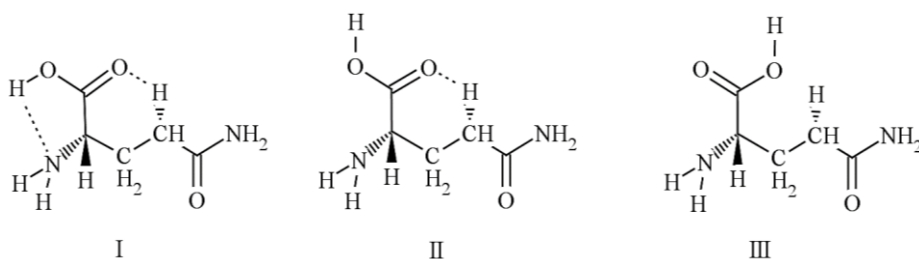


Рис. Конформеры *L*-глутамина: I – со слабыми взаимодействиями $N^{\cdots}H$ и $O^{\cdots}H$, II – с $O^{\cdots}H$, III – без слабых взаимодействий.

Внутримолекулярное слабое взаимодействие $N^{\cdots}H$ в I приводит к оттоку электронной плотности с $COOH$ в сторону первой аминогруппы, что сопровождается снижением $q(1NH_2)$, $V(1NH_2)$, $\Delta E(1NH_2)$ и увеличением $q(COOH)$ по сравнению с этими группами в II – III. Вторая ВС в I конформере между атомом кислорода $COOH$ и водородом $2CH_2$ групп приводит к обеднению $\rho(r)$ атомного бассейна $2CH_2$ и значительно увеличивает ее $q(2CH_2)$.

Таблица:

Интегральные электронные характеристики групп конформеров *L*-глутамина: заряд ($q(R)$), энергия ($E(R)$) и объем ($V(R)$).

	1COOH	CH	1NH ₂	1CH ₂	2CH ₂	CO	2NH ₂
$q(R)$, а.е.							
I	-0,125	0,369	-0,316	0,080	0,079	0,262	-0,350
II	-0,155	0,380	-0,269	0,106	0,052	0,265	-0,351
III	-0,145	0,376	-0,305	0,131	0,019	0,278	-0,354
$\Delta E(R)$							
I	0	0	340	40	0	0	0
II	-60	10	410	50	-20	0	0
III	-40	30	380	70	-40	0	0
$V(R)$, Å ³							
I	45,53	13,77	25,54	22,30	22,27	26,11	26,58
II	46,02	13,83	26,74	22,01	22,58	26,16	26,62
III	46,12	14,01	26,38	21,80	23,05	26,04	26,69

* нумерация групп $COOH$, CH_2 , и NH_2 указана слева направо по молекуле.

Заряды бензолзамещённых сульфонов

Шостак М.С. (студент, 4-го года обучения)

Нефедова И.А. (студент, 5-го года обучения)

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

Поиск равновесной геометрии четырёх соединений I - IV (Рис.) осуществлён методом B3LYP/6-311++G (3df, 3pd) в программе Gaussian 03. Интегральная электронная характеристика атомов – заряд – вычислена для атомных бассейнов в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» (QTAIM) с помощью программы AIMALL, суммирована в параметр ($q(R)$) функциональных групп.

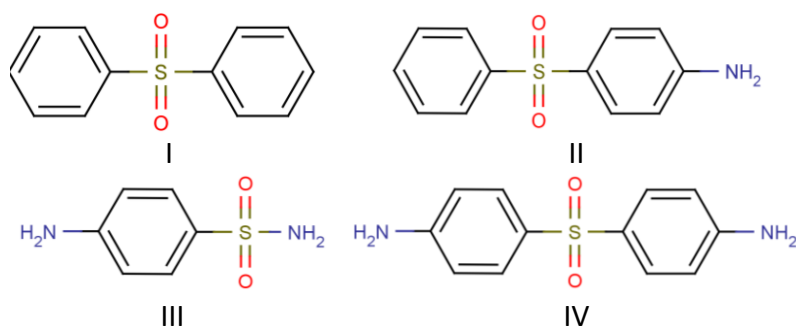


Рис:
Дифенилсульфон - I;
аминодифениламинсульфон-II;
сульфаниламид - III;
диаминодифенилсульфон - IV;

Сульфогруппа имеет некоторую подвижность электронной плотности ($\rho(r)$) в I - IV о чём свидетельствуют разные значения зарядов $q(SO_2)$. В III $q(SO_2)$ имеет положительное значение ($\rho(r) = 0,349$ а.е.), что говорит о её электронодонорных свойствах в данной молекуле, а отрицательные значения $q(SO_2)$ в I, II, IV ($\rho(r) = -0,082; -0,092; -1,485$ а.е.) свидетельствует о электроноакцепторных свойствах группы SO_2 . Так же электронодонорными свойствами обладают группы - $1C_6H_4$ и $2C_6H_4$, так как имеют положительный заряд группы ($q(R) = 0,041; 0,025; 0,435; 0,392$ а. е.).

Отрицательное значение заряда SO_2 в I, II, IV показывает электроноакцепторность этих групп. Таким образом при добавлении к дифенилсульфону амидной группы, заряд сульфо группы понижается на $q(SO_2) = 0.010$ а.е. относительно I соединения ($q(SO_2) = -0.082$). Атом серы группы сульфогруппы (SO_2) проявляет донорные свойства в структуре III, что видно по понижению заряда соседней NH_2 .

Сравнение 2-оксипиррола и 4-винил-2-оксипиррола в квантовой теории атомов в молекулах

Щенухина А.С. (магистр 1-го года обучения)

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

Осуществлён поиск равновесной геометрии методом B3LYP в квантовохимическом пакете программ Gaussian 03 для 2-оксипиррола (1) и 4-винил-2-оксипиррола (2) (Рис.). Заряды и объёмы атомов получены в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» (QTAIM) с использованием программы AIMALL. Структура 2 отличается от молекулы 1 наличием винила ($-\text{CH}=\text{CH}_2$), замещающего атом водорода у третьего углерода (3C).

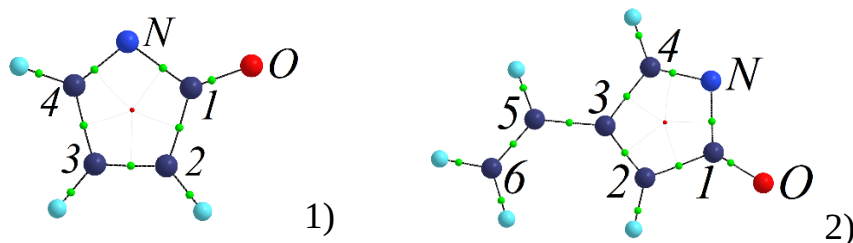


Рис: Молекула 2-оксипиррола (1) и 4-винил-2-оксипиррола (2).

Распределение электронной плотности ($\rho_b(r)$) в КТ(3;-1) цикла показывает, что N-4C прочнее, чем N-1C ($\rho_b(r)$ в N-4C на 0,115 а.е. выше, чем в N-1C). Величина $\rho_b(r)$ в КТ(3;-1) 2C-3C на 0,098 а.е. выше, чем в остальных КТ(3;-1) взаимодействий C-C по циклу и сравнима с 5C-6C винилового фрагмента структуры 2. Вместе с тем параметр $\rho_b(r)$ 3C-5C незначительно выше, чем 1C-2C и 3C-4C.

Наличие в соединении 2 винильного фрагмента приводит к перераспределению $\rho(r)$ ароматического кольца, сопровождающемуся значительным изменением интегральных электронных характеристик (заряда $q(R)$ и объёма $V(R)$) групп CO, CH и атома азота. Так $-\text{CH}=\text{CH}_2$ отдаёт долю своей $\rho(r)$ в атомные бассейны N, CO и 2CH понижая их $q(R)$ на 0,019 а.е., 0,013 а.е. и 0,011 а.е. соответственно. При этом объём азота практически не изменяется, тогда как $V(1\text{CO})$ увеличивается достаточно заметно – на 0,10 Å³, а $V(2\text{CH})$ уменьшается на 0,07 Å³.



Дополнительные материалы

Исследование комплексообразования цефтриаксона с Ni(II) и Co(II)

Исаев И.Д. (студент 4 курса)

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

Цефтриаксон – бета-лактамный антибиотик широкого спектра действия, часто используемый в медицинской практике для лечения инфекционных заболеваний.

Известно, что бета-лактамные антибиотики образуют устойчивые комплексы с катионами 3d-металлов. Металлокомплексы цефтриаксона ранее были изучены в твёрдом состоянии. В данной работе нами было проведено исследование комплексообразования цефтриаксона с катионами Ni(II) и Co(II) в водном растворе при различных соотношениях компонентов.

Для постановки эксперимента использовали препарат производства ОАО «Борисовский завод медицинских препаратов» и соли $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. При проведении исследований были получены системы с различным мольным соотношением компонентов (7 соотношений от 4:1 до 1:1 с шагом 0,5 моль для цефтриаксона). Для полученных систем записывали спектры на приборе СФ-2000.

Эксперименты показали, что при мольном соотношении цефтриаксона и металла 2:1 и более, образуются хорошо растворимые яркоокрашенные комплексы. При переходе от соотношения 2:1 к 1:1 наблюдается увеличение вязкости растворов, которые при соотношении 1:1 превращаются в тиксотропные гели. Литературный поиск показал, что эффект гелеобразования в растворах металлокомплексов цефтриаксона наблюдается нами впервые.



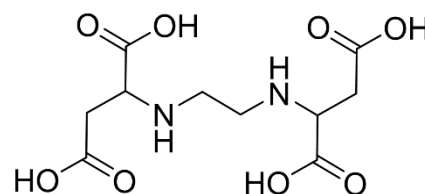
Компьютерное моделирование оптических изомеров

этилендиамин-N,N'-диянтарной кислоты и их кальциевых комплексов

Торопыгина К.О. (студентка магистратуры 2 курса)

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

Молекулы этилендиамин-N,N'-диянтарной кислоты (ЭДДЯК, H_4Edds) имеет два асимметрических атома углерода и может существовать в виде трёх оптических изомеров. При



кислотности раствора, близкой к нейтральной, ЭДДЯК существует в виде цвиттер-ионов.

Методом DFT / B3LYP / 6-31G**++ рассчитана геометрия и энергия цвиттер-ионов $H_2Edds-RR^{2-}$, $H_2Edds-RS^{2-}$, $H_2Edds-SS^{2-}$ и изомерного им цвиттер-иона этилендиаминтетрауксусной кислоты H_2Edta^{2-} . Энергия HOMO и LUMO орбиталей тех же объектов рассчитана без изменения геометрии методом DFT / TPSS / 6-31G**++. Теми же методами рассчитана геометрия, энергия и энергия HOMO и LUMO орбиталей кальциевых комплексов $[CaEdds-RR]^{2-}$, $[CaEdds-RS]^{2-}$, $[CaEdds-SS]^{2-}$, $[CaEdta]^{2-}$. Показано, что для всех изомеров ЭДДЯК энергетическая щель $E_g = E_{LUMO} - E_{HOMO}$ заметно меньше, чем для ЭДТА. Таким образом, все изомеры ЭДДЯК будут поглощать свет с большей длиной волны, чем ЭДТА, и разрушаться в более мягких условиях, чем ЭДТА. Это вполне согласуется с экспериментальными данными о сравнительной стабильности растворов ЭДТА и ЭДДЯК к действию УФ излучения. Значения E_g для кальциевых комплексов меньше, чем для соответствующих цвиттер-ионов незакомплексованных лигандов. Можно предполагать, что кальциевые комплексоны будут поглощать свет с большей длиной волны, чем незакомплексованные лиганды. Соответственно, связывание в комплекс с кальцием облегчает распад комплексонов под действием УФ излучения.

Эксперименты выполнены на приборах Тверского регионального межведомственного центра коллективного пользования.



Супрамолекулярные гидрогели на основе аминокислоты L-цистеин, нитрата серебра и низкомолекулярного хитозана

Зеников Г.Р. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Гидрогели супрамолекулярной природы являются перспективными материалами для производства лекарственных форм, применения в промышленности.

Синтезированы гидрогели на основе ЦСР-хитозан- SO_4^{2-} растворов, имеющие супрамолекулярную природу. Установлено, что гидрогели стабильны во времени в узком концентрационном диапазоне исходных компонентов. Вибрационной вискозиметрией доказано, что в пределах данного диапазона увеличение концентрации инициатора гелеобразования приводит к увеличению общей вязкости системы. При этом общая стабильность гидрогелей падает. Методом ДСР установлено, что введение сульфат-аниона в ЦСР вызывает рост размеров агрегатов с течением времени, что приводит к формированию фрагментов пространственной гель-сетки.

На микрофотографиях гидрогелей, полученных с помощью СЭМ и ПЭМ обнаружено, что ХЗ способствует формированию волокнообразных структур, в которые встроены наночастицы серебра. С помощью элементного анализа установлено, что эти у этих волокон повышенное содержание атомов углерода. Скорее всего, в них содержится хитозан.

На основе данных УФ-спектроскопии была сделана гипотеза о механизме действия различных катионов и хитозана на цистеин-серебряный раствор. Хитозан, являясь поликатионом, вносит дестабилизирующий эффект в систему цистеинсеребряного раствора, имеющего положительный заряд, из-за чего происходит уменьшение концентрации наночастиц серебра, что можно увидеть из данных УФ-спектроскопии.



Влияние бромид- и фторид-анионов на процессы самосборки в L-цистеин-нитрат серебра системах

Механников И.А. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Гидрогели из низкомолекулярных веществ представляют особый научный интерес. Взаимодействия между звеньями данных цепочек изучаются супрамолекулярной химией. Отметим, что супрамолекулярные гидрогели могут широко использоваться в фармакологии и промышленности.

Синтезированы гидрогели на основе серосодержащей аминокислоты L-cys, нитрата серебра, бромид- и фторид-анионов. Исследован концентрационный диапазон системы на основе L-цистеина и нитрата серебра и определена точка гелеобразования. Полученные гидрогели не обладают такой же устойчивостью, как и системы с хлоридами. Методом вибрационной вискозиметрии обнаружено, что вязкость получаемых систем при увеличении концентрации бромида калия в системе проходит через максимум в определённой концентрации соли, а потом уменьшается. В электронных спектрах данных гидрогелей можно отметить присутствие полос 310 и 390 нм, характерных для ЦСР. Однако уже при дальнейшем введении большего количества бромида в систему эти полосы исчезают. При этом появляется новая в области 350 нм которая растёт в определенном концентрационном диапазоне. Предположительно, это связано с изменением электронной конфигурации цепочек из-за повышенного сродства галогенид-аниона к серебру. Распределение частиц по размерам, полученное методом ДСР, показывает, что и в ЦСР в системе после добавления электролита сохраняется три основных группы агрегатов по 10, 60 и 400 нм. Добавление электролита инициирует агрегацию уже имеющихся частиц. С помощью микрофотографий, полученных методом СЭМ, можно отметить, что введение галогенида провоцирует образование сферообразных частиц. При увеличении концентрации галогенидов эти агрегаты разрушаются.