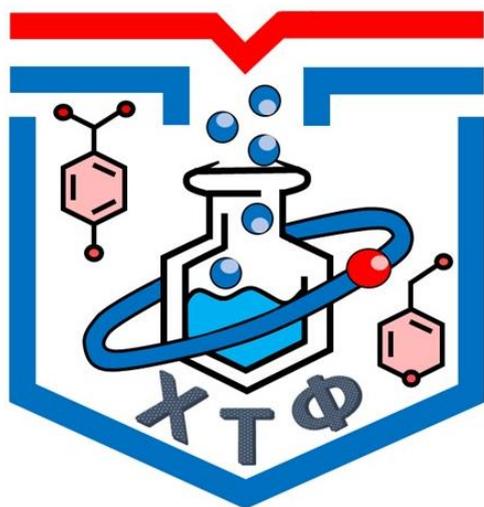


Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Тверской государственный университет»



XXIII НАУЧНАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ
АСПИРАНТОВ И
СТУДЕНТОВ ХИМИКО-
ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО
ФАКУЛЬТЕТА

Тезисы докладов

ПОСВЯЩЕНА СТО-
ДЕВЯНОСТОЛЕТИЮ
СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ
Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА

27 мая, Тверь
2024 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 2024 года в количестве 67 материалов. Доклады сгруппированы по секциям, соответствующим научным направлениям кафедр.



Оглавление

Секция биохимии и биотехнологий 6

1. [Булкина А.Э.](#) Мармеладные изделия функционального назначения 7
2. [Вольга А.А.](#) Нетрадиционное сырье в производстве конфет типа пралине .. 8
3. [Дышкант Е.Е.](#) Влияние CO₂-шротов мяты перечной на качественные характеристики и пищевую ценность сырцовых пряничных изделий..... 9
4. [Ефимов Е.В.](#) Технология производства мучных кондитерских изделий на примере затяжного печенья с добавлением амарантовой муки 10
5. [Киреев Е.С.](#) Влияние дополнительного морковного сырья различной технологической обработки на качество готовых макаронных изделий 11
6. [Кочихин Д.Д.](#) Факторы, влияющие на реологические свойства теста батона «Нарезной» 12
7. [Моисеева Е.Н.](#) Разработка балльной шкалы для оценки эстетических показателей качества тортов 13
8. [Орловская А.А.](#) Применение кедровой обезжиренной муки в технологии хлебобулочных изделий 14
9. [Парфентьева В.В.](#) Сравнительная оценка органолептических показателей кексов с использованием нетрадиционных видов муки 15
10. [Рожков А.П.](#) Технология производства пастилы с использованием нетрадиционного ягодного сырья..... 16

Секция неорганической и аналитической химии.... 17

11. [Алябина Н.В.](#) Физико-химические характеристики пенообразователей, модифицированных водорастворимыми полимерами 18
12. [Белавенцева О.А.](#) Идентификация лекарственного препарата сложного состава методом ИК-спектроскопии..... 19
13. [Беляева Е.А.](#) Квантовохимический расчёт структуры нанокластера Ag₆.... 20
14. [Варзар А.А.](#) Создание ионоселективного электрода для анализа цефуроксима 21
15. [Гигава А.М.](#) Компьютерное моделирование методом DFT комплексов Pt(II) с производными пиридина..... 22
16. [Демидова Н.В.](#) Новая методика определения аскорбиновой кислоты..... 23
17. [Ермолаева А.А.](#) DFT расчёт молекул фталоцианиновых комплексов Mg(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Pd(II) 24
18. [Изоитко Д.В.](#) Квантово-химическое моделирование олигомеров цистеината серебра..... 25



19.	<u>Козлова Е.Д.</u> ИК спектр цефтибутена: экспериментальные данные и квантовохимический расчёт.....	26
20.	<u>Кравец О.Б.</u> Физико-химические методы анализа комбинированных лекарственных средств.....	27
21.	<u>Марулева А.Е.</u> Исследование комплексообразования иминодиянтарной кислоты с борной кислотой.....	28
22.	<u>Плахотник В.А.</u> Исследование соединений кальция в силикатобетоне.....	29
23.	<u>Скобин М.И.</u> Исследование долевого распределения частиц в водных системах лантаноид-гепарин.....	30
24.	<u>Сутугина К.А.</u> Исследование комплексов Cu(II) и Ag(I) с цефуроксимом	31
25.	<u>Сухорукова А.А.</u> Потенциометрические характеристики ионоселективного электрода с откликом на амоксициллин	32
26.	<u>Топытчак А.М.</u> Исследование структурных параметров $\text{Co}(\text{S}_2\text{CNEt}_2)_3$ методом DFT	33
27.	<u>Удалова А.С.</u> Квантово-химическое моделирование смешанно-лигандных комплексов переходных металлов с 1,10-фенантролином	34
28.	<u>Хомякова К.Н.</u> Определение фосфора в клубнях картофеля.....	35
29.	<u>Хохлова А.В.</u> Ионоселективный электрод для определения новокаинамида потенциометрическим методом.....	36
30.	<u>Шевченко М.А.</u> Вольтамперометрический анализ пищевых добавок на содержание йода.....	37
31.	<u>Юлова А.А.</u> Квантово-химическое исследование комплексов переходных металлов с основаниями Шиффа группы N_2O_2	38
32.	<u>Яковлева В.Р.</u> Определение тиамин гидрохлорида в лекарственных формах	39
Секция органической химии		40
33.	<u>Александрова А.И.</u> Влияние строения оксосоединений на свойства фенилгидразонов	41
34.	<u>Арефьев А.А.</u> Влияние структуры хлорцинкатных ионных жидкостей на размер квантовых точек сульфида цинка	42
35.	<u>Белякова А.С.</u> Исследование пеногасящей способности бинарных смесей поверхностно-активных веществ.....	43
36.	<u>Богданова Е.М.</u> Получение и свойства сложного эфира пентаэритрита и лауриновой кислоты	44
37.	<u>Васильева Д.В.</u> Применение диоксида титана в качестве катализатора при ацилировании неонола 9-12	45
38.	<u>Веролайн В.А.</u> Исследование амфотерных поверхностно-активных веществ в качестве стабилизаторов эмульсий	46



39.	<u>Воробьева А.О.</u> Термическая стабильность металлных ионных жидкостей – тетрахлорманганатов N-алкилпиридиния	47
40.	<u>Грязнов А.С.</u> Аммониевые ионные жидкости с ферроценилметильным радикалом в катионе	48
41.	<u>Девятова С.А.</u> Получение и исследование свойств аскорбилпальмитата ..	49
42.	<u>Егорова А.Д.</u> Ацилпроизводные Синтанола АЛМ-7	50
43.	<u>Егорова У.В.</u> Электропроводность растворов дицианамидов N-алкилпиридиния	51
44.	<u>Камардина Ю.С.</u> Амидообразование с участием ангидридов карбоновых кислот и ароматических аминов	52
45.	<u>Кафтанов А.Д.</u> Синтез и термическая стабильность металлных ионных жидкостей на основе четвертичных солей аммония и пиридиния	53
46.	<u>Петров М.Р.</u> Синтез гетероциклических соединений по модифицированной реакции Биджинелли.....	54
47.	<u>Рылина К.Д.</u> Получение производных 2-аминопентандиовой кислоты и исследование их свойств	55
48.	<u>Силина М.А.</u> Изучение взаимодействия ароматических нитрозосоединений с C-H – кислотами	56
49.	<u>Сорокина П.А.</u> Синтез сложных эфиров на основе <i>n</i> -гидроксibenзойной кислоты.....	57
50.	<u>Тарабанова А.А.</u> Поверхностная активность цитрилглицерида.....	58
51.	<u>Цветкова И.В.</u> Синтез и свойства металлных ионных жидкостей	59
52.	<u>Шамарина К.А.</u> Исследование микрогеометрических параметров полиэтиленсукцината методом Roughness 3D Analysis	60
Секция физической химии.....		61
53.	<u>Бакалюк С.А.</u> DFT рассмотрение конформеров ацетилцистеина.....	62
54.	<u>Барсукова В.В.</u> Топологический подход в исследовании физико-химических свойств карбоновых кислот	63
55.	<u>Киреева Д.С.</u> Свойства критических точек слабых взаимодействий. Моделирование гидратации l-цистеина	64
56.	<u>Кузьпелев Н.А.</u> Спектральные методы контроля синтеза и агрегационной стабильности наночастиц серебра, синтезированных с использованием водных экстрактов растений	65
57.	<u>Макаров С.В.</u> Топологический подход в изучении энтальпии образования тиоэфиров	66
58.	<u>Макеев И.С.</u> Влияние морфологии прекурсоров на физико-механические свойства ориентированной пленочной нити сверхвысокомолекулярного полиэтилена.....	67



59.	<u>Неелова А.В., Полякова Е.Э.</u> Золь-гель переход в системе L-цистеин/ AgNO_3 , инициированный фторид-анионом.....	68
60.	<u>Салазкин Н.С.</u> Зеленый» синтез наночастиц серебра и их физико-химические свойства.....	69
61.	<u>Хижняк С.Б.</u> Топологический подход в изучении амидов	70
	Дополнительные материалы	71
62.	<u>Васильева К.Д.</u> Квантовохимический расчёт электронного спектра поглощения фталоцианата магния	71
63.	<u>Джабраилова А.Г.</u> Абсорбция пиридина из газовой фазы кристаллическим сульфатом меди	72
64.	<u>Зверева А.А.</u> Квантовохимический расчёт структуры олигомеров анилина.....	70
65.	<u>Короткова А.В.</u> Тяжелые металлы в водах реки Волга	70
66.	<u>Удовенко В.П.</u> Количественное определение кофеина в чае	70
67.	<u>Черепанова М.В.</u> Количественное определение фторхинолонов в лекарственных формах	70



Секция биохимии и биотехнологий



Мармеладные изделия функционального назначения

Булкина А.Э. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Функциональные продукты питания – такие продукты, которые кроме вкусовых качеств и пищевой ценности имеют физиологическое воздействие на организм человека.

В качестве перспективного объекта для создания на его основе функционального пищевого продукта лечебно-профилактической направленности я выбрала мармелад. В данной работе в качестве пищевой добавки в рецептуру мармелада вводится комплексная пищевая добавка «Премикс витаминный DELAR».

В процессе разработки рецептуры одним из основных нормативных документов, является ТР ТС 022/2011 «Пищевая продукция в части ее маркировки» [1]. Исходя из рекомендуемой дозировки, было принято решение произвести несколько образцов мармелада.

После проведения испытаний были получены следующие результаты (таблица №1). Исходя из полученных результатов можно сделать следующий вывод, что при дозировке витаминного комплекса 0,57кг/1000 кг ГП, в мармеладе остаются следующие витамины.

Таблица №1

Наименование витаминов	НД на методы испытания	Единицы измерения	Результаты испытаний
В1	ГОСТ 32903-2014	мг/100г	0,29
В5	ГОСТ 32903-2014	мг/100г	менее 0,6
В6	ГОСТ 32903-2014	мг/100г	менее 12,5
В3	ГОСТ 32903-2014	мг/100г	менее 0,6

1. ТР ТС 022/2011 Технический регламент Таможенного союза. «Пищевая продукция в части ее маркировки» от 9.12.2011 г. №881.
2. ГОСТ 6442-2014 «Мармелад. Общие технические условия» [Электронный ресурс]. – Введ. 2016-01-01. – М: Стандартинформ, 2019. 6с.



Нетрадиционное сырье в производстве конфет типа пралине

Вольга А.А. (бакалавриат, 4-го года обучения)

Научный руководитель: зав. кафедрой, доцент, Прутенская Е.А.

Конфетная масса типа широко используется не только для изготовления конфет, но и начинок. Однако, в настоящее время растет стоимость основного компонента конфет- какао бобов, из-за неустойчивости культуры к заболеваниям и условиям к окружающей среде. В связи с этим, актуальным является разработка рецептуры конфет типа с пралине с заменителем какао бобов - кэробом. К преимуществам кэроба относятся: отсутствие кофеина, теобромина, содержание белка в 4 раза меньше, чем в какао и концентрация углеводов практически 50%. Все это позитивно влияет на качество конфет. Для усиления вкуса и источника волокон в начинку добавляли вяленые ягоды и перец. Вяленая вишня благодаря специальной технологии сушки и отсутствию термического воздействия сохранила все свои полезные компоненты.

В результате эксперимента была рассчитана рецептура с заменой. Затем изготовлены конфеты по классической и разработанной рецептуре. В процессе работы была проверена массовая доля влаги двух образцов. Проведенные расчёты показали, что в конфете «Журавлиная ягода» количество белка уменьшилось на 39%, содержание жира увеличилось на 2%, количество углеводов увеличилось на 54%, а энергетическая ценность уменьшилось на 15%. В конфетной массе типа пралине «Костянка», в сравнение с классической рецептурой, количество белка уменьшилось на 38%, содержание жира увеличилось на 2%, количество углеводов увеличилось на 13%, а энергетическая ценность уменьшилось на 16%.

Таким образом, разработанные конфеты могут рекомендованы покупателям, с высокой аллергенностью и высоко требовательными к количеству калорий.



Влияние CO₂-шротов мяты перечной на качественные характеристики и пищевую ценность сырцовых пряничных изделий

Дышкант Е.Е. (студент, 4-го года обучения)

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

Применение нетрадиционного сырья в производстве пищевых продуктов, особенно в кондитерской отрасли, вызывает значительный интерес среди исследователей и производителей. CO₂-шроты, получаемые методом сверхкритической экстракции, обладают уникальными свойствами, благодаря которым они могут использоваться в качестве ингредиента для улучшения органолептических и пищевых характеристик кондитерских изделий. CO₂-шроты мяты перечной сохраняют в себе высокое содержание эфирных масел, клетчатки, микроэлементов и полифенолов [1].

При экспериментальной выпечке сырцовых пряников были введены CO₂ шроты в количестве 5% от общего веса муки. Данная добавка позволила сохранить структурную целостность теста, не ухудшая его обрабатываемость. При этом добавление CO₂ шротов мяты увеличило содержание диетических волокон, что делает пряники не только более питательными, но и способствует долгосрочному насыщению и улучшению пищеварения.

В работе была проведена оценка органолептических характеристик с использованием методов сенсорного анализа. Как показали результаты, пряники с добавлением CO₂-шрота мяты перечной получили высокие оценки за мятный аромат и приятную текстуру. Кроме того, был проведен анализ влияния CO₂-шротов на сроки и условия хранения пряников. Благодаря антимикробным свойствам мяты, пряники демонстрируют лучшую устойчивость к порче и меньшую склонность к высыханию, что позволяет увеличить срок их годности.

1. Попова И.В., Новикова А.А. "Использование сверхкритической CO₂-экстракции в пищевой промышленности", Журнал научных исследований, 2020. - С. 112-119.



Технология производства мучных кондитерских изделий на примере затяжного печенья с добавлением амарантовой муки

Ефимов Е.В. (студент, 4-го года обучения)

Научный руководитель: ст. преподаватель Кудряшова Н.А.

Целью исследования является изучение технологии производства одного из видов мучного кондитерского изделия - печенья затяжного с добавлением амарантовой муки.

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% [1].

Амарантовая мука - продукт переработки семян амаранта - ценное продовольственное сырье, обладающее уникальным химическим составом.

Введение 10-30% амарантовой муки в рецептуру печенья из смеси пшеничной муки практически не повлияло на его органолептические свойства, не вызывало понижение потребительских свойств и не ухудшали внешний вид печенья и соответствуют ГОСТ 24901-2014.

По физико-химическим показателям качества исследованного печенья образцов с добавлением амарантовой муки соответствуют ГОСТ 24901-2014.

Расчет пищевой и энергетической ценности показал, что с увеличением введения амарантовой муки энергетическая ценность изделия, исходя из химического состава сырья незначительно уменьшается.

Расчет биологической ценности затяжного печенья с добавлением амарантовой муки счетным методом показал, что при добавлении амарантовой муки БЦ увеличивается.

1. ГОСТ 24901-2014 Печенье. Общие технические условия – Москва: Стандартинформ, 2017. – 12



Влияние дополнительного морковного сырья различной технологической обработки на качество готовых макаронных изделий

Киреев Е.С. (студент 4 курса)

Научный руководитель: к.б.н., доцент Прутенская Е.А.

В данной работе была поставлена цель изучить как ведет себя дополнительное сырье различной технологической обработки в макаронных изделиях на примере моркови в готовых образцах присутствующих на рынке.

Для проведения оценки качества были изготовлены 5 образцов: контрольный без добавления моркови, образцы с добавлением 3% на сухое вещество и 5%. Данные представлены в таблице №1 Физико-химический анализ проводился в соответствии ГОСТа 31743-2017 пункт 5.2.3. таблице №1 по следующим показателям для определения таких показателей как массовая доля золы на а.с.в, содержание белка, кислотность. Данные представлены в таблице №1 [1].

Таблица №1 Физико-химические показатели качества образцов.

Наименование показателя	Без добавок	3% сока	3% сушеной	5% сушеной	5% сока
Общая кислотность град.	2,0	2,3	2,5	3,2	2,7
Зола в пересчете на а.с.в %	2,21	2,25	2,43	2,54	2,42
Содержание влаги %	8,9	4,8	4,9	5,2	5,4

1. ГОСТ 31743-2017 Изделия макаронные. Общие технические условия: дата введения 2019-01-01. – Москва: Стандартинформ, 2023. – 9 с.



Факторы, влияющие на реологические свойства теста батона «Нарезной»

Кочихин Д.Д. (бакалавр, 4-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.б.н. Прутенская Е.А.

Батон «Нарезной» – подовое штучное изделие, с пятью косыми надрезами, изготовленное из пшеничной хлебопекарной муки высшего сорта, массой нетто 400 грамм.

Цель работы: изучить влияние комплексного улучшителя сырья на реологические свойства теста батона «Нарезного». Для достижения цели были изготовлены пробные изделия и учитывали их реологические свойства. Для эксперимента использовали улучшители окислительного и восстановительного действия.

Реологические свойства теста – это комплексный показатель, который описывает поведение и состояние теста при замесе и в течение всего технологического процесса. Реологические свойства муки и теста не регламентируются нормативными документами. К этим свойствам относят: эластичность, растяжимость, вязкость, сопротивление, деформации. При проведении пробной выпечки учитывались влияние основных ингредиентов на качество готового продукта: мука – чем больше в муке пшеничной хлебопекарной сильной клейковины (более 28 %), тем лучше набухают белковые вещества, в следствии чего тесто поднимается в разы быстрее и сильнее; вода ускоряет действие ферментов, активно развивает жизнедеятельность бродильной микрофлоры. Растительные масла – добавляются для повышения качества и пищевой ценности, связываются с белками и крахмалом, увеличивают объем изделия и повышает эластичность мякиша. Сахар белый – при его внесении получается разрыхленный мякиш, более яркая окрашенная корка.

Как показал эксперимент, внесение комплексных улучшителей приводит к увеличению пористости, эластичности теста.



Разработка балльной шкалы для оценки эстетических показателей качества тортов

Моисеева Е.Н. (бакалавр, 4-го года обучения)

Научный руководитель: ст. преподаватель Брославская М.Н.

При исследовании эстетических показателей качества используются балльные шкалы, которые приводятся согласно определенному признаку с оцениваемыми объектами. Цель – Разработать балльную шкалу для определения эстетических показателей качества тортов. Исследование проводилось в три этапа. Первый: определение эстетических показателей, описание их характеристик, построение градации баллов. Второй: расчет отклонений баллов, определение их характеристик. Третий: проведение балльной оценки эстетических показателей качества пяти образцов торта «Киевский» различных производителей. Результаты: 1 место – образец № 2 «У Палыча» 98 баллов. 2 место – образец № 3 «Север-Метрополь» 97 баллов. 3 место – образец № 1 «Венский Цех» 96 баллов. 4 место – образец № 4 «Филли-Бейкер» 94 балла. 5 место – образец № 5 «Вкус-Вилл» 74 балла. Первые четыре образца получили статус: «Фирменный торт очень высокого качества». Пятый образец – «Фирменный торт высокого качества».

Данная балльная шкала позволяет определить уровень эстетического и художественного оформления в целом. Данная шкала была апробирована на АО «Волжский пекарь» г. Тверь.

1. Моисеева Е. Н., Брославская М.Н. Использование подсистемы 5S «Бережливое производство» при анализе художественного оформления торта «Киевский» различных производителей// Материал: 9-ая Международная молодежная научно-практическая конференция «Качество продукции: контроль, управление, повышение, планирование» [Курск], 18 ноября 2022 года. – С.131-135.



Применение кедровой обезжиренной муки в технологии хлебобулочных изделий

Орловская А.А. (студентка, 4-го года обучения)

Научный руководитель: ст. преподаватель Кудряшова Н.А.

Цель работы: повышение пищевой ценности и обогащение питательными веществами хлебобулочных изделий.

Хлебобулочное изделие - изделие, вырабатываемое из основного сырья для хлебобулочного изделия или основного сырья для хлебобулочного изделия и дополнительного сырья для хлебобулочного изделия [1].

В качестве нетрадиционного растительного сырья в технологии хлебобулочных изделий используют побочные продукты переработки кедрового ореха – мука из жмыха после получения масла [2]. Кедровая мука применяется в качестве вкусовой добавки и обогатителя микроэлементами и витаминами в производстве пищевых продуктов. Кедровая мука обезжиренная - порошок светло-кремового цвета с легким ореховым ароматом, сладковатым на вкус [3].

1. ГОСТ 32677 – 2014 «Изделия хлебобулочные. Термины и определения». – Введ. 2015-05-01.–Москва :Стандартинформ, 2015. 1 с. - [Электронный ресурс]. - URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200113580>
2. Нилова, Л. П. Влияние муки кедрового ореха на биохимический состав изделий из пшеничной муки / Л. П. Нилова, Т. В. Шеленга, В. В. Васипов // Научно-практический журнал. – Орел : Орловский государственный университет, 2017. – С. 3 – 5.
3. Муканова, М. Ж. Кедровая мука как дополнительный функциональный продукт / М. Ж. Муканова, А. С. Серикова. - Астана : Казахский университет технологии и бизнеса.



Сравнительная оценка органолептических показателей кексов с использованием нетрадиционных видов муки

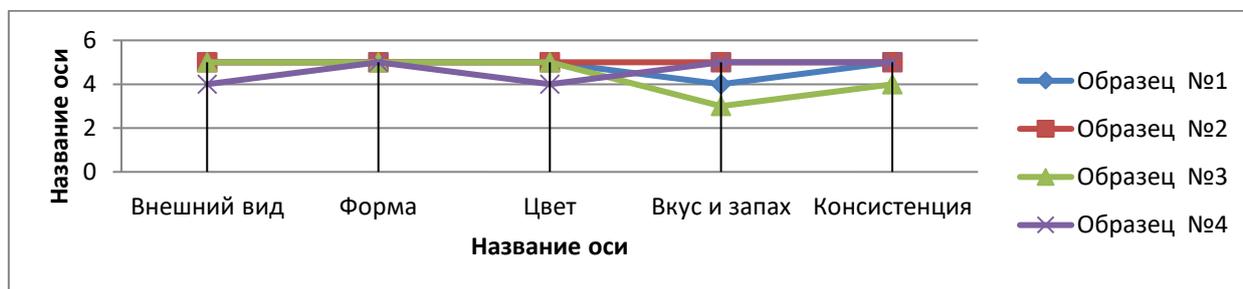
Парфентьева В.В. (студент, 4-го года обучения)

Научный руководитель: к.б.н., доцент Прутенская Е.А.

Качество кексов определяется многими органолептическими показателями. Одним из значимых показателей является объем и структура готового изделия, характер пористости, которая зависит от технологии приготовления теста. Для определения оценки качества изделий мы изготовили четыре образца с частичной заменой пшеничную муку на нетрадиционные виды муки.

			
Образец № 1 Классический 100% пшеничная мука	Образец № 2 10% амарантовой муки	Образец № 3 20% овсяной муки	Образец № 4 15 % льняной муки

Для определения потребительских свойств изученных образцов была проведена сравнительная оценка органолептических показателей по пятибалльной шкале, результаты представлены на графике.



Видно, что по всем показателем лидирует образец № 2, хотя другие образцы не сильно уступает по потребительским свойствам.

1. ГОСТ 15052-2014 «Кексы. Общие технические условия»



Технология производства пастилы с использованием нетрадиционного ягодного сырья

Рожков А.П. (студент, 4-го года обучения)

Научные руководители: к.б.н., доц. Прутенская Е.А., ст. преп. Кудряшова Н.А.

Цель работы: изучить технологию производства пастилы с использованием нетрадиционного ягодного сырья и провести оценку качества готовых изделий.

Пастила разрабатывалась с использованием различных пропорций ягодного сырья: Образец №1- пастила с добавлением 95% яблочного пюре и 5% пюре ягод калины, Образец №2- пастила с добавлением 90% яблочного пюре и 10% пюре ягод калины, Образец №3- пастила с добавлением 85% яблочного пюре и 15% пюре ягод калины и Образец №4 пастила классическая «Ванильная».

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, №4

Наименование показателя	Соответствие ГОСТ 6441-2014			
	Образец №1 пастила с добавлением 5% пюре ягод калины	Образец №2 пастила с добавлением 10% пюре ягод калины	Образец №3 пастила с добавлением 15% пюре ягод калины	Образец №4 пастила классическая «Ванильная»
вкус и запах	соответствует	соответствует	соответствует	соответствует
цвет	соответствует	соответствует	соответствует	соответствует
консистенция	соответствует	соответствует	соответствует	соответствует
структура	соответствует	соответствует	соответствует	соответствует
форма	соответствует	соответствует	соответствует	соответствует
поверхность	соответствует	соответствует	соответствует	соответствует

В результате физико-химической оценки установлено, что все образцы полностью соответствуют требованиям ГОСТ 6441-2014.

1. ГОСТ 6441-2014 Изделия кондитерские пастильные. Общие технические условия.



Секция неорганической и аналитической химии



Физико-химические характеристики пенообразователей, модифицированных водорастворимыми полимерами

Алябина Н.В. (аспирант 4 года обучения)

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

Обеспечение пожарной безопасности на промышленных объектах, в том числе на объектах нефтяного комплекса, обеспечивается в первую очередь наличием на объектах фторсинтетического пенообразователя АFFF или АFFF/AR.

При разработке рецептуры фторсинтетического пенообразователя, являющегося основным огнетушащим средством при горении нефтепродуктов и других горючих жидкостей, необходимой мерой для усиления пленкообразующей способности и стабилизации пенообразователя является введение в рецептуру водорастворимых полимеров.

Целью данной работы была разработка биологически мягкого фторсинтетического пенообразователя для пожаротушения типа АFFF, соответствующего всем параметрам ГОСТ Р 50588 и ГОСТ Р 53280.2.

В результате экспериментов:

1. Были подобраны процентные содержания фторПАВ, углеводородных ПАВ, растворителя.
2. Для тушения смесевых топлив был добавлен полимерный компонент, который с одной стороны повышает термическую устойчивость пены, а с другой замедляет процесс растекания и ведет к накоплению избыточного слоя пены.
3. При вводе в систему 0,2 % водорастворимого полимера (ксантановой камеди) система становилась стабильной и стала отвечать все требованиям ГОСТ и реальной действительности при тушении пожаров. Полученная система была проанализирована на все показатели ГОСТ.

Список литературы:

1. ТУ 2412-003-78148123-2005 с изм. 1-7. Пенообразователь ПО-РЗФ.



Идентификация лекарственного препарата сложного состава методом ИК-спектроскопии

Белавенцева О.А. (специалист, 5 курс)

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

Развитие фармацевтической индустрии направлено на создание инновационных и безопасных лекарственных средств, способных улучшить здоровье и благополучие людей. Таким образом, поиск и создание новых лекарственных средств является важным этапом в развитии медицины и фармацевтики, способствуя улучшению качества жизни и продлению человеческого существования.

В качестве объекта исследования был выбран препарат ОАО Цитрамон П «Уралбиофарм», Россия, г. Екатеринбург.

Предварительно изучены ИК-спектры в дисках калия бромида парацетамола, ацетилсалициловой кислоты, кофеина и некоторых вспомогательных веществ исследуемого препарата. После на суммарном ИК-спектре выявлены характеристические полосы данных компонентов.

В области «отпечатков пальцев» были обнаружены участки ИК-спектров, которые не перекрываются другими полосами веществ и стабильно проявляющиеся на суммарном ИК-спектре. Это полосы поглощения парацетамола при 1506 см^{-1} и 1107 см^{-1} , ацетилсалициловой кислоты – при 1094 см^{-1} и 1307 см^{-1} . Они сохраняются независимо от количественного содержания указанных веществ и подтверждают их присутствие в таблетках. Полосы поглощения кофеина в диапазоне от 400 до 1800 см^{-1} перекрываются по всему спектру полосами поглощения парацетамола и ацетилсалициловой кислоты и могут быть идентифицированы только при длине волны 755 см^{-1} .

Было установлено, что суммарные ИК-спектры позволяют определить индивидуальные вещества при совместном присутствии в многокомпонентных лекарственных средствах без предварительного разделения.

1. Арзамасцев А.П. Фармацевтическая химия / А.П. Арзамасцев – М: РАМН, 2004. – 662 с.

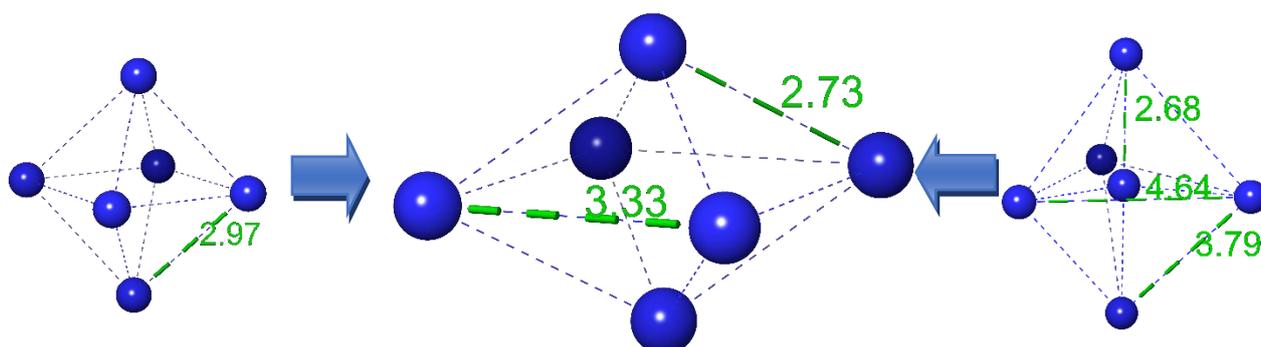


Квантовохимический расчёт структуры нанокластера Ag_6

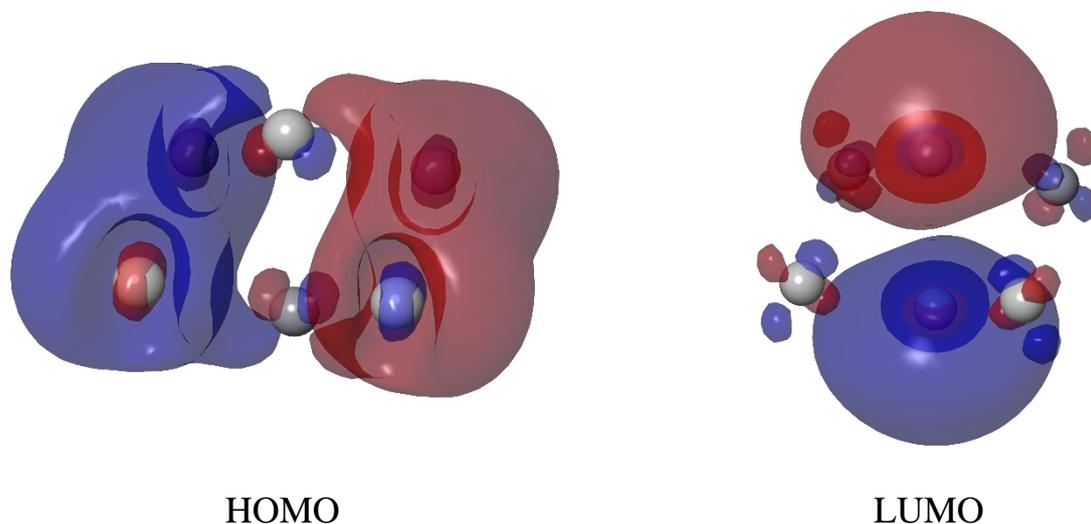
Беляева Е.А. (студентка, 5 курс)

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

Структура нанокластера Ag_6 рассчитана методом DFT с использованием функционала PW6B95-D3(BJ) и базиса LACVP+, учитывающего диффузные волновые функции и влияние внутренних электронных оболочек (эффективного потенциала остова, ECP) на внешние электроны. Расчёт проведён из двух начальных состояний: 1. Шесть атомов серебра расположены в вершинах октаэдра; 2. Пять атомов серебра расположены в вершинах тригональной бипирамиды и один атом расположен в центре многогранника. В обоих случаях расчёт приводит к одинаковой структуре, в которой атомы серебра расположены по вершинам тетрагональной бипирамиды:



Расчёт показал образование молекулярных орбиталей с участием d-электронов:



НОМО

LUMO



Создание ионоселективного электрода для анализа цефуроксима

Варзар А.А. (студентка 2-го года обучения)

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

На основе комплекса цефуроксима (Cfr) с фофорномолибденовой кислотой (ФМК) изготовили электрод и проверили его основные свойства, которые представлены в таблице 1.

Таблица 1.

Основные метрологические характеристики ИСЭ

Крутизна электродной функции, мВ/рС	Диапазон линейности, рС	Нижний предел обнаружения, М	Рабочий диапазон, рН	Время отклика, с	Доверительный интервал Δx_{cp} , Г
55	1-5	$4,7 \cdot 10^{-5}$	4-7	15-30	$\pm 0,003$

Пленочные селективные мембраны с поливинилхлоридной матрицей на основе цефуроксима с ФМК имели состав: к ЭАВ — 0.1 г добавляли 20 мл циклогексанона и 1 капля ДБФ, нагревали до 60 °С и при перемешивании небольшими порциями добавляли 0.98 г ПВХ. У полученного электрода не наблюдается изменение угла наклона электродной функции и значительный дрейф потенциала, поэтому он пригоден для прямого потенциометрического измерения концентраций растворов цефуроксима.

В диапазоне рН от 4 до 7 показание электрода не зависят от кислотности среды. В кислой области начинается экспоненциальный рост значения потенциала, сопровождающийся выпадением белого аморфного осадка, что связано с разрушением комплекса ФМК—Cfr в результате протонирования антибиотика. Падение рН в щелочной области объясняется тем, что ИСЭ на основе комплексов обладают не только катионной, но и анионной функцией.

Таким образом, изготовленный электрод с ЭАВ можно использовать для определения цефуроксима в широком диапазоне концентраций и рН в течение 2 месяцев со дня изготовления.



Компьютерное моделирование методом DFT комплексов Pt(II) с производными пиридина

Гигава А.М. (магистр, 2 курс)

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

Платиновые комплексы находят широкое применение в онкологии благодаря своей высокой токсичности. В то же время активно исследуются способы повышения целенаправленности онкопрепаратов, снижения их побочных эффектов на здоровые ткани и уменьшения воздействия ферментов на данные комплексы.

Пиридин и его производные встречаются повсеместно в природе и выполняют ключевые функции в жизнедеятельности организмов. Было замечено, что замена одного из лигандов на производные пиридина повышает устойчивость комплекса к действию ферментов, что дает возможность сокращать дозы лекарства и, как следствие, уменьшать его отрицательное воздействие.

Моделирование данных комплексов с помощью квантово-химических подходов, особенно с использованием метода теории функционала плотности (DFT), представляет собой особую задачу, где критически важен выбор подходящего сочетания функционала и базисного набора.

В исследовании было выполнено моделирование ряда комплексов, применяя разнообразные комбинации функционала и базисных наборов, рассмотрено влияние заместителей на характер связи Pt–NH₃.

Для комплексов были рассчитаны геометрические параметры, парциальные атомные заряды и ИК-спектры, высшая занятая (HOMO) и низшая вакантная молекулярная орбиталь (LUMO), проведено сравнение расчетных данных с экспериментальными.



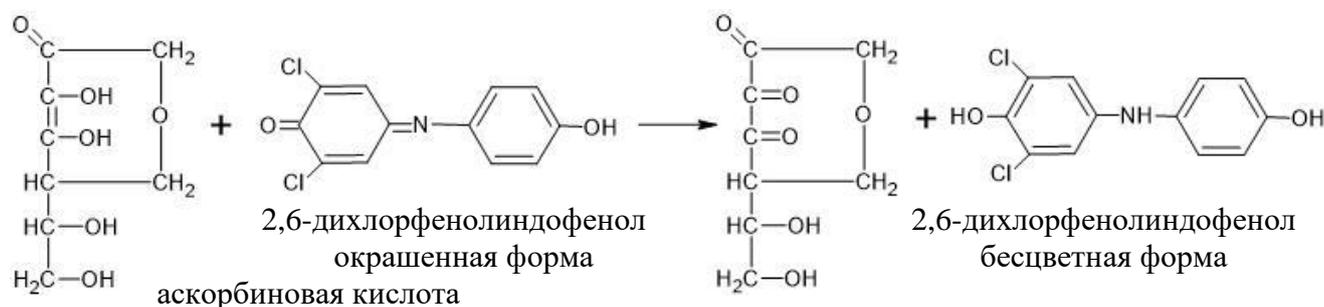
Новая методика определения аскорбиновой кислоты

Демидова Н.В. (бакалавр, 4-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Толкачева Л.Н.

Аскорбиновая кислота (АК), или витамин С, является важной составляющей в человеческом организме, так как участвует во многих окислительно-восстановительных процессах на клеточном уровне. Поэтому важным моментом является определение ее содержания в продуктах, поступающих внутрь.

С точки зрения доступности, экспрессности и точности нами был выбран спектрофотометрический метод. В качестве окрашенного реагента использовали 2,6-дихлорфенолиндофенол (ДХФИФ) ($3,5 \cdot 10^{-3} \text{M}$) [2]. В основе метода лежит реакция восстановления аскорбиновой кислоты:



На светопоглощение и устойчивость ДХФИФ сильно влияет выбор среды. Были проведены исследования ДХФИФ при различных рН. Выявили, что синяя щелочная (рН=6,6 и 9,1) окраска индикатора гораздо интенсивнее и устойчивее красной кислой (рН=3,8). АК не активна в щелочной среде, поэтому для анализа оптимальным будет выбор нейтральной среды. Суть метода заключается в измерении интенсивности окрашивания стандартного раствора ДХФИФ при $\lambda_{\text{max}}=610$ нм после контакта с АК.

Уравнение калибровочной прямой имеет вид: $y = -32,597x + 0,8497$ ($R^2=0,9883$) и линейно в интервале 0,001-0,02 мг/мл аскорбиновой кислоты.

Список литературы:

1. Ахмедова Р.И., Мирзаева Х.А. Спектрофотометрическое определение аскорбиновой кислоты в лекарственных формах // *Universum: Химия и биология: электрон. науч. журн.* 2016. №12(30).



DFT расчёт молекул фталоцианиновых комплексов Mg(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Pd(II)

Ермолаева А.А. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Методом DFT с использованием базиса LACV3P**++ и meta-GGA функционала r^2 SCAN-D3(BJ) рассчитаны компьютерные модели молекул фталоцианиновых комплексов Mg(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Pd(II). Все расчёты выполнены в программе Jaguar (Schrodinger, LLC). Выбор функционала r^2 SCAN-D3(BJ) был сделан на основе сравнительного расчёта с использованием нескольких функционалов (B3LYP-D3(BJ), B97-D3(BJ), BP86-D3(BJ), CAM-B3LYP-D3(BJ), M06-2X-D3, MN15-L, PBE-D3(BJ), PW6B95-D3(BJ), r^2 SCAN-D3(BJ)) молекулы фталоцианата Co(II), структура которой была исследована экспериментально методом РСА. Рассчитанные значения $E(\text{HOMO})$, $E(\text{LUMO})$ и $E_g = E(\text{LUMO}) - E(\text{HOMO})$ представлены в табл. 1 в сравнении с экспериментальными данными. Лучшие результаты при расчёте энергии электронных орбиталей фталоцианиновых комплексов металлов методом DFT даёт использование функционалов r^2 SCAN-D3(BJ), PBE-D3(BJ), BP86-D3(BJ).

Таблица 1

Значения энергий электронных орбиталей в молекулах фталоцианатов металлов

Энергия, эВ	Молекула					
	MgPc	CoPc	NiPc	CuPc	ZnPc	PdPc
$E(\text{HOMO})$ расчёт	-5.00	-4.99	-5.02	-5.01	-5.02	-5.10
$E(\text{HOMO})$ эксперимент [1]	–	-5.0	-5.3	-5.2	-5.0	–
$E(\text{LUMO})$ расчёт	-3.53	-3.44	-3.47	-3.52	-3.53	-3.50
$E(\text{LUMO})$ эксперимент [1]	–	-3.4	-3.6	-3.6	-3.4	–
E_g расчёт	1.47	1.55	1.55	1.49	1.49	1.60
E_g эксперимент [1]	–	1.6	1.7	1.6	1.6	–

1. Ikushima A.J., Kanno T., Yoshida S., Maeda A. // Thin Solid Films. 1996. V. 273. Iss. 1-2. P. 35–38.



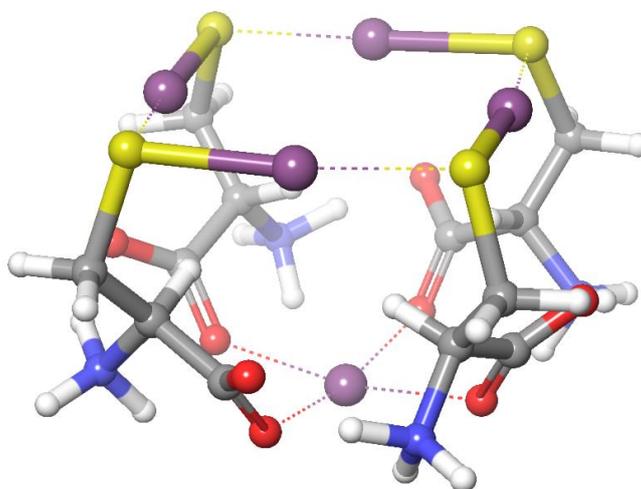
Квантово-химическое моделирование олигомеров цистеината серебра

Изоитко Д.В. (студент, 4 курс)

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

Известно, что при стандартных условиях водные растворы L-цистеина и нитрата серебра способны формировать стабильные гидрогели, даже если концентрация реагентов составляет всего около 0.01%. Процесс гелеобразования начинается с формирования стабильных цвиттер-ионов цистеина серебра, после чего они объединяются в организованные надмолекулярные структуры благодаря нековалентным взаимодействиям между атомами серы и серебра.

При этом, наилучшее соотношение L-цистеина и нитрата серебра составляет 4:5. Профессором, д.х.н., Алексеевым В.Г. была предложена возможность существования сложных комплексов, состоящих из 4 цвиттер-ионов цистеина серебра и дополнительного, пятого, иона серебра $[Ag_5Cis_4]^+$.



Целью данной работы было изучение стабильности и возможности формирования более крупных агрегатов из рассматриваемых структур, учитывая влияние растворителя. Для этого использовался метод теории функционала плотности (DFT) с функционалом B3LYP-D3 и базисным набором LANL2DZ. Результаты расчетов указывают на относительную стабильность этих комплексов и их способность к объединению в надмолекулярные структуры через нековалентные и электростатические взаимодействия.

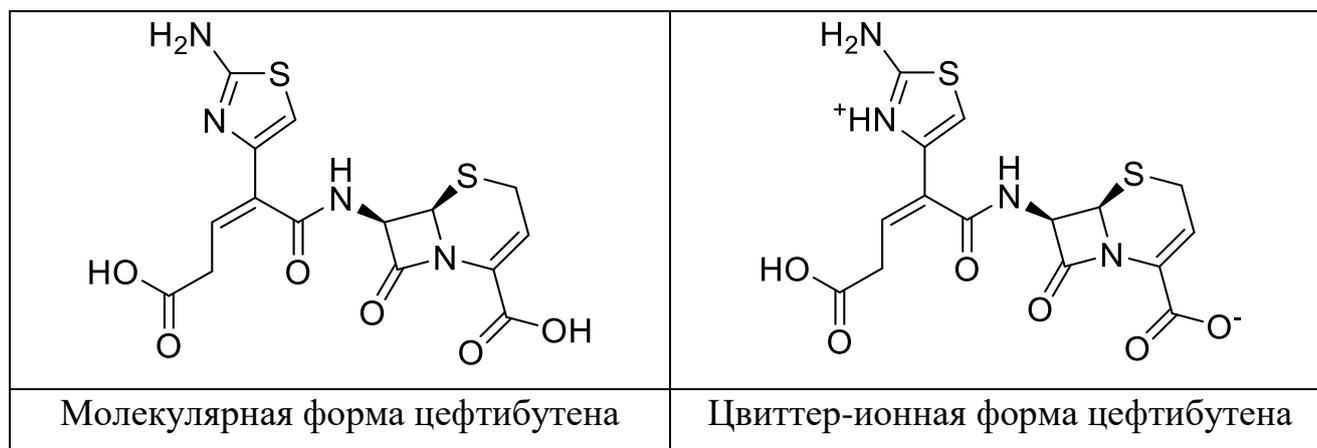


ИК спектр цефтибутена: экспериментальные данные и квантовохимический расчёт

Козлова Е.Д. (магистрантка, 2 год обучения)

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

Цефтибутен – антибиотик группы цефалоспоринов. Молекула цефтибутена содержит две карбоксильные группы и аминотиазольную и теоретически может образовывать цвиттер-ион.



Методом функционала электронной плотности с использованием функционала BLYP-D3 и базиса 6-31G**++ проведён расчёт ИК спектров молекулярной и цвиттер-ионной форм цефтибутена. Расчётные значения волновых чисел (см^{-1}) наиболее интенсивных полос поглощения представлены в таблице в сравнении с экспериментальными значениями. Сопоставление экспериментальных и расчётных данных показывает, что в твёрдом состоянии цефтибутен существует в молекулярной форме.

Колебание	Экспериментальные данные	Молекулярная форма	Цвиттер-ионная форма
бета-лактам	1770	1773.9	1759.0
карбоксильная группа боковой цепи		1718.0	1727.8
карбоксильная группа ядра молекулы	1699	1707.4	–
амидная группа	1651	1651.7	1675.0



Физико-химические методы анализа комбинированных лекарственных средств

Кравец О.Б. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Среди витаминов важную роль играет аскорбиновая кислота, которая участвует в окислительно-восстановительных процессах в человеческом организме. Поэтому анализ аскорбиновой кислоты – одна из важных задач идентификации синтетических фармацевтических препаратов [1].

Было определено количественное содержание аскорбиновой кислоты в драже аскорбиновой кислоты, витаминах "Витрум Вижн Плюс" и "Ундевит" (при совместном присутствии с никотиновой кислотой) методом алкалиметрического титрования [2].

Таблица 1

Результаты количественного определения аскорбиновой кислоты

Объект исследования	$m_{\text{теор}}, \text{Г}$	$m_{\text{пр}}, \text{Г}$
Аскорбиновая кислота, АО «Фармстандарт»	0,250	0,264
Витрум Вижн Плюс, ООО "Такеда Фармасьютикалс"	$M \text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6 = 0,060$	$m\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6 = 0,053$
Ундевит, ЗАО «Алтай Витамины»	$M \text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6 = 0,075$ $m \text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2 = 0,028$	$m \text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6 = 0,082$ $m \text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2 = 0,020$

Содержание определяемого компонента соответствует заявленному.

Можно сделать вывод о подлинности исследуемых препаратов.

Список литературы:

1. Тыжигирова В. В. Анализ комбинированных лекарственных препаратов / В. В. Тыжигирова. – Иркутск: ИГМУ, 2016. – 107 с.



Исследование комплексообразования иминодиянтарной кислоты с борной кислотой

Марулева А.Е. (студент, 5-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Толкачева Л.Н.

В настоящее время комплексоны широко используются в фармации, медицине, пищевой промышленности в качестве антидотов, консервантов и компонентов лекарственных препаратов.

Иминодиянтарная кислота (ИДЯК, H_4L) относится к классу дикарбоновых кислот и является аналогом известной иминодиуксусной кислоты, в которой два фрагмента уксусной кислоты заменены янтарной кислотой. Но в отличие от иминодиуксусной кислоты ИДЯК, попадая в окружающую среду подвергается биодеструкции распадаясь на аминокислоты [1].

На первом этапе исследования рН-потенциометрическим методом нами были определены константы устойчивости ИДЯК при 25°C и ионной силе раствора 0,1 в среде KNO_3 . Расчет проводился с помощью программ New DALSFEK и AUTOEQUIL. Полученные результаты хорошо согласуются между собой и с литературными данными.

На втором этапе в тех же условиях провели исследование процессов комплексообразования с борной кислотой, которая широко применяется в сельском хозяйстве и других отраслях промышленности. Обнаружено образование средних и протонированных комплексов, логарифмы констант устойчивости которых соответственно равны 4,85 и 13,31.

Можно сделать вывод о возможности и целесообразности использования бора в виде комплексоната ИДЯК, например, в сельском хозяйстве.

Список литературы:

1. Смирнова Т. И. // Вестник ТвГУ. Серия: Химия. 2015. № 3. С. 40–45.



Исследование соединений кальция в силикатобетоне

Плахотник В.А. (студент, 5 курс)

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

Автоклавные ячеистые бетоны и изделия из них всё шире применяются в строительстве в России и за рубежом [1]. Это обусловлено повышенными тепло- и звукоизоляционными характеристиками при приемлемых прочностных характеристиках.

Количественное определение кальция в ячеистом бетоне методом рентгеновского энергодисперсионного микроанализа на приборе Oxford INCA Energy 350 показало его содержание 18%. Для объективности исследования нами был проведен анализ содержания кальция классическими мокрыми методами. Весовым анализом с оксалатом аммония [2] установлено содержание кальция $17,42 \pm 2$ весовых %, а сульфатным методом с сульфатом натрия [2] определено содержание кальция $17,84 \pm 2$ весовых %.

Анализ показал, что образцы ячеистого бетона содержат плохо закристаллизованный тоберморит и ксонотлит. Причем ксонотлит является преобладающей в 1,5 - 2 раза фазой в системе. Это объясняется неравномерностью структуры ячеистого бетона, тогда как мокрые методы анализа предусматривают предварительный перевод всего кальция испытуемых образцов в раствор с последующим определением его суммарного количества в этом растворе.

Список литературы:

1. Бутт Ю.М., Рашкович Л.М. Твердение вяжущих при повышенных температурах, М.: Стройиздат, 1965, 244 с.
2. Анализ минерального сырья / Под общ. ред. Ю. Н. Книпович, Ю. В. Морачевского, 3-е изд., перераб. и доп., Ленинград: Госхимиздат, 1959, С. 92-94.



Исследование долевого распределения частиц в водных системах лантаноид-гепарин

Скобин М.И. (молодой учёный)

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

Были исследованы системы $\text{Ln}^{3+} - \text{H}_2\text{O} - \text{Hep}^{3-}$ (Ln^{3+} : La^{3+} , Ce^{3+} , Pr^{3+} , Nd^{3+} , Sm^{3+} , Eu^{3+} , Gd^{3+} , Tb^{3+} , Dy^{3+} , Ho^{3+} , Er^{3+} , Tm^{3+} , Yb^{3+} , Lu^{3+}) методами рН-метрии и математического моделирования. Определено, что во всех системах существуют следующие частицы: Hep^{3-} , Ln^{3+} , HHep^{2-} , LnHep . На рис. 1 представлена диаграмма долевого распределения частиц для системы $\text{Ce}^{3+} - \text{H}_2\text{O} - \text{Hep}^{3-}$. Все изученные системы, имеют схожие диаграммы в связи с малым количеством различий в протекающих процессах.

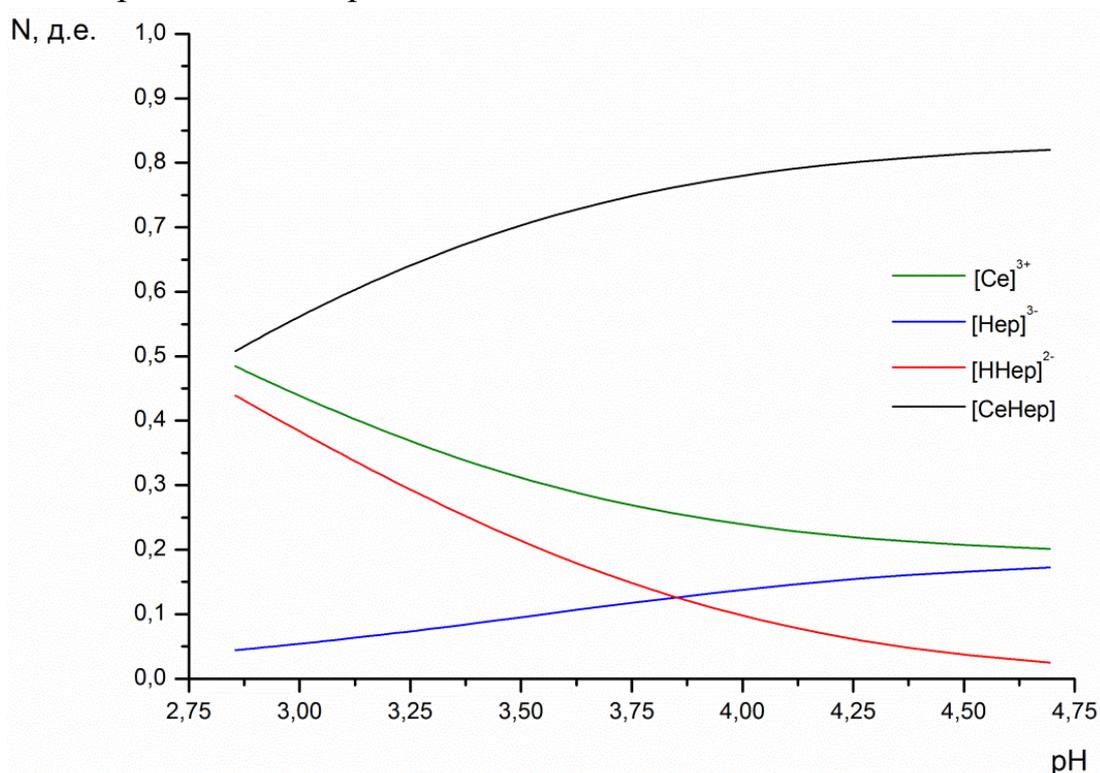


Рис. 1. Диаграмма долевого распределения содержания комплексных форм

В результате анализа полученных диаграмм было обнаружено, что во всем исследуемом интервале рН образуются средние комплексы. Можно определить максимальный выход (около 80%) для всех комплексов гепарина с ионом лантаноида во всех экспериментальных системах.

Выявлены интервалы значений рН, в которых преимущественно образуются комплексы состава $[\text{LnHep}]$ и не протекает гидролиз лантаноида. Величина $\text{pH} = 4.75$ является оптимальной при синтезе комплексов гепарина с лантаноидами, а при $\text{pH} \geq 5.5$ в значительной степени протекает гидролиз.



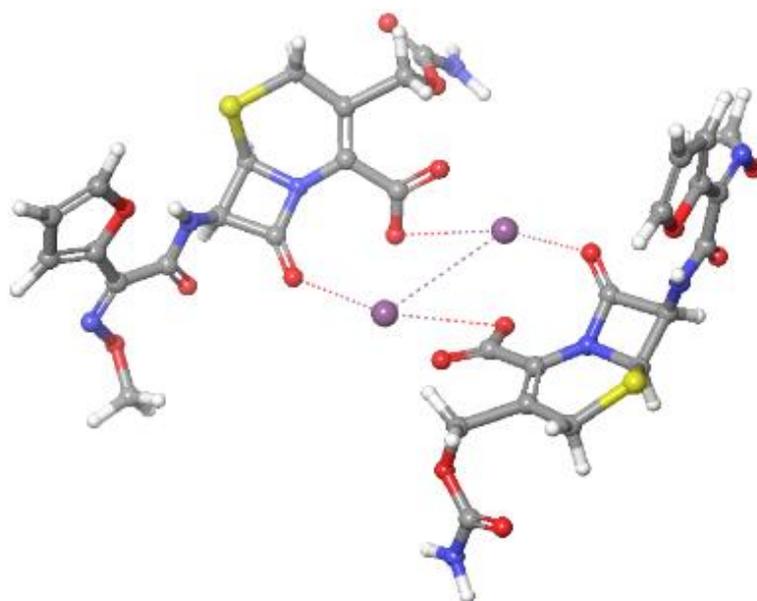
Исследование комплексов Cu(II) и Ag(I) с цефуроксимом

Сутугина К.А. (магистр, 2 курс)

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

Цефуроксим является антибиотиком из группы цефалоспоринов, обладающим широким спектром действия против различных бактерий. Он включен в список жизненно необходимых и важнейших лекарственных препаратов медицинского назначения. С помощью метода квантовой химии, основанного на теории функционала плотности (DFT), были проанализированы комплексы цефуроксима с ионами меди (II) и серебра (I).

Используя метод DFT, была выполнена оптимизация структуры комплексов и определены их геометрические параметры. Чтобы убедиться в точности полученных структур, были вычислены инфракрасные спектры соединений и проведено сравнение теоретических линий с линиями, полученными в ходе экспериментальных исследований.



Для серебряного комплекса было выдвинуто предположение о структуре $[Ag_2(CRX)_2]$, в которой пара ионов серебра образует мостики между атомом кислорода карбонильной группы β -лактамного кольца одного лиганда и карбоксилатной группой другого. В этом случае карбаматная группа не принимает участие в образовании комплекса. Расстоянием между атомами серебра 3.5\AA .



Потенциометрические характеристики ионоселективного электрода с откликом на амоксициллин

Сухорукова А.А. (студентка, 5 курс)

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

Амоксициллин — лекарственное средство, полусинтетический антибиотик широкого спектра действия группы пенициллинов для лечения бактериальных инфекции.

Потенциометрические методы, в частности, с использованием ионоселективных электродов (ИСЭ) выгодно отличаются от других методов простотой и экспрессивностью анализа. Целью работы было создание ИСЭ для определения антибиотика в лекарственных препаратах, биологических средах, пищевых продуктах, сточных водах фармацевтических предприятий и других объектах.

В работе использовали амоксициллин, фосфорно-молибденовую (ФМК) и фосфорновольфрамовую (ФВК) кислоты, поливинилхлорид (ПВХ) марки С-70 х.ч., циклогексонон ч.д.а., дибутилфталат (ДБФ). Электродноактивное вещество (ЭАВ) получали добавлением к раствору амоксициллина растворов ФВК и ФМК в соотношении 1:1. Пленочные селективные мембраны с поливинилхлоридной матрицей на основе амоксициллина с ФМК и ФВК имели состав: ПВХ – 98%, ДБФ – 1%, ЭАВ – 1%. ИСЭ перед применением вымачивали в 0,01 М растворе амоксициллина. Потенциометрические характеристики ИСЭ:

	Диапазон линейности отклика, моль/л	Наклон электродной функции S, мВ	Предел обнаружения, моль/л	Время отклика, с	pH
ФМК	$10^{-1} — 10^{-4}$	44	10^{-4}	30	3–6,5
ФВК	$10^{-1} — 10^{-5}$	40	10^{-5}	45	2 – 6

Определение амоксициллина в готовых лекарственных формах показало работоспособность созданного ИСЭ.



Исследование структурных параметров $[\text{Co}(\text{S}_2\text{CNEt}_2)_3]$ методом DFT

Топытчак А.М. (студент, 5 курс)

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

Трис-диэтилдитиокарбамат кобальта (III) – мономерное комплексное соединение, которое входит в состав противоопухолевых препаратов. Данное соединение имеет искаженную октаэдрическую геометрию.

Цель работы: подобрать оптимальную систему функционал-базис для корректного расчета геометрических параметров $[\text{Co}(\text{S}_2\text{CNEt}_2)_3]$ методом функционала плотности (DFT).

В представленной работе были рассмотрены функционалы различного типа: GGA (BLYP-D3), Meta (M05-D3, M11-L), Hybrid (B3LYP-D3, ω B97X-D). А также использованы базисные наборы, включающие поляризационные и диффузные функции (6-31G++**, LAV3P++**, LACVP++**, LACV3P++**).

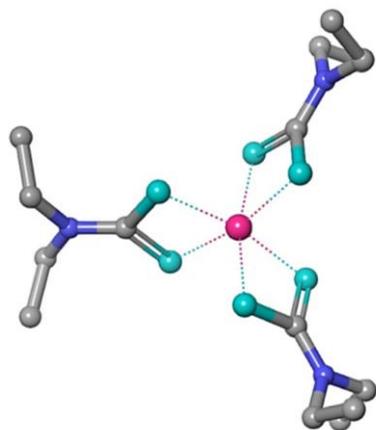


Рис.1. Изображение модели комплекса $[\text{Co}(\text{S}_2\text{CNEt}_2)_3]$

Функционал M05-D3 (Meta-функционал) и базисный набор 6-31G++**, обеспечивают большую сходимость экспериментальных геометрических параметров комплекса с исходными литературными данными [1].

Список литературы:

1. Аyyавoo S.S., Ramalingam B. Trisdithiocarbamate of Co(III) complexes // Molecular Structure – 2017 – Vol. 1134. – P. 416 – 425.



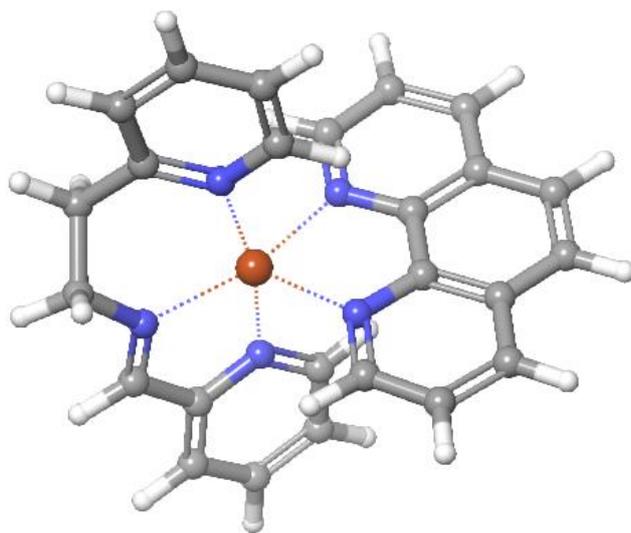
Квантово-химическое моделирование смешанно-лигандных комплексов переходных металлов с 1,10-фенантролином

Удалова А.С. (студент, 4 курс)

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

При синтезе комплексных соединений часто используется подход, при котором в одном комплексе сочетаются несколько разных лигандов (при этом одни из них обладают выраженной функциональной активностью, а другие – сродством к определенному субстрату). Это позволяет создавать соединения, обладающие высокой биологической активностью и при этом эффективностью. 1,10-фенантролин часто используют в качестве вспомогательного лиганда из-за его хорошего сродства с ДНК при разработке противоопухолевых и противовирусных препаратов [1].

Методом квантово-химического моделирования DFT были смоделированы комплексные соединения на основе ионов кобальта (II), никеля (II) и меди (II). Определены подходящие функционал и базисный набор, рассчитаны геометрические параметры комплексов, колебательные ИК и УФ-



спектры. Проведенное сравнение расчетных и экспериментальных полос поглощения подтвердило корректность построенных моделей и выбор параметров DFT.

[1] Dagli et al. The mixed ligand complexes of Co(II), Ni(II), Cu(II) and Zn(II) with coumarilic acid/1,10-phenanthroline // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. 2018. Doi:10.1007/s10973-018-7773-y/



Определение фосфора в клубнях картофеля

Хомякова К.Н. (магистрант 1 года обучения)

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

Фосфор является обязательной составной частью живой клетки растений, он входит в состав нуклеиновых кислот, участвующих в процессе синтеза белков и передачи наследственных свойств. Фосфор содержится также в веществах, определяющих направление и скорость биохимических процессов в растениях, – в витаминах, гормонах, ферментах. Особенно велика роль фосфора в процессах дыхания растений и синтеза углеводов – крахмала, сахаров. Кроме того, фосфор входит в состав других органических соединений, имеющих большое значение в жизни растений: фосфатидов, фитина, сахарофосфатов и других [1].

Для проведения анализа клубней картофеля сортов Гала, Сюрприз и Северное сияние на содержание фосфора был использован фотометрический метод (ГОСТ 26657–97), а также, в качестве экспериментального экспресс-метода, был применен электронно-зондовый рентгеноспектральный микроанализ.

Таблица 1. Сравнение результатов фотометрического и электронно-зондового рентгеноспектрального анализов

Сорт	Массовая доля фосфора, % (фотометрический метод)	Содержание фосфора, вес. % (элементный анализ)
Гала	0,049	0,026 – 0,059
Сюрприз	0,048	0,028 – 0,070
Северное сияние	0,037	0,032 – 0,157

Концентрации макроэлементов, полученные в результате проведения электронно-зондового рентгеноспектрального микроанализа, оказались сопоставимыми с концентрациями, полученными фотометрическим методом. Данный метод можно использовать для определения ориентировочных концентраций фосфора, однако для более точного результата необходимо провести иной инструментальный анализ.

Список литературы:

1. Алимкулов С.О. Биологическая роль фосфора в жизни растений / С.О. Алимкулов, Д.К. Мурадова // Молодой ученый. – 2015. – №10. – С. 44-47.



Ионоселективный электрод для определения новокаинамида потенциометрическим методом

Хохлова А.В. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Потенциометрические методы основаны на использовании зависимости равновесного потенциала электрода, опущенного в раствор, от активности (концентрации) ионов этого раствора [1]. Прямая потенциометрия (ионометрия) – это метод, в котором индикаторным является ионоселективный электрод. Для его реализации достаточно подобрать соответствующий ионоселективный электрод для определяемого иона [2]. Применение этого метода для определения новокаинамида не описано в литературе, поэтому целью настоящей работы явилось создание ИСЭ для определения последнего и изучение его потенциометрических характеристик в готовых лекарственных формах.

В работе использовали новокаинамид (в виде гидрохлорида) фармакопейной чистоты, фосфорно-молибденовую (ФМК) и фосфорно-вольфрамовую (ФВК) кислоты ч.д.а., диоктилфталат (ДОФ) ч.д.а., поливинилхлорид (ПВХ) марки С-70 х.ч. Электродноактивные вещества (ЭАВ) получали добавлением к раствору новокаинамида растворов гетерополикислот (ФВК и ФМК) до полного выпадения осадка. Пластифицированные мембраны ИСЭ изготавливались на основе новокаинамида и имели состав (в масс. %): ПВХ–90, ДОФ–5, ЭАВ–5. Для определения электродных характеристик использовали электрохимическую ячейку. Изготовленные электроды обладали хорошими потенциометрическими характеристиками. Интервал линейности электродной функции находился в промежутке 1–4 рС, крутизна электродной функции близка к теоретическому значению Нернстовской величины функции (59 мВ) и составляла 46,8 мВ/рС (ФМК) и 50,3 мВ/рС (ФВК), время отклика 8–10 с. Работе электродов не мешало наличие неорганических катионов (Na, Ca, K) биологических систем, функционирование электродов не зависило от рН в диапазоне от 4 до 7,5, что делало этот интервал наиболее подходящим для определения новокаинамида. Диапазон линейности электродной функции и ее крутизна позволяют надеяться на успешное практическое использование изготовленного ИСЭ.

1. Отто М. Современные методы аналитической химии / ред. А. В. Гармаш. – 3-е изд. – М.: Техносфера, 2008. – 544 с.
2. Нечипоренко А.П. Физико-химические (инструментальные) методы анализа. Электрохимические методы. Потенциометрия и кондуктометрия: Учеб.-метод. пособие / Под ред. В.В. Кириллова. – СПб.: НИУ ИТМО; ИХиБТ, 2013. – 34 с.



Вольтамперометрический анализ пищевых добавок на содержание йода

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

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

Йод – один из важнейших микроэлементов в биохимии организма человека. Недостаток йода приводит к развитию серьезных заболеваний. Для компенсации недостатка йода в продуктах питания используют йодсодержащие пищевые добавки.

В данной работе представлены результаты анализа пищевых добавок Smart Kid® «Банан-яблоко», Promax Фукус, Vertera Forte, Vertera Forte «Вишня» производства фирмы «Vertera» (<https://vertera.org/>) методом инверсионной вольтамперометрии с использованием прибора ТА-Lab («ТомьАналит», Россия) в соответствии с методическими указаниями МУ 31-07/04 «Определение йода в пищевой продукции». Результаты представлены в табл. 1. Во всех случаях содержание йода в образцах соответствует допустимому интервалу значений, заявленных производителем.

Таблица 1:

Результаты вольтамперометрического определения содержания йода в пищевых добавках

Название	Найдено \bar{x} , мг/кг	Заявлено производителем, мг/кг
Smart Kid® «Банан-яблоко»	1,172 ± 0,041	1,100
Vertera Forte «Вишня»	4,160 ± 0,165	4,200
Promax Фукус	51,067 ± 1,805	50,000
Vertera Forte	9,367 ± 1,006	9,000



Квантово-химическое исследование комплексов переходных металлов с основаниями Шиффа группы N₂O₂

Юлова А.А. (магистр, 2 курс)

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

Шиффовы основания как лиганды привлекают значительное внимание в области координационной химии благодаря их уникальной способности образовывать комплексы с различными переходными металлами. Эти соединения обладают широким спектром применений, включая катализ, разработку фармацевтических средств, а также создание химических и оптических датчиков.

К группе «N₂O₂» относятся основания Шиффа, которые координируются с ионом металла в четырех точках (через два атома кислорода и два азота), образуя прочные хелатные комплексы.

В данной работе с использованием метода теории функционала плотности (DFT) были проанализированы комплексы, сформированные из лиганда, полученного в результате реакции 2-гидрокси-6-изопропил-3-метил-бензальдегида с 1,2-диаминпропаном, и переходных металлов: марганец (Mn), кобальт (Co) и никель (Ni). Согласно литературным данным, для марганца и кобальта характерно формирование одиночных хелатных комплексов типа [ML], тогда как для никеля характерно образование димеров [NiL]₂ с металл-металлической связью Ni–Ni, структура которых вызывает особый интерес.

В результате исследования были определены подходящие функционал и базисный набор (с учетом наличия металлической связи Ni–Ni). Были вычислены геометрические характеристики комплексов, их ИК- спектры, а также выполнено сопоставление полученных результатов расчета с экспериментальными данными.



Определение тиамин гидрохлорида в лекарственных формах

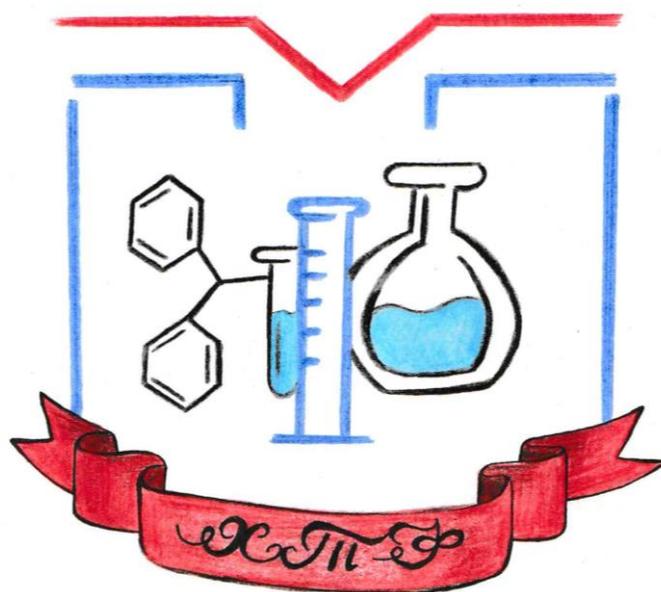
Яковлева В.Р. (Студентка, 5 курса специалитета)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Мантров Г.И., ассистент Крюков Т.В.

Потенциометрические методы с использованием ионоселективных электродов (ИСЭ) выгодно отличаются простотой и экспрессностью анализа. Целью настоящей работы явилось создание ИСЭ для определения тиамин гидрохлорида, изучение его потенциометрических характеристик и разработка методики потенциометрического определения в готовых лекарственных формах [1].

В работе использовали тиамин гидрохлорид фармакопейной чистоты, фосфорномолибденовую (ФМК) и фосфорновольфрамовую (ФВК) кислоты ч.д.а., диоктилфталат (ДОФ) ч.д.а., поливинилхлорид (ПВХ). Электроактивные вещества (ЭАВ) получали добавлением к раствору тиамин растворов гетерополикислот до полного выпадения осадка. ИСЭ вымачивали в растворе 0,01 М. тиамин в течении 1-2 суток. Изготовленные электроды обладали хорошими потенциометрическими характеристиками. Интервал линейности электродной функции находится в промежутке 2-6 рС, крутизна электродной функции составляет 47 мВ/рС для ИСЭ на основе ФВК и 51 мВ/рС для ИСЭ на основе ФМК, время отклика составляло 8-10 с., значение потенциалов электродов постоянно в диапазоне рН от 4 до 6, что делает этот интервал наиболее подходящим для определения тиамин гидрохлорида [2]. Определение тиамин гидрохлорида в готовых лекарственных формах показало работоспособность созданного ИСЭ и позволило надеяться на успешное практическое применение.

1. Н.Я. Логинов. Аналитическая химия: учеб. Пособие / Н. Я. Логинов, А. Г. Воскресенский, И. С. Солодкин. – М.: «Просвещение» 1975.– 478 с.
2. Государственная фармакопея Российской Федерации. 15-е изд. М.: Научный центр экспертизы средств медицинского применения, 2018.



Секция органической химии



Влияние строения оксосоединений на свойства фенилгидразонов

Александрова А.И. (студент, 5 курс)

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

Постоянно возрастающий интерес к химии гидразонов обусловлен спецификой электронного и пространственного строения их молекул, необычайно широкими синтетическими возможностями и многочисленными спектрами практического использования представителей этого класса соединений. Производные гидразона активно изучаются в связи с проблемами онкологии, генетики, сельского хозяйства и технологии синтетических материалов.

Представленная работа посвящена изучению влияния строения оксосоединений на свойства полученных фенилгидразонов. Взаимодействием фенилгидразина и пропанона, гексаналя, бензальдегида и 4-гидрокси-3-метоксибензальдегида получены фенилгидразоны перечисленных оксосоединений. Схема реакции представлена ниже:



Рис. Общая схема реакции получения фенилгидразонов

Полученные соединения идентифицированы по температуре плавления, однако не удалось выделить в виде кристаллического осадка фенилгидразон гексаналя.

Для исследования реакционной способности полученных производных, синтезированы формазаны, взаимодействием фенилгидразонов 4-гидрокси-3-метоксибензальдегида и бензальдегида с хлоридом фенилдиазония.

Определены температура плавления и растворимость полученных соединений, с помощью ИК-спектроскопического анализа подтверждено строение синтезированных азогидразонов.



Влияние структуры хлорцинкатных ионных жидкостей на размер квантовых точек сульфида цинка

Арефьев А.А. (магистрант 2-го года обучения)

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

Квантовые точки (КТ) являются важными материалами, свойства которых можно варьировать, меняя их размер, ввиду чего они находят все большее применение. Но из-за их высокой реакционной способности и склонности к агрегации необходимо их стабилизировать, с чем могут справиться ионные жидкости (ИЖ).

Целью данной работы было изучить влияние пиридиниевых хлорцинкатных ИЖ на размер образующихся квантовых точек сульфида цинка, синтезированных путем их взаимодействия с сульфидом натрия.

Квантовые точки сульфида цинка получали взаимодействием эквимольных количеств сульфида натрия и хлорцинкатных ИЖ. Размеры полученных частиц устанавливали методами УФ-спектроскопии, рентгенофазового анализа (РФА), атомно-силовой (АСМ) и растровой электронной микроскопии (РЭМ). Ниже в таблице приведены используемые в синтезе ИЖ и размеры, полученных частиц.

Таблица

Размеры КТ ZnS, полученные различными методами

№	Используемая ИЖ	d, нм(УФ)	d, нм(АСМ)	d, нм (РЭМ)	d, нм (РФА)
1	$\text{PyC}_{16}\text{Br}\cdot\text{ZnCl}_2$	>34	178	-	-
2	$\text{PyC}_{12}\text{Br}\cdot\text{ZnCl}_2$	2,0; 2,2; 2,7	82	96	4,15
3	$\text{PyC}_{10}\text{Cl}\cdot\text{ZnCl}_2$	5,0	50	-	4,04
4	$\text{PyC}_8\text{Br}\cdot\text{ZnCl}_2$	2,5	50	65	4,92
5	$\text{PyC}_4\text{Br}\cdot\text{ZnCl}_2$	2,8; 3,8	104	100	3,97
6	$\text{PyC}_4\text{Cl}\cdot\text{ZnCl}_2$	4,6	100	106	3,89



Исследование пеногасящей способности бинарных смесей поверхностно-активных веществ

Белякова А.С. (студентка 4-го года обучения)

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

Исследовано влияние пеногасителей и антивспенивающих агентов. В качестве антивспенивателей были выбраны ПЭГ-115, полиэтиленгликоль-сукцинат (ПЭГС) и полиэтиленгликоль-адипинат (ПЭГА); в качестве пеногасителей - амиловый, гептиловый и нониловый спирты, а также диметиловый эфир адипиновой кислоты, изобутиловый эфир стеариновой кислоты и динониловый эфир янтарной кислоты. Использовано несколько методик: расчет показателя эффективности пеногашения, определение гасящей способности, определение активности пеногасителей/антивспенивателей. Выводы исследования: антивспениватель ПЭГА более эффективно препятствует пенообразованию, чем ПЭГС и ПЭГ-115, поскольку показатель эффективности равен 80%, 76% и 75% соответственно; по минимальному количеству вещества, прошедшему на пеногашение, выстраиваются в ряд: ПЭГС (0,01 г) → ПЭГА (0,02 г) → ПЭГ-115 (0,25 г), причем пена полностью не разрушается, а стабилизируется и больше не образуется; в ряду пеногасителей гептиловый спирт (96%) и диметиловый эфир адипиновой кислоты (94%) эффективнее разрушают пену в сравнении с остальными. По минимальному количеству спиртов, прошедшему на пеногашение, вещества выстраиваются в ряд: $C_7H_{15}OH$ ($V_{cp} = 0,20$ мл) → $C_5H_{11}OH$ ($V_{cp} = 0,30$ мл) → $C_9H_{19}OH$ ($V_{cp} = 0,95$ мл). Эфиры образуют следующий ряд: $C_8H_{14}O_4$ ($V_{cp} = 0,10$ мл) → $C_{22}H_{44}O_2$ ($V_{cp} = 0,30$ мл) → $C_{22}H_{42}O_4$ ($V_{cp} = 0,80$ мл).

Таким образом, при сравнении между собой антивспенивателей, спиртов и эфиров, было выявлено, что спирты оказывают большее влияние на пенообразование в смеси ПАВ, т.к. они в минимальных количествах полностью разрушают образовавшуюся пену и препятствуют ее дальнейшему образованию, в отличие от антивспенивателей, которые предотвращают или снижают образование пены.



Получение и свойства сложного эфира пентаэритрита и лауриновой кислоты

Богданова Е.М. (студент, 4 курс)

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

Актуальной проблемой современного органического синтеза является подбор оптимальных методов получения сложных эфиров на основе многоатомных спиртов, которые широко используются в качестве смазочных материалов в высокоскоростных газовых турбинах, авиации и других областях. В связи с этим интересен вопрос получения дилаурилпентаэритрита.

Сложный эфир получали методом азеотропной этерификации, взаимодействием лауриновой кислоты с пентаэритритом в присутствии катализатора *n*-толуолсульфокислоты и серной кислоты. Температуру реакционной среды контролировали добавлением в колбу толуола в количестве 6 % от массы лауриновой кислоты. Толуол также использовался для образования низкокипящей, азеотропной смеси с водой. Реакционную массу, нагревали в течение 5 часов при температуре 150°C. Окончание реакции, контролировали по прекращению накопления воды в насадке Динна-Старка. После отгонки толуола остаток представлял собой твердое маслянистое вещество белого цвета с температурой плавления 43-45°C.

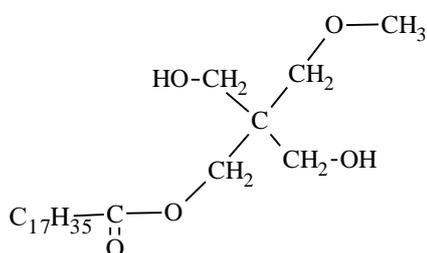


Рис. Дилаурилпентаэритрит

представляет собой малорастворимое неионогенное поверхностно-активное вещество, мало растворимое в воде и этаноле, хорошо растворяющееся в диэтиловом эфире и ацетоне. Строение синтезируемого соединения подтверждено данными ИК-спектроскопического анализа.

Исследована растворимость и определена температура плавления дилаурилпентаэритрита, также рассчитано кислотное и эфирное числа. Полученное соединение



Применение диоксида титана в качестве катализатора при ацилировании неонола 9-12

Васильева Д.В. (магистрант 2-го года обучения)

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

В реакции этерификации в качестве катализатора наряду с протонными кислотами и *пара*-толуолсульфокислотой возможно использование соединений титана, обычно это тетраалкилтитанаты, титановые соли карбоновых кислот, гексафтортитанаты и смешанные титаносодержащие соединения [1].

В данной работе была изучена реакция ацилирования оксиэтилированного спирта неонола 9-12 двухосновными карбоновыми кислотами в присутствии диоксида титана как катализатора.

Синтезы осуществляли путем азеотропной этерификации по известной методике [2], но с некоторыми изменениями. Так, была модифицирована установка для синтеза, а также удален этап промывки в делительной воронке и последующее осушение в связи с достаточной растворимостью получающихся соединений в воде, что привело бы к потерям целевого продукта. Контроль за ходом реакции осуществлялся по изменению кислотного числа. Таким образом были получены следующие соединения с соответствующими выходами: эфир неонола 9-12 и глутаровой кислоты (84 %), эфир неонола 9-12 и винной кислоты (86 %). При использовании в качестве катализатора *пара*-толуолсульфокислоты выходы целевых продуктов составляли 70 % и 34 % соответственно.

Список литературы:

1. Силинг М.И., Ларичева Т.Н. Соединения титана как катализаторы реакций этерификации и переэтерификации // Усп. хим. – 1996. – Т. 65. – Вып. 3. – С. 296–304.
2. Синтез и свойства сложных эфиров адипиновой кислоты / И.Н. Вихарева, Е.А. Буйлова, Д.Р. Гатиятуллина [и др.] // Баш. хим. ж. – 2019. – Т. 26. – №2. – С. 33–36.



Исследование амфотерных поверхностно-активных веществ в качестве стабилизаторов эмульсий

Веролайн В.А. (магистрант, 2 год)

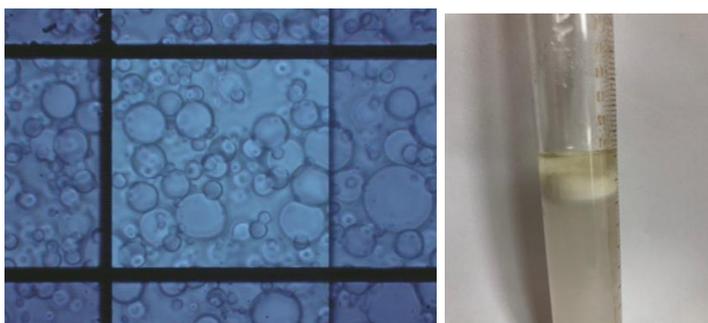
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Темникова С.А.

Амфотерные поверхностно-активные вещества считаются одними из наиболее многообещающих из-за их способности вызывать минимальное раздражение, обладания высокой эффективностью в уменьшении поверхностного натяжения и хорошей совместимостью с различными типами поверхностно-активных веществ.

Экспериментально установлено, что синтез на основе N,N-диэтиламиноэтилдодеканоата и акриловой кислоты является более целесообразным, так как выход продукта составил 95%. Благодаря отказу от растворителя, полученное вещество не нуждается в очистке. Устойчивое пенообразование изучаемого вещества отмечено через 30 мин только при концентрациях от $1 \cdot 10^{-1}$ до $1 \cdot 10^{-3}$ моль/л [3].

Эмульгирующую способность исследовали: N-додеканоилоксиэтил-N,N-диэтиламмонийпропионата с концентрациями от $1 \cdot 10^{-1}$ моль/л до $1 \cdot 10^{-3}$ моль/л с оливковым маслом в соотношении 5:1. При встряхивании более 600 сек. эмульсий с концентрацией АмПАВ $1 \cdot 10^{-1}$ моль/л образовался стабильный слой толщиной 8 мм. При остальных концентрациях такие слои не были обнаружены.

С помощью оптического микроскопа Nupregion-1000 (Bruker) получали электронные микрофотографии ресуспензируемого слоя эмульсии оливкового масла в растворе АмПАВ с концентрацией $1 \cdot 10^{-1}$ моль/л представленные ниже:





Термическая стабильность металлных ионных жидкостей – тетрахлорманганатов N-алкилпиридиния

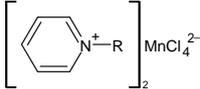
Воробьева А.О. (магистр, 2 год обучения)

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

Для металлных ионных жидкостей (ИЖ) характерна высокая термическая стабильность, позволяющая использовать их в химических процессах, проводимых при температурах, достигающих 200-300°C и выше.

Целью работы является исследование термической стабильности ИЖ с тетрахлорманганат-анионом и катионом N-алкилпиридиния с различной длиной алкильных заместителей. Результаты анализа представлены в таблице.

Таблица

Термогравиметрический анализ тетрахлорманганатов N-алкилпиридиния: 

R	T _{разл.} , °C	T ₅₀ , °C	Потеря массы, %					Остаток, %
			100°C	200°C	300°C	400°C	500°C	
(CH ₂) ₃ CN	260	369	1	1	21	66	75	21
C ₄ H ₉	240	350	1	1	31	74	81	15
CH ₂ C ₆ H ₅	238	349	2	2	32	61	69	27
C ₈ H ₁₇	237	329	2	2	28	80	83	13
C ₁₀ H ₂₁	235	337	1	1	33	79	83	12

T_{разл.} – температура начала термического разложения.

T₅₀ – температура, при которой наблюдается 50%-ная потеря массы.

В общем случае все изученные тетрахлорманганаты N-алкилпиридиния стабильны до 230°C и постепенно разлагаются в интервале 230-600°C. ИЖ с децил-радикалом стабильна до 235°C. Напротив, ИЖ с бутиронитрил-, бутил-, бензил- и октил-радикалами обладают большей термической стабильностью.

При увеличении длины алкильного заместителя в составе катиона происходит снижение термической стабильности. Так тетрахлорманганат N-децилпиридиния менее стабилен, чем N-октилпиридиния и N-бутилпиридиния. По-видимому, большая длина алкильной цепи вызывает усиление Ван-дер-Ваальсовых сил и снижение внутримолекулярного электростатического взаимодействия, что в результате приводит к снижению термостабильности.



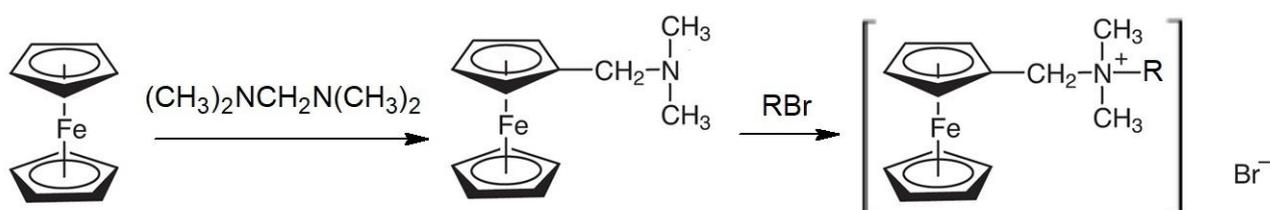
Аммониевые ионные жидкости с ферроценилметильным радикалом в катионе

Грязнов А.С. (студент 5 курс)

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

Среди аммониевых металлсодержащих ионных жидкостей (ИЖ) наиболее известны соединения, содержащие металл в структуре аниона $(R_4N)_2^+MeX_4^{2-}$ (Me: Co, Ni, Mn, Fe, Cd и др.). В то же время металлсодержащие ионные жидкости, содержащие металл в катионе, немногочисленны и в основном получены на основе N,N-диметиламинометилферроцена. Эти соединения имеют широкий спектр применения: от лекарственных препаратов до регуляторов горения твёрдого ракетного топлива.

В данной работе представлены результаты исследований ИЖ – четвертичных солей аммония с ферроценилметильным радикалом в катионе и с Br^- анионом. Исследовано влияние структуры катиона на термическую стабильность и поверхностную активность синтезированных ионных жидкостей. Ионные жидкости получены трёхстадийным синтезом, используя реакцию аминоалкилирования ферроцена и кватернизацию амина алкилбромидом с различной длиной алкильной цепи.



R: C_4H_9 ; C_8H_{17} ; $C_{10}H_{21}$; $C_{12}H_{25}$; $C_{16}H_{33}$

Анализ термической стабильности синтезированных ИЖ указывает на их большую термостабильность по сравнению с органическими ионными жидкостями. В результате исследований водных растворов полученных веществ было установлено, что исследуемые ИЖ ведут себя как классические катионные ПАВ и снижают поверхностное натяжение воды до $35-40 \cdot 10^{-3}$ н/м.



Получение и исследование свойств аскорбилпальмитата

Девятова С.А. (студент, 4 курс)

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

Аскорбилпальмитат (пищевая добавка E304) – сложный эфир пальмитиновой и аскорбиновой кислот, также известный как жирорастворимая форма витамина С, имеет формулу $C_{22}H_{38}O_7$. Аскорбилпальмитат относится к антиокислителям и антиоксидантам искусственного происхождения, его применяют в технологических целях в процессе производства пищевых продуктов, а также в косметологии, животноводстве и фармацевтике.

Эфир получали взаимодействием аскорбиновой кислоты с пальмитиновой кислотой. Синтез проводили при температуре 120-130°C в присутствии катализатора серной кислоты H_2SO_4 . Полученный эфир экстрагировали в ацетоне. После очистки и перекристаллизации получили слегка желтоватые кристаллы. Схема реакции представлена ниже:

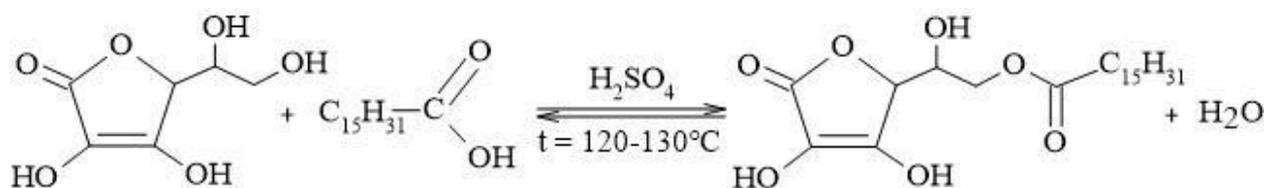


Рис. Схема реакции получения аскорбилпальмитата

Полученное соединение представляет собой слегка желтоватые кристаллы со слабым цитрусовым запахом. Имеет слабокислый вкус. Исследована растворимость аскорбилпальмитата: хорошо растворим в маслах, спиртах, этилацетате, ацетоне и хлороформе, слабо растворим в гексане и четыреххлористом углероде, не растворим в воде. Определена температура плавления 115-120°C, которая хорошо соотносится с литературными данными.



Ацилпроизводные Синтанола АЛМ-7

Егорова А.Д. (студент, 5-го года обучения)

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

Синтанол АЛМ-7, смесь первичных оксиэтилированных спиртов, широко применяется в различных отраслях, включая производство косметики, бытовой химии и фармацевтических препаратов. Синтез производных синтанола АЛМ-7 представляет собой важный процесс в промышленном производстве поверхностно-активных веществ (ПАВ). Ацилирование позволяет модифицировать свойства синтанола АЛМ-7, придавая ему новые функциональные возможности [1].

В данной работе осуществлён синтез производных Синтанола АЛМ-7 ацилированием его ангидридами фталевой, малеиновой и янтарной кислот. Процесс синтеза был оптимизирован путем подбора условий реакции, включая соотношение реагентов и температуру. Реакции проводились в отсутствие катализаторов. Строение целевых продуктов было подтверждено данными ИК-спектроскопии. Также были исследованы физико-химические характеристики водных растворов, полученных соединений и исходного вещества.

Полученные производные Синтанола АЛМ-7 обладают улучшенными поверхностно-активными свойствами по сравнению с исходным соединением. Они характеризуются более низким поверхностным натяжением, лучшей смачивающей способностью и повышенной стабильностью эмульсий. Эти свойства делают их перспективными соединениями для использования в качестве компонентов, где требуется эффективное поверхностно-активное действие.

Список литературы:

2. Ломинога Е.А., Бурмистров К.С., Гевод В.С. Синтез и свойства продукта ацилирования Синтанола АЛМ-10 фталевым ангидридом. *Вопр. химии и хим. технологии*. 2014. Т. 3. С. 52-55.



Электропроводность растворов дицианамидов N-алкилпиридиния

Егорова У.В. (специалист, 5 года обучения)

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

В настоящее время можно заметить резко возрастающий интерес применения ионных жидкостей в области электрохимических исследований и прикладных аспектах для использования их в качестве электролитов нового поколения в аккумуляторных батареях, солнечных панелях и др. Они очень практичны в использовании при проведении в них различных химико-технологических процессов, так как остаются жидкими в широком интервале температур, не летучи, не горючи, термически устойчивы и менее токсичны в сравнении с другими органическими растворителями.

В настоящей работе проведен синтез дицианамидов N-алкилпиридиния, а также кондуктометрическое исследование их разбавленных растворов в ацетонитриле. Синтезированные соединения представляют собой вязкие жидкости светло-желтого цвета, которые хорошо растворяются в воде и полярных органических растворителях. Зависимости эквивалентной электропроводности (ЭП) от квадратного корня концентрации представлены на рисунке 1.

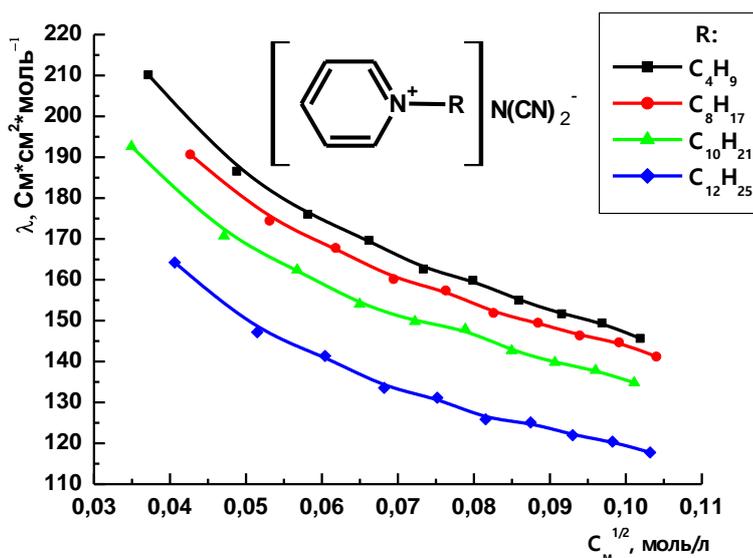


Рис. 1. Зависимость эквивалентной ЭП галогенидов N-алкилпиридиния в ацетонитриле от квадратного корня концентрации при 25 °С

Установлено, что зависимость ЭП растворов ИЖ в ацетонитриле от концентрации схожа с таковой для водных растворов сильных электролитов. Показано, что увеличение длины алкильного заместителя в катионе приводит к снижению эквивалентной ЭП растворов, изученных ИЖ в растворе ацетонитрила.



Амидообразование с участием ангидридов карбоновых кислот и ароматических аминов

Камардина Ю.С. (специалист, 5-го года обучения)

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

N-Замещенные амиды карбоновых кислот, имеющие в своем составе амидную группировку –NH–CO–, обладают ценными и уникальными свойствами, которые определяют их широкое применение в качестве биологически активных веществ, синтетических антибиотиков, растворителей, красителей и полупродуктов [1]. Амидная группировка атомов входит в состав высокомолекулярных соединений: полиамидов, полиуретанов и полиамидокислот, из которых получают высоко термостойкие полиимиды [2].

В настоящей работе синтезированы амиды на основе фталевого, малеинового, янтарного ангидридов и ароматических аминов: анилина, *n*-нитроанилина, *o*-метиланилина. В качестве растворителя использовался диметилформамид (ДМФА). Составлены закономерности влияния структуры ангидридов и аминов на выход и температуру плавления амидов.

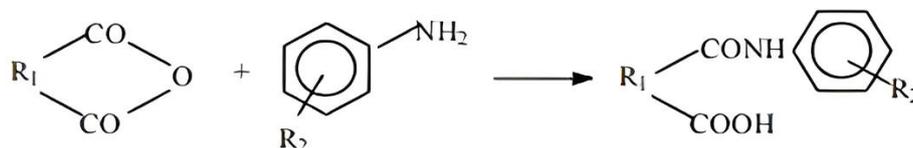


Рис. Схема синтеза амидов на основе ангидридов дикарбоновых кислот и ароматических аминов

Структура полученных соединений подтверждена методом ИК-спектроскопии.

Список литературы:

1. Садовников А. И. Закономерности амидообразования с участием ангидридов карбоновых кислот и ароматических аминов // Известия высших учебных заведений. - 2007. – Т. 50. Вып. 5.
2. Кустова Т. П. Стратегия выбора среды для *N*-ацилирования аминов // Рос. хим. ж. об-ва им. Д. И. Менделеева. - 2006. Т. L. Вып. 3.



Синтез и термическая стабильность металлных ионных жидкостей на основе четвертичных солей аммония и пиридиния

Кафтанов А.Д. (аспирант, 3-го года обучения)
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Журавлев О.Е.

Ионные жидкости (ИЖ) – органические соединения, состоящие из органического катиона и органического или неорганического аниона с температурой плавления ниже 100°C. Число ИЖ очень велико, благодаря большому количеству подходящих комбинаций катионов и анионов, этим объясняется большое разнообразие их свойств и возможностей для применения. Известно, что металлные ИЖ могут выступать заменой классических катализаторов - кислот Льюиса. От термической стабильности ионных жидкостей зависит диапазон температур, в котором они могут быть использованы.

Целью работы являлось получение железосодержащих ионных жидкостей на основе четвертичных солей аммония и пиридиния и изучение их термической стабильности на воздухе. Схема синтеза ИЖ представлена ниже.

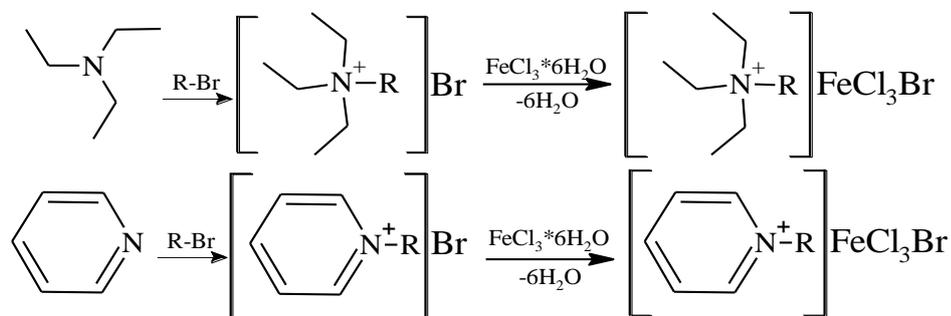


Схема 1. Синтез ионных жидкостей, где R: -C₂H₅, -C₄H₉, -C₆H₁₃, -C₈H₁₇, -C₁₀H₂₁, -C₁₂H₂₅, -C₁₆H₃₃

Строение всех полученных соединений подтверждено данными ИК-спектроскопии и спектроскопии в видимой области. Установлено, что бромтрихлорферраты N-алкилпиридиния обладают большей термической стабильностью на воздухе по сравнению с бромтрихлорферратами тетраалкиламмония. Показано, что среди исследованных ИЖ бромтрихлорферрат N-этилпиридиния обладает наибольшей термической стабильностью.



Синтез гетероциклических соединений по модифицированной реакции Биджинелли

Петров М. Р. (студент, 4-го года обучения)

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

Реакция Биджинелли является широко применяемым методом получения гетероциклических соединений — дигидропиримидинов. Для повышения эффективности реакции постоянно разрабатываются новые методики, в которых варьируются исходные реагенты, катализаторы и условия проведения. Одним из перспективных направлений является использование ионных жидкостей (ИЖ) в качестве катализаторов. ИЖ представляют собой расплавленные соли с температурой плавления ниже 100 °С. Они обладают уникальными свойствами, такими как нелетучесть, низкая токсичность, термическая и химическая устойчивость.

В данной работе показано, что использование *N*-метил-2-пирролидон гидросульфата и *N*-метил-2-пирролидон перхлората в качестве катализаторов в реакции Биджинелли приводит к значительному уменьшению времени синтеза и увеличению выходов продукта. В классической реакции Биджинелли, катализируемой кислотами Льюиса или Брэнстеда, время синтеза обычно составляет 15–20 часов, а выходы продукта достигают 20–50%. При использовании ИЖ время синтеза удалось сократить до 1 часа, а выходы увеличить до 81–94%. Кроме того, применение ИЖ позволило устранить необходимость использования растворителей и снизить температуру нагрева до 75–80 °С. Это не только ускоряет реакцию, но и делает ее более экологичной, так как отпадает необходимость в использовании летучих органических соединений.

Таким образом, использование ионных жидкостей в качестве катализаторов реакции Биджинелли является перспективным направлением, позволяющим оптимизировать условия проведения реакции и добиться более высоких выходов продукта.



Получение производных 2-аминопентандиовой кислоты и исследование их свойств

Рылина К.Д. (студентка 4-го года обучения)

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

Настоящая работа посвящена синтезу N-ациламино кислот, полученных из аминокислот и жирных кислот. В качестве объектов исследования выбрана глутаминовая кислота, высшие карбоновые кислоты, ангидриды карбоновых кислот. Синтезированы N-ацилоаминовые кислоты из галогенаминов, алифатических ангидридов или жирных кислот. Использована реакция Шоттена-Баумана.

Получение N-стеароилглутамат натрия проводили в две стадии. На схеме I показана реакция получения галогенгидрида карбоновой кислоты, которую использовали в синтезе на первой стадии. На второй стадии проводили ацилирование глутаминовой кислоты согласно схеме II.

Схема I.

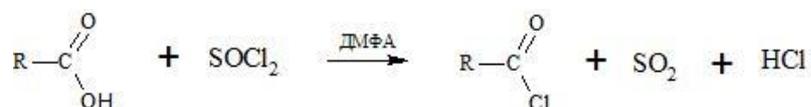
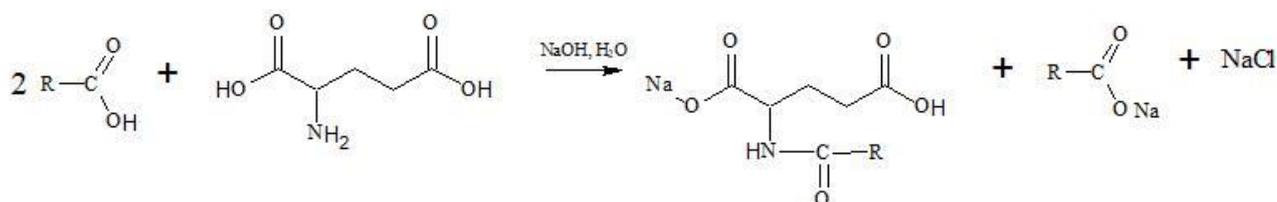


Схема II.



Полученный N-стеароилглутамат натрия представляет собой порошок светлорыжего цвета, растворяется в воде и спирте при нагревании. Состав и строение полученного соединения подтверждены данными ИК-спектроскопии (Таблица 1).

Таблица 1. Валентные полосы поглощения N-стеароилглутамата натрия

Функциональная группа	Теоретические валентные полосы поглощения, см ⁻¹	Практические валентные полосы поглощения, см ⁻¹
ОН	3600 - 3150	3410
С-О	1300 – 1250; 1150 - 1100	1255; 1126
С=О	1730 - 1715	~1705
С-О	1075 - 1000	1126
С-Н	2900 – 2880; 1340	2913; 1313
С=О	1700 - 1680	~1671

N-ацилпроизводное глутаминовой кислоты получено на основе фталевого ангидрида и глутаминовой кислоты. Данный метод представляет собой реакцию сплавления аминокислоты и фталевого ангидрида. Смесь эквимольных количеств веществ нагревали 0,5ч при температуре бани 145-150°C. После охлаждения твердый продукт реакции растворяли в горячем метаноле и разбавляли водой. Выпавшую кислоту отфильтровывали, промывали холодной водой и сушили в течение двух дней. Продукт выделяли в виде фталимида глутаминовой кислоты, который растворяется в этиловом спирте и ацетоне, в воде при нагревании.



Изучение взаимодействия ароматических нитрозосоединений с С-Н – кислотами.

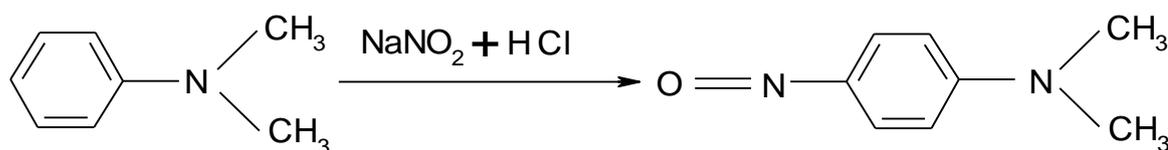
Силина М.А. (студент, 4-го года обучения)

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

Химия нитрозосоединений привлекает внимание многих исследователей, поскольку этот класс веществ находит широкое применение в различных областях производства. Ряд ароматических и гетероциклических нитрозосоединений и их производные являются биологически активными веществами, что позволяет их использовать для приготовления лекарственных препаратов.

Из известных методов синтеза нитрозосоединений (окисление аминов и N-замещённых гидроксиламинов, восстановление нитросоединений, нитрозирование металлоорганических соединений) был выбран метод замещения атома водорода на нитрозогруппу в ароматических соединениях.

Для синтеза был выбран N,N-диметиланилин



В качестве соединений с активной метиленовой группой были использованы ацетилацетон и ацетоуксусный эфир.

Полученные соединения после перекристаллизации из водного спирта представляют собой кристаллические вещества тёмно-зелёного цвета, мало растворимые в воде, но хорошо растворимые в органических растворителях [1].

Список литературы:

1. Щербина А.Э. органическая химия. Основной курс: учебник/ А.Э. Щербина, Л.Г. Мотусевич; под ред. А.Э. Щербины. – Минск: Новое знание. 2014. – 808с.



Синтез сложных эфиров на основе *n*-гидроксibenзойной кислоты

Сорокина П.А. (студент, 5 курс)

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

Сложные эфиры *n*-гидроксibenзойной кислоты с длиной углеводородного радикала C_{10} - C_{16} относятся к числу высокоэффективных синтетических консервантов. Преимуществом данных веществ является присутствие в соединениях гидроксильной группы, которая увеличивает бактериостатическое действие, что способствует уничтожению грамположительных видов бактерий. Данные консерванты не влияют на такие аспекты изготавливаемого продукта, как аромат и вкус.

Цель представленной работы – получение децилового и цетилового эфиров *n*-гидроксibenзойной кислоты в лабораторных условиях. Реакцией диазотирования *n*-аминобензойной кислоты нитритом натрия при охлаждении и тщательном перемешивании получен *n*-карбоксифенилдиазоний хлорид. Гидролизом соли диазония получена *n*-гидроксibenзойная кислота.

Методом азеотропной этерификации *n*-гидроксibenзойной кислоты дециловым и цетиловым спиртами получены сложные эфиры *n*-гидроксibenзойной кислоты.

Синтезированные эфиры очищены перекристаллизацией из ацетона до постоянной температуры плавления. Полученные алкил-*n*-гидроксibenзоаты – кристаллические вещества кремового и темно-кремового цвета, не имеющие запаха. Строение полученных соединений подтверждено данными ИК-спектроскопии. Определены температуры плавления и исследована растворимость алкил-*n*-гидроксibenзоатов. Рассчитан гидрофильно-липофильный баланс, по значению которого полученные эфиры можно отнести к эмульгаторам для систем «вода в масле».



Поверхностная активность цитрилглицерида

Тарабанова А.А. (магистрант 2 курс)

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

Общим свойством, объединяющим эмульгаторы и отличающим их от других пищевых добавок, является поверхностная активность [1]. Методом азеотропной этерификации получен сложный эфир на основе глицерина и лимонной кислоты, который относится к функциональному классу пищевых поверхностно-активных веществ (ПАВ). Представленная работа посвящена изучению поверхностной активности цитрилглицерида.

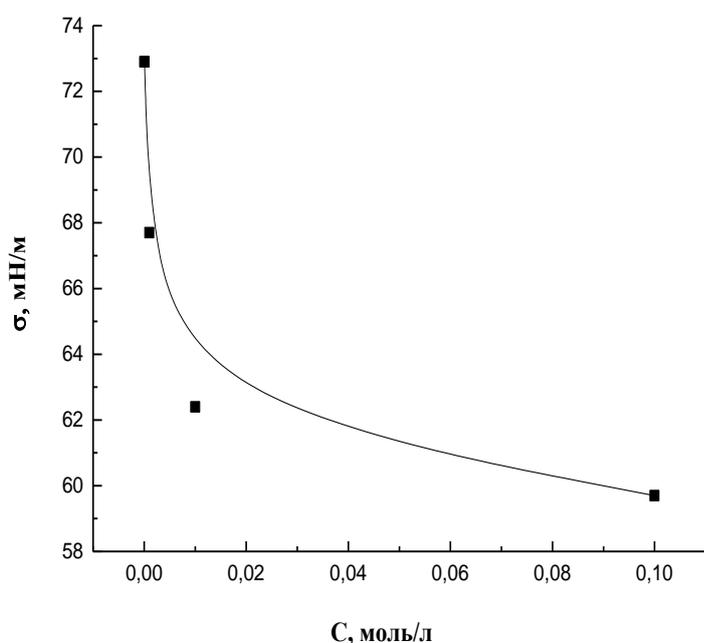


Рис. Зависимость поверхностного натяжения водных растворов цитрилглицерида от логарифма концентрации.

Методом максимального давления в газовом пузырьке определены значения поверхностной активности водных растворов синтезированного соединения. Изотерма (рис.) поверхностного натяжения подтверждает, что с повышением концентрации водных растворов поверхностная активность цитрилглицерида повышается и снижает поверхностное натяжение воды с 72,9 до 59,7 мН/м.

Список литературы:

1. Нечаев А.П., Траунберг С.Е., Кочеткова А.А. и др. Пищевая химия: под. ред. А. П. Нечаева. Издание 3-е, испр. – СПб.: ШОРД, 2004. – 404 с.



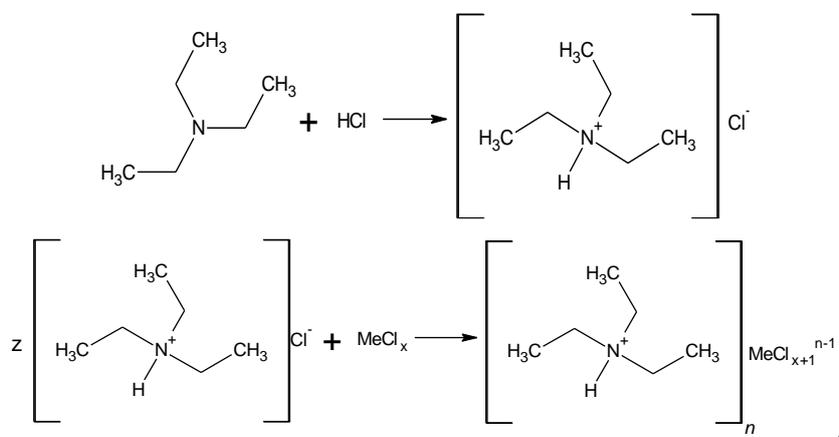
Синтез и свойства металлных ионных жидкостей

Цветкова И.В. (студент, 4-го года обучения)

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

Ионные жидкости - это новая область исследований в современных химических лабораториях по всему миру. Являясь "зелеными" катализаторами, растворителями, ионные жидкости прочно укоренились в современной органической химии. Металлные ионные жидкости - это ионные жидкости, состоящие из аниона, содержащего металл и органического катиона. Такие ионные жидкости обладают уникальными физико-химическими свойствами, такими как высокая термическая стабильность, низкая вязкость, хорошая электропроводность и магнитные свойства.

Целью данного исследования было получение ионных жидкостей металлов, содержащих следующие анионы: FeCl_4^- , ZnCl_4^{2-} , CoCl_4^{2-} , MnCl_4^{2-} и NiCl_4^{2-} на основе триэтиламина.



где Me: Fe (x=2, n=1, z=1); Co, Mn, Ni, Zn: x=3, n=2, z=2

Металлные ионные жидкости получают в две стадии. На первом этапе проводилась реакция протонирования триэтиламина и соляной кислоты. На второй стадии из гидрохлорида триэтиламмония были получены тетрагалогенометаллные ионные жидкости. Все синтезированные соединения были охарактеризованы по точкам плавления, а структуры полученных соединений подтверждены данными ИК-спектроскопии и спектроскопии в видимой области.



Исследование микрогеометрических параметров полиэтиленсукцината методом Roughness 3D Analysis

Шамарина К. А. (магистрант 2-го года обучения)

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

Метод Roughness 3D Analysis, входящий в ПО атомно-силового микроскопа «Solver P47» фирмы «NT-MDT», является удобным средством изучения микрогеометрических параметров поверхности изделий. Он позволяет рассчитывать 3D параметры, характеризующие структуру поверхности с учетом того, что поверхность располагается в трехмерном пространстве.

На полученных сканах поверхности полиэтиленсукцината наблюдается зернистая структура. Высота отдельных неоднородностей образцов не превышает 2 мкм.

Результаты исследования полиэфира представлены в виде конкретных параметров шероховатости (средней шероховатости и истинной площади поверхности) и трехмерной топографии. Значение средней шероховатости составило 240,608 нм, значение истинной площади поверхности составило 117,658 мкм².

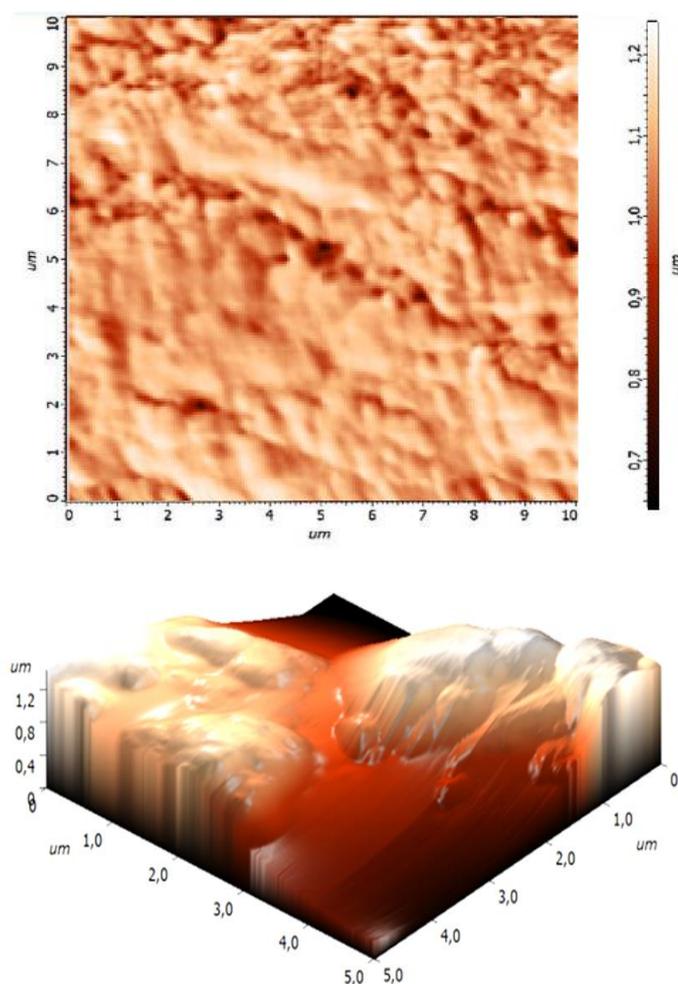
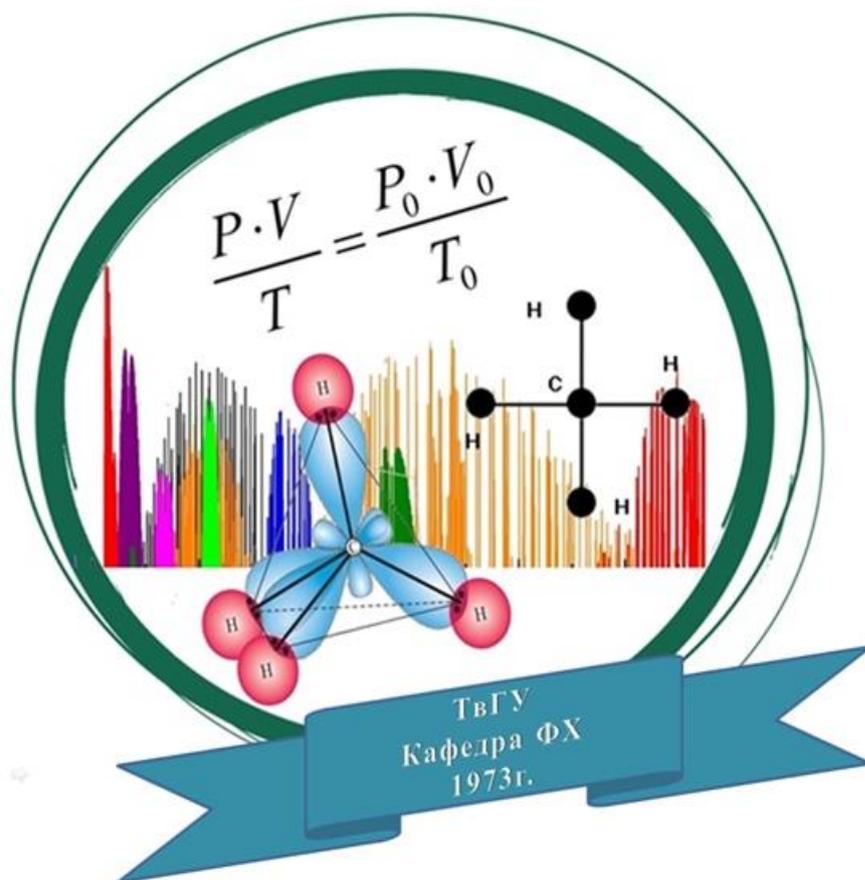


Рис.1. 2D- и 3D-сканы полиэфира



Секция физической химии



DFT рассмотрение конформеров ацетилцистеина

Бакалюк С.А. (Студент, 4 курс)

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

Ацетилцистеин (*L*-Асс) является муколитическим средством и используется в медицине уже несколько десятилетий. Знание его конформационного разнообразия и характеристик электронной плотности конформеров позволит лучше понять кинетику реакций с его участием и уточнить его термодинамические свойства. Рассмотрение отдельных конформеров *L*-Асс результативней проводить в рамках квантовой химии, поскольку использование её методов экономически более выгодно, чем проведение эксперимента.

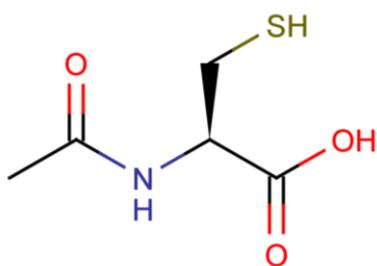


Рис.1. Структурная формула *L*-ацетилцистеина (*L*-Асс)

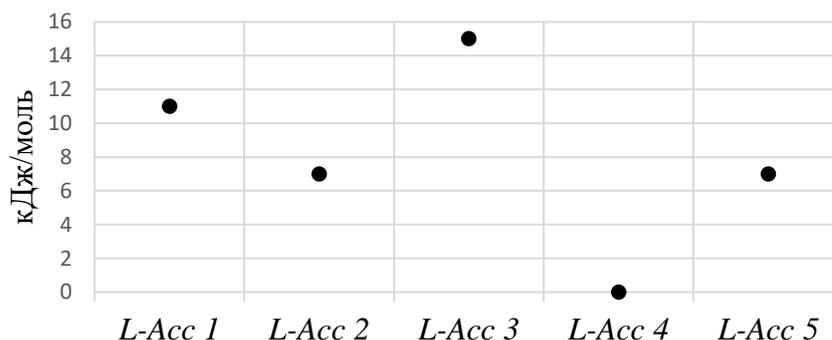


Рис.2. Отличие в полной электронной энергии конформеров *L*-Асс

Количественная оценка конформеров *L*-Асс (Рис. 1.) проводилась с помощью программы MarvinSketch, по предварительному распределению по энергиям выбраны пять конфигураций с наименьшей энергией, проведена маркировка расчетных моделей: *L*-Асс 1, *L*-Асс 2, *L*-Асс 3, *L*-Асс 4, *L*-Асс 5. Поиск равновесной геометрии пяти конформеров проведен функционалом B3LYP в программе Gaussian 03. Получены полные электронные энергии в а.е. пяти соединений. Наименьшей энергией обладает конформер *L*-Асс 4 (Рис. 2.). Энергия остальных состояний отличается от данного на 7 и более кДж/моль (н.у., газовая фаза), таким образом, при органическом синтезе их свойства будут вносить незначительный вклад в свойство получаемого вещества.



Топологический подход в исследовании физико-химических свойств карбоновых кислот

Барсукова В.В. (магистр, 2-го года обучения)

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

Карбоновые кислоты широко применяются в различных областях промышленности. Использование топологического подхода в исследовании физико-химических свойств карбоновых кислот представляет собой новую перспективу в химической науке. Рассмотрим некоторые топологические индексы (ТИ) и зависимости вида $P=f(\text{ТИ})$.

Для карбоновых кислот нами были выведены расчётные схемы в четвертом приближении [1]

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

Здесь R, p_1, p_2, p_3, \dots - число троек смежных рёбер, число путей длины l ($l=1,2,3,\dots$), а $p_{CC}, p_{CO}, \Gamma_{CC}, \dots$ - соответствующие параметры. По данной схеме проведены численные расчёты $\Delta_f H_{298(\text{ж})}^0$ и $C_{p(\text{ж}, 298 \text{ К})}^0$ карбоновых кислот.

Так для энтальпии образования средняя абсолютная ошибка расчёта ($|\bar{\varepsilon}|$) и максимальное отклонение (ε_{\max}) соответственно, составили 0,3 кДж/моль и -1,2 кДж/моль. Для теплоёмкости соответственно получаем $|\bar{\varepsilon}| - 2,1$ Дж/мольК и $\varepsilon_{\max} - 0,6$ Дж/мольК [1].

Получены новые данные, согласующиеся с экспериментом [2].

1. Барсукова В.В., Виноградова, М.Г. Теоретико-графовый подход в изучении корреляций структура – теплоёмкость карбоновых кислот. //ВестникТвГУ:Сер.Химия.2023.№3 (53).С. 30-34.
2. Lange's Handbook of Chemistry / Editor: J.A. Dean. (15th Edition), McGraw-Hill. 1999. [Электронный ресурс]. — URL: <http://fptl.ru/biblioteka/spravo4niki/dean.pdf> (дата обращения: 12.04.2024).

Свойства критических точек слабых взаимодействий.

Моделирование гидратации L-цистеина

Киреева Д.С. (бакалавр, 4 года обучения)

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

Рассмотрено образование слабых взаимодействий (СВ) в *L*-Cys и гидратированном тремя молекулами H₂O и проведено их сравнение. Моделирование L-цистеина и его гидратация (молекулы воды вводили со стороны группы –COOH) проводились в теориях квантовой химии. Оптимизация геометрии обеих молекул (Рис. а) и б)) проведена функционалом B3LYP, а параметры электронной плотности ($\rho(r)$) в критических точках (КТ) связевых путей (Табл.) получены в рамках quantum theory of atoms in molecules (QTAIM).

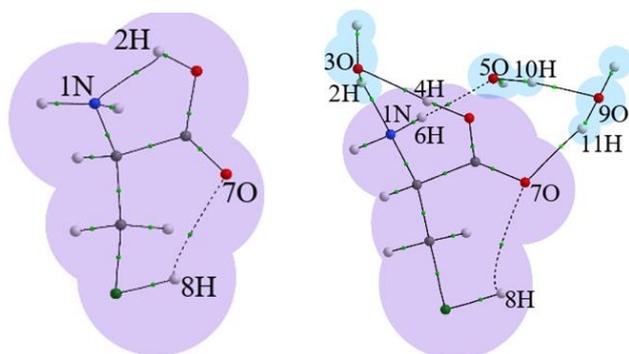


Рис. Оптимизированная геометрия а) *L*-Cys и б) *L*-Cys+3H₂O; цветные области схематично показывают количество взаимодействующих молекул

Безводный *L*-Cys имеет два внутримолекулярных СВ (1N \cdots 2H, 7O \cdots 8H) (Рис. а), но при добавлении молекул H₂O изменяется тип СВ 1N \cdots 2H на межмолекулярное с модификацией свойств электронной плотности ($\rho(r)$) этого СВ (Табл.): эллиптичности (ε) и длины связующего пути (L). Взаимодействие 1N \cdots 2H становится прочнее ($\rho(r)$ в КТ (3; -1) увеличивается, а L уменьшается), СВ (7O \cdots 8H) ослабевает (уменьшается $\rho(r)$ в КТ (3; -1) и увеличивается L)

Табл.: Интегральные характеристики в КТ СВ молекул цистеина.

Взаимодействие	<i>L</i> -Cys			<i>L</i> -Cys+3H ₂ O		
	$\rho(r)$, в а.е.	ε	L , в Å	$\rho(r)$, в а.е.	ε	L , в Å
1N \cdots 2H	0,034	0,25	1,99	0,043	0,04	1,85
3O \cdots 4H	-	-	-	0,047	0,04	1,72
5O \cdots 6H	-	-	-	0,022	0,07	2,04
7O \cdots 8H	0,014	0,21	2,40	0,013	0,64	2,63
7O \cdots 11H	-	-	-	0,023	0,03	1,90
9O \cdots 10H	-	-	-	0,035	0,03	1,84



Спектральные методы контроля синтеза и агрегационной стабильности наночастиц серебра, синтезированных с использованием водных экстрактов растений

Кузьпелев Н.А. (4 курс обучения)

Руководитель: к.х.н., доцент С.Д. Хижняк

Целью работы является изучение с помощью методов УФ-видимой спектроскопии и динамического светорассеяния процесса синтеза и агрегационной стабильности НЧС, синтезированных в водных экстрактах иван-чая (листья и цветы) и борщевика (листья).

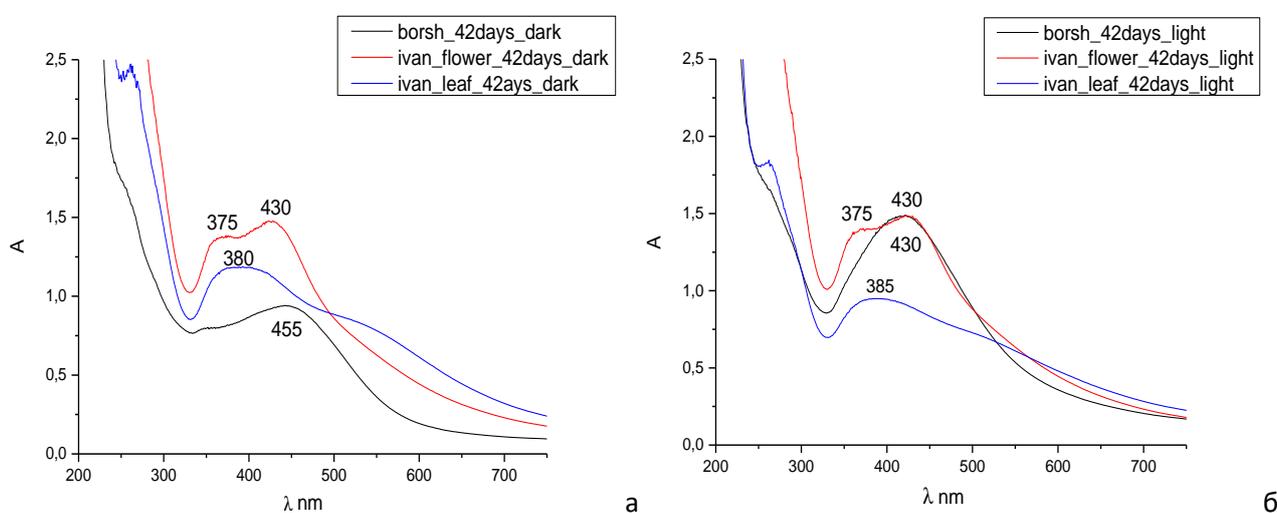


Рисунок. Электронные спектры наночастиц серебра через 12 дней в темноте (а) и 12 дней на свету (б)

На рис. А показаны электронные спектры растворов НЧС, синтезированных в экстрактах исследуемых растений, через 42 дня после добавления раствора AgNO_3 и хранящихся в темноте, и подвергнутых в течение 12 дней воздействию дневного света (рис. Б). Можно заметить, что ППР в спектре образца с борщевиком значительно выросла, в образце с цветами иван-чая осталась без изменений, а в образце листьев иван-чая заметно уменьшилась. Такие изменения в значениях ППР свидетельствуют о том, что воздействие дневного света на растворы, инициирующего восстановление Ag^+ , зависит от эффективности синтеза и модификации поверхности НЧС в водных экстрактах и может быть использовано для контроля стабильности биосинтезированных НЧС.

Работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии ЦКП ТвГУ.



Топологический подход в изучении энтальпии образования тиоэфиров

Макаров С.В. (студент, 4 курс)

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

Методы теории графов и топологии используются для корреляции и прогнозирования различных свойств веществ, в том числе и для энтальпии образования тиоэфиров.

Целью данной работы является – установление количественных корреляций “структура – энтальпия образования” в тиоэфирах.

В работе рассмотрены зависимости вида $P=f(\text{ТИ})$. Выявлены уравнения, отвечающие наиболее тесной корреляционной связи между энтальпией образования тиоэфиров и топологическими индексами. Например:

$$\Delta_f H^0_{(г, 298 К)} = -7,388 H - 9,585 p_2 - 12,682 p'_2 + 2,79R + 5,707 R' + 48,362$$

Средняя абсолютная ошибка расчета ($|\bar{\varepsilon}|$) и максимальное отклонение (ε_{\max}) составили соответственно 0,8 кДж/моль и 1,5 кДж/моль.

В работе были рассмотрены графические зависимости "Свойство- номер изомера" и "ТИ - номер изомера", "Свойство P – ТИ". Найдено, что величины $\Delta_f H^0_{298(г)}$ и $\Delta_f H^0_{298(ж)}$ хорошо коррелируют с индексами J , p_2' и H . В других случаях такой корреляции нет.

Также была дана теоретико-графовая интерпретация аддитивных схем расчёта. Например, в четвёртом приближении для тиоэфиров имеем:

$$P(C_n H_{2n+1})_2 S = p_1 p_{CC} + p'_1 p_{CS} + p_1^* p_{CS} + p_2 \Gamma_{CC} + p'_2 \Gamma_{CS} + R \Delta_{CCC} + \\ + R' \Delta_{CCS} + p_3 \tau_{CC} + p'_3 \tau_{CS} + p_4 \omega_{CC} + p'_4 \omega_{CS} + p_5 \nu_{CC} + p'_5 \nu_{CS}$$

Здесь $p_1, p_2, p_3, p_4, \dots$ – соответственно такие индексы как число путей длины один, два, три, ...; R – число троек смежных рёбер и т.д.. По данной схеме проведены численные расчёты $\Delta_f H^0_{298(г)}$ и $\Delta_f H^0_{298(ж)}$ тиоэфиров, согласующиеся с экспериментом. Получены новые данные.



Влияние морфологии прекурсоров на физико-механические свойства ориентированной пленочной нити сверхвысокомолекулярного полиэтилена

Макеев И.С. (студент, 4-го года обучения)

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

Перспективным материалом с широким спектром функциональных свойств, применяемым в настоящее время во многих отраслях промышленности для решения различных задач, является сверхвысокомолекулярный полиэтилен (СВМПЭ) - материал, который обладает множеством полезных свойств и применяется в различных областях промышленности.

В ходе работы было рассмотрено влияние морфологии прекурсоров на физико-механические свойства ориентированных пленочных нитей СВМПЭ, а именно влияние условий получения плёнок для дальнейшего вытягивания нитей. При температуре равной 135°C и времени 100 мин. были получены 2 пленки. Различие в получении было только в методе охлаждения: пленку №1 подвергли резкому охлаждению (Рис. 1.), то есть закалке, в отличии от пленки №2 (Рис. 2.).

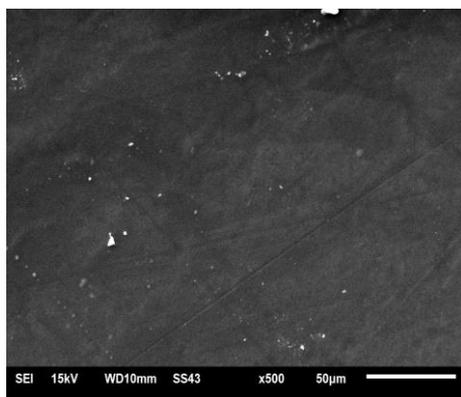


Рис.1. Пленка №1

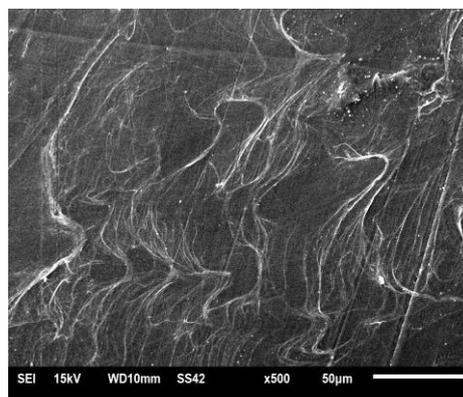


Рис. 2. Пленка №2

Список литературы:

1. Валуева М. И., Колобков А. С., Малаховский С. С. // Труды ВИАМ. 2020. Т. 3. №3. С. 49-52.



Золь-гель переход в системе L-цистеин/ AgNO_3 , инициированный фторид-анионом

Неелова А.В., Полякова Е.Э. (бакалавры, 3-го года обучения)

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

Стимуло-чувствительные супрамолекулярные гели на основе низкомолекулярных соединений вызывают повышенный интерес ученых со всего мира. Различные низкомолекулярные анионы, являющиеся инициаторами гелеобразования в таких системах, привлекают повышенное внимание в связи с их существенной ролью в окружающей среде и многих биологических процессах. Цель настоящей работы — исследование особенностей формирования и свойств супрамолекулярного геля на основе цистеин-серебряного золя (ЦСЗ) и галогенид-ионов.

Было установлено, что иодид-, бромид- и хлорид-ионы приводили к осаждению наночастиц ЦСЗ. При этом впервые выявлено, что фторид-анион может инициировать процесс гелеобразования в исследуемой системе. Полученные цистеин-серебряные гели обладают тиксотропными свойствами. Реологические испытания показали, что вязкость гелей падает при увеличении концентрации аниона, что связано с изменением микроструктуры пространственной сетки геля от вытянутых образований до сферических частиц. Взаимодействие частиц ЦСЗ с F^- имеет электростатическую природу. Эксперименты *in-vitro* показали, что цистеин-серебряный гель обладает высокой токсичностью по отношению к клеткам плоскоклеточного рака человека, при умеренном токсическом эффекте к нормальным клеткам фибробластам человека.

*Работа выполнена в рамках развития НЦМУ (№ 075-15-2022-305) на
оборудовании ЦКП ТвГУ и ИБМХ.*

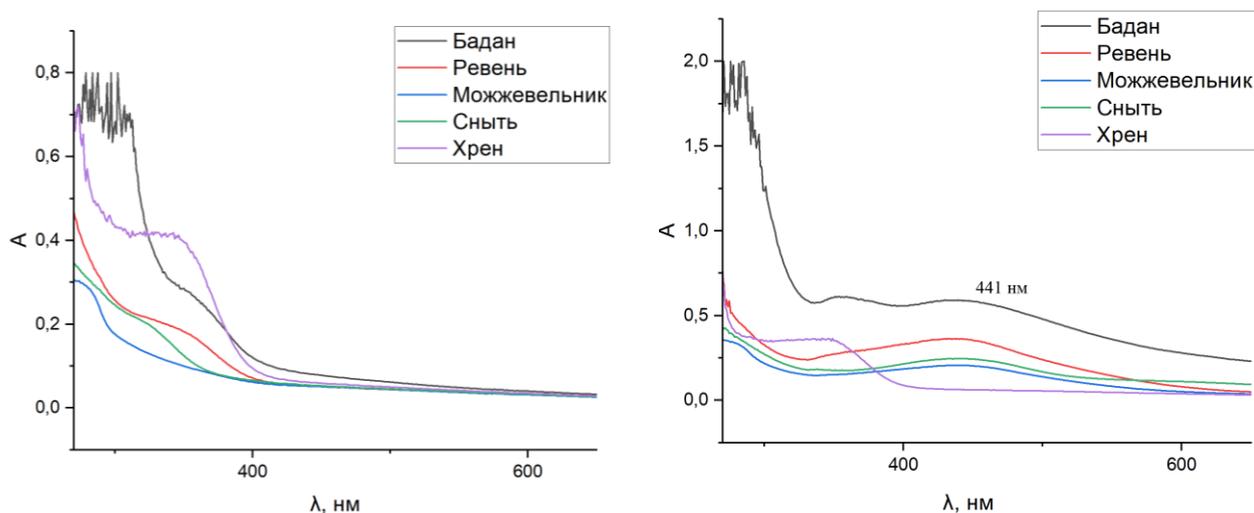


Зеленый» синтез наночастиц серебра и их физико-химические свойства

Салазкин Н.С. (аспирант, 1 год)

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

Применение экстрактов разнообразных растений для создания наночастиц серебра представляет собой инновационный и экономичный подход. Отличительной особенностью таких наночастиц является их модифицированная поверхность, на которой могут присутствовать органические лиганды, белки, полисахариды и многоатомные спирты. Целью исследования является экологически чистый синтез наночастиц серебра с использованием водных экстрактов избранных лекарственных растений, включая бадан, ревеня, можжевельник, сныть и хрен. В качестве ключевых методов исследования выступают спектроскопия в УФ-видимом диапазоне и динамическое светорассеяние. Анализ электронных спектров экстрактов до (А) и через 12 дней после (Б) введения AgNO_3 демонстрирует, что интенсивность поглощения и положение максимума плазмонного резонанса наночастиц серебра изменяются со временем. Исключением является образец с хреном, который не показал способности восстанавливать ионы серебра в исследуемых условиях. Самые высокие показатели поглощения были зафиксированы для экстрактов бадана и ревеня, которые представлены ниже:





Топологический подход в изучении амидов

Хижняк С.Б. (студент, 5 курс)

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

Целью данной работы является – установление количественных корреляций “структура – энтальпия образования” в амидах.

Для исследуемых соединений нами были вычислены некоторые топологические индексы (ТИ) и выявлена их дискриминирующая способность.

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

Для амидов нами также были получены расчётные схемы в третьем приближении:

$$P_{C_n H_{2n+1} O N} = p_1 b + p_1' b' + p_1'' b'' + p_2 \Gamma_{CC} + p_2' \Gamma_{CO} + p_2'' \Gamma_{CN} + p_2^* \Gamma_{NO} \\ + R \Delta_{CCC} + R' \Delta_{CON} + p_3 \tau_{CC} + p_3' \tau_{CO} + p_3'' \tau_{CN} + p_4 \omega_{CC} + p_4' \omega_{CO} + p_4'' \omega_{CN}$$

Здесь $p_1, p_2, p_3, p_4, \dots$ – соответственно такие индексы как число путей длины один, два, три; R – число троек смежных рёбер; b, Γ_{CC}, \dots - соответствующие параметры.

По данной схеме проведены численные расчёты $\Delta_f H^0_{298(\text{ж})}$ амидов, согласующиеся с экспериментом [1]. Получены новые данные. Средняя абсолютная ошибка расчета ($|\bar{\varepsilon}|$) и максимальное отклонение (ε_{\max}) соответственно, составляют 2,2кДж/моль и 5,5кДж/моль.

Список литературы:

1. Lange's Handbook of Chemistry / Editor: J.A. Dean. (15th Edition), McGraw-Hill. 1999. [Электронный ресурс].
URL: <http://fptl.ru/biblioteka/spravo4niki/dean.pdf> (дата обращения: 21.01.23).

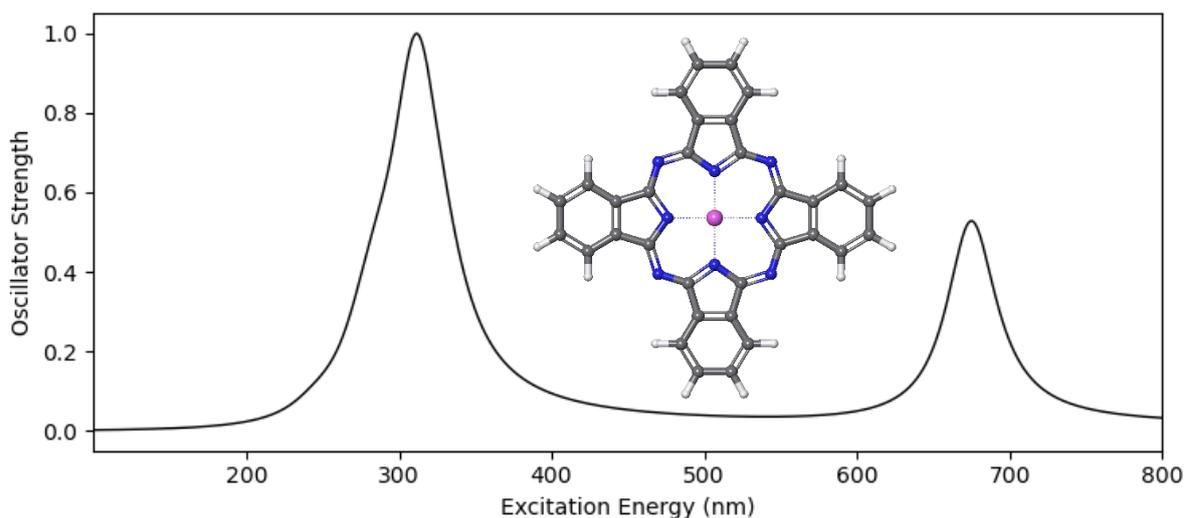


Квантовохимический расчёт электронного спектра поглощения фталоцианата магния

Васильева К.Д. (студентка, 3 курс)

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

Выполнено компьютерное моделирование структуры и некоторых свойств молекулы фталоцианата магния (MgPc). Расчёт структуры молекулы MgPc и значений энергии молекулярных электронных орбиталей HOMO и LUMO проведён методом функционала электронной плотности с использованием функционала r^2 SCAN-D3(BJ) и базиса 6-31G**++ . $E(\text{HOMO}) = -4.97$ эВ, $E(\text{LUMO}) = -3.50$ эВ. Расчёт электронного спектра поглощения проведён методом TD-DFT с использованием функционала CAM-B3LYP-D3(BJ) и базиса 6-31G**++ для раствора в диметилформамиде. Влияние растворителя при расчёте учитывалось по модели сольватации PBF. Рассчитанный спектр поглощения представлен на рисунке:



Рассчитанные значения максимумов полос поглощения 312 и 675 нм в полной мере соответствуют экспериментальным значениям 311 и 675 нм.



Абсорбция пиридина из газовой фазы кристаллическим сульфатом меди

Джабраилова А.Г. (студентка, 3 курс)

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

Измельчённые в агатовой ступке порошки кристаллогидрата $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ и безводного CuSO_4 насыпали тонким слоем толщиной не более 2 мм в открытые чашки Петри и помещали в эксикатор на фарфоровую сетку. Туда же помещали открытые стаканчики с безводным пиридином (для насыщения внутреннего пространства эксикатора парами пиридина) и сухими гранулами NaOH (для поглощения влаги). Плотнo закрывали крышку эксикатора и оставляли на трое суток. С течением времени порошки в чашках Петри приобретали одинаковый фиолетовый цвет, что свидетельствует о поглощении пиридина как безводным CuSO_4 , так и кристаллогидратом $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ с образованием пиридиновых комплексов меди(II). При растворении в воде комплексы разрушаются. В электронных спектрах поглощения их растворов проявляется полоса поглощения 803 нм, характерная для аква-комплекса меди(II). Термический анализ комплекса, полученного из безводного CuSO_4 , показывает, что удаление пиридина из комплекса в основном завершается при 270 °С, а состав комплекса примерно соответствует формуле $\text{CuSO}_4 \cdot 0.5\text{Py}$. Для комплекса, полученного из кристаллогидрата $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, удаление лигандов происходит в три ступени с эндотермическими максимумами при 180, 280 и 335 °С. По данным термического анализа можно составить формулу $\text{CuSO}_4 \cdot 0.5\text{Py} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$.

Таким образом по результатам проведённого исследования можно сделать вывод, что кристаллический сульфат меди(II), как в безводной форме, так и в форме пятиводного кристаллогидрата, способен поглощать пиридин из газовой фазы. При этом абсорбция пиридина кристаллогидратом $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ сопровождается частичной потерей воды.

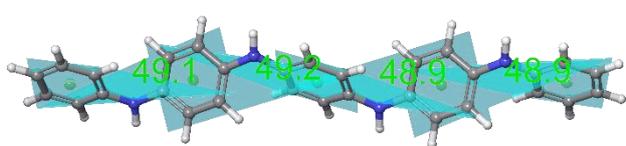


Квантовохимический расчёт структуры олигомеров анилина

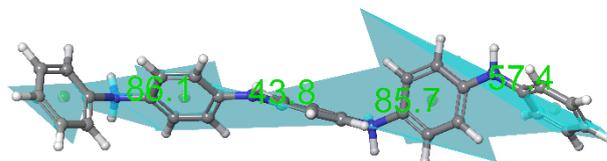
Зверева А.А. (студентка, 4 курс)

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

Методом функционала электронной плотности с использованием функционала r^2 SCAN-D3(BJ) и базиса 6-31G**++ проведён расчёт структуры олигомерных фрагментов полианилина в полностью восстановленной (лейкоэмеральдин), полуокисленной (эмеральдин) и полностью окисленной (пернигранилин) формах. Во всех случаях расчёт проведён для молекулярной и протонированной (катионной) форм. Протонирование аминных групп приводит к существенному увеличению углов между плоскостями циклов, а протонирование иминных групп, наоборот, эти значения уменьшает.

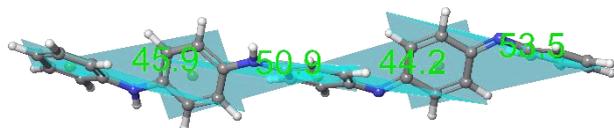


Молекулярная форма

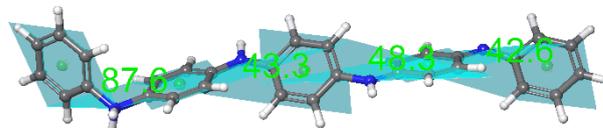


Протонированная форма

Лейкоэмеральдин

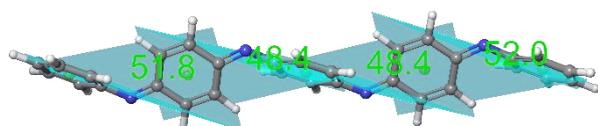


Молекулярная форма

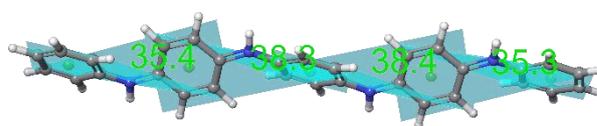


Протонированная форма

Эмеральдин



Молекулярная форма



Протонированная форма

Пернигранилин

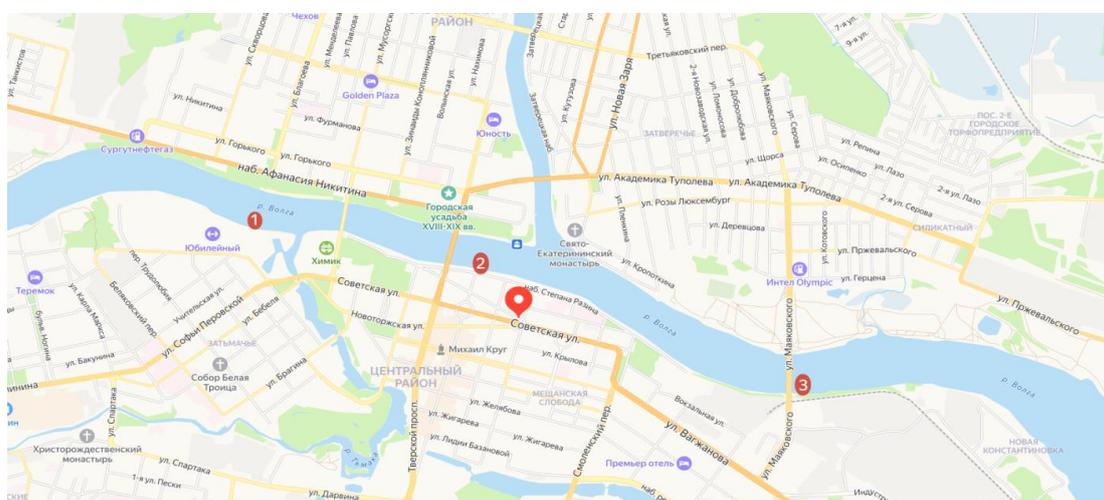
Тяжелые металлы в водах реки Волга

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

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

Актуальность темы заключается в том, что реки Твери являются важными водными объектами региона и имеют большое значение для жизни города.

Целью данной работы является изучение содержания цинка и никеля в водах реки Волги, в местах, обозначенных цифрами 1, 2 и 3. Результаты представлены в таблице.



Металл	Концентрация металлов, мг/л			
	Точка 1 р. Волга	Точка 2 р. Волга	Точка 3 р. Волга	ПДК
Цинк	28,492	44,832	48,92	5,0
Никель	0,5523	0,4056	1,1847	0,1

В результате данной работы было выявлено превышение нормативных значений содержания цинка и никеля в реке Волга. Расчёты показали, что наибольшее содержание металлов находится на третьем участке, т. е. на выходе из Твери.



Количественное определение кофеина в чае

Удовенко В.П. (студентка, 3 курс)

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

Экстракционно-фотометрическим методом проведено количественное определение кофеина в образцах чёрного (Greenfield Golden Ceylon) и зелёного (Ahmad Tea original) чая.

Анализируемый материал предварительно измельчали в ступке. Навеску переносили в мерную колбу, доводили до метки дистиллированной водой, перемешивали, выдерживали в течение часа и фильтровали через бумажный фильтр. Затем отбирали аликвоту фильтрата, помещали в пробирку с притёртой пробкой, прибавляли 10 мл хлороформа и энергично встряхивали в течение 15 минут. Полученный хлороформный экстракт кофеина оставляли для отстаивания полученной эмульсии на 2 часа. После этого водный слой отделяли, а хлороформный экстракт кофеина сливали в кювету спектрофотометра.

Определение кофеина при рабочей длине волны 275 нм (максимум поглощения хлороформного раствора кофеина). Для контроля чистоты хлороформного извлечения (наличие дополнительных органических веществ в хлороформном извлечении) проводили сканирование интервала длин волн от 200 до 400 нм, которое показало полное отсутствие дополнительно экстрагированных веществ. Калибровочный график строили по стандартным растворам кофеин-бензоата натрия.

Результаты определения

Образец	Найденная концентрация кофеина в экстракте, мг/л
Чай чёрный «Greenfield Golden Ceylon»	464,7
Зелёный чай «Ahmad Tea original»	313,6



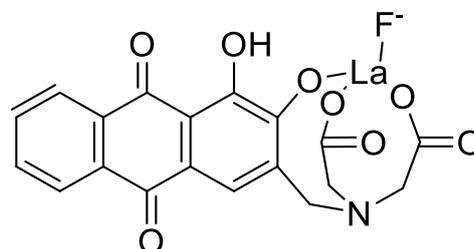
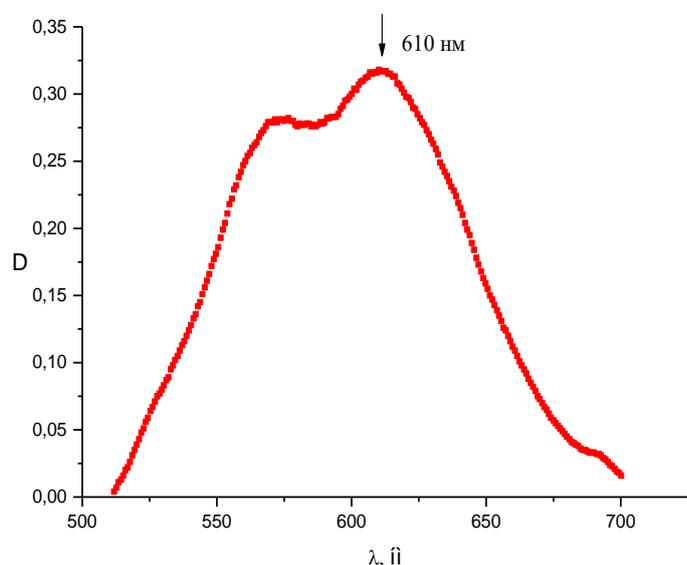
Количественное определение фторхинолонов в лекарственных формах

Черепанова М.В. (студентка, 3 курс)

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

Образцы лекарственных форм, содержащих фторхинолоновые антибиотики, смешивали с $\text{Ca}(\text{OH})_2$ и выдерживали в муфельной печи при 650 °С градусов на 3 часа. При этом органические вещества, входящие в состав лекарственной формы, разлагаются, а весь фтор переходит в CaF_2 . Далее тигель извлекали из печи и охлаждали. Его содержимое полностью перемещали в колбу с раствором оксалата аммония в двукратном мольном избытке. Смесь выдерживали в течение часа при непрерывном перемешивании. При этом фторид-ион переходил в раствор: $\text{CaF}_2 + \text{C}_2\text{O}_4^{2-} = 2\text{F}^- + \text{CaC}_2\text{O}_4$

Далее содержание фтора в растворе определяли спектрофотометрическим методом, основанным на образовании растворимый в воде тройного комплекса синего цвета, в состав которого входит лантан, ализарин-комплексон и фторид.



Спектр раствора, для определения ципрофлоксацина в лекарственной форме.

Содержание антибиотиков в лекарственных формах

Образец	Заявлено производителем, мг	Найдено, мг
Офлоксацин	200,00	198,8 ± 2,5
Нолицин (норфлоксацин)	400,00	397,1 ± 4,9
Ципролет (ципрофлоксацин)	250,00	244,7 ± 7,1