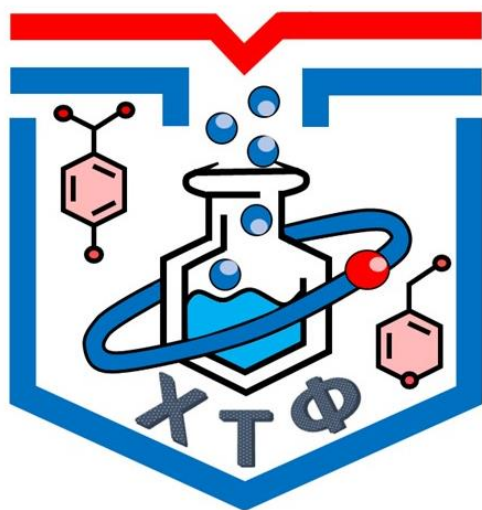


Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Тверской государственный университет»



XXIV НАУЧНАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ
АСПИРАНТОВ И
СТУДЕНТОВ ХИМИКО-
ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО
ФАКУЛЬТЕТА

Тезисы докладов

20 мая, Тверь
2025 г.

Ответственный за выпуск
Ассистент, Андрианова Я.В.

В сборнике представлены тезисы докладов научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов химико-технологического факультета Тверского государственного университета 2025 года в количестве 76 материалов. Доклады сгруппированы по секциям, соответствующим научным направлениям кафедр.



Оглавление

Секция биохимии и биотехнологий 7

1. [Букова Е.П.](#) Изучение влияния пряных трав на процесс брожения и органолептические свойства кваса..... 8
2. [Гордеенко А.Г.](#) Исследование качества заварных пирожных «Эклер» 9
3. [Росолович М.А.](#) Модифицированный рецепт шарлотки с повышенным содержанием калорий и биологической ценности 10
4. [Тишкарёв Е.М.](#) Разработка кекса с повышенным содержанием витамина С 11
5. [Усова П.С.](#) Использование соевой муки в технологии мучных кондитерских изделий на примере кекса на дрожжах 12
6. [Филючкова К.А.](#) Изучение технологии производства и оценка качества печенья сдобного 13

Секция неорганической и аналитической химии.... 14

7. [Агапитов С.В.](#) Сравнение методик определения железа в питьевой воде титриметрическим и атомно-абсорбционным методами..... 15
8. [Андреев К.](#) Анализ жёсткости и содержания никеля в водных источниках тверской области 16
9. [Аразгелдиева Ш.](#) Анализ препарата «Витамины группы В Эвалар» методом тонкослойной хроматографии 17
10. [Артамонова А.А.](#) Определение содержания железа в источниках пригородной зоны города Тверь..... 18
11. [Архангелова Ю.Н.](#) Верификация стандартизированных методик определения азота (белка) в пищевых продуктах..... 19
12. [Васильева Л.А.](#) Количественное определение жира и водорастворимых витаминов методом ВЭЖХ в композитных смесях, используемых в функциональных группах питания..... 20
13. [Васильева К.Д.](#) Исследование кислотно-основных свойств меропенема методами рН-метрического титрования и компьютерного моделирования 21
14. [Горячева Е.А.](#) Экспериментальное и теоретическое исследование электронных спектров мурексида 22
15. [Гультяева К.А.](#) Анализ образца стали химическими и физико-химическими методами 23
16. [Гусева Д.Д.](#) Исследование свойств замасливателя методами аналитической и физической химии..... 24



17.	<u>Джабраилова А.Г.</u> Константы кислотно-основных равновесий в растворе цефиксима по данным рН-метрического титрования и компьютерного моделирован.....	25
18.	<u>Егорова К.В.</u> Фотометрическое определение кофеина, парацетамола, ацетилсалициловой кислоты в препарате Цитрамон П.....	26
19.	<u>Иванюта Я.В.</u> Определение дифенгидрамина гидрохлорида в лекарственном препарате Антигриппин-АНВИ спектрофотометрическим методом	27
20.	<u>Исаев И.Д.</u> Исследование гелеобразования в системах цефтриаксон – Co(II) и цефтриаксон – Ni(II)	28
21.	<u>Крылова А.В.</u> Исследование процессов ступенчатой диссоциации комплексона, производного валерьяновой кислоты	29
22.	<u>Лисицкий Т.М.</u> Создание прекурсоров для синтеза разветвленных экологически безопасных комплексонов.....	30
23.	<u>Мартынюк А.В.</u> Количественное определение ибупрофена разных производителей.....	31
24.	<u>Митрика К.В.</u> Исследование полиморфизма стрептоцида.....	32
25.	<u>Мишутина А.А.</u> Модификация пробоподготовки при анализе алкогольной продукции для идентификации методом определения отношения изотопов $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$	33
26.	<u>Найман Е.В.</u> Количественный анализ витамина Е в косметических кремах	34
27.	<u>Насуров Р.Д.</u> Создание ионоселективного электрода (ИСЭ) для определения метоклопрамида.....	35
28.	<u>Никитин С.А.</u> Титриметрическое определение индометацина в лекарственных препаратах	36
29.	<u>Петровичева М.В.</u> Оптимизация условий пробоподготовки при определении фосфора в пищевых продуктах.....	37
30.	<u>Прокофьева Д.А.</u> Определение содержание ионов натрия, калия, магния и кальция в лечебно-столовой минеральной воде	38
31.	<u>Серафимский А.С.</u> Сравнительный анализ методик определения серной кислоты в воздухе рабочей зоны фотометрическим и турбидиметрическим методами	39
32.	<u>Суворов А.А.</u> Усиление ростостимулирующих свойств гуминовых кислот комплексонами	40
33.	<u>Титова Т.В.</u> Сравнительный анализ титриметрической и вольтамперометрической методик определения йода в пищевых продуктах и продовольственном сырье.....	41



34. [Тищенко А.А.](#) Определение концентрации минералов, влияющих на вкус и качество вина 42
35. [Удовенко В.П.](#) Исследование комплексообразования в системе иминодиянтарная кислота – скандий (III) 43
36. [Филатова Е.А.](#) Анализ монет Госбанка России..... 44
37. [Черепанова М.В.](#) Квантово-химическое исследование комплексов на основе диацетилмоноксима..... 45
38. [Чесноков А.Ю.](#) О контроле окружающей среды с помощью ИСЭ 46
39. [Щеглова Л.А.](#) Количественное определение рутина в некоторых лекарственных формах методом ВЭЖХ..... 47

Секция органической химии 48

40. [Арефьев А.А.](#) Получение квантовых точек сульфида кадмия с использованием N-алкилпиридиниевых тетрафторборатных ионных жидкостей..... 49
41. [Гапоненко О.В.](#) Получение производных бетулина и исследование их свойств..... 50
42. [Дю М.А.](#) Термическая стабильность имидазолиевых ионных жидкостей с гексафторфосфат-анионом 51
43. [Зайцева А.Е.](#) Синтез солей N-алкилпиридиния и изучение их защитных свойств в кислой среде 52
44. [Ипатова О.А.](#) Изучение термической стабильности дицианамидов N-алкилоксикарбонилметилпиридиния..... 53
45. [Калашикова А.О.](#) Пластификаторы для поливинилхлорида на основе дикарбоновых кислот и синтанолов..... 54
46. [Кафтанов А.Д.](#) Синтез и физико-химические свойства железосодержащих ионных жидкостей на основе солей 1-алкилпиридиния 55
47. [Крупнов В.М.](#) Влияние поверхностно-активных веществ на свойства растворов желатина..... 56
48. [Кузина Е.П.](#) Получение эмульсий оливкового масла методом температурной инверсии фаз 57
49. [Куприянова С.М.](#) Синтез протонированных ионных жидкостей на основе солей аммония 58
50. [Мальшева П.А.](#) Синтез N,N-диалкилпиридиниевых ионных жидкостей с металлными анионами 59
51. [Молчанова У.А.](#) Синтез оснований Шиффа конденсацией ароматических альдегидов с анилином 60
52. [Мочалов В.В.](#) Изучение способов влияния на процесс полимеризации акрилонитрила 61



53.	<u>Синицына А.О.</u> Ацилирование спиртов ангидридами двухосновных кислот	62
54.	<u>Соловьева А.Ю.</u> Влияние структуры аниона на термическую стабильность аммониевых ионных жидкостей	63
55.	<u>Терентьев Д.И.</u> Синтез и термическая стабильность тетраалкиламмониевых ионных жидкостей	64
56.	<u>Усманова А.И.</u> Получение 3-(D-глюкопентаоксипентил)-содержащего формазана	65
57.	<u>Фонникова А.А.</u> Получение 1,3,5-трифенилвердазила на основе бензальдегида	66
58.	<u>Харкунова М.К.</u> Исследование свойств алканоламинов	67
59.	<u>Шараева Я.А.</u> Электропроводность растворов тетрафенилборатов 1-алкилпиридиния	68

Секция физической химии..... 69

60.	<u>Бакалюк С.А.</u> Интегральные электронные характеристики групп конформеров ацетилцистеина	70
61.	<u>Баранник А.А.</u> Модификация супрамолекулярных гидрогелей на основе L-Cys-AgNO ₃ с помощью лаурилсульфата натрия (SDS) и лаурата натрия (SL)	71
62.	<u>Беляков А.А.</u> Исследование процессов формирования ассоциатов на основе глутатиона и нитрата серебра	72
63.	<u>Горбань А.П.</u> Воздействия дневного света на характеристики наночастиц серебра, полученных зеленым синтезом из экстрактов боярышника	73
64.	<u>Денисенко В.Д.</u> Изучение взаимодействия L-цистеина с йодатом калия	74
65.	<u>Ершов Н.А.</u> Исследование геле- и пленкообразующей способности каррагинана при добавлении цистеин-серебряного раствора	75
66.	<u>Захарова А.С.</u> Параметры КТ (3; -1) в молекуле орто-метилфенилсульфоновой кислоты	76
67.	<u>Зеников Г.Р.</u> Влияние взаимодействия хитозана с различными ионами на свойства ЦСР гидрогелей	77
68.	<u>Киреева Д.С.</u> Моделирование гидратации L – цистеина четырьмя молекулами воды	78
69.	<u>Малинина А.А.</u> Идентификация химического состава и определение чистоты Подорожника большого	79
70.	<u>Механников И.А.</u> Процессы структурирования в коллоидных растворах на основе аминокислоты l-цистеин и нитрата серебра под влиянием галогенид-анионов	80
71.	<u>Новожилова А.С.</u> Энергетические характеристики простых эфиров	81



72. [Полякова Е.Э.](#) Новый подход для получения гибридных наноструктур AgJ/Ag₂O методом «мокрого» синтеза 82
73. [Пыжова А.Р.](#) Объемы и заряды групп пентамеров винилиденфторида.....83
74. [Пыжова А.Р.](#) Моделирование межмолекулярных взаимодействий винилиденфторида 84
75. [Савенко А.О.](#) Спектральный анализ морфологии эмульсий типа Вода/Масло.....85
76. [Тищенко В.С.](#) Объемы групп эфиров фторангидрида метилфосфоновой кислоты..... 86



Секция биохимии и биотехнологий



Изучение влияния пряных трав на процесс брожения и органолептические свойства кваса

Букова Е.П. (бакалавр, 3-го года обучения)

Научный руководитель: зав. кафедрой, доцент, к.х.н. Прутенская Е.А.

Целью работы было изучение влияния пряных трав (корицы, кардамона, гвоздики) на процесс брожения и органолептические свойства хлебного кваса.

Хлебный квас — традиционный ферментированный напиток, обладающий высокой пищевой и функциональной ценностью. Основными этапами приготовления кваса являлись: подготовка хлебных сухариков, приготовление сусла, основное брожение (2 дня) и дображивание с внесением пряностей (1 день), фильтрацию и контроль качества. Для исследования была взята экспериментальная рецептура: вода питьевая 2,5 л, сухарики ржаные 250г, сахар-песок 60г, дрожжи хлебопекарные фирмы «Саф-Момент», корица молотая 2г, кардамон в стручках 8шт, гвоздика сушеная 8 почек.

При изучении процесса брожения определяли кислотность кваса, массовую долю сухих веществ. Микробиологический анализ зафиксировал, что в процессе основного брожения количество дрожжей увеличивалось. Однако, при добавлении пряностей в конце вторых суток произошло снижение количества дрожжей на третьи сутки. Таким образом, пряные добавки могут выступать в качестве регуляторов спиртового брожения при производстве кваса.

Органолептический анализ выявил улучшение вкусо-ароматических характеристик полученного напитка благодаря пряностям, которые придали квасу уникальные оттенки.

Результаты работы демонстрируют, что добавление пряных трав не только обогащает вкус и аромат кваса, но и способствует повышению его функциональных свойств. Полученные данные могут быть использованы для оптимизации технологии производства кваса и расширения ассортимента функциональных напитков.



Исследование качества заварных пирожных «Эклер»

Гордеенко А.Г. (бакалавр, 5-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Филатова А.Е.

В настоящее время любой пищевой продукт в своем составе имеет большое количество различных пищевых добавок и ароматизаторов. Их применение позволяет улучшить, как пищевые качества продукта, так и улучшают, и стабилизируют структуру продуктов. Применение пищевых добавок соответствует требованиям ТР ТС 029/2012 «Требования безопасности пищевых добавок, ароматизаторов и технологических вспомогательных средств».

Все используемые производителем пищевые добавки не влияют на такие органолептические показатели, как вкус и цвет продукта. Так же были проведены физико-химические исследования изделий. Были проведены исследования заварных пирожных таких производителей: ЗАО Хлеб, АО «Волжский пекарь», ООО «Гиперглобус», ТМ «Ермолино». В результате проведенных исследований можно сказать, что увеличение количества консервантов, добавляемых при производстве увеличивает кислотность изделия, наибольший градус кислотности показали изделия фирмы ТМ «Ермолино». При этом данные изделия обладают длительным сроком хранения. Наибольшей влажностью обладают изделия АО «Волжский пекарь», величина влажности составила 44%, что не соответствует нормам. Остальные показатели всех исследуемых образцов соответствуют нормам.

1. «ОСТ 10-060-95. Стандарт отрасли. Торты и пирожные. Технические условия». Утвержден Минсельхозпродом России 30.03.1995.
2. ТР ТС 021/2011 Технический регламент Таможенного союза. О безопасности пищевой продукции. Утвержден Решением Комиссии Таможенного союза от 9 декабря 2011 года N 880.



Модифицированный рецепт шарлотки с повышенным содержанием калорий и биологической ценности

Росолович М.А. (бакалавр, 3-го года обучения)

Научный руководитель: зав. кафедрой, доцент, к.х.н. Прутенская Е.А.

Шарлотка является классическим рецептом готовки бисквитного пирога с начинкой из яблок. Классический рецепт включает в себя яблоки, яйца, муку, сахар и разрыхлитель. В модифицированном рецепте к классическим ингредиентам добавляются грецкие орехи, корица и курага.

В этой работе я приведу изменения пищевой и энергетической ценности моего рецепта и чем это актуально. Проведя расчет, мы получили данные, представленные в таблице.

Продукты	Белки	Жиры	Углеводы	Калории на 100 г	Масса, г	Калорий на массу
Яблоки	0,3	0,2	14	52	450	234
Яйца	12,7	9,5	0,7	143	200	286
Мука	10,3	1,1	70	334	120	400,8
Сахар	0	0	100	387	150	580,5
Курага	3	0,4	64	260	50	130
Грецкие орехи	15	66	13	660	50	330
Корица	4	1,2	80	250	4	10

Из полученных результатов (таблица 1) можно сделать вывод, что в модифицированном рецепте значительно повышается энергетическая ценность за счет добавления орехов и кураги и за счет орехов повышается содержание жиров, что улучшает пищевую ценность. Продукт обогащен полиненасыщенными жирными кислотами, К, Mg. Этот модифицированный рецепт отлично подойдет подросткам за счет его повышенной энергетической и пищевой ценности.



Разработка кекса с повышенным содержанием витамина С

Тишкарёв Е.М. (бакалавр, 3-го года обучения)

Научный руководитель: зав. кафедрой, доцент, к.х.н. Прутенская Е.А.

Функциональные продукты питания, обладающие дополнительной пользой для здоровья, например, с повышенной концентрацией витамина С, приобретают всё большую популярность. В качестве основы для такого продукта выбрано кондитерское изделие — апельсиновые кексы, обогащённые натуральными ингредиентами, которые содержат витамины и микроэлементы.

Целью работы являлась разработка рецептуры изделия с повышенным содержанием витамина С.

Технологический процесс включал приготовление теста на основе апельсинового сиропа с цедрой, яйца, масла, сметаны и пшеничной муки. В качестве начинки использовали лаймо-имбирный курт. Выпечку осуществляли при 180°C в течение 25 минут.

В процессе исследования использовались лабораторные методы определения пищевой ценности расчетным способом, а также измерения титруемой кислотности по ГОСТ 31986-2012.

Таблица. Характеристика полученного продукта

Белки	Жиры	Углеводы	Содержание витамина С, мг/100г	Пищевая ценность	Кислотность
81,6 г	128,4 г	610,7 г	270	3944 ккал	0,192 Т

На основании проведенных исследований сделан вывод, что разработанное кондитерское изделие соответствует критериям функционального питания благодаря содержанию пектина цитрусовых и витамина С, который способствует длительной сохранности продукта.



Использование соевой муки в технологии мучных кондитерских изделий на примере кекса на дрожжах

Усова П.С. (студент, 2-го года обучения)

Научный руководитель: ст. преподаватель Кудряшова Н.А.

Кексы представляют собой мучные кондитерские изделия, выпеченные из сдобного теста. В зависимости от технологии производства и рецептуры вырабатывают кексы: на дрожжах; химических разрыхлителях; без химических разрыхлителей и дрожжей [1]. Цель исследования: изучение возможности использования соевой муки в технологии кексов и оценка ее влияния на показатели качества и пищевую ценность готовых изделий. Для достижения поставленной цели предложено внесение в рецептуру муки соевой в количестве 4%, 8% и 12%. Соевая мука имеет богатый белковый (45-50%) и витаминный состав. В качестве основы выбрана рецептура кекса дрожжевого «Весеннего». Методом пробной лабораторной выпечки произведено четыре образца: №1 - по классической рецептуре, №2, №3 и №4 - с добавлением соевой муки в количестве 4%, 8% и 12% соответственно. Изделия имеют показатели: форма круглая, мякиш желтого цвета, пористый, на разрезе равномерно распределены изюм и цукаты, поверхность посыпана рафинадной пудрой. Установлено, что Образец №4 обладает наилучшими органолептическими характеристиками (структура без пустот и уплотнений, более нежная по сравнению с другими образцами, яркая корочка). Влажность изделия 19,07%. Все показатели соответствуют ГОСТ. Таким образом, применение соевой муки в технологии кексов, путем добавления ее в пшеничную, приводит к улучшению органолептических характеристик, обогащению химического состава и повышению пищевой ценности готовых изделий.

1. ГОСТ 15052-2014 «Кексы. Общие технические условия» [Текст]. – Москва: Стандартинформ, 2015 – 11 с.



Изучение технологии производства и оценка качества печенья сдобного

Филючкова К.А. (студент, 2-го года обучения)

Научный руководитель: ст. преподаватель Кудряшова Н.А.

Печенье – это мучное кондитерское изделие разнообразной формы, массовой долей влаги не более 16,0%. Печенье изготавливают в следующем ассортименте: сахарное, сдобное, овсяное, затяжное. Сдобное печенье может быть изготовлено без использования муки и (или) других продуктов переработки зерна. Например, печенье, изготовленное с использованием тонкоизмельченных продуктов переработки орехов и (или) арахиса [1].

Цель работы: изучение технологии производства и оценка качества печенья сдобного злакового, реализуемого в розничной торговой сети г. Твери.

Технология печенья сдобного имеет различия в способах приготовления теста, особенностях формования изделий, но выделяют основные общие стадии: подготовка сырья; приготовление теста; формование; отделка пласта теста/тестовых заготовок; выпечка; охлаждение; отделка (если предусмотрено рецептурой); фасование, упаковывание; хранение.

Для проведения оценки качества был изучен розничный рынок мучных кондитерских изделий в части печенья сдобного. Отобраны 3 образца: №1- Печенье злаковое «Коломенское», 120 г; №2 – Печенье злаковое «Ивашкино», 190 г; №3 – Печенье сдобное «Полезный завтрак злаковый микс» Хлебный дом, 160 г. В результате анализа проведена оценка органолептических и физико-химических показателей на соответствие изучаемых образцов требованиям ГОСТ 24901-2023. Органолептически оценивали: вкус и запах, форму, внешний вид, вид в изломе. Из физико-химических показателей определяли: влажность, щелочность. Все образцы соответствуют требованиям ГОСТ.

1. ГОСТ 24901-2023 «Печенье. Общие технические условия» [Текст]. – Москва: ФГБУ «Институт стандартизации», 2023 – 16 с.



Секция неорганической и аналитической химии



Сравнение методик определения железа в питьевой воде титриметрическим и атомно-абсорбционным методами

Агапитов С.В. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Определение содержания железа в питьевой воде имеет важное значение для оценки её качества и соответствия санитарно-гигиеническим нормам [1]. Целью данной работы было сравнение двух методов количественного анализа железа: титриметрического метода и атомно-абсорбционного метода [2].

По результатам анализа было установлено, что атомно-абсорбционный метод предпочтителен для точного количественного определения железа в питьевой воде, особенно при низких концентрациях, в то время как титриметрический метод может быть использован в лабораториях с ограниченными техническими возможностями.

Тип воды	ААС-метод (мг/л)	Титриметрический метод (мг/л)	Разница (%)
Водопроводная	0,071	0,054	23,9%
Колодезная	0,073	0,067	8,2%
Бутилированная	0,0025	0,0043	-42,0%

1. Егорова Ю. А. и др. О введении в действие новых санитарно-эпидемиологических требований к питьевому водоснабжению //Водоснабжение и санитарная техника. – 2021. – №. 9. – С. 26-30.
2. ГОСТ 4011-72. Вода питьевая. Методы определения железа.



Анализ жёсткости и содержания никеля в водных источниках тверской области

Андреев К. (специалист, 5-го года обучения)

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

Проблема качества питьевой воды остаётся актуальной в контексте экологического мониторинга и охраны здоровья населения. Особое внимание уделяется таким параметрам, как жёсткость воды и наличие тяжёлых металлов, в частности никеля, которые могут оказывать токсическое действие при превышении допустимых концентраций. В условиях Тверской области исследование природных источников – родников, рек, а также водопроводной воды – позволяет оценить состояние водоснабжения и определить потенциальные риски. Цель работы – оценка жёсткости и содержания никеля в водах различного происхождения и сравнение полученных данных с нормативами предельно допустимых концентраций (ПДК).

Жёсткость воды определялась методом комплексонометрического титрования по ГОСТ 4151-72 [1]. Концентрация никеля оценивалась фотометрическим методом по ГОСТ 13938.6–78 с использованием диметилглиоксима и измерением оптической плотности при длине волны 434–450 нм [2]. Для анализа использовались пробы водопроводной, речной и родниковой воды.

Таблица. Результаты анализа

№	Образец	Жёсткость, ммоль/дм ³	Содержание никеля, мг/дм ³
1	Tver (водопровод)	6,2	0,0014
2	Vyshne (река)	5,3	0,0003
3	Rod (родник)	4,3	0,0003
ПДК [3]		6,5-8,5	0,1

1. ГОСТ 4151-72. Вода питьевая. Методы определения общей жёсткости. – М.: Изд-во стандартов, 2000. – 6 с.
2. ГОСТ 13938.6-78. Металлы. Методы фотометрического определения никеля. – М.: Изд-во стандартов, 2000. – 13 с.
3. Санитарные правила и нормы СанПиН 1.2.3685-21 «Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания».



Анализ препарата «Витамины группы В Эвалар» методом тонкослойной хроматографии

Аразгелдиева Ш. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Для разделения витаминов, входящих в состав препарата «Витамины группы В Эвалар» методом тонкослойной хроматографии использованы три смеси растворителей. Смесь 1: *n*-бутанол (66,6 % об.) + ледяная уксусная кислота (16,7 % об.) + вода (16,7 % об.). Смесь 2: *n*-бутанол (60 % об.) + ледяная уксусная кислота (15 % об.) + вода (25 % об.). Смесь 3: этанол (85,7 % об.) + вода (14,3 % об.).

Для разделения использовали пластины Sorbfil, которые представляют собой алюминиевую фольгу, покрытую слоем силикагеля. Хроматограммы проявляли в парах йода. В таблице представлены значения коэффициентов удерживания R_f витаминов группы В для трёх смесей растворителей. Видно, что лучшее разделение витаминов происходит при использовании смеси 1.

Витамин	R_f		
	Смесь 1	Смесь 2	Смесь 3
В1 (Тиамин)	0,33	0,25	0,004
В2 (Рибофлавин)	0,20	0,146	0,003
В3 (Никотиновая кислота)	0,237	0	0,076
В6 (Пиридоксин)	0,1	0,073	0
В9 (Фолиевая кислота)	0	0,03	0
В12 (Цианокобаламин)	0,262	0,187	0



Определение содержания железа в источниках пригородной зоны города Тверь

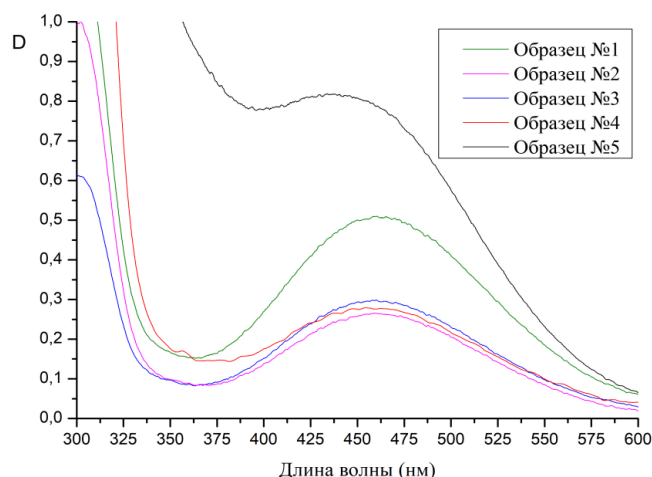
Артамонова А.А. (бакалавр, 4-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Скобин М.И.

Качество воды играет важную роль в жизни человека. Она необходима для поддержания здоровья и нормального функционирования организма. Непригодная для употребления вода снижает качество продолжительности жизни. Именно поэтому важно следить за качеством употребляемой воды.

Целью данной работы было исследовать ключевую воду из источников пригородной зоны города Тверь.

Было исследовано пять источников: 1 - 56.736801, 35.906267, 2 - 56.792642, 36.030758, 3 - 56.940117, 35.745784, 4 - 56.830525, 36.097137, 5 - 56.803708, 36.173081. Методом спектрофотометрического анализа определили



количественное содержание железа в исследуемой воде.

Образцы №1, №2, №3, №5 снимали с использованием кварцевых кювет при толщине 1 см, образец №4 при толщине 3 см, при длине волны 480 нм.

Рис. Спектры образцов

Таблица. Содержание железа в исследуемой воде

Образец	№1	№2	№3	№4	№5
[Fe ³⁺], г/мл	$2 \cdot 10^{-4}$	$9,35 \cdot 10^{-5}$	$1,035 \cdot 10^{-4}$	$2,74 \cdot 10^{-7}$	$5,2 \cdot 10^{-4}$

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



Верификация стандартизированных методик определения азота (белка) в пищевых продуктах

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

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

Проведено определение азота (белка) методом Кьельдаля в различных пищевых продуктах стандартизированными методиками и методикой ВУСНІ к прибору. Произведена верификация выбранной методики ВУСНІ к прибору с другими стандартизированными методиками.

Метрологические характеристики, полученные в ходе эксперимента в лаборатории (ГОСТ 25011-2017, ГОСТ 34454-2018, ГОСТ 34111-2017) и метрологические характеристики методики ВУСНІ в мясном продукте (сосиски) представляют следующее:

Таблица 1. Значения, полученные при эксперименте по ГОСТ 25011-2017

σ_{Γ} (отн)	σ_R (отн)	$\pm\Delta_{с(отн)}$	$\pm\Delta_{(отн)}$
0,02	0,02	0,08	0,09

Таблица 2. Лабораторные значения по методике ВУСНІ

σ_{Γ} (отн)	σ_R (отн)	$\pm\Delta_{с(отн)}$	$\pm\Delta_{(отн)}$
0,01	0,01	0,08	0,08

Таблица 3. Значения, полученные при эксперименте по ГОСТ 34454-2018

σ_{Γ} (отн)	σ_R (отн)	$\pm\Delta_{с(отн)}$	$\pm\Delta_{(отн)}$
0,06	0,04	0,12	0,14

Таблица 4. Лабораторные значения по методике ВУСНІ

σ_{Γ} (отн)	σ_R (отн)	$\pm\Delta_{с(отн)}$	$\pm\Delta_{(отн)}$
0,04	0,02	0,11	0,12

Таблица 5. Значения, полученные при эксперименте по ГОСТ 34111-2017

σ_{Γ} (отн)	σ_R (отн)	$\pm\Delta_{с(отн)}$	$\pm\Delta_{(отн)}$
0,19	0,18	0,81	0,88

Результаты, полученные в ходе эксперимента по методике ВУСНІ, позволяют сделать выводы о хорошей воспроизводимости этой методики с другими рассмотренными стандартизированными методиками.



Количественное определение жира и водорастворимых витаминов методом ВЭЖХ в композитных смесях, используемых в функциональных группах питания

Васильева Л.А. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Жители арктического региона чаще, чем жители южных широт и центральной России, сталкиваются с недостатком витаминов. Существует необходимость внедрения в рацион питания функциональных продуктов с использованием композитных смесей для поддержания баланса витаминов в организме.

В данной работе были исследованы 4 образца композитных смесей (белковых концентратов) на содержание жира- и водорастворимых витаминов методом ВЭЖХ.

Таблица 1. Содержание водорастворимых витаминов в протеинах

Наименование витамина	Содержание жирорастворимых витаминов в протеинах, мг/кг			
	Арахисовый	Конопляный	Льняной	Тыквенный
Аскорбиновая кислота (витамин С)	21,1±1,7	112,8±9,0	32,2±2,6	127,6±10,2
Пиридоксин гидрохлорид	10,7±1,6	28,1±2,2	4,9±0,7	33,7±2,7
Рибофлавин	9,3±1,4	Менее 1	3,4±0,5	17,7±1,4

По результатам исследования четырех протеинов по количеству водорастворимых витаминов их можно расположить в порядке убывания тыквенный-конопляный-арахисовый-льняной.

Таблица 2. Содержание жирорастворимых витаминов в протеинах

Наименование витамина	Содержание жирорастворимых витаминов в протеинах, мг/кг			
	Арахисовый	Конопляный	Льняной	Тыквенный
Ретинол	39,4±9,5	менее 0,1	36,1±8,7	33,5±8,0
Холекальциферол	1,1±0,3	0,21±0,05	1,08±0,26	0,76±0,18
Токоферол	3,4±0,8	0,32±0,08	3,93±0,94	5,06±1,21

По количеству жирорастворимых витаминов композитные смеси аналогично можно расположить в порядке убывания арахисовый-тыквенный-льняной-конопляный. По результатам работы были установлены нижние диапазоны методик для жира- и водорастворимых витаминов.



Исследование кислотно-основных свойств меропенема методами рН-метрического титрования и компьютерного моделирования

Васильева К.Д. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Меропенем - высокоэффективный антибиотик из группы карбапенемов. Его молекула содержит карбоксильную, вторичную аминную и две амидные группы, и по кислотно-основным свойствам близка к аминокислотам и пептидам.

Теоретическая оценка значений констант кислотно-основных равновесий в растворе меропенема была проведена с применением компьютерной программы EriK (Schrodinger LLC), использующей метод химических графов. Рассчитаны значения десятичных логарифмов констант протонирования аниона меропенема Mrp^- : 8,22 для аминогруппы, 3,05 для карбоксилатной группы. Экспериментальные значения констант протонирования Mrp^- были получены методом рН-метрического кислотно-основного титрования раствора NaMrp на фоне 0,1 М KNO_3 при 25 °С 0,05М раствором HNO_3 . Расчёт значений десятичных логарифмов констант протонирования аниона Mrp^- был проведён в программе NewDALSFЕK.

Для равновесия $\text{Mrp}^- + \text{H}^+ \leftrightarrow \text{HMrp}$ расчёт даёт значение логарифма константы $\lg\beta_1 = 7,24 \pm 0,02$. Для равновесия $\text{Mrp}^- + 2\text{H}^+ \leftrightarrow \text{H}_2\text{Mrp}^+$ — значение $\lg\beta_2 = 9,52 \pm 0,08$. В соотнесении с результатами моделирования в программе EriK эти результаты можно интерпретировать как протонирование аминогруппы с константой $\lg K_1 = 7,24 \pm 0,02$ и затем протонирование карбоксилатной группы с константой $\lg K_2 = 9,52 - 7,24 = 2,28 \pm 0,08$. Полученные результаты хорошо согласуются с имеющимися литературными данными о значениях констант протонирования аниона меропенема в 18%-ном растворе метанола в воде: $\lg K_1 = 7,30$ для аминогруппы и $\lg K_2 = 3,30$ для карбоксилатной группы, определенными хроматографическим методом.

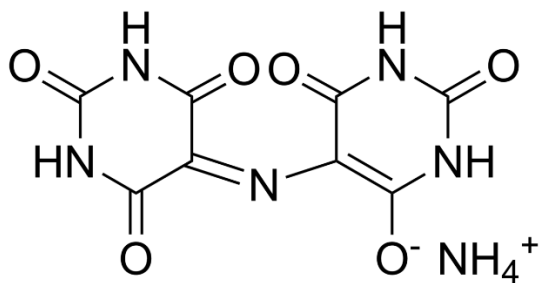


Экспериментальное и теоретическое исследование электронных спектров мурексида

Горячева Е. А. (специалист, 5-го года обучения)

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

Мурексид – аммониевая соль 5,5'-нитрилодибарбитуровой кислоты, металлоиндикатор, комплексометрический индикатор, органический краситель. В аналитической химии 0,1%-ный водный раствор мурексида применяется как индикатор для комплексометрического и колориметрического определения ионов металлов. Спектры мурексида были



записаны в видимой области. Приготовлены растворы мурексида в воде (навеску 0,02 г мурексида растворили в 100 мл воды) и в этаноле (навеску 0,02 г мурексида растворили в 35 мл воды и добавили этанол

до 100 мл). Полученные растворы фотометрировали в видимой области на спектрофотометре ПЭ-5400ВИ. С помощью квантово-химических расчетов (DFT/6-31G++**) были определены колебательные спектры, распределение электронной плотности и значения энергий для HOMO и LUMO орбиталей.

Экспериментальные данные, растворитель		Расчетные данные, растворитель	
H ₂ O, λ_{max} , нм	C ₂ H ₅ OH, λ_{max} , нм	H ₂ O, λ_{max} , нм	C ₂ H ₅ OH, λ_{max} , нм
520	512	505	495

В ходе работы установлено хорошее соответствие экспериментально полученных данных и значений, полученных с использованием функционала M06-L для раствора мурексида в воде и функционала TPSS для раствора мурексида в этаноле.



Анализ образца стали химическими и физико-химическими методами

Гультяева К.А. (специалист, 5-го года обучения)

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

С использованием комплекса химических и физико-химических методов проведён анализ образца стали на содержание металлических и неметаллических примесей. Предварительный анализ проведён методом атомно-эмиссионной спектроскопии с использованием спектрометра FOUNDRY-MASTER UVR. Обнаружено содержание углерода (0,202 %), серы (0,0119 %), фосфора (0,0063 %), кремния (0,245 %), марганца (0,535 %), меди (0,129 %). Уточнённые значения были получены с использованием нескольких методов. Содержание углерода (по ГОСТ 12344-2003) и серы (по ГОСТ 22536.2-87) определено методом ИК-микроскопии на газовом анализаторе. Содержание фосфора – фотометрическим методом в соответствии с ГОСТ 22536.3 по поглощению восстановленного фосфомолибдата при 810 нм. Содержание кремния – гравиметрическим методом (по ГОСТ 22536.4-88) по массе осадка диоксида кремния. Содержание меди – фотометрическим методом (по ГОСТ 22536) по поглощению аммиачного комплекса при 675 нм. Содержание марганца – титриметрическим методом по ГОСТ 12348-87.

Результаты анализа:

Определяемый элемент	Содержание, %
Углерод	0,204±0,020
Сера	0,011±0,004
Марганец	0,538±0,030
Фосфор	0,0086±0,0060
Кремний	0,235±0,022 (гравиметрия)
	0,249±0,022 (фотометрия)
Медь	0,127±0,017



Исследование свойств замасливателя методами аналитической и физической химии

Гусева Д.Д. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Замасливатель представляет собой специальную смесь, применяемую для обработки стекловолокна с целью повышения его обрабатываемости.

Существуют три метода определения свойств замасливателя: центрифугирование, определение массовой доли сухого остатка и потенциометрическое измерение рН.

Определение массовой доли сухого остатка замасливателя проводилось по ГОСТ 12172-74 [1]. Около 1 г замасливателя помещали в бюксы, взвешивали, сушили в сушильном шкафу при 110 °С в течение 1 часа, охлаждали до комнатной температуры. Затем проводили взвешивание высушенных бюксов с остатками и записывали их массу.

Для проверки стабильности замасливателя используют центрифугирование: образцы помещают в пробирки и вращают в центрифуге при 5000 об/мин в течение 10 минут. Стабильной считается эмульсия, если после центрифугирования она остаётся однородной, без расслоения и с равномерным цветом.

Метод потенциометрического измерения рН используется для определения рН замасливателя.

Таким образом, важность изучения свойств замасливателей обусловлена их широким применением в таких отраслях, как машиностроение, авиация, ракетостроение, оборонная промышленность.

1. ГОСТ 12172-74 «Клеи фенолополивинилацетальные. Технические условия» [Электронный ресурс]. – Введ. 1976-01-01. – М: ИПК ИЗДАТЕЛЬСТВО СТАНДАРТОВ, 2002. 10с.

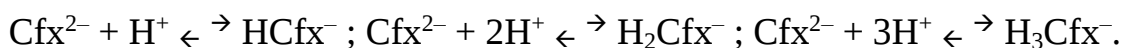


Константы кислотно-основных равновесий в растворе цефиксима по данным рН-метрического титрования и компьютерного моделирован

Джабраилова А.Г. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Теоретическая оценка значений констант кислотно-основных равновесий в растворе цефиксима была проведена с использованием компьютерной программы Eпik (Schrodinger LLC), использующей метод химических графов. Рассчитаны значения десятичных логарифмов констант протонирования: 4,05 для аминотиазольной группы, 3,12 для карбоксилатной группы боковой цепи, 3,07 для карбоксилатной группы ядра молекулы. Экспериментальные значения констант протонирования аниона цефиксима Cfx^{2-} были получены методом рН-метрического кислотно-основного титрования раствора Na_2Cfx на фоне 0,1 М KNO_3 при 25 °С 0,05 М раствором HNO_3 . Расчёт значений десятичных логарифмов констант протонирования аниона Cfx^{2-} был проведён в программе NewDALSFEK. Математическая модель включала равновесия:



Для равновесия $\text{Cfx}^{2-} + \text{H}^+ \rightleftharpoons \text{HCfx}^-$ расчёт даёт значение константы $\lg\beta_1 = 3,98 \pm 0,05$. Программа отклоняет как незначимое равновесие $\text{Cfx}^{2-} + 2\text{H}^+ \rightleftharpoons \text{H}_2\text{Cfx}^-$, а для равновесия $\text{Cfx}^{2-} + 3\text{H}^+ \rightleftharpoons \text{H}_3\text{Cfx}^-$ даёт значение константы $\lg\beta_3 = 9,20 \pm 0,15$. В соотнесении с результатами моделирования в программе Eпik эти результаты можно интерпретировать как протонирование аминотиазольной группы с константой $\lg K_1 = 3,98 \pm 0,05$ и затем одновременное протонирование обеих карбоксилатных групп с близкими значениями констант константы $\lg K_2 \approx \lg K_3 \approx (9,20 - 3,98) / 2 = 2,61$. Полученные результаты хорошо согласуются с имеющимися литературными данными о значениях констант протонирования аниона цефиксима: $\lg K_1 = 3,72$ для аминотиазольной группы, для карбоксилатных групп $\lg K_2 = 2,70$, $\lg K_3 = 2,06$, определенными при 25 °С хроматографическим методом.



Фотометрическое определение кофеина, парацетамола, ацетилсалициловой кислоты в препарате Цитрамон П

Егорова К. В. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Важным элементом в фармацевтической промышленности является качественное и количественное определение лекарственных препаратов. Из-за большого количества компонентов, содержащихся в лекарствах, стоит обратить внимание на экспрессные методы определения отдельных веществ.

Необходимо точное измерение концентрации всех активных компонентов, для повышения эффективности производственного процесса в фармацевтической отрасли.

В ходе исследования были определены три компонента: кофеин, парацетамол, ацетилсалициловая кислота, содержащиеся в препарате Цитрамон П.

В работе использовали реактивы, которые удовлетворяют требованиям Государственной Фармакопеи. Оптическую плотность регистрировали на спектрофотометре СФ – 2000.

Взвешенную таблетку растворяют в 50 мл гидроксида натрия 0,1 н. Отобрав 5 мл из полученного раствора, проводили извлечение кофеина четыреххлористым углеродом из щелочного раствора за три последовательные экстракции с дальнейшим определением его по УФ-спектрам при длине волны 271 нм. Количественное определение парацетамола и ацетилсалициловой кислоты проводили с помощью метода Фиррордта. Снятие спектров чистых веществ парацетамола и ацетилсалициловой кислоты в щелочной среде проводили при длинах волн 230 и 255 нм.

В ходе работы были проанализированы трехкомпонентные смеси кофеина, парацетамола и ацетилсалициловой кислоты в лекарственном препарате Цитрамон П.



Определение дифенгидрамина гидрохлорида в лекарственном препарате Антигриппин-АНВИ спектрофотометрическим методом

Иванюта Я. В. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Дифенгидрамин гидрохлорид — белый мелкокристаллический порошок, являющийся одним из представителей антигистаминных препаратов первого поколения.

Для исследования был взят комбинированный лекарственный препарат Антигриппин-АНВИ, который используется для лечения ОРВИ и гриппа у взрослых. Дифенгидрамин гидрохлорид входит в состав капсул Б.

В работе использовали стандартный образец дифенгидрамина гидрохлорида, который удовлетворяет требования нормативной документации (НД) [1].

Предварительно взяли навеску, растворили в колбе на 100 мл и отфильтровали. К 1 мл фильтрата добавили 3 мл фосфатного буфера ($\text{pH}=7,4$), 10 мл хлороформа, 1 мл 0,04% раствора бромтимолового синего и перенесли в делительную воронку для экстракции. Экстрагирование проводили в течение 2 минут. Хлороформное извлечение отделили и измерили на спектрофотометре ПЭ-5400ВИ при 400 нм в кювете толщиной 10 мм относительно хлороформа. Параллельно проводили испытание рабочего стандартного образца дифенгидрамина гидрохлорида, содержание которого 50 мкг/мл.

Для проверки эффективности метода в аналитических целях проводилась процедура валидации по указанным критериям, как специфичность, диапазон применения, линейность, правильность и сходимость результатов анализа. В ходе проверки метода были достигнуты результаты, соответствующие установленным требованиям НД [2].

1. ФСП 42-0008402503. Димедрол.
2. ФСП 42-0125031200. Антигриппин-АНВИ, капсулы.



Исследование гелеобразования в системах цефтриаксон – Co(II) и цефтриаксон – Ni(II)

Исаев И.Д. (магистрант, 2-й год обучения)

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

Цефтриаксон – антибиотик III поколения цефалоспоринового ряда, имеющий широкий спектр действия и малую токсичность. Ранее нами было замечено гелеобразование в исследуемых системах «цефтриаксон – Co(II)», «цефтриаксон – Ni(II)». В данной работе представлены результаты изучения влияния концентрации растворов на способность к образованию коллоидных систем. Для проведения исследований использовали препарат «цефтриаксон» производства ОАО «Борисовский завод медицинских препаратов» и гексагидраты хлорида кобальта(II) и никеля(II). Результаты эксперимента представлены в таблице. Используемые обозначения: М – наблюдается помутнение, УХ* – образование отдельных устойчивых хлопьев в малых количествах, УХ – образование устойчивых хлопьев в достаточных количествах, УГ – образование устойчивого геля. При мольном соотношении Ctx:M(II) = 3:1 и более образуется истинный раствор.

Таблица Результаты эксперимента.

Концентрация металла, моль/л	Мольное соотношение Ctx : Ni(II)				Мольное соотношение Ctx : Co(II)			
	2,5:1	2:1	1,5:1	1:1	2,5:1	2:1	1,5:1	1:1
0,0045	–	–	–	–	–	–	–	М
0,0090	–	–	–	М	–	–	УХ	УГ
0,0180	–	–	–	УГ	–	–	УХ	УГ
0,0360	–	–	УХ	УГ	–	–	УХ	УГ
0,0720	–	УХ*	УХ	УГ	–	УХ*	УХ	УГ
0,1440	УХ*	УХ	УХ	УГ	УХ*	УХ	УХ	УГ



Исследование процессов ступенчатой диссоциации комплексона, производного валерьяновой кислоты

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

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Скобин М.И.

Протолитические равновесия в растворах ЭДТВК исследовали при 298K и значениях ионной силы $I = 0,1$ моль/л. Экспериментальная и теоретическая кривые титрования в исследуемом интервале рН представлена на рисунке 1.

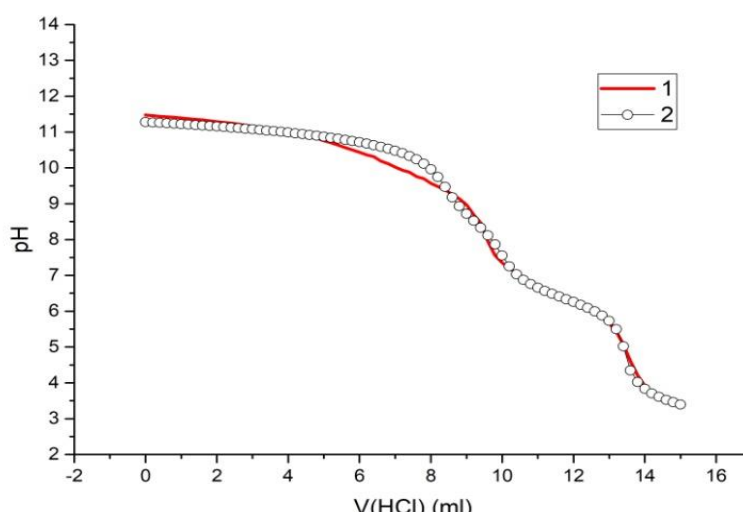


Рис. 1. Экспериментальная (1) и теоретическая (2) кривые титрования раствора ЭДТВК

Логарифмы констант устойчивости различных комплексных форм комплексонатов металлов были рассчитаны с помощью программы «NewDALSFEK». Результаты расчета термодинамических констант диссоциации ЭДТВК представлены в таблице.

Таблица. Логарифмы констант ступенчатой диссоциации комплексонов

Комплексные формы	pK
HEDTV	$8.51 \pm 8.38 \times 10^{-2}$
H ₂ EDTV	$7.35 \pm 1.52 \times 10^{-1}$
H ₃ EDTV	$5.36 \pm 1.22 \times 10^{-1}$
H ₄ EDTV	$2.5 \pm 6.33 \times 10^{-1}$

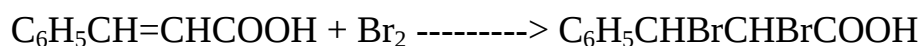


Создание прекурсоров для синтеза разветвленных экологически безопасных комплексонов

Лисицкий Т.М. (аспирант, 2-го года обучения)

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

С целью расширения спектра экологически безопасных комплексонов нами предпринята попытка реализовать реакционную способность двойных связей непредельных кислот, таких как, фумаровая, малеиновая или коричная кислоты для создания галогенпроизводных прекурсоров с последующим получением разветвленных лигандов. Подобная реакция электрофильного бромирования алкенов осуществлена в работе [1]. А в книге [2] описан трансоеидный синтез дибромянтарной кислоты присоединением двух атомов брома к фумаровой кислоте. По аналогичной схеме нами получена дибромобензилпропионовая кислота присоединением двух атомов брома к коричной кислоте:



Дальнейшая работа с этим прекурсором будет состоять в синтезе разветвленных комплексонов методом галоген-замещения брома на аминосоединения в дибромобензилпропионовой кислоте.

Такие комплексоны интересны тем, что в отличие от классических комплексонов, типа ЭДТА, экологически безопасны благодаря способности к разложению в окружающей среде под действием ультрафиолета солнечного света [3].

1. Eissen M., Lenoir D., Electrophilic Bromination of Alkenes: Environmental, Health and Safety Aspects of New Alternative Methods // Chemistry – A European Journal, 2008. -V. 14, No 32. - P. 9799-10163, <https://doi.org/10.1002/chem.200800462>
2. Потапов В.М. Стереохимия, изд. 2, М.; Химия. – 1988. - С. 285
3. Патент РФ №2169136, опубл. 20.06.2001.



Количественное определение ибупрофена разных производителей

Мартынюк А.В. (специалист, 5-го года обучения)

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

Учитывая широкий ассортимент лекарственных средств, представленных на рынке, важным является контроль их качества. В рамках исследования было проведено количественное определение ибупрофена в препаратах трёх производителей (Титхимфарм, OZON и АКОС) методом кислотно-основного титрования.

Анализ препаратов проводили по следующей методике: количество порошка растертых таблеток, содержащее 0,1 г ибупрофена взбалтывали с 15 мл хлороформа в течение 15 минут и фильтровали. Остаток промывали хлороформом дважды по 5 мл и фильтровали через тот же фильтр в ту же колбу. Прибавляли 20 мл этилового спирта, предварительно нейтрализованного по фенолфталеину, и титровали 0,1 н. раствором гидроксида натрия с тем же индикатором до розового окрашивания [1].

Полученные данные о содержании ибупрофена представлены в таблице 1. При расчетах использовался коэффициент, согласно которому 1 мл 0,1 н. раствора гидроксида натрия эквивалентен 0,02063 г ибупрофена.

Таблица. Результаты количественного определения ибупрофена

Препарат	Масса навески для анализа, г	Масса ибупрофена в навеске теоритическая, г	Масса практическая, г
Ибупрофен, OZON	0,100	0,0625	0,0605±0,0006
Ибупрофен, АКОС	0,100	0,0625	0,0620±0,0006
Ибупрофен, Титхимфарм	0,100	0,0833	0,0817±0,0002

Проведенный анализ с высокой степенью достоверности подтверждает соответствие содержания определяемого компонента заявленному, что позволяет сделать вывод о подлинности препаратов.

1. Государственная фармакопея Российской Федерации. XV изд. – Т. 1-5. – М.: 2023.



Исследование полиморфизма стрептоцида

Митрика К.В. (специалист, 5-го года обучения)

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

Известно [1], что полиморфизм широко распространен среди лекарственных веществ. Поскольку полиморфные модификации субстанций различаются по физико-химическим свойствам, при разработке лекарственных препаратов необходимо устанавливать и учитывать особенности полиморфных модификаций фармакопейных субстанций. Важным показателем фармакопейной субстанции, влияющим на ее растворение, скорость растворения, биодоступность, является степень ее кристалличности, размер частиц.

В данной работе исследовали влияние растворителя на полиморфные модификации стрептоцида.

При сравнении полученных результатов микроскопического исследования образцов стрептоцида, после его перекристаллизации из воды и спирта были обнаружены две полиморфные модификации, различающиеся по форме кристалла.

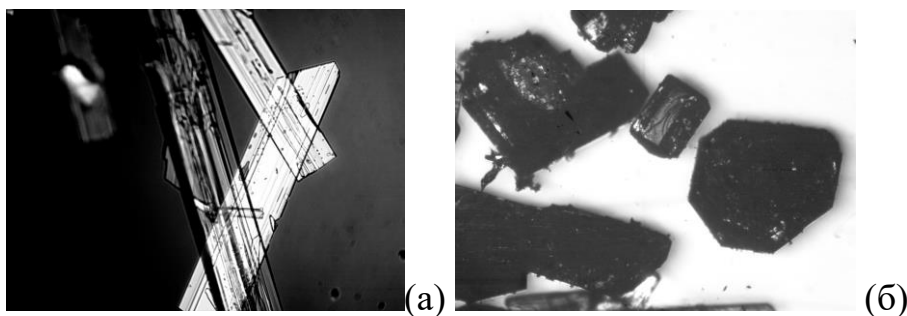


Рис. Образцы стрептоцида после перекристаллизации (а-вода, б-спирт)

Из результатов исследования видно, что стрептоцид может существовать как минимум в двух полиморфных модификациях – в виде призм и тонких пластинок.

1. Полиморфизм и свойства лекарственных средств / И.П. Рудакова, И.Г. Ильина, С.Я. Скачилова и др. // Фармация. – 2009.



Модификация пробоподготовки при анализе алкогольной продукции для идентификации методом определения отношения изотопов $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$

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

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

Проблема фальсификации вин несет в себе серьезные социально-экономические последствия. С одной стороны, существует прямая угроза здоровью потребителей. С другой - государство и добросовестные производители несут существенные финансовые потери.

Метод изотопного соотношения углерода ($^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$) является одним из наиболее надежных способов идентификации фальсификатов, поскольку он отражает природное происхождение сырья. Однако точность изотопного анализа сильно зависит от пробоподготовки, так как неправильная очистка и концентрирование пробы могут привести к изотопному фракционированию и искажению результатов.

Целью работы является оптимизация метода пробоподготовки для изотопного анализа алкогольной продукции с целью повышения точности определения соотношения $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ и сокращения времени пробоподготовки.

По результатам анализов можно сделать вывод, что значения отношений изотопов углерода по методам пробоподготовки отличаются незначительно и находятся в пределах погрешности.

Проведённое исследование подтвердило, что метод парофазного анализа с использованием TurboMatrix Headspace является более эффективным по сравнению с дистилляцией для определения изотопного состава углерода в алкогольной продукции.

Таким образом, достигнута цель работы – оптимизирована методика пробоподготовки для изотопного анализа, решены поставленные задачи, а результаты имеют значимую практическую ценность для винодельческой отрасли.

Количественный анализ витамина Е в косметических кремах

Найман Е.В. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Актуальность данной работы заключается в том, что количественно витамин Е находят зачастую методом ВЭЖХ, но для этого необходимо дорогостоящее оборудование, поэтому так важно находить более доступные методы без дорогостоящего оборудования и сложной пробоподготовки.

Для обнаружения активного компонента кремов – Витамина Е в форме токоферола, был использован метод тонкослойной хроматографии. В качестве элюента была взята смесь гексана с этилацетатом (в соотношении 10:1), а реагентом детектором был гексациноферрат калия (III) (рис. 1.). Для количественной оценки было использовано приложение «Sorbfil TLC View», которое анализировало фотографию и по отклонению яркости пятен от яркости фона строило аналоговую кривую хроматограммы с последующим нахождением пиков на этой кривой и расчетом площади [1].

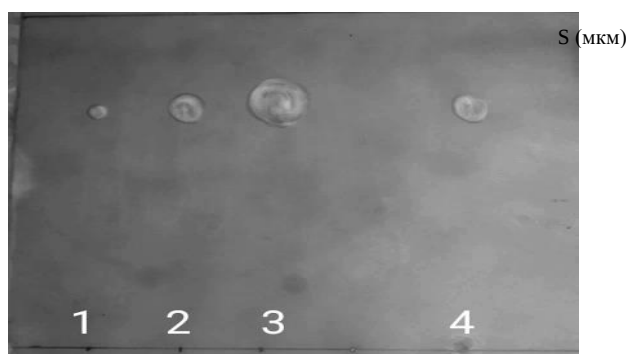


Рис 1. Хроматограмма: р-р токоферола 0,5% - 1, 1 % - 2, 1,5 % - 3, образец крем «Нежный лён» - 4.

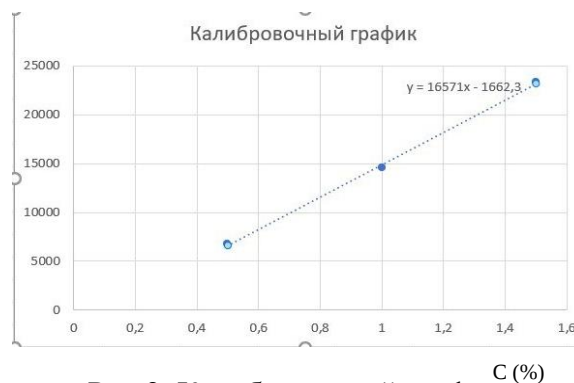


Рис.2. Калибровочный график.

На основе полученного графика была найдена концентрация витамина Е для анализируемого образца крема «Нежный лён» - 0,68%. Можно сделать вывод, что анализируемый крем имеет эффективную концентрацию.

1. Денситометр Сорбфил. Версия 2.1 Руководство пользователя. – Краснодар: ООО «Имид», 2018.



Создание ионоселективного электрода (ИСЭ) для определения метоклопрамида

Насуров Р.Д. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Потенциометрические методы отличаются простотой и быстротой проведения анализа. Цель работы: потенциометрическое определение метоклопрамида (в виде гидрохлорида) в лекарственных препаратах.

В работе использовали метоклопрамид (в виде гидрохлорида), фосфорномолибденовую кислоту (ФМК), фосфорновольфрамную кислоту (ФВК), поливинилхлорид (ПВХ), диоктилфталат (ДОФ). Электродноактивное вещество получали добавлением по каплям к раствору метоклопрамида в равных объемах растворы ФВК и ФМК до полного выпадения осадка [1].

Пластифицированные мембраны ИСЭ изготавливались на основе метоклопрамида и имели состав (в масс. %): ЭАВ-5, ПВХ-35, ДОФ-60. ИСЭ вымачивали в растворе метоклопрамида в течение 1-2 суток.

Интервал линейности электродных функций находится в промежутке 10^{-1} - 10^{-4} моль/л, крутизна электродных функций близка к теоретическому значению Нернстовской величины функции (59 мВ) и составляет: 55,1 мВ/рС для ИСЭ на основе ФВК и 48,2 мВ/рС для ИСЭ на основе ФМК, время отклика составляло 10-15 с. Работе электродов не мешало наличие неорганических катионов (Na, Ca, K), значение потенциалов электродов постоянно в pH=2-5. Изготовленные электроды обладали хорошими потенциометрическими характеристиками.

Потенциометрическое определение метоклопрамида (в виде гидрохлорида) с использованием ИСЭ показало хороший результат.

1. Егорова, Л.В. Селективное определение некоторых лекарственных аминов: маг. дисс. направление 04.04.01 Химия / Л.В. Егорова / рук. работы Г.И. Мантров. – Тверь: ТвГУ, 2017. – 49 с.



Титриметрическое определение индометацина в лекарственных препаратах

Никитин С.А. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Методом алкалиметрического титрования было определено количественное содержание индометацина в лекарственном препарате индометацин (Софарма).

Точную навеску 0,1 г растертых таблеток индометацина, растворяли в 10 мл этанола, предварительно нейтрализованного по фенолфталеину. Полученный раствор титровали 0,0955 М раствором NaOH при постоянном перемешивании до появления устойчивой бледно-розовой окраски. Аналогично проводили титрование из ацетона.

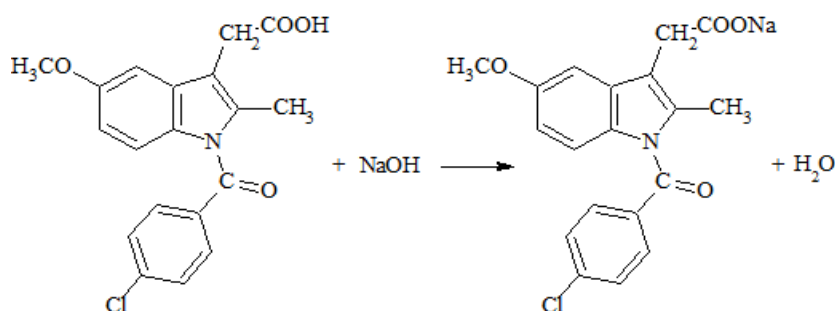


Рис. Уравнение реакции индометацина с гидроксидом натрия

Результаты количественного содержания индометацина в исследуемом лекарственном препарате представлены в таблице. Данные значения получены из расчёта, что на 1 мл 0,0955 М раствора NaOH приходится 0,0341 г индометацина.

Таблица. Результаты алкалиметрического определения индометацина

Растворитель	Масса теоретическая индометацина, г	Масса практическая индометацина, г
Этиловый спирт	0,01895	0,01807
Ацетон	0,01895	0,01807

В результате проведенного анализа можно сделать вывод о соответствии содержания определяемого компонента заявленному производителем.

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



Оптимизация условий пробоподготовки при определении фосфора в пищевых продуктах

Петровичева М.В. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Предложена разработка оптимального метода пробоподготовки мокрым озолением при определении фосфора в различных пищевых продуктах. Проведены сравнительные исследования методов пробоподготовки сухим и мокрым озолением в различных видах пищевых продуктов, выполнены расчеты и статистический обсчет данных, полученных в ходе эксперимента. В работе были использованы 3 группы пищевых продуктов: молочные продукты (творог 9%), мясные продукты (колбаса докторская) и продукты переработки овощей (горошек зеленый консервированный).

Таблица 2. Значения массовой доли фосфора, С, мг/100г

Наименование образца	Сухое озоление			Мокрое озоление		
	C ₁	C ₂	C _{ср}	C ₁	C ₂	C _{ср}
Творог 9%	133.8	135.9	134.8	160.3	162.1	161.2
Колбаса докторская	158.0	159.0	158.5	190,2	191.7	189.1
Горошек зеленый	54,2	55,5	54,9	66,9	65,9	66,4

Сравнительный анализ полученных данных с пробоподготовкой по методу сухого озоления и предлагаемому методу мокрого озоления показал хорошую воспроизводимость и сходимость для обоих вариантов. Однако по методу мокрого озоления результаты в среднем на 17% выше, из чего мы можем сделать вывод, что разложение матрицы пищевого продукта происходит с меньшими потерями, чем по методу сухого озоления. Это говорит нам о возможности использования предлагаемого метода мокрого озоления при проведении пробоподготовки для определения фосфора в выбранных нами категориях продуктов и поможет значительно сократить проведение этого этапа и анализа в целом, а также повысить точность.



Определение содержания ионов натрия, калия, магния и кальция в лечебно-столовой минеральной воде

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

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

Проведён анализ пяти образцов лечебно-столовой минеральной воды: «Аш-Тау», «Стэлмас», «Славяновская», «Нарзан», «Кашинская» – на содержание ионов натрия, калия, магния и кальция. Содержание кальция определено методом комплексометрического титрования в щелочной среде соответствии с ГОСТ 23268.5-78. При pH 10 в присутствии эриохрома черного Т определяли суммарное содержание кальция и магния. В другой пробе при pH 12–13 в присутствии мурексида определяли содержание кальция и по разнице находили содержание магния. Содержание натрия и калия находили методом фотометрии пламени также в соответствии с (ГОСТ 23268.6-78). Результаты анализа представлены в таблицах.

Таблица 1. Содержание кальция и магния в образцах

Образец	Ca ²⁺ , мг/л		Mg ²⁺ , мг/л	
	Заявлено производителем	Результат анализа	Заявлено производителем	Результат анализа
«Аш-Тау»	200-500	327,1	50-200	106,5
«Стэлмас»	300-1000	302,2	200-500	462,6
«Славяновская»	250-350	246,9	Меньше 50	27,2
«Нарзан»	200-600	450,5	50-180	104,1
«Кашинская»	250-550	314,2	100-180	151,3

Таблица 2. Содержание натрия и калия в образцах

Образец	Заявлено производителем, Na ⁺ + K ⁺ , мг/л.	Результат анализа, мг/л		
		K ⁺	Na ⁺	Na ⁺ + K ⁺
«Аш-Тау»	900-1900	87,3	481,6	568,9
«Стэлмас»	300-1000	27,3	437,4	464,6
«Славяновская»	600-800	44,3	416,6	461,0
«Нарзан»	50-450	9,9	161,3	171,2
«Кашинская»	250-400	23,2	168,0	191,2



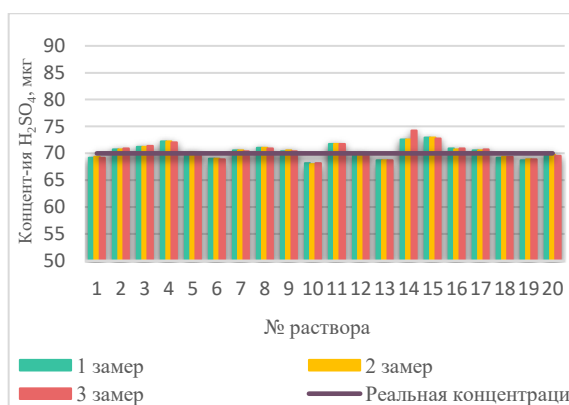
Сравнительный анализ методик определения серной кислоты в воздухе рабочей зоны фотометрическим и турбидиметрическим методами

Серафимский А.С. (магистрант, 2-го года обучения)

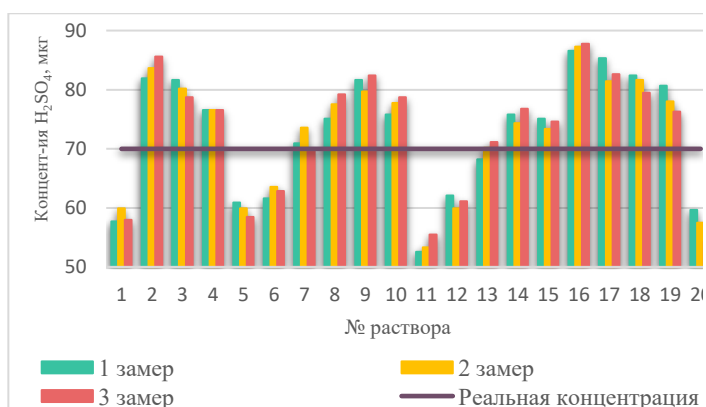
Научный руководитель: декан, доцент, к.х.н. Феофанова М.А.

Целью работы являлся сравнительный анализ эффективности, точности и практичности фотометрического и турбидиметрического методов для определения концентрации серной кислоты в воздухе рабочей зоны.

Была определена концентрация вещества фотометрическим и турбидиметрическим методами троекратно в 20-ти заранее приготовленных растворах (рис. а) и б)).



а)



б)

Рис. Концентрация серной кислоты: а) определенная фотометрическим методом и б) определенная турбидиметрическим методом.

Произведенные замеры концентраций показали надежность и воспроизводимость процесса подготовки проб фотометрическим методом. Приготовленные растворы методом турбидиметрии оказались менее стабильны.

Оценка экономической эффективности показала, что фотометрический метод является более экономически выгодным и менее трудоемким.

Фотометрия предпочтительнее для анализов, требующих высокой точности и чувствительности. Турбидиметрия остаётся полезной в ситуациях, когда требуются быстрые и менее точные измерения и оптимальна для оценки мутности и концентрации взвешенных частиц, особенно в биологических системах и массовых исследованиях.



Усиление ростостимулирующих свойств гуминовых кислот комплексонами

Суворов А.А. (аспирант, 2-го года обучения)

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

Удобрения на основе гуминовых веществ (ГВ) являются природными, экологически чистыми и способны улучшать проницаемость клеточных мембран, что увеличивает доступность почвенных элементов питания за счет их способности к образованию комплексов, а большой спектр функциональных групп способствует возникновению донорно-акцепторных взаимодействий.

С целью усиления эффекта донорно-акцепторного взаимодействия с микроэлементами почвы нами разработаны удобрения на основе ГВ, модифицированных включением в их состав экологически безопасных комплексонов, являющихся активными компонентами созданных ранее стимуляторов роста.

Иминодиянтарная кислота, как представитель экологически безопасных комплексонов, используется в предложенном составе для обработки гумифицированного материала с целью повышения выхода в готовом продукте биологически активных веществ.

Используемая в данном случае иминодиянтарная кислота не только удаляет металлические мостики между структурными фрагментами гуминовых веществ, способствуя тем самым полному выходу гуминовых веществ из природного гумифицированного материала, но также сама является активным компонентом получаемого данным способом стимулятора роста.

Эффективность предложенного способа получения гуминовых стимуляторов роста показана при использовании торфа месторождения «Васильевский мох» Тверской области и жидкого сапропеля из озера Жарки (Жарковский район Тверской области).



Сравнительный анализ титриметрической и вольтамперометрической методик определения йода в пищевых продуктах и продовольственном сырье

Титова Т.В. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Для предотвращения развития йододефицитных состояний используют пищевые продукты, богатые и обогащенные йодом. Учитывая отрицательные последствия, как малого потребления йода, так и избыточного, необходим точный контроль количества йода, вводимый в ежедневный рацион с пищей.

Целью работы являлось исследование количественного содержания йода в пищевых продуктах и продовольственном сырье методами титриметрии [1] и инверсионной вольтамперометрии [2] и сравнение полученных результатов.

В процессе испытаний методик была проведена процедура внутреннего контроля качества результатов анализа с определением показателей точности, правильности и прецизионности (таблица).

Таблица. Показатели качества методики

Методика	Среднее квадратическое отклонение повторяемости, σ_r , %	Среднее квадратическое отклонение воспроизводимости, σ_R , %	Точность $\pm\delta$, %	Расширенная неопределенность при коэффициенте охвата 2, U , %
[1]	11	13	11	15
[2]	5	5	11	12

На основании экспериментальных данных выявлены преимущества и недостатки методов и выявлено, что метод инверсионной вольтамперометрии оказался более экспрессным, точным и удобным для использования в рутинной работе пищевых лабораторий.

1. МУК 4.1.1481-03. Определение массовой доли йода в пищевых продуктах и сырье титриметрическим методом – М.: Минздрав России, 2003.
2. МУ 31-07/04. Количественный химический анализ проб пищевых продуктов, продовольственного сырья, кормов и продуктов их переработки, лекарственных препаратов, витаминов, БАД, биологических объектов. Номер в федеральном реестре ФР.1.31.2004.01166.



Определение концентрации минералов, влияющих на вкус и качество вина

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

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

Контроль содержания минеральных веществ в вине критически важен для его стабильности и качества. Концентрация калия варьируется от 100 до 1800 мг/л, и ниже 450 мг/л вино становится устойчивым к кристаллическим помутнениям, предотвращая образование осадка. Кальций, при содержании от 30 до 200 мг/л, может способствовать образованию осадка виннокислых соединений. Магний, влияющий на кислотность и pH вина, имеет концентрацию в диапазоне от 30 до 240 мг/л, зависящую от состава почвы и технологий переработки винограда. Натрий нейтрализует органические кислоты, его уровень варьируется от 10 до 200 мг/л и увеличивается при выращивании винограда на засоленных почвах, но снижается при спиртовом брожении.

Таблица. Результаты анализа красного полусладкого вина Киндзмараули

Элемент	метод	Результат, мг/мл	Норма для натуральных красных вин, мг/мл	Соотношение общей минерализации к концентрации		
				исследуемый образец	Натуральная продукция	Фальсифицированная
Калий	Фотометрия пламени	1118,9	100-1800	1,71:1	1,6:1-3:1	7:1-52:1
Натрий		57,04	10-200	33,59:1	-	-
Кальций	Титриметрия	Ca-85,6	30-240	22,4:1	10:1-66:1	16:1
Магний		Mg-89,77	30-200	21,34:1	8:1-66:1	39:1

Анализируя содержание этих минералов а также количественное соотношение общей минерализации к концентрации в исследуемом образце, сделали вывод о высоком качестве исследуемого вина и отсутствии фальсификации [1].

1. Бурганова Г.А. Минеральный состав вин при их идентификации и выявлении фальсификации //Наука и образование в глобальных процессах. – 2018. – № 1(5). – С. 74-76.



Исследование комплексообразования в системе иминодиянтарная кислота – скандий (III)

Удовенко В.П. (бакалавр, 4-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Скобин М.И.

В данной работе методом рН-метрии было изучено комплексообразование иминодиянтарной кислоты (ИДЯК) со скандием в водной системе. Соотношение компонентов ИДЯК и Sc^{3+} составляло 1 к 1.

По результатам моделирования были обнаружены средние и основные комплексные формы, также были рассчитаны их константы образования.

По расхождению графиков очевидно, что во второй системе происходит образование комплексных форм по сравнению с первой (рис.).

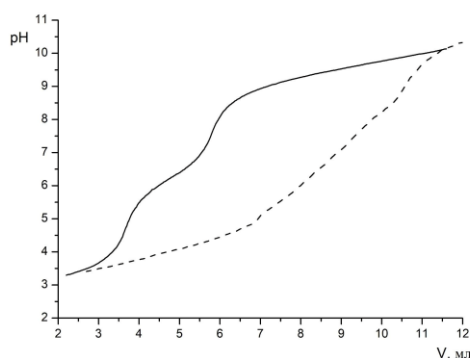


Рис. Кривые титрования растворов: ИДЯК - сплошная линия и ИДЯК со Sc^{3+} – пунктирная линия

На основе полученных данных была проанализирована устойчивость координационных соединений, а также определен наиболее оптимальный диапазон рН для выделения обнаруженных комплексных форм. Достоверность полученных результатов позволяет использовать константы устойчивости для пополнения баз данных координационных соединений.



Анализ монет Госбанка России

Филатова Е.А. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Химические элементы 11-й группы Периодической системы элементов Д.И. Менделеева (подгруппа меди: Cu, Ag, Au) иногда называют «монетной группой». Это d-элементы переходных металлов [1]. В нумизматической литературе древние монеты, как правило, подразделяют на золотые (Au, Aurum), серебряные (Ag, Argentum), медные (Ae, Aes). Следует обратить внимание на то, что указанные монетные металлы немагнитны. Однако, мы заметили, что некоторые современные пятирублевые монеты банка РФ притягиваются магнитом. Это послужило причиной нашего исследования состава таких монет различных лет выпуска. Был осуществлен анализ неразрушающим методом на энергодисперсионном микроанализаторе Oxford JNCA Energy 350 в комплекте с растровым электронным микроскопом JEOL JSM-6610LV.

Таблица. Результаты анализа монет достоинством 5 руб. Банка РФ, %

1998 год

Спектр	O	Cu	Итог
Спектр 1	5.5	94.5	100.0
Спектр 2	6.6	93.4	100.0
Спектр 3	5.7	94.3	100.0
Спектр 4	5.9	94.1	100.0
Спектр 5	5.6	94.4	100.0

2011 год

Спектр	C	Fe	Итог
Спектр 1	20.6	73.5	94.1
Спектр 2	20.2	74.4	94.6
Спектр 3	22.6	70.6	93.2
Спектр 4	18.2	77.5	95.7
Спектр 5	20.2	75.7	95.9

1. В.Ю. Бажин, Т.А. Александрова, Е.Л. Котова, А.П. Суслов Современный взгляд на аномалии в группах металлов Периодической системы Д.И. Менделеева // Записки Горного института, 2019, Т. 239, С. 520-527; DOI: 10.31897/PMI.2019.5.520.

Квантово-химическое исследование комплексов на основе диацетилмонооксима

Черепанова М. В. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Оксимосодержащие лиганды являются удобными объектами для синтеза комплексных соединений с металлами (Ni^{2+} , Pt^{2+} , Co^{2+}). Данный лиганд представляет собой основание Шиффа и образует устойчивые комплексы (рис.1), которые проявляют высокую биологическую активность.

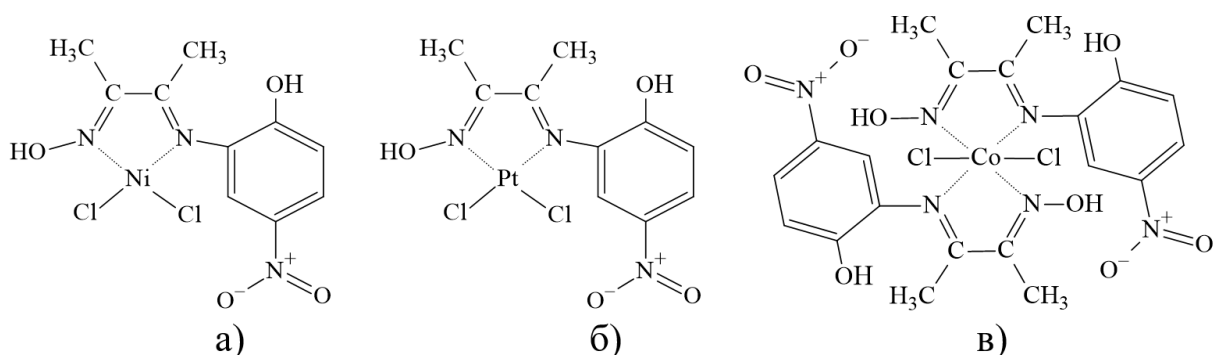


Рисунок. а) $[\text{Ni}(\text{hnpio})\text{Cl}_2]$, б) $[\text{Pt}(\text{hnpio})\text{Cl}_2]$, в) $[\text{Co}(\text{hnpio})_2\text{Cl}_2]$

Оптимизация геометрии комплексов была выполнена с использованием программ Maestro и Jaguar, входящих в пакет Schrodinger Suite. Квантово-химические расчеты осуществляли методом теории функционала плотности с использованием функционала B3LYP-D3 в базисе 6-31G**++.

Комплексы никеля и платины имеют плоскоквадратную геометрию, а комплекс кобальта – октаэдрическую. Стоит отметить, что в результате взаимодействия гидроксильных групп и атомов хлора структура комплекса деформируется (Cl-Co-Cl отклоняется от четверной оси), что сказывается на его химических и оптических свойствах.

Для исследуемых комплексов были определены геометрические характеристики. Кроме того, для оценки оптической активности этих комплексов были рассчитаны молекулярные орбитали HOMO и LUMO.



О контроле окружающей среды с помощью ИСЭ

Чесноков А.Ю. (аспирант, 2-го года обучения)

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

Загрязнение окружающей среды является одной из главных проблем современности, так как она может повлечь за собой глобальные экологические катастрофы. Для решения проблемы следует уделять больше внимания экологическим мерам, которые включают контроль природных загрязнений.

Если опасность загрязнения окружающей среды классическими комплексами можно преодолеть их заменой на экологически безопасные комплексы, производные янтарной кислоты, то опасность загрязнения природы антибиотиками устраняется только разрушением последних, например, фотокаталитической деградацией [1].

Нами созданы ионселективные электроды, в которых электродактивным веществом служат комплексы РЗЭ с цефазолином [2]. Они перспективны в плане использования для определения антибиотиков в микрообъемных пробах. Эти электроды стабильны, имеют концентрационный диапазон эксплуатации $pC = 1-3$ и могут быть использованы в диапазоне $pH = 4-8$. Проверка селективности ИСЭ по отношению к ионам Na^+ и K^+ показала, что электроды эффективны даже при их тысячекратном присутствии. Работоспособность электродов проверена на модельных объектах.

1. Marvelraj L.A.S. Adolf, Priya V.S. Photocatalytic degradation of antibiotics using Cu doped-SnO₂/CQDs nanocomposites // Environmental Nanotechnology, Monitoring & Management, V. 23, February 2025, 101052; <https://doi.org/10.1016/j.enmm.2025.101052>.
2. Крюков Т.В., Феофанова М.А., Чесноков А.Ю., Толкачева Л.Н., Никольский В.М. Создание ионселективных электродов для эффективного контроля загрязнения окружающей среды антибиотиками // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. 2025. № 1 (59). С. 74-82.



Количественное определение рутина в некоторых лекарственных формах методом ВЭЖХ

Щеглова Л.А. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Количественное определение рутина в лекарственных формах имеет большое значение в области контроля качества фармацевтической продукции. Для определения рутина используют методы: спектрофотометрия, капиллярный электрофорез, высокоэффективная жидкостная хроматография.

На сегодняшний день существуют аттестованные методики определения рутина методом ВЭЖХ и спектрофотометрии, описанные для БАДов [1]. Но они не валидированы для лекарственных форм.

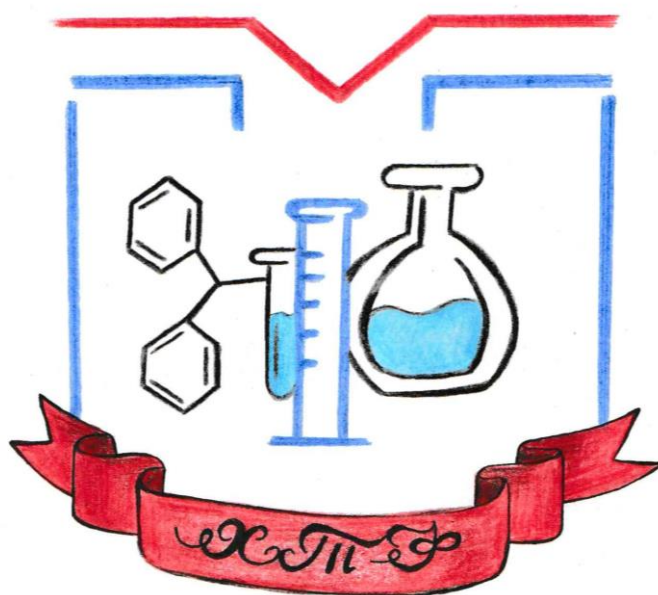
Анализ лекарственных препаратов наружного применения методом ВЭЖХ затруднен в связи со сложной пробоподготовкой и матрицей. Для проведения измерений был модифицирован метод ВЭЖХ для образцов гелей «Троксерутин» и «Троксевазин».

Таблица. Условия и параметры проведения анализа методом ВЭЖХ

Параметр	Значение
Длина волны	360 нм
Время детектирования	6,8-7,0 мин
Подвижная фаза	0,2% ТХУ:АСН (80:20)
Температура термостата колонок	25°C

При пересчете концентраций рутина в пробах гелей «Троксевазин» и «Троксерутин» составили соответственно $(1,89 \pm 0,28)$ г/100г и $(1,99 \pm 0,30)$ г/100г. В сравнении с ранее полученными результатами измерений методом спектрофотометрии в тех же образцах, можно отметить больший разброс значений [2], что показывает более высокую точность метода ВЭЖХ.

1. Руководство Р 4.1.1672-03: дата введения 2003-06-30. – Москва : Минздрав России, 2004. – 239 с.
2. Сборник тезисов VII Международной (XIX Региональной) научной конференции «Техногенные системы и экологический риск», Обнинск 18-19 апреля 2024 г. С 251-252
// Определение рутина в некоторых лекарственных формах для наружного применения
// НИЯУ «МИФИ».



Секция органической химии



Получение квантовых точек сульфида кадмия с использованием N-алкилпиридиниевых тетрафторборатных ионных жидкостей

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

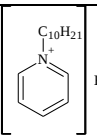
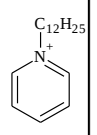
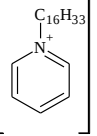
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Журавлев О.Е.

Получение квантовых точек (КТ) заданных размеров является важной задачей из-за их широких областей применения. Ионные жидкости (ИЖ) обладающие поверхностно-активными свойствами способны стабилизировать золи наночастиц.

Цель работы: синтезировать КТ сульфида кадмия с использованием ацетонитрильных растворов тетрафторборатных ИЖ.

Золи CdS получены с использованием сульфида натрия и ацетата кадмия в ацетонитрильном растворе ИЖ. Для оценки среднего размера наночастиц полупроводника по величине сдвига края фундаментального поглощения спектральным методом были записаны спектры поглощения в УФ-области зольей КТ CdS, полученные размеры частиц представлены в таблице. Были получены снимки поверхности частиц методом растровой электронной микроскопии и оценена стабильность зольей по величине ξ -потенциала.

Таблица. Размеры КТ CdS, полученные методом УФ-спектроскопии

Используемая ИЖ	Структурная формула	С (ИЖ), %	$d_{\text{ср}}$, нм	$E_{\text{ср}}$, эВ
N-децилпиридиний тетрафторборат		1	5,27	4,56
		2	5,34	4,50
		3	5,39	4,46
N-додецилпиридиний тетрафторборат		1	5,34	4,50
		2	5,49	4,39
		3	5,65	4,27
N-гексадецилпиридиний тетрафторборат		3	5,49	4,39



Получение производных бетулина и исследование их свойств

Гапоненко О.В. (специалист, 5-го года обучения)

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

Бетулин, благодаря своей доступности и биологической активности, занимает важное место среди ценных природных источников, как в нативном состоянии, так и в виде различных продуктов трансформации. Однако его ограниченная растворимость в воде сдерживает применение этого вещества в медицине, косметике и других сферах. Увеличение растворимости тритерпеноидов, как и любых гидрофобных лекарственных веществ, может быть достигнуто посредством их химической модификации [1].

В настоящей работе сложные эфиры бетулина получали реакцией ацилирования соответствующими кислотами в заданных условиях. Для синтеза были выбраны стеариновая, пальмитиновая и олеиновая кислоты. В качестве катализатора использовали серную концентрированную кислоту. Оптимальное время проведения синтезов, установленное опытным путем, составляет 60 мин.

Полученные в работе производные бетулина представляют собой бесцветные жидкости. Соединения растворяются в этилацетате, хлороформе, совершенно нерастворимы в воде. Строение и состав полученных производных бетулина подтверждены методом ИК-спектроскопии. Определены значения поверхностного натяжения и эфирное число эфиров бетулина. Обнаружено уменьшение поверхностного натяжения с 72,3 до 32 мН/м, следовательно, полученные соединения являются поверхностно-активными.

1. Воробьева О.А. Производные бетулина. Биологическая активность и повышение растворимости // Химия растительного сырья. 2019. № 4. С. 407-430.



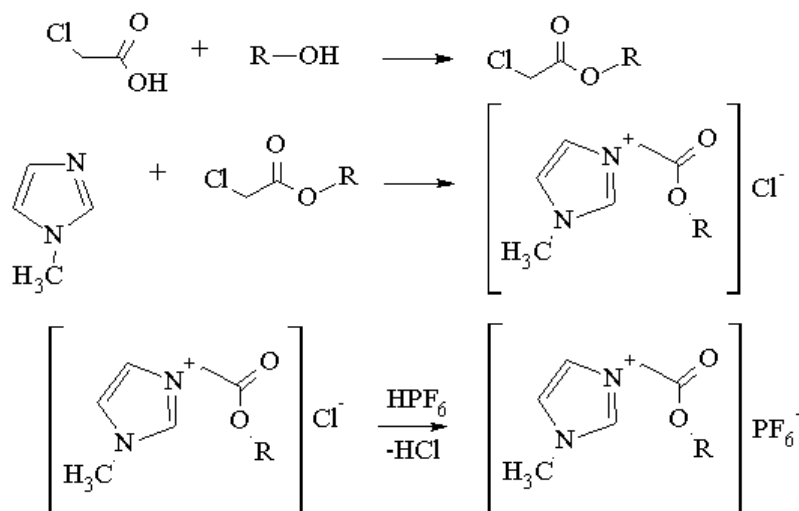
Термическая стабильность имидазолиевых ионных жидкостей с гексафторфосфат-анионом

Дю М. А. (бакалавр, 4 год обучения)

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

Ионные жидкости (ИЖ) - это расплавы органических солей, находящиеся в жидком состоянии в широком интервале температур, в ряде случаев ниже комнатной. Наиболее важными характеристиками ИЖ являются высокая полярность, ионная проводимость, низкая температура плавления и высокая термическая стабильность. Изучение взаимосвязи структура-свойство для ионных жидкостей является актуальной на сегодняшний день задачей.

Цель работы: получение ряда имидазолиевых ионных жидкостей и изучение их термостабильности на воздухе. Схема получения представлена ниже:



где R=C₄H₉, C₆H₁₃, C₈H₁₇

Все синтезированные соединения охарактеризованы по данным ИК-спектроскопии. Оценка термической стабильности ионных жидкостей проводилась в температурном интервале 25-600 °С на воздухе. Было показано, что ионные жидкости с гексафторфосфат-анионом более термически стабильны, чем с хлорид-анионом.



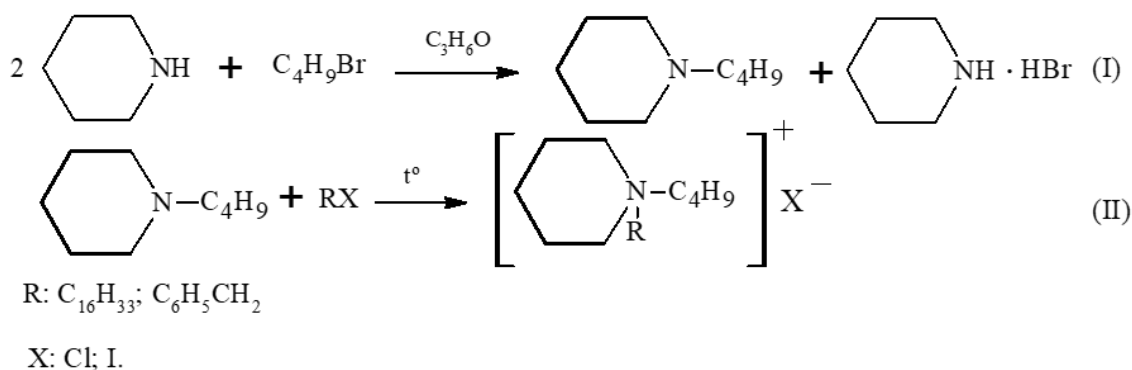
Синтез солей N-алкилпиперидиния и изучение их защитных свойств в кислой среде

Зайцева А.Е. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Добавление ингибитора является одним из наиболее удобных и эффективных способов замедления коррозии металлов. Широко распространены ингибиторы на основе азотсодержащих соединений в том числе соли N-алкилпиперидиния.

В настоящей работе синтезированы четвертичные соли N-алкилпиперидиния с различными радикалами и анионами и изучена их ингибирующая способность в 20% H_2SO_4 при защите стали-3 (0,14% С, 0,55% Мп, 0,05% Cr). Концентрация ингибитора во всех случаях составляла 0,2% масс., метод исследования – гравиметрический, время испытаний 336 часов. Пиперидин на первой стадии был переведен в третичный амин (I). Последующей кватернизацией N-бутилпиперидиния различными алкилгалогенидами были получены исследуемые соединения (II):



Из синтезированных солей реакцией ионного обмена так же были получены борфториды и бораты. Для всех полученных соединений рассчитана скорость коррозии.

В результате проделанной работы мы пришли к выводу, что синтезированные соединения могут быть использованы для защиты стали-3 в растворах H_2SO_4 .

Изучение термической стабильности дицианамидов N-алкилоксикарбонилметилпиридиния

Ипатова О.А. (бакалавр 4-го года обучения)

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

Благодаря уникальной комбинации свойств ионные жидкости находят применение в качестве растворителей, электролитов для аккумуляторов, катализаторов, что делает их перспективной альтернативой традиционными органическим растворителям. Исследование их термической стабильности необходимо для определения области допустимых температур использования и безопасности процессов.

Целью работы являлось изучение термической стабильности пиридиниевых ионных жидкостей с дицианамид-анионом на воздухе.

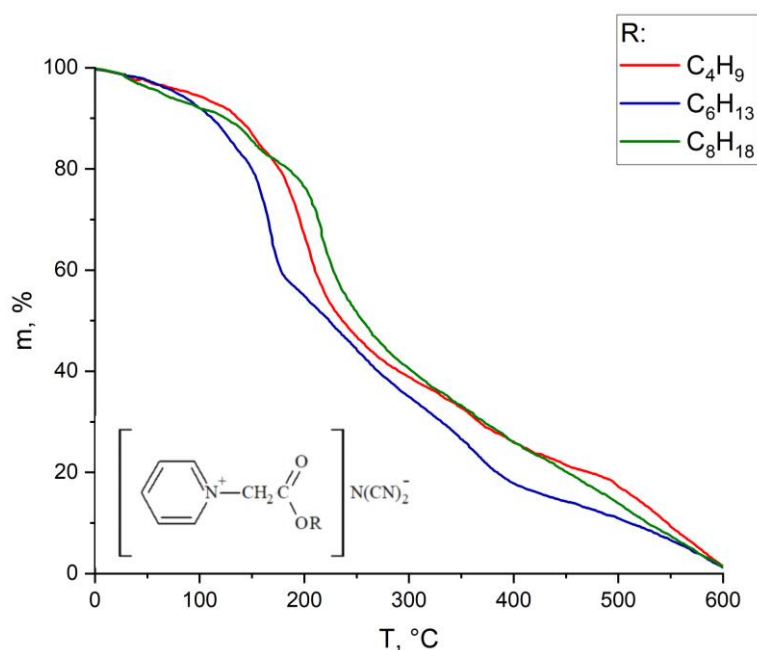


Рис. Кривые потери массы дицианамидов N-алкилоксикарбонилметилпиридиния.

Установлено, что все исследуемые соединения стабильны до 146 °С, затем постепенно разлагаются до 600 °С. Наибольшей термической стабильностью обладает дицианамид N-октилоксикарбонилметилпиридиния, который термостабилен до 184 °С, ионные жидкости с заместителями C_4H_9 и C_6H_{13} в катионе устойчивы до 164 °С и 146 °С соответственно.



Пластификаторы для поливинилхлорида на основе дикарбоновых кислот и синтанолов

Калашникова А.О. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Долгое время для улучшения свойств поливинилхлорида использовали фталаты, которые, несмотря на свою эффективность в роли пластификаторов, вызывают опасения из-за неблагоприятного влияния на окружающую среду и здоровье человека. Это привело к необходимости поиска альтернативных, экологически чистых и безопасных пластификаторов, способных заменить традиционные фталатные соединения.

Целью настоящего исследования является получение аналогов фталатов. В работе представлены результаты сравнения нескольких пластификаторов для поливинилхлорида (ПВХ) на основе дикарбоновых кислот (глутаровой, адипиновой, себадиновой) и синтанола (ОС-20).

Методика синтеза включала этерификацию кислот с ОС-20 в присутствии катализатора (пТСК) при 75–80°C. Выходы продуктов составили 65%, 56% и 72% соответственно. Состав и строение полученных сложных эфиров подтверждены данными ИК-спектроскопии.

Пленки ПВХ с добавлением синтезированных пластификаторов в количестве 43% показали значительное повышение эластичности.

Пластификаторы на основе себадиновой и адипиновой кислоты обладают совместимостью с ПВХ меньше, чем пластификатор из глутаровой кислотой, так как в первых двух случаях на поверхности пленок произошла миграция избыточного количества пластифицирующего агента в виде жирных белых налетов, которые легко удаляются при механическом воздействии. В случае с глутаровой кислотой налета не образовалось, пленка осталась прозрачной и стала более эластичной.



Синтез и физико-химические свойства железосодержащих ионных жидкостей на основе солей 1-алкилпиридиния

Кафтанов А.Д. (аспирант, 4-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 °С. Разнообразие ИЖ обусловлено большим количеством подходящих комбинаций катионов и анионов, из-за чего они могут обладать самыми различными свойствами и иметь широкое практическое применение.

Целью работы являлось получение железосодержащих ИЖ на основе солей 1-алкилпиридиния и изучение их физико-химических свойств.

В ходе работы были получены восемь новых, не описанных в литературе ИЖ, для которых была изучена их термическая стабильность на воздухе в температурном интервале 25 – 600 °С и определен молярный коэффициент экстинкции в ацетоне, также для соединений, обладающих поверхностной активностью, были определены критические концентрации мицеллообразования (ККМ).

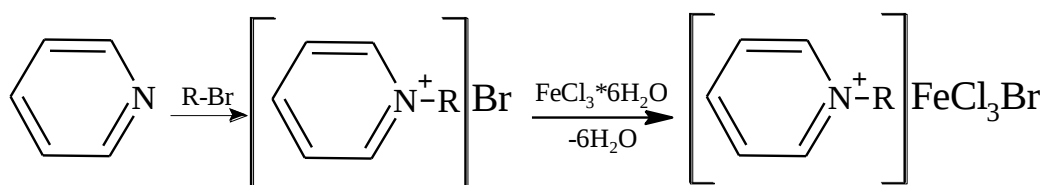


Рис. Схема синтеза ионных жидкостей, где R: -H, -C₂H₅, -C₄H₉, -C₆H₁₃, -C₈H₁₇, -C₁₀H₂₁, -C₁₂H₂₅, -C₁₆H₃₃

Строение всех полученных соединений подтверждено данными ИК-спектроскопии и спектроскопии в видимой области. Показано, что среди исследованных ИЖ бромтрихлорфerrаты пиридиния и 1-этилпиридиния обладают наибольшей термической стабильностью. Было установлено, что полученные бромтрихлорфerrаты 1-алкилпиридиния обладают большей поверхностной активностью по сравнению с исходными бромидами.



Влияние поверхностно-активных веществ на свойства растворов желатина

Крупнов В.М. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Взаимодействие желатина с поверхностно-активными веществами (ПАВ) существенно влияет на его структуру и свойства в растворах.

Добавление цетилпиридиний бромида (ЦПБ), катионного ПАВ, оказывает значительное влияние на вязкость растворов желатина. Экспериментально установлено, что увеличение концентрации ЦПБ (от $1 \cdot 10^{-5}$ до $1 \cdot 10^{-2}$ моль/л) приводит к росту относительной вязкости растворов желатина, причем оптимальная концентрация для достижения максимальной вязкости наблюдается в 4% растворе желатина (рис. 1). Микроскопические исследования показывают, что морфология образующихся агрегатов также зависит от концентрации ЦПБ: при высокой концентрации формируются крупные «пластинчатые» структуры, обуславливающие высокую вязкость, в то время как при низкой концентрации преобладают «каплевидные» образования, соответствующие меньшей вязкости.

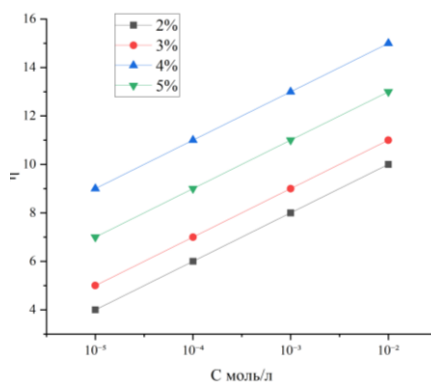


Рис. Зависимость вязкости желатина от концентрации ЦПБ.

Полученные данные показывают, что, регулируя концентрацию ЦПБ, можно управлять процессом агрегации в растворах желатина, что позволяет задавать требуемые реологические параметры этих растворов.



Получение эмульсий оливкового масла методом температурной инверсии фаз

Кузина Е.П. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Актуальность исследования обусловлена потребностью в разработке устойчивых, экологически чистых и безопасных эмульсий, которые могут найти применение в пищевой, косметической и фармацевтической промышленности. Оливковое масло, благодаря уникальному химическому составу, богатому полиненасыщенными жирными кислотами, витаминами и антиоксидантами, является идеальным компонентом для создания высококачественных эмульсий. Стабильность оливкового масла в составе эмульсий зависит от многих факторов, часто от типа используемого эмульгатора, например, поверхностно-активного вещества (ПАВ).

В качестве эмульгаторов в работе были использованы неионогенный Tween 80 и неионогенный ПАВ мягкого действия Эмукол-268, содержащий в своем составе полиоксипропиленовую часть и цепь полипропиленоксида. Tween 80 обладает высоким значением гидрофильно-липофильного баланса, что делает его эффективным стабилизатором для эмульсий М/В. В то время как Эмукол-268, обладающий ГЛБ в пределах от 2 до 8, может быть использован как в прямых, так и в обратных эмульсиях, в зависимости от условий. Исследовали системы эмульсий оливкового масла, содержащие растворы Эмукол-268 и Tween 80 с концентрациями от 1% до 10%.

Эмульсии оливкового масла получали методом температурной инверсии фаз. Обращение фаз определяли по скачку удельной электропроводности, измеренную кондуктометром MettlerToledo SG7. Измерения проводились с нагреванием эмульсионной системы при термостатировании с шагом 2°C. По результатам измерений получили политермы электропроводности, которые имели скачки, характеризующие обращение фаз, исследуемых эмульсий.



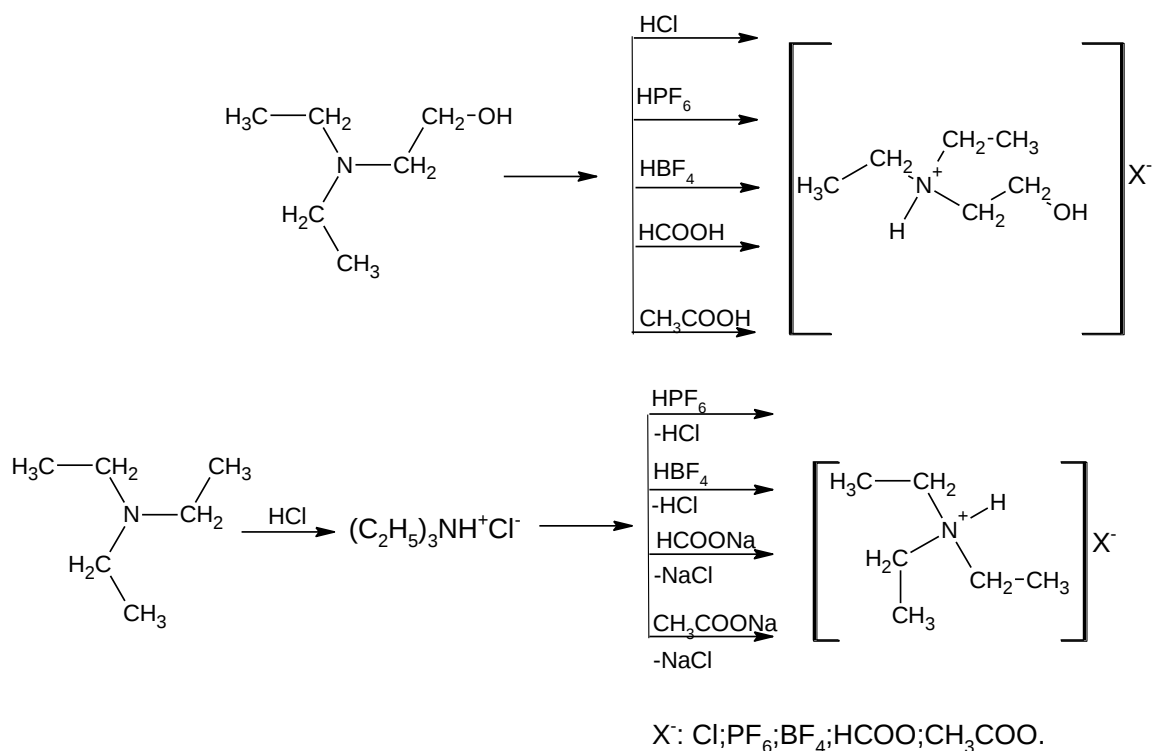
Синтез протонированных ионных жидкостей на основе солей аммония

Куприянова С. М. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Протонированные ионные жидкости (ПИЖ) - это подкласс ионных жидкостей (ИЖ), которые образуются путем переноса протона (H^+) от кислоты к основанию. ПИЖ обязательно содержат протонированный катион, например, аммоний, имидазолий или пиридиний.

В данной работе выполнен синтез протонированных ИЖ с катионами триэтиламмония и диэтил(2-гидроксиэтил)аммония с различными неорганическими и органическими анионами и изучена их термическая стабильность на воздухе. Схема синтеза представлена ниже.



Все полученные соединения были охарактеризованы по данным ИК-спектроскопии. Определены основные физико-химические константы. Проведено изучение термической стабильности синтезированных соединений в температурном интервале 25-600 °С на воздухе. Установлены закономерности влияния структуры катиона и природы аниона на термические свойства.



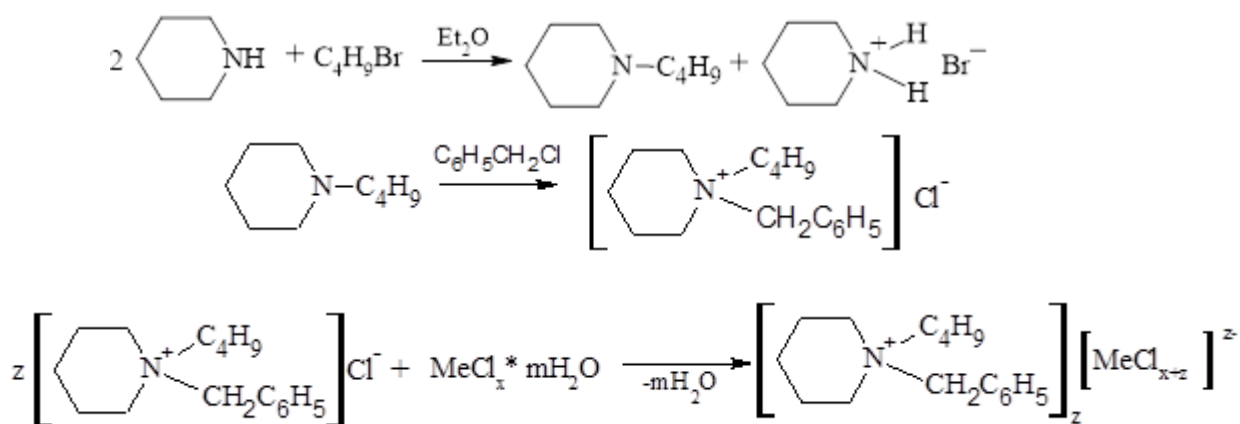
Синтез N,N-диалкилпиперидиниевых ионных жидкостей с металлатными анионами

Малышева П. А. (бакалавр, 4 года обучения)

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

Ионные жидкости (ИЖ) – это органические соли, являющиеся жидкостями с низкими температурами плавления (ниже 100°C), которые состоят из органических катионов и неорганических либо органических анионов. Ключевым аспектом в химии ИЖ является их поведение в растворах, поскольку они могут диссоциировать на ионы полностью или частично.

Целью данной работы было получение металлатных ионных жидкостей с катионом N-бензил-N-бутилпиперидиния и изучение электропроводности (ЭП) их разбавленных растворов в ацетоне. Синтез металлатных ИЖ осуществляли в три стадии. Все синтезированные соединения охарактеризованы по данным ИК-спектроскопии. Схема синтеза представлена ниже.



где Me: Fe (x=3, z=1, m=6); Mn (x=2, z=2, m=4); Co, Ni (x=2, z=2, m=6).

Полученные соединения представляли собой окрашенные жидкости или легкоплавкие аморфные вещества. Было выполнено кондуктометрическое исследование разбавленных растворов (в диапазоне 10^{-2} – 10^{-3} моль/л) ИЖ в ацетоне. Показано, что замена хлор-иона на металлатный анион приводит к значительному росту эквивалентной ЭП растворов.



Синтез оснований Шиффа конденсацией ароматических альдегидов с анилином

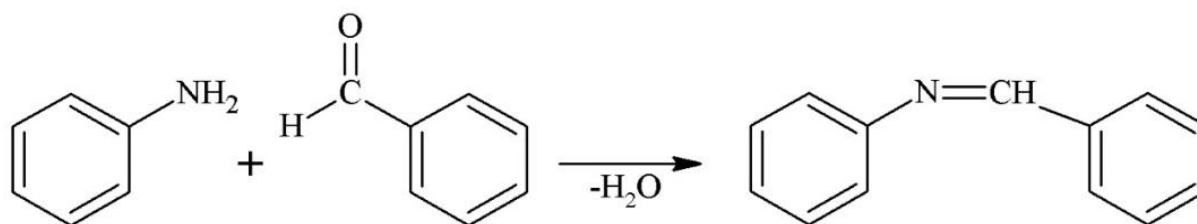
Молчанова У.А. (бакалавр, 4-го обучения)

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

Основания Шиффа или азометины — соединения общей формулы $R^1R^2C=NR^3$ (R – алкильный или арильный радикал), получаемые при взаимодействии первичных аминов с альдегидами или кетонами, благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам широко применяются в качестве промежуточных продуктов для синтеза ряда органических соединений или в качестве лигандов для получения комплексов металлов. Преимуществом оснований Шиффа, имеющих в составе азометиновую группу ($-C=N-$), является обеспечение высокой реакционной способностью, что придает молекулам стабильность и участие в реакциях конденсации и циклизации.

В данной работе для получения оснований Шиффа использовали реакцию нуклеофильного присоединения–отщепления анилина по карбонильной группе ароматических альдегидов (бензальдегид, фурфурол).

Схема получения N-бензилиденанилина:



Синтезированные соединения представляют собой окрашенные игольчатые кристаллы (N-бензилиденанилин в жёлтый цвет, N-фурфулиденанилин — фиолетовый), нерастворимые в воде, растворимые в органических растворителях. Идентификацию полученных азометинов проводили по совпадению температуры плавления вещества с литературными данными. Структура соединений подтверждена данными ИК-спектроскопии, в спектрах синтезированных азометинов присутствует характеристическая полоса поглощения связи $-C=N-$ при 1637 см^{-1} .



Изучение способов влияния на процесс полимеризации акрилонитрила

Мочалов В.В. (специалист, 5-го года обучения)

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

Для изучения влияния основных параметров полимеризации акрилонитрила (АН) в растворе ДМСО на ММ и ММР полимера были проведены синтезы. Условия, при которых осуществлялись синтезы (начальная концентрация АН (C_m), концентрация инициатора (C_I), температура в реакторе (t)) и полученные при этом молекулярные характеристики (среднечисловая M_n , средневесовая M_w молекулярные массы и степень полидисперсности $D = M_w/M_n$), приведены в таблице.

Определение ММР проводили методом гель-проникающей хроматографии с использованием системы «Бриз», снабженной рефрактометрическим детектором модели 2414 и набором колонок Styragel HR. Такой набор гель-колонок позволяет определять молекулярно-массовые характеристики полимеров с молекулярными массами от 500 до 10 000 000.

Таблица. Условия полимеризации акрилонитрила

№ синтеза	параметры синтеза			молекулярные характеристики		
	C_m , %	C_I , %	t , °C	$M_n \cdot 10^3$	$M_w \cdot 10^3$	$D = M_w/M_n$
1	20,0	0,020	70	293,4	446,9	1,52
2	20,0	0,020	66	351,7	506,1	1,44
3	18,0	0,020	70	254,7	453,5	1,57
4	20,0	0,022	70	271,0	417,6	1,55



Ацилирование спиртов ангидридами двухосновных кислот

Синицына А.О. (студентка, 4-го года обучения)

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

Ацилирование спиртов ангидридами двухосновных кислот позволяет создавать разнообразные производные, востребованные в фармацевтической, пищевой и косметической промышленности.

В ходе данной работы были получены сложные эфиры ацилированием первичных спиртов (этанол, бутанол-1) ангидридами двухосновных кислот (фталевой, янтарной, глутаровой, малеиновой) по известной методике [1]. Общая схема реакций:

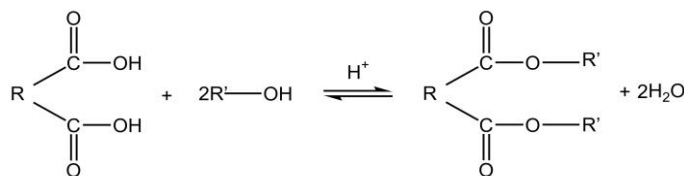


Таблица. Выходы синтезированных сложных эфиров

Реагенты	Продукт	Выход продукта, %
н-бутиловый спирт и фталевый ангидрид	дибутилфталат	93
н-бутиловый спирт и глутаровый ангидрид	дибутилглутарат	57
этиловый спирт и янтарный ангидрид	диэтилсукцинат	29
этиловый спирт и малеиновый ангидрид	моноэтиловый эфир малеиновой кислоты	39

Идентификацию синтезированных соединений проводили по совпадению физико-химических характеристик (показатель преломления, температура кипения) с литературными данными. Методом ИК-спектроскопии были подтверждены структуры полученных сложных эфиров.

1. Волгина Т.Н., Татаркина А.И. Лабораторный практикум по химии и технологии органических веществ / Т.Н. Волгина; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014.– 71с.



Влияние структуры аниона на термическую стабильность аммониевых ионных жидкостей

Соловьёва А.Ю. (специалист, 5-го года обучения)

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

Ионные жидкости (ИЖ) представляют собой расплавленные органические соли, которые остаются в жидком состоянии в широком диапазоне температур. Их необычные и, во многом, уникальные свойства определяют широкий спектр высокотемпературных применений.

Цель работы заключается в синтезе ИЖ на основе диметилдипензиламмония с различными анионами и исследовании влияния их структуры на термическую стабильность. Структура всех синтезированных ионных жидкостей подтверждена данными ИК-спектроскопии

Для оценки термостабильности полученных ИЖ был проведен термогравиметрический анализ в интервале температур 25-600°C на воздухе (рис.). Установлено, что для ИЖ с одноименным катионом в зависимости от структуры аниона термическая стабильность снижается в ряду: $\text{BF}_4^- > \text{PF}_6^- > \text{N}(\text{CN})_2^- \approx \text{NO}_3^- > \text{SO}_4^{2-}$. Данная зависимость обусловлена увеличением нуклеофильности и координирующей природы аниона.

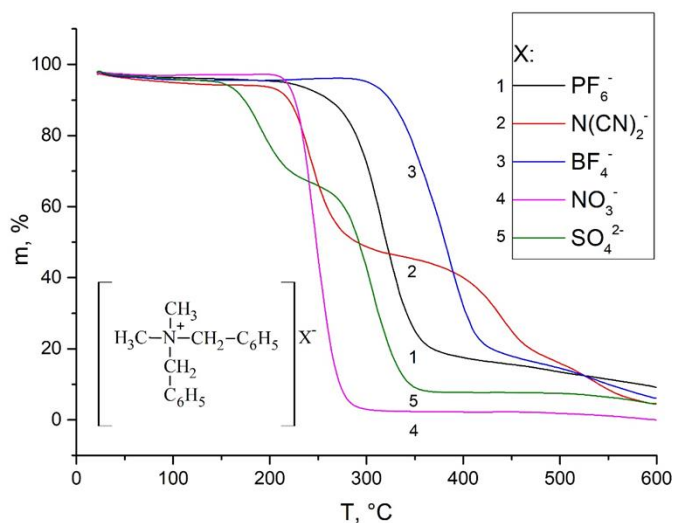


Рис. Кривые потери массы ИЖ диметилдипензиламмония.



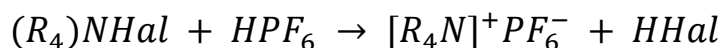
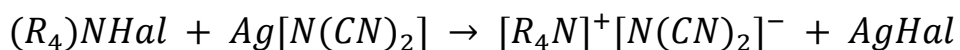
Синтез и термическая стабильность тетраалкиламмониевых ионных жидкостей

Терентьев Д.И. (студент, 4-го года обучения)

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

В настоящее время под термином «ионные жидкости» чаще всего подразумевают соли, температура плавления которых ниже температуры кипения воды, то есть ниже 100°C. В современной химии ионные жидкости весьма широко используются в качестве растворителей, катализаторов. Изучение зависимости свойств ионных жидкостей от их структуры является актуальной задачей в органической химии.

В работе были синтезированы ионные жидкости с дицианамид- $[N(CN)_2]^-$, гексафторфосфат-анионом $[PF_6]^-$ и тетраалкиламмониевым катионом с разной длиной углеродной цепи алкильного заместителя (CH_3 , C_2H_5 , C_4H_9). В качестве прекурсоров для синтеза ионных жидкостей использовались: $Ag[N(CN)_2]$ и водный раствор H_2PF_6 соответственно. Схема получения представлена ниже.



где R: CH_3 , C_2H_5 , C_4H_9 ; Hal: Br, I

Синтезированные ионные жидкости с дицианамид-анионом являются жидкостями за исключением тетраметиламмоний дицианамида. Все полученные гексафторфосфаты тетраалкиламмония являются кристаллическими веществами белого цвета. Все синтезированные соединения охарактеризованы по данным ИК-спектроскопии. Определены основные физико-химические константы.

Оценка термической стабильности ионных жидкостей проводилась в температурном интервале 25-600 °C в воздушной атмосфере. Проведен сравнительный анализ термической стабильности изученных соединений.



Получение 3-(D-глюкопентаоксипентил)-содержащего формаза

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

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

Формаза, содержащие углеводный фрагмент D-глюкозы могут быть использованы как потенциальный биоактивный агент или хромофор для дальнейших исследований в области органического синтеза и биомедицинской химии. Представленная работа посвящена получению 3-(D-глюкопентаоксипентил)-содержащего формаза. Синтез проводился в несколько стадий.

На первой стадии взаимодействием D-глюкозы с хлоргидратом фенилгидразина в присутствии ацетата натрия получен D-глюкозозон. Реакция проводилась в водной среде с последующим охлаждением и перекристаллизацией продукта в виде жёлтых кристаллов. Строение подтверждено температурой плавления 204–205°C.

На следующей стадии диазотированием анилина нитритом натрия в кислой среде (HCl) при температуре 0–5 °C получили diazonиевую соль, которую использовали сразу после получения без выделения из раствора.

Завершающую стадию проводили с помощью реакции азосочетания: раствор фенилгидразона D-глюкозы в смеси пиридина и диметилформамида охлаждали до –5–10 °C и добавляли к нему водный раствор diazonиевой соли. В результате образовалось окрашенное соединение – 3-(D-глюкопентаоксипентил)-содержащий формаза.

Полученный продукт экстрагировали органическим растворителем, обезвоживали с использованием Al_2O_3 . Полученный осадок промывали метанолом. Выход составил ~63%. Структура подтверждена методом ИК-спектроскопии: наблюдались полосы поглощения, характерные для формазанового хромофора и гликозидного фрагмента (N–H, N=N, C=C, C–O).

Таким образом, разработан достаточно эффективный маршрут синтеза глюкозосодержащего формаза.



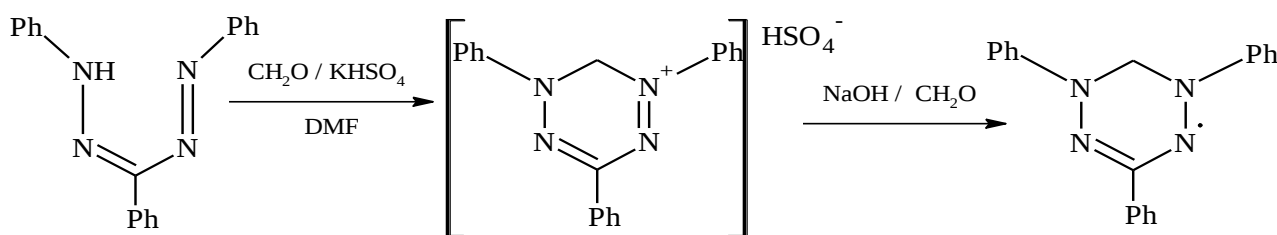
Получение 1,3,5-трифенилвердазила на основе бензальдегида

Фонникова А.А. (специалист, 5-го года обучения)

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

Вердазины – класс стабильных азотцентрированных радикалов, которые содержат частично насыщенное тетразиновое кольцо. Из-за их высокой химической устойчивости, способности как окисляться, так и восстанавливаться, вердазины являются классом стабильных радикалов, которые находят применение в различных областях: органической и координационной химии, в химии полимеров, физике, биологии.

Представленная работа посвящена синтезу 1,3,5-трифенилвердазила на основе бензальдегида. Взаимодействием фенилгидразина и бензальдегида получен фенилгидразон альдегида. На следующем этапе реакцией азосочетания фенилдиазоний хлорида с фенилгидразоном бензальдегида получен 1,3,5-трифенилформаза. Взаимодействием 1,3,5-трифенилформазана с формальдегидом в среде ДМФА получен раствор лейковердазила, который далее обрабатывали гидроксидом натрия и перемешивали в течение 24 часов. Схема реакции получения 1,3,5-трифенилвердазил представлена ниже [1].



Определена температура плавления – 145-148°C, с помощью ИК-спектроскопического анализа подтверждено строение синтезированного 1,3,5-трифенилвердазила.

1. Кострюков С.Г. Триарилвердазильные радикалы как перспективные редокс-активные компоненты органических аккумуляторов / С.Г. Кострюков, О.Ю. Черняева, А.Ш. Козлов, Б.С. Танасейчук, М.К. Пряниникова, А.А. Буртасов // Изв. АН Сер. Хим. – 2019. – Т. 2019, № 7. – С. 1321–1329.



Исследование свойств алканоламинов

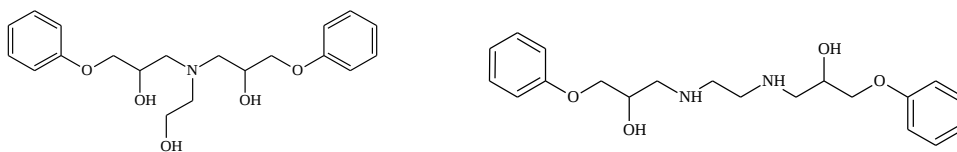
Харкунова М.К. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Алканоламины, содержащие гидроксильные группы ($-\text{OH}$) на концах цепей и эфирные ($-\text{O}-$) связи, являются важными компонентами при производстве полиуретанов и могут быть отнесены к классу простых полиэфирполиолов.

Основными характеристиками, оказывающими влияние на свойства полиэфирполиолов являются гидроксильное число, кислотное число, аминное число и содержание эпоксидных групп.

В ходе данного исследования были синтезированы полифункциональные алканоламины следующего строения:



Были определены ключевые характеристики полученных соединений. Результаты представлены в таблице.

Таблица. Характеристики синтезированных алканоламинов

№	Количество ОН-групп	Гидроксильное число, мг КОН на г	Кислотное число, мг КОН на г	Количество эпоксигрупп	Массовая доля эпоксигрупп, %	Количество аминогрупп	Аминное число, мг КОН/г
1	2	172	1,45	2	10,4	2	258
2	2	168	2,34	2	11,2	2	287
3	1	150	1,69	1	6,35	2	272
4	2	176	1,81	2	11,3	2	265
5	3	254	3,56	2	10,9	1	179
6	3	239	1,98	2	10,6	1	174
7	3	251	2,02	2	11,4	1	163
8	2	171	2,35	2	11,0	2	270
9	2	164	0,2	2	9,2	2	295
10	2	175	2,35	2	11,3	2	291
11	2	173	1,12	2	9,84	2	247
12	3	247	1,96	2	11,2	1	156
13	3	239	1,53	2	11,5	1	159

Полученные данные подтверждают прямую зависимость гидроксильного и аминного чисел, а также содержания эпоксидных групп от количества соответствующих функциональных групп в алканоламине. Кислотное число находится в пределах от 0,2 до 3,56 мг КОН на г, что является допустимым для простых полиэфирполиолов.



Электропроводность растворов тетрафенилборатов 1-алкилпиридиния

Шараева Я.А. (специалист, 5-го года обучения)

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

Ионные жидкости на основе солей пиридиния зарекомендовали себя как универсальные и эффективные вещества для применения в электрохимии. Их уникальная химическая структура и свойства делают их незаменимыми в развитии «зеленой» химии и повышении производительности электрохимических устройств.

Целью работы являлось исследование электропроводности (ЭП) растворов тетрафенилборатов 1-алкилпиридиния с различной длиной алкильного заместителя в ацетоне при 25°C.

На основе полученных данных построена зависимость эквивалентной ЭП от концентрации ИЖ (рис.1):

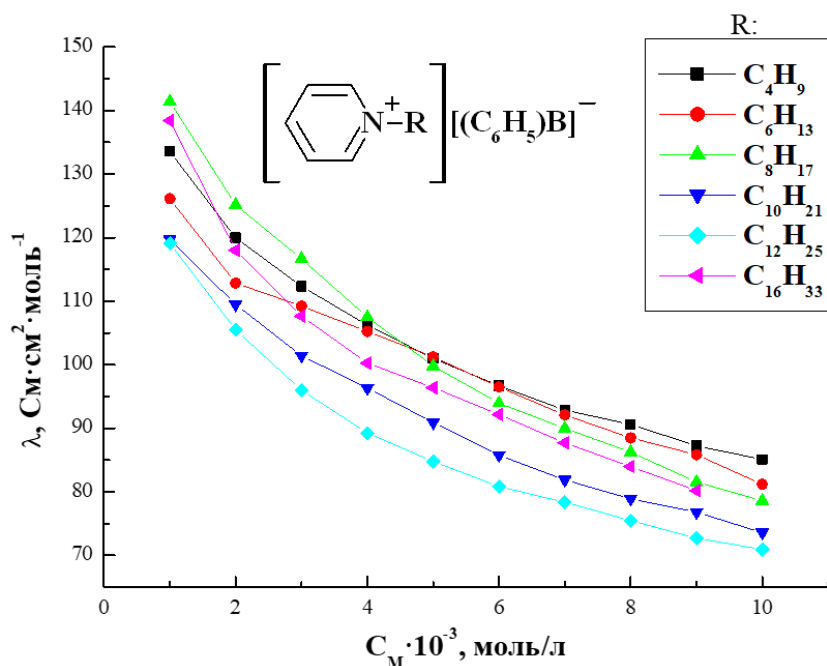
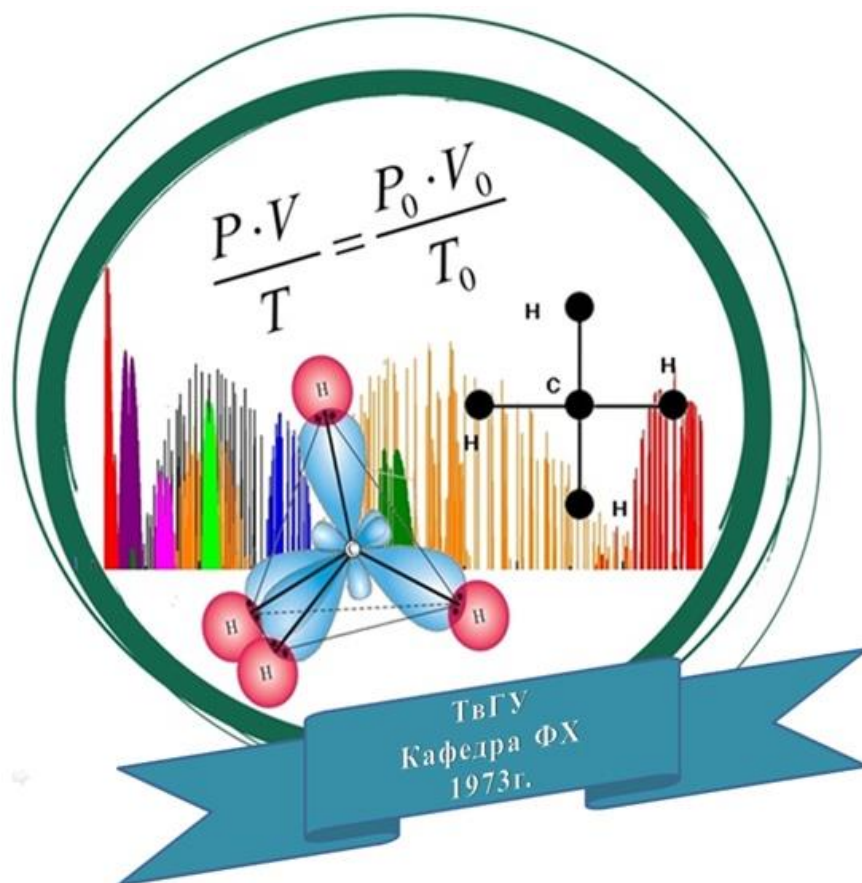


Рис. Зависимость эквивалентной электропроводности растворов тетрафенилборатов 1-алкилпиридиния в ацетоне от концентрации при 25 °С.

В результате кондуктометрического анализа не было установлено четкой зависимости эквивалентной ЭП растворов тетрафенилборатов 1-алкилпиридиния от структуры катиона.



Секция физической химии



Интегральные электронные характеристики групп конформеров ацетилцистеина

Бакалюк С.А. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Различие электронного строения конформеров *L*-ацетилцистеина (*L*-асс) определяет особенности кристаллизации вещества и, соответственно, его растворимости. *Целью работы* стало сравнение QTAIM-характеристик функциональных групп устойчивых конформаций *L*-асс.

Оптимизация пяти основных состояний *L*-асс проведена в программе Gaussian 03 методом функционала плотности B3LYP, соотношение атомам интегральных электронных характеристик (зарядов, энергий и объемов) выполнено в терминах «квантовой теории атомов в молекулах» - QTAIM [1] численным интегрированием по изоповерхности 0,001 а.е. в программном пакете AIMALL. Параметры для функциональных групп (*R*): заряд - $q(R)$, энергия - $E(R)$ и объем - $V(R)$, суммированы из соответствующих атомных свойств.

Анализ $q(R)$ показал отток электронной плотности ($\rho(R)$) в сторону азота с групп CH_3 , C(O) и CH и его отрицательный индуктивный эффект на них. Группа CH_3 обладает наименьшей подвижностью $\rho(R)$ среди других *R* из-за влияния экранирующего эффекта C(O) . Из сравнения полной электронной энергии конформеров получено, что четвертое исследованное состояние является наиболее энергетически выгодным и отличается от ближнего по энергии на 7 кДж/моль. Значительные изменения объема $V(R)$ отмечены у NH , что объяснено стерическим влиянием на нее со стороны SH , так в случаях, когда тиол обладает наибольшим $V(R)$, в NH – этот параметр -наименьший.

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория. – М.: Мир, 2001. – 532 с.



Модификация супрамолекулярных гидрогелей на основе L-Cys-AgNO₃ с помощью лаурилсульфата натрия (SDS) и лаурата натрия (SL)

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

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

Проблема супрамолекулярных гидрогелей на основе L-Cys и AgNO₃ заключается в ограниченном сроке хранения. Для её решения изучено влияние анионных ПАВ на устойчивость данных систем во времени. ПАВ преимущественно используются в качестве стабилизаторов эмульсий, пенообразователей, некоторые ПАВ проявляют антибактериальную активность. Изучение L-Cys-AgNO₃ систем с добавлением ПАВ актуально, поскольку поверхностно-активные вещества могут стабилизировать гидрогели, увеличивая срок хранения, и дополнительно придать им новые свойства. Синтез гидрогелей происходил по одностадийному методу. Концентрация SDS в образцах варьировалась в пределах 0,1–0,5 мМ, а концентрация SL в образцах составляла $8 \cdot 10^{-7}$ – $8 \cdot 10^{-8}$ мМ за счет ограниченной растворимости в воде, концентрация остальных компонентов оставалась постоянной.

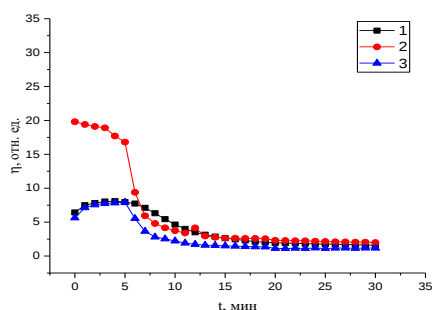


Рис. 1 Зависимость относительной вязкости от времени при T = 20 °С для образцов различного состава:

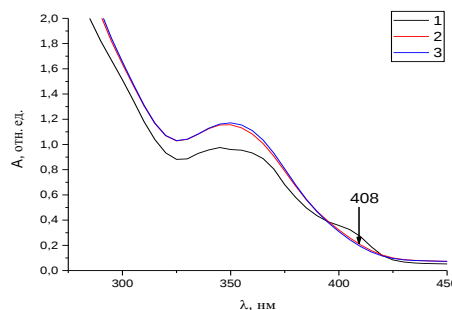


Рис. 2 Электронные спектры образцов различного состава, зарегистрированные через 7 дней после синтеза:

1 – L-Cys-AgNO₃-KI, 2 – L-Cys-AgNO₃-KI-SDS, 3 – L-Cys-AgNO₃-KI-SL

Исходя из представленных данных (рис. 1 и 2), можно сделать вывод, что ПАВ стабилизируют гидрогели, о чем свидетельствует отсутствие полосы плазменного резонанса в электронных спектрах, а значительное увеличение вязкости при добавлении SDS предположительно происходит благодаря сульфогруппе. Дальнейшее увеличение концентрации SDS понижает вязкость до значений сопоставимых с образцом, содержащим SL.



Исследование процессов формирования ассоциатов на основе глутатиона и нитрата серебра

Беляков А.А. (специалист, 5-го года обучения)

Научные руководители: доцент, к.х.н. Вишневецкий Д.В., асс. Андрианова Я.В.

За счет большого содержания глутатиона в клетках человека и его высокой роли в жизнедеятельности, он является интересным объектом исследования в составе систем с ионами различных металлов. Уже известны подобные системы с L-цистеином, но диапазон соотношений, растворимых в воде систем, процессы самосборки нитрата серебра с глутатионом мало изучены. Целью работы являлось исследование процессов самосборки глутатион-нитрат серебра ($\text{GSH}:\text{AgNO}_3$). Объектами исследования - серия системы глутатион:нитрат серебра в соотношениях 1:0.25, 1:0.5, 1:0.75, 1:1, 1:1.25, 1:1.5, 1:1.75, 1:2, 1:2.25.

В ходе экспериментов было установлено, что наиболее устойчивые соотношения $\text{GSH}:\text{AgNO}_3$ – 1:2, 1:2.25. На УФ-спектрах образцов проявлялась полоса, по которой можно судить об изменении электронной конфигурации в системах, в отличие от исходных компонентов. С избытком серебра, pH систем понижался, что говорит о разрушении водородных связей и депротонирование глутатиона.

Участие тиольной группы подтвердилось реактивом Элмана. Были получены ИК-спектры серии образцов с избытком нитрата серебра.

Анализ спектров, а также сумма результатов остальных методов изучения систем показали, что структурирование происходит за счет координации минимум двух молекул глутатиона посредством взаимодействия карбоксильных групп глициновых фрагментов с ионами серебра. Динамическое светорассеяние подтвердило укрупнение частиц в растворе, по сравнению с исходным глутатионом.

Работа выполнена на оборудовании ЦКП ТвГУ



Воздействия дневного света на характеристики наночастиц серебра, полученных зеленым синтезом из экстрактов боярышника

Горбань А.П. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Одним из преимуществ зеленого синтеза наночастиц серебра (НЧС) является возможность использования лекарственных растений, биоактивные вещества которых выступают в роли восстановителя и стабилизатора НЧС, придавая их коллоидным растворам дополнительные свойства. В данной работе для синтеза НЧС использовали листья боярышника, которые содержат разнообразные биологически активные вещества (флавоноиды, проантоцианидины и др.), благодаря которым экстракты проявляют кардиотоническое, антидепрессивное, антиоксидантное и др. действия. Характеристики синтезируемых наночастиц зависят от условий синтеза – концентрации исходных компонентов, температуры, скорости перемешивания. Кроме того, дневной свет, УФ облучение способствуют протеканию дополнительных фотохимических реакций, что оказывает влияние на параметры НЧС. Цель данной работы – исследование влияния дневного света на характеристики наночастиц, синтезированных в водных экстрактах листьев боярышника, которые были собраны в разное время года (июнь, сентябрь) в деревне Аввакумово Тверской области.

С помощью методов УФ-видимой спектроскопии, динамического светорассеяния, СЭМ установлено, что воздействие дневного света на образцы НЧС может приводить к увеличению количества и размера наночастиц вследствие протекания фотохимической реакции. Однако, в случае формирования стабильных НЧС воздействие дневного света на коллоидные растворы наночастиц не проявляется заметным образом на положении и интенсивности полосы плазмонного резонанса в электронных спектрах, что может служить критерием эффективности синтеза НЧС.



Изучение взаимодействия L-цистеина с йодатом калия

Денисенко В.Д. (магистр, 1-го года обучения)

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

Актуальность исследования обусловлена необходимостью разработки эффективных методов анализа йодатов и тиольных групп, что имеет существенное значение для решения ряда важных практических задач: определение содержания йодатов позволяет осуществлять строгий контроль качества йодсодержащих продуктов, что особенно важно для пищевой и фармацевтической промышленности, анализ тиольных групп ($-SH$) играет ключевую роль в биохимических исследованиях, поскольку они участвуют в поддержании стабильности, регуляции активности белков и защите клеток от окислительного стресса. Нарушение баланса тиольных групп может привести к дисфункции белков, что связано с развитием различных патологических процессов.

В ходе проведенных экспериментов было установлено, что в кислой среде при взаимодействии L-цистеина с йодатом калия в эквимольном соотношении (1:1) наблюдается образование желтого раствора. Последующее добавление 1% раствора крахмала приводит к появлению интенсивной сине-малиновой окраски, что является качественной реакцией на наличие молекулярного йода (I_2). Данное предположение подтверждается также результатами УФ-спектроскопии: зафиксированные спектры демонстрируют характерные для молекулярного йода полосы поглощения, что согласуется с литературными данными.

Таким образом, проведенные исследования позволяют сделать вывод о протекании реакции с образованием свободного йода, что открывает перспективы для разработки новых аналитических методов определения как йодатов, так и тиолсодержащих соединений.



Исследование геле- и пленкообразующей способности каррагинана при добавление цистеин-серебряного раствора

Ершов Н.А. (специалист, 5-го года обучения)

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

Создание биосовместимых и биоразлагаемых бактерицидных гелей, пленок, волокон является актуальным направлением. Наиболее перспективными являются водорастворимые полисахариды, такие как каррагинан (КАР), благодаря биосовместимости и низкой токсичности [1]. Помимо этого, КАР обладает плёнкообразующей способностью [2].

Цель исследования - изучить процессы геле- и пленкообразования КАР при добавлении бактерицидного водного раствора L-цистеина и нитрата серебра (цистеин-серебряный раствор - ЦСР).

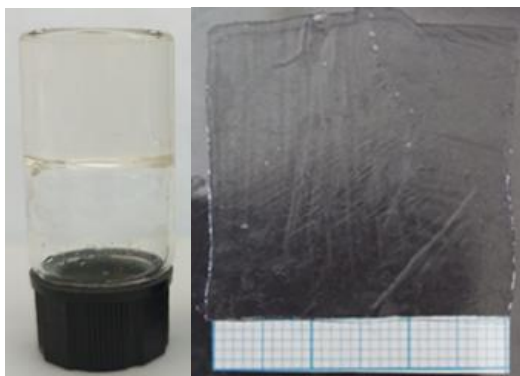


Рис. Фото композитного гидрогеля и полученной из него пленки

В ходе работы были приготовлены водные растворы КАР и смешанные растворы КАР/ЦСР, а также были изготовлены пленки (рис.). Для исследования полученных образцов использовались методы вибрационной вискозиметрии, УФ-спектроскопии, потенциометрического титрования, электронной микроскопии (СЭМ) и

механических испытаний.

1. Biomedical and Environmental Applications of Carrageenan-Based Hydrogels: A Review. // A. Mirzaei, M. Esmkhani, M. Zallaghi, Z. Nezafat, S. Javanshir. Journal of Polymers and the Environment. 2022. №5 (3), 734-745 pp.
2. Carrageenan-based sustainable biomaterials for intelligent food packaging: A review // S. Mathew, A. Jaiswal, S. Jaiswal. Carbohydrate Polymers. 2024 V. 342, 1-15 pp.

Параметры КТ (3; -1) в молекуле орто-метилфенилсульфоновой кислоты

Захарова А.С. (бакалавр, 3-го года обучения)

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

Целью работы стало изучение распределения электронной плотности в критических точках ($\rho(r_b)$) связующих путей (КТ (3; -1)) S-O и O-H молекулы орто-метилфенилсульфоновой кислоты (Рис.). С помощью методов квантовой химии DFT и QTAIM получена равновесная структура, КТ связей S-O, O-H и их характеристики.

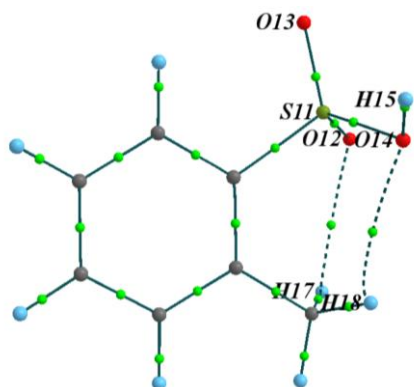


Рис. Молекула орто-метилфенилсульфоновой кислоты. Показаны ядра атомов, связующие пути, критические точки связи (3;-1); выделены атомы S, O и H рассматриваемых путей S-O и O-H

Сравнение характеристик $\rho(r_b)$ связей S-O (Таблица, КТ 1-3) показало значимое отличие характеристик третьей КТ от 1 и 2: её электронная плотность $\rho(r)$ и собственные значения матрицы Гессе (λ_1 , λ_2 и λ_3) меньше, тогда как длина (l) и эллиптичность (ε – параметр, отвечающий за асимметричность распределения $\rho(r)$ в перпендикулярных от связи направлениях) больше. Эти различия показывают S11 - O14 более слабой и менее прочной связью, чем S11 - O12 и S11 - O13. Аналогичное сопоставление параметров $\rho(r_b)$ полученных O-H (Таблица, КТ 4-6) показывает O12 $\cdots$ H17 и O14 $\cdots$ H18 (по сравнению с O14 - H15) дальними взаимодействиями, которые можно отнести к слабым внутримолекулярным водородным связям.

Таблица. Электронная плотность ($\rho(r_b)$) КТ (3; -1), собственные значения гессиана (λ_1 , λ_2 и λ_3), эллиптичность (ε) и длина (l) связующих путей S-O и O-H

КТ (3; -1)	Связь	$\rho(r_b)$, а.е.	λ_1	λ_2	λ_3	ε	l , а.е.	l , Å ³
1	S11 - O12	0,323	-0,604	-0,598	2,062	0,010	2,698	1,43
2	S11 - O13	0,318	-0,599	-0,584	1,986	0,026	2,713	1,43
3	S11 - O14	0,226	-0,406	-0,368	0,683	0,103	3,054	1,62
4	O12 $\cdots$ H17	0,010	-0,008	-0,004	0,050	0,867	5,352	2,83
5	O14 $\cdots$ H18	0,008	-0,006	-0,004	0,039	0,670	5,107	2,70
6	O14 - H15	0,366	-1,916	-1,890	0,925	0,014	1,778	0,94



Влияние взаимодействия хитозана с различными ионами на свойства ЦСР гидрогелей

Зеников Г.Р. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Гелеобразование в L-цистеин-серебряном растворе (ЦСР) может быть происходит под действием электролитов, содержащих, например, SO_4^{2-} анион. Добавление в ЦСР хитозана (ХЗ) – биodeградируемого аминополисахарида, обладающего мукоадгезивными свойствами, антибактериальной и антиоксидантной активностью [1] – расширяет область применения ЦСР гидрогелей. Установлено, что гидрогели различного состава: ЦСР-ХЗ- Na_2SO_4 и ЦСР-ХЗ- CuSO_4 – отличаются стабильностью во времени, что можно объяснить особенностями комплексообразования ХЗ с катионами сульфатсодержащих электролитов. Цель работы – исследование комплексообразующей способности различных катионов с ХЗ на примере модельных систем: ХЗ- AgNO_3 , ХЗ- Ag_2SO_4 , $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, CuSO_4 , ХЗ- NaNO_3 , ХЗ- Na_2SO_4 . С помощью спектроскопии УФ-видимого диапазонов установлено, что в электронных спектрах систем ХЗ- AgNO_3 , ХЗ- Ag_2SO_4 , ХЗ- CuSO_4 наблюдаются изменения, свидетельствующие о взаимодействии ХЗ с нитратом и сульфатом серебра, сульфатом меди. Данные, полученные с помощью метода динамического светорассеяния, подтверждают взаимодействие ХЗ с $\text{Ag}(\text{I})$, $\text{Cu}(\text{II})$ и SO_4^{2-} ионами в гидрогелях на основе ЦСР, что предполагает возможность протекания конкурентных процессов между макромолекулами ХЗ и кластерными цепочками ЦСР, с одной стороны, и между молекулами ХЗ и ионами электролита, с другой.

1. Zenikov, G.R., Khizhnyak, S.D., Ivanova, A.I. et al. The Self-Organization and Gelation Processes in a Cysteine–Silver Solution Containing Chitosan and an Electrolyte. Colloid J 86, 370–380 (2024). <https://doi.org/10.1134/S1061933X24600143>



Моделирование гидратации L – цистеина четырьмя молекулами воды

Киреева Д.С. (магистрант, 1-ого года обучения)

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

Гидратация L – цистеина осуществлялась постепенным «опусканием» молекул воды со стороны карбоксильной группы (Рис.). Оптимизация геометрии гидрата ($L\text{-Cys}\cdot 4\text{H}_2\text{O}$) проводилась функционалом B3LYP. В рамках QTAIM получены параметры критических точек (КТ) связевых путей: электронная плотность ($\rho(r_b)$) в а.е., эллиптичность (ϵ) и длина связующего пути (l) в Å (Таблица).

Квантово-химическое исследование $L\text{-Cys}\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ показало образование водородных взаимодействий только межмолекулярного характера – ММСВ (в отличие от $L\text{-Cys}\cdot 3\text{H}_2\text{O}\cdot 2\text{H}_2\text{O}\cdot \text{H}_2\text{O}$). Рассматриваемые в гидрате ММСВ содержат одинаковый атомный состав – $\text{H}\cdots\text{O}$, за исключением одного – $\text{N}\cdots\text{H}$ (Таблица).

Таблица. Параметры КТ слабых взаимодействий гидрата цистеина: электронная плотность ($\rho(r_b)$) в а.е., эллиптичность (ϵ) и длина связующего пути (l) в Å.

Взаимодействие	$\rho(r_b)$, а.е.	ϵ	l , Å	Взаимодействие	$\rho(r_b)$, а.е.	ϵ	l , Å
$\text{H12}\cdots\text{O13}$	0,011	0,077	2,414	$\text{O7}\cdots\text{H11}$	0,027	0,021	1,909
$\text{N1}\cdots\text{H2}$	0,042	0,036	1,858	$\text{H4}\cdots\text{O3}$	0,050	0,040	1,710
$\text{H6}\cdots\text{O5}$	0,023	0,070	2,026	$\text{O7}\cdots\text{H8}$	0,022	0,044	1,981
$\text{H10}\cdots\text{O9}$	0,035	0,037	1,835	—	—	—	—

Слабые взаимодействия, $\text{H4}\cdots\text{O3}$ и $\text{H10}\cdots\text{O9}$ по сравнению с остальными $\text{H}\cdots\text{O}$ более прочные, что следует из более высокого значения $\rho(r_b)$ в их КТ и более короткой l . Таким образом, именно водородные связи $\text{H4}\cdots\text{O3}$ и $\text{H10}\cdots\text{O9}$ могут наблюдаться в снятом ИК-спектре с этого кристаллогидрата. Менее прочным ММСВ является $\text{H12}\cdots\text{O13}$, что основано на самой малой $\rho(r_b)$ и самой большой $\rho(r_b)$. Оно образовано водородом тиольной группы и кислородом воды и в газовой фазе оно самое нестабильное.



Идентификация химического состава и определение чистоты Подорожника большого

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

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

Цель настоящей работы – изучение химического состава листьев подорожника большого в фитоценозах Калининского муниципального округа Тверской области.

Объекты исследования - образцы подорожника большого собранные в августе 2024 года в данном округе с различной антропогенной нагрузкой. Фоновым образцом послужила аптечная форма растения.

В работе использовались методы Фурье ИК-спектроскопии, УФ-спектроскопии и растрового электронного микроанализа.

Фурье ИК-спектроскопия использовалась для идентификации функциональных групп и биологически активных веществ. Регистрация спектров осуществлялась на ИК спектрометре «ALPHA» фирмы «Bruker» на кафедре органической химии ТвГУ.

С помощью УФ-спектроскопии были определены изменения состава фенольных соединений в образцах. Регистрация УФ-спектров осуществлялась на кафедре физической химии Тверского государственного университета на УФ-спектрометре фирмы «Thermo Scientific» «Evolution Array UV-VIS».

Растровый электронный микроанализ проводился на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета и применялся для изучения морфологии листа и элементного состава растения.

Проведенные исследования показали, что подорожник большой достаточно устойчив к различным видам антропогенного стресса. Микроанализ подтвердил элементный состав листьев растительного сырья, а также способность аккумулировать загрязнители (Si, Fe, Cl), что позволяет рассматривать данное растения как биоиндикатор.



Процессы структурирования в коллоидных растворах на основе аминокислоты L-цистеин и нитрата серебра под влиянием галогенид-анионов

Механников И.А. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Аминокислоты и пептиды, как основные структурные блоки белков, крайне востребованы в создании супрамолекулярных гидрогелей биомедицинского назначения. Такие гидрогели формируются в результате самосборки низкомолекулярных соединений за счет нековалентных взаимодействий, таких как водородные связи, электростатические и ван-дер-ваальсовы взаимодействия и др.

Гидрогели на основе аминокислоты L-цистеин (L-Cys) и ионов серебра представляют собой анион-чувствительные системы, поскольку гелеобразование в них инициируется различными электролитами, включая сульфаты, хлориды, молибдаты и др. Цель работы - исследование золь-гель перехода в коллоидной системе L-Cys-AgNO₃ (ЦСР) под воздействием галогенид-анионов (Br⁻ и I⁻). В рамках исследования применялись методы вибровискозиметрии, УФ- и Фурье-ИК спектроскопии, динамического светорассеяния (ДСР) и сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Установлено, что добавление KBr и KI в ЦСР вызывает переход системы в гелеобразное состояние лишь в узком диапазоне концентраций, полученные гидрогели быстро теряют прозрачность и разрушаются. По данным ДСР золь-гель переход сопровождается резким увеличением размеров наноагрегатов, их агрегацией и формированием фрагментов гелевой сетки. В электронном спектре ЦСР после добавления галогенид-анионов исчезают полосы поглощения с максимумами ~316 и ~390 нм, и появляется поглощение в области ~350 нм. СЭМ анализ подтвердил изменения морфологии цистеин-серебряного раствора под влиянием бромид- и иодид-анионов.



Энергетические характеристики простых эфиров

Новожилова А.С. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций “структура-свойство” в простых эфирах.

В работе используются: феноменологические методы, методы статистического анализа, линейной алгебры и др.

Для выбранных соединений нами выведены расчётные схемы в разных приближениях, проведены численные расчёты энтальпии образования, согласующиеся с экспериментом, получены новые данные.

В работе также проведены численные расчёты по энергиям разрыва связей в простых эфирах, выявлены отдельные закономерности. Например:

1. Энергия разрыва связей D_{298} в рассматриваемых соединениях увеличивается при разветвлении радикала и появлении гетероатома в цепи молекулы.

Ср. (в кДж/моль [1]):

	$\text{CH}_3\text{O}-n\text{C}_3\text{H}_7$	$\text{CH}_3\text{O}-i\text{C}_3\text{H}_7$
D_{298}	$358,6 \pm 6,3$	$360,7 \pm 4,2$
	CH_3OCH_3	CF_3OCH_3
D_{298}	402,1	$420,8 \pm 4,2$

2. Энергии разрыва связей O-C в простых эфирах уменьшаются при увеличении числа заместителей.

Ср. (в кДж/моль[1]):

	$\text{CH}_3\text{O}-\text{CH}_3$	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}-\text{CH}_3$	$(\text{CH}_3)_2\text{CHO}-\text{CH}_3$	$(\text{CH}_3)_3\text{CO}-\text{CH}_3$
D_{298}	$351,9 \pm 4,2$	$349,8 \pm 4,2$	$350,2 \pm 6,3$	$343,9 \pm 6,3$

1. Yu-Ran Luo. Handbook of bond dissociation energies in organic compounds. Florida: CRC Press. 2003. 380 p.



Новый подход для получения гибридных наноструктур AgI/Ag₂O методом «мокрого» синтеза

Полякова Е.Э. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Загрязнение окружающей среды антибиотиками — актуальная проблема. Она возникает по разным причинам, но приводит к одному исходу — мутации бактерий. Одним из решений данной проблемы является использование полупроводниковых материалов с фотокаталитическими свойствами, которые ускоряют процесс деградации органических загрязнений. Примером таких веществ являются наночастицы AgI/Ag₂O.

Данная работа посвящена открытию анион-фоточувствительной гелевой системы на основе L-цистеина, нитрата серебра и IO_3^- . Впервые было показано, что иодат-анионы, добавленные к цистеин-серебряному золю (ЦСЗ), действуют одновременно как гелеобразующий и светочувствительный агент в видимой области длин волн. Взаимодействие ЦСЗ с иодат-анионами приводит к образованию наноструктур AgI/Ag₂O эллиптической формы, что было подтверждено физико-химическими методами.

Наряду с этим было установлено, что цистеин-серебряный золь обладает селективностью только к IO_3^- , что подтверждалось характеристической окраской красно-коричневого цвета, по сравнению со многими другими неорганическими ионами важными для человека и окружающей среды.

Таким образом, многофункциональная система ЦСЗ/ IO_3^- может рассматриваться как новый низкомолекулярный гелеобразователь с фоточувствительными свойствами, как еще один способ детектирования иодат-анионов и как новый подход для получения гибридных наночастиц AgI/Ag₂O.

Работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии и электронной микроскопии ЦКП ТвГУ.

Объемы и заряды групп пентамеров винилиденфторида

Пыжова А.Р. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Концевым фрагментом олигомера поливинилиденфторида в зависимости от метода получения может быть как CH_3 , так и CH_2 группа, что влияет на величину некоторых свойств [1]. Для сравнения свойств электронной плотности - $\rho(R)$ (интегральных электронных характеристик функциональных групп – зарядов ($q(R)$) и объемов ($V(R)$)) проведена оптимизация двух линейных пентамеров винилиденфторида с разными концевыми группами (Рис) методом B3LYP в программе Gaussian 03. Атомные объемы и заряды получены в «Квантовой теории атомов в молекулах» с использованием пакета AIMALL и суммированы в параметры групп $q(R)$ и $V(R)$ (Таблица).



Рис. Структура пентамеров винилиденфторида ($\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_2$), в которых $1\text{R}=11\text{R}=\text{CH}_3$ или CH_2

Сравнение $V(R)$ и $q(R)$ показало наличие пространственной симметрии (наличие оси второго порядка) в линейных пентамерах относительно группы 6CF_2 , что отражено в одинаковом распределении параметров по обе стороны от нее (Таблица). Распределение $q(R)$ для обеих молекул показывает значительное изменение $q(2\text{CF}_2)$, $q(1\text{CH}_2)$ и $q(1\text{CH}_3)$ краевых фрагментов и отсутствие подвижности $\rho(R)$ остального расположения групп CF_2 и CH_2 . Аналогичные изменения показывает и распределение $V(R)$. Из $V(2\text{CF}_2)$ и $q(2\text{CF}_2)$ видно, что электронодонорные свойства метила и ее стерический эффект на CF_2 выше, чем у концевой CH_2 .

Таблица. Объемы ($V(R)$) и заряды ($q(R)$) групп молекул пентамеров винилиденфторида

$q(R)$, в а.е.											
Группа*	1R*	2CF ₂	3CH ₂	4CF ₂	5CH ₂	6CF ₂	7CH ₂	8CF ₂	9CH ₂	10CF ₂	11R*
CH ₂	0,077	-0,139	0,117	-0,111	0,112	-0,112	0,112	-0,111	0,117	-0,139	0,077
CH ₃	0,120	-0,168	0,113	-0,118	0,110	-0,114	0,110	-0,118	0,113	-0,168	0,120
$V(R)$, в Å ³											
CH ₂	29,0	35,5	21,9	34,2	21,7	34,2	21,7	34,2	21,9	35,5	29,0
CH ₃	31,4	35,3	21,8	34,2	21,7	34,2	21,7	34,2	21,8	35,3	31,4

* В столбце 1R, 2R – концевая группа (CH_2 или CH_3).

1. Li Z., Liao J., Xi Z., Zhang Z. Influence of Steric Hindrance on Ferro- and Piezoelectric Performance of Poly(vinylidene fluoride)-Based Ferroelectric Polymers // Macromol. Chem. Phys. 2019, 220, 1900273



Моделирование межмолекулярных взаимодействий винилиденфторида

Пыжова А.Р. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Оптимизация взаимодействия двух, трех, четырех молекул (Рис.) и винилиденфторида ($\text{CH}_2=\text{CF}_2$) и их полные электронные энергии (E_{total}) получены в газовой фазе методом B3LYP с использованием программы Gaussian03.

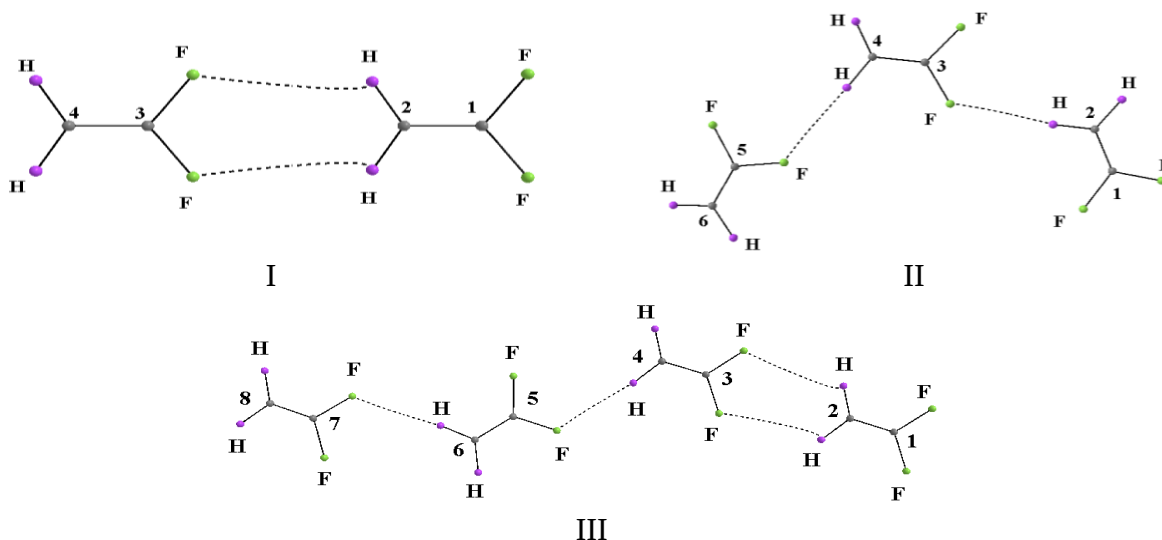


Рис. Образование взаимодействий между двумя молекулами винилиденфторида - I, тремя молекулами - II, четырьмя молекулами - III.

Вычисления показали, что слабые межмолекулярные связи могут образовываться двух видов – парные (I, III) и одиночные (II, III). Величина электронной плотности в критических точках парных взаимодействий в два раза меньше (и прочность), чем в одиночной. Проведенное сравнение полной электронной энергии I, II, III показало, что их E_{total} несколько ниже, чем сумма отдельных $E_{\text{total}}(\text{CH}_2=\text{CF}_2)$ (Таблица). Таким образом, энергетически более стабильны состояния, обладающие межмолекулярными взаимодействиями по сравнению с невзаимодействующими молекулами

Таблица. Полная электронная энергия E_{total} (в а.е.) взаимодействующих молекул и винилиденфторида

Расчет энергии	$\text{CH}_2=\text{CF}_2$	I	II	III
E_{total}	-277,181872	-554,364243	-831,546815	-1108,729319
Сумма $E_{\text{total}}(\text{CH}_2=\text{CF}_2)$		-554,363743	-831,545615	-1108,727486

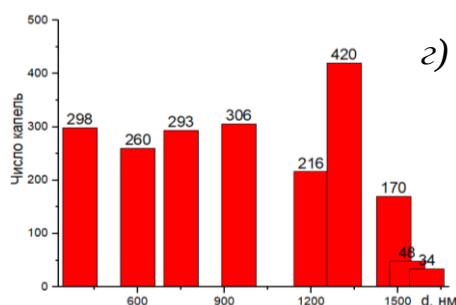
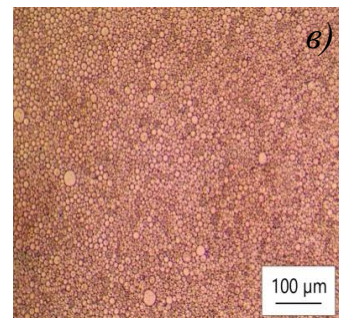
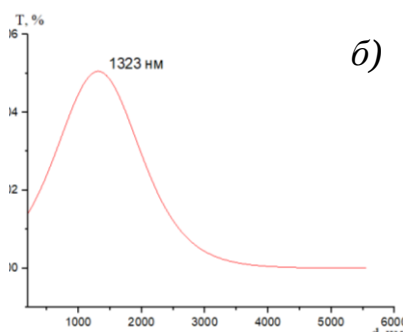
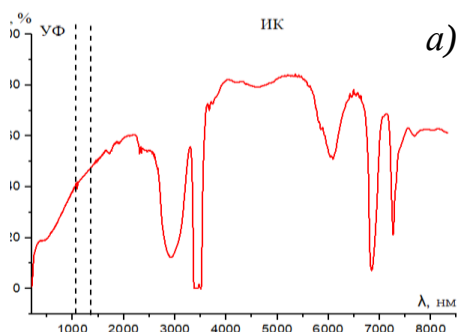
Спектральный анализ морфологии эмульсий типа Вода/Масло

Савенко А.О. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Эмульсия – дисперсная система, состоящая из 2-х несмешивающихся (например, вода/масло – В/М) или ограниченно растворимых жидкостей, стабилизированная поверхностно-активным веществом (ПАВ). Актуальность исследования обусловлена широким применением эмульсий в нефтяной, пищевой, фармацевтической и др. отраслях.

Цель работы – исследование морфологии и агрегативной устойчивости эмульсии типа В/М на основе парафинового масла, стабилизированной неионогенным раствором ПАВ (ОР-10) при концентрации эмульгатора 20 % с использованием оптической спектроскопии. В качестве независимого метода анализа морфологии использовали оптическую микроскопию. Спектроскопический метод анализа морфологии основан на оценке рассеяния, максимум которого соответствует среднему размеру капель в образце [1]. На основе спектральных данных получено распределение частиц (капель) по размерам в оптическом (УФ, видимом и ИК) диапазоне с пиком в 1323 нм, что согласуется с результатами микроскопии.



Спектры в оптическом (УФ, видимом и ИК) диапазоне эмульсии (а); распределение капель по размерам эмульсии (б); микрофотография 1% эмульсии (в); гистограмма распределения капель эмульсии на основе обработки микроснимка (г).

Работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии ЦКП ТвГУ

1. Маркова, А. И. Изучение морфологии эмульсий методом электронной спектроскопии / А. И. Маркова и др. // Журнал прикладной спектроскопии. – 2020. – Т. 87. – № 6. – С. 881–885.



Объемы групп эфиров фторангидрида метилфосфоновой кислоты

Тищенко В.С. (бакалавр, 4-го года обучения)

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

Поиск равновесной геометрии молекул эфиров фторангидрида метилфосфоновой кислоты (Рис): зарина (1), зомана (2), этилметилфосфонофторидата (3), фенилметилфосфонофторидата (4) и циклозарина в конформациях ванна (5) и кресло (6) проведен методом V3LYP в программе Gaussian 03. Атомные объемы ($V(\Omega)$) рассчитаны с помощью «Квантовой теории атомов в молекулах» в программе AIMALL, суммированы в параметр групп $V(R)$ (Таблица).

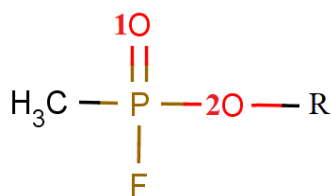


Рис. Структура эфиров фторангидрида метилфосфоновой кислоты, в которых заместитель R: $-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ для зарина, $-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{C}(\text{CH}_3)_3$ для зомана, $-\text{C}_2\text{H}_5$ для этилметилфосфонофторидата, $-\text{C}_6\text{H}_5$ для фенилметилфосфонофторидата и $-\text{C}_6\text{H}_{11}$ для циклозарина

Сравнение $V(R)$ в молекулах алкилметилфосфонофторидата выявило стерический эффект на объем атомного бассейна атома кислорода во втором положении со стороны заместителей (Таблица). Так у зомана, $V(R)$ которого $144,99 \text{ \AA}^3$ (максимальный среди рассмотренных) $V(2\text{O})$ самый малый $14,61 \text{ \AA}^3$, тогда как у молекулы 3 самый малый $V(R)$ - $53,96 \text{ \AA}^3$, а $V(2\text{O})$ имеет наибольшее значение - $15,62 \text{ \AA}^3$. Разные конформационные состояния заместителя также оказывают разное стерическое влияние на метилфосфонофторидатный фрагмент: несмотря на большее значение $V(\text{C}_6\text{H}_{11})$ в конформации кресло (6), он меньше влияет на $V(2\text{O})$, чем в расположении ванна (5).

Таблица. Объемы групп ($V(R)$) молекул эфиров фторангидрида метилфосфоновой кислоты

Молекула*	1CH_3	P	1O	F	2O	R*
1	33,67	4,15	22,16	16,99	15,41	77,44
2	33,77	4,15	22,20	16,95	14,61	144,99
3	33,67	4,15	22,35	16,73	15,62	53,96
4	33,64	4,19	22,27	16,65	15,43	106,10
5	33,76	4,13	22,41	16,74	14,90	129,05
6	33,67	4,15	22,17	17,00	15,42	129,62