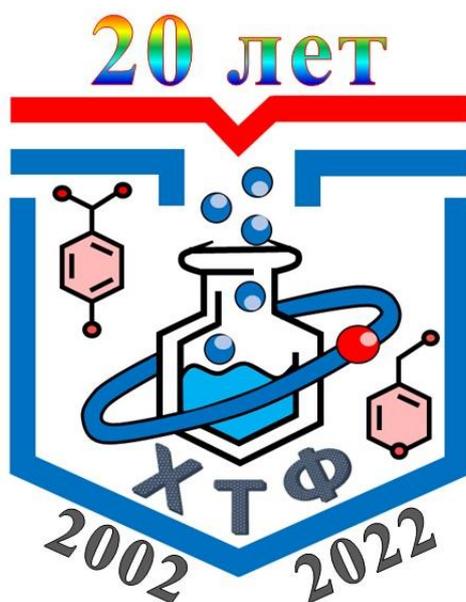


Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Тверской государственный университет»
Химико-технологический факультет



Конкурс научно-исследовательских работ
химико-технологического факультета

12 декабря 2022 года г. Тверь

ТВЕРЬ 2022

УДК 54(082)
ББК Г.я431
К 21

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

К 21 **Конкурс научно-исследовательских работ, посвященный двадцатилетию образования химико-технологического факультета.** Сборник материалов Конкурса, 12 декабря 2022 г./ – Тверь: Тверской государственный университет, химико-технологический факультет 2022. – 39 с.

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

УДК 54(082)
ББК Г.я431

© Авторы статей, 2022
© Тверской государственный университет,
химико-технологический факультет 2022

Оглавление:

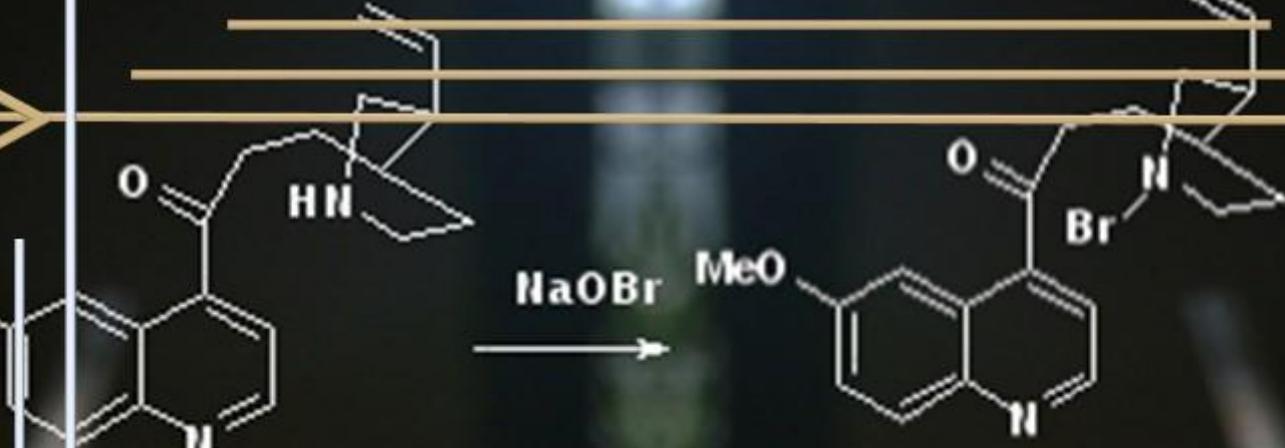
АПРОБИРОВАННОЕ НАУЧНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

1. [Бойкова С.С.](#)
Заряды, энергии и объемы групп кислых L-аминокислот 6
2. [Волкова В.М.](#)
Наночастицы серебра, полученные с использованием
водных растворов листьев клёна..... 8
3. [Гешко В.В.](#)
Кинетика синтеза наночастиц серебра в водных экстрактах
листьев дуба..... 10
4. [Зеников Г.Р.](#)
Гелеобразование в водных низкоконцентрированных
растворах L-цистеина, нитрата серебра, сульфата меди и
хитозана..... 12
5. [Козлова Р.Р.](#)
Теоретико-графовый подход в исследовании корреляций
«структура – свойство» гликолей 14
6. [Кравец О.Б.](#)
Физико-химические методы анализа комбинированных
лекарственных средств 16
7. [Нефедова И.А.](#)
Влияние заместителя на заряд сульфоновой группы в
симметричных диалкилсульфонах. 18
8. [Петров В.Р.](#)
Фотокаталитическая активность наночастиц
Ag/ α -Ag₂MoO₄/h-MoO₃ в процессе деградации
красителя метиленового синего..... 20
9. [Шачнева К.С.](#)
Определение п-ацетаминофена в лекарственных
препаратах..... 22
10. [Щенухина А.С.](#)
Конформеры метилового красного в квантовой теории
атомов в молекулах..... 24

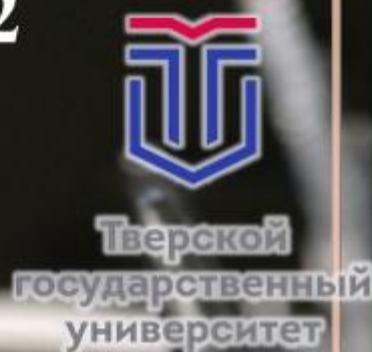
12 декабря 2022 г.

ЮНЫЕ ТАЛАНТЫ

11. [Агейчева А.А.](#)
Определение адсорбционной способности некоторых энтеросорбентов..... 27
12. [Барсукова Е.В.](#)
Влияние неионогенных пав на экстракцию флавоноидов из листьев наперстянки..... 29
13. [Механников И.А.](#)
Эффект бромид и фторид-анионов на процессы самосборки в L-цистеин-серебряных растворах..... 31
14. [Немытышева И.А.](#)
Способ количественного определения йодата калия в поваренной соли..... 33
15. [Хижняк И.А.](#)
Определение важнейших характеристик бутилированной воды 35
16. [Шебеченкова А.Н.](#)
Оптимизация геометрии конформеров пропанола-1 37



12 декабря 2022



**Апробированное
научное
исследование**



Заряды, энергии и объемы групп кислых *L*-аминокислот

Бойкова С.С. (специалист, 4 курс)

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

Различие электронных свойств конформеров *L*-аспарагиновой и *L*-глутаминовой кислот ранее не рассматривалось. Вследствие этого, целью работы стало сравнение интегральных электронных параметров групп (заряд, энергия и объем) для трех состояний *L*-глутаминовой (I-III) и двух форм *L*-аспарагиновой (IV-V) кислот (Рис.). Некоторые результаты представлены в материалах [1-4].

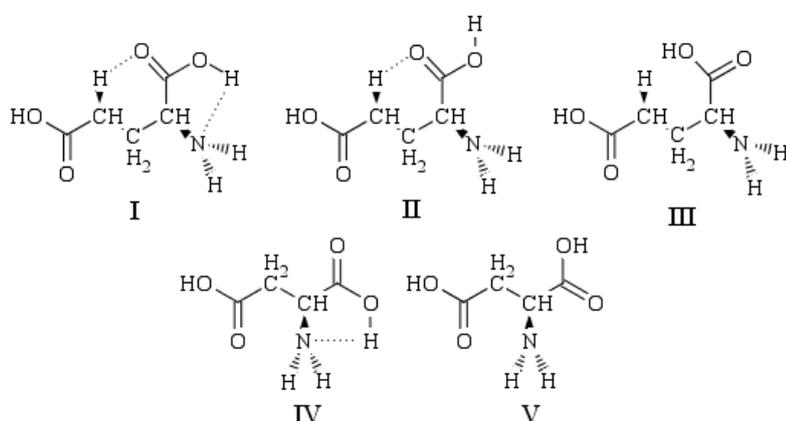


Рис.:
Конформер *L*-глутаминовой кислоты с водородными связями N[⋯]H и O[⋯]H – I, с O[⋯]H – II, без слабых взаимодействий – III; *L*-аспарагиновая кислота с N[⋯]H – IV, без – V

Полученные интегральные характеристики (заряд $q(R)$, объем $V(R)$ и относительная электронная энергия $\Delta E(R)$) представлены в виде таблицы в работе [3]. Среди конформеров I–III наиболее энергетически выгодному состоянию отвечает состояние I, обладающее наименьшей полной электронной энергией (E_{total}). В структуре III параметр E_{total} выше на 2 кДж/моль, а в II - на 7 кДж/моль по отношению к I. Среди конформеров IV–V минимальное значение E_{total} соответствует IV равновесному состоянию. В структуре V параметр E_{total} выше на 9 кДж/моль. Наименьшие величины $E(R)$ для COOH, CH₂, NH₂ и CH структур I и IV взяты в качестве стандартных.

Наличие слабого внутримолекулярного взаимодействия – водородной связи N[⋯]H приводит к оттоку электронной плотности с COOH аминокислотного фрагмента к атому азота во I и IV конформерах. По отношению к I конформации *L*-глутаминовой кислоты во II равновесном состоянии для этой COOH значение $q(\text{COOH})$ меньше на 0,032 а.е., $V(\text{COOH})$ выше на 0,52 Å, $q(\text{NH}_2)$, $\Delta E(\text{NH}_2)$ и

$V(\text{NH}_2)$ увеличиваются на 0,020 а.е., 60 кДж/моль и 1,17 Å соответственно, в III – $q(\text{COOH})$ уменьшается на 0,069 а.е., $V(\text{COOH})$ повышается на 1,26 Å, $q(\text{NH}_2)$, $\Delta E(\text{NH}_2)$ и $V(\text{NH}_2)$ больше на 0,020 а.е., 50 кДж/моль и 1,14 Å. В оптимизированной конформации V $q(\text{COOH})$ меньше на 0,063 а.е., $V(\text{COOH})$ увеличивает свое значение на 1,09 Å, $q(\text{NH}_2)$, $\Delta E(\text{NH}_2)$ и $V(\text{NH}_2)$ возрастает на 0,030 а.е., 50 кДж/моль и 0,76 Å по отношению к энергетическому состоянию IV. Вторая ВС в I равновесной структуре между кислородом COOH и водородом CH₂ (Рис.) приводит к обеднению электронной плотностью атомного бассейна CH₂, что сопровождается значительным увеличением ее $q(\text{CH}_2)$, $\Delta E(\text{CH}_2)$ и уменьшением $V(\text{CH}_2)$: во II $q(\text{CH}_2)$ и $\Delta E(\text{CH}_2)$ ниже на 0,029 а.е. и 30 кДж/моль, $V(\text{CH}_2)$ больше на 0,36 Å, а в III $q(\text{CH}_2)$ и $\Delta E(\text{CH}_2)$ уменьшается на 0,042 а.е. и 10 кДж/моль, $V(\text{CH}_2)$ больше на 0,63 Å.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

1. Бойкова С.С., Матус Я.А., Русакова Н.П., Орлов Ю.Д. Сравнение характеристик электронной плотности конформеров глутаминовой кислоты // Математика и математическое моделирование Сборник материалов XVI Всероссийской молодежной научно-инновационной школы (5-7 апреля, г. Саров, 2022 г.). Саров, Интерконтакт, 2022 С. 142-144;
2. Бойкова С.С., Русакова Н.П. Сравнение характеристик электронной плотности конформеров аспарагиновой кислоты // Сборник: XXVIII Каргинские чтения. Тезисы докладов Всероссийской научно-технической конференции молодых учёных «Физика, химия и новые технологии» (31марта-1апреля, г. Тверь, 2022 г.). Тверь: тверской государственный университет, 2022. С. 31;
3. Бойкова С.С., Матус Я.А., Русакова Н.П., Орлов Ю.Д. Электронные характеристики групп конформеров кислых L-аминокислот // Химическая термодинамика и кинетика: Сборник научных трудов XII Международной конференции.(16-20 мая, г. Тверь, 2022 г), Великий Новгород, 2022. С 73-74. DOI:10.34680/978-5-89896-814-4/2022.thermodynamics;
4. Бойкова С.С. Кислые L-аминокислоты. Квантовая теория атомов в молекулах. // Сборник: XXI Научная конференция аспирантов и студентов химико-технологического факультета. Тезисы докладов. (23 мая, г. Тверь, 2022). тверь: тверской государственный университет, 2022. С. 67.

12 декабря 2022 г.

Наночастицы серебра, полученные с использованием водных растворов листьев клёна

Волкова В.М. (магистр, 1 курс)

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

Целью данной работы является синтез и характеристика наночастиц серебра, полученных с использованием водных экстрактов листьев клена.

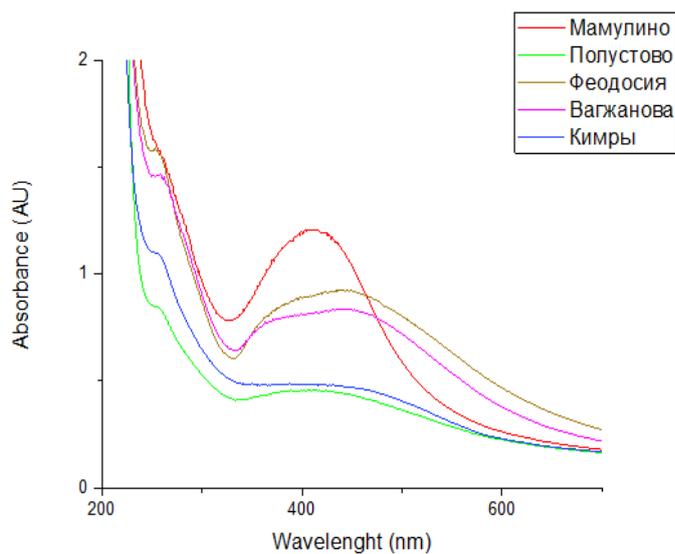


Рис. 2 Электронные спектры водных экстрактов листьев клёна через 7 дней после добавления AgNO_3

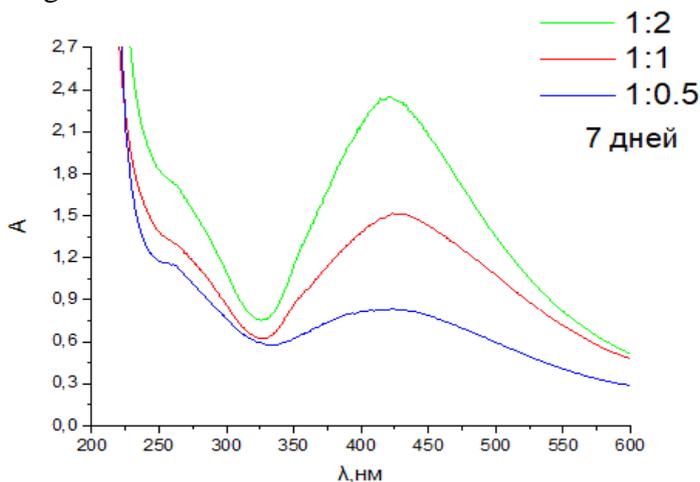


Рис. 1 Электронные спектры водных экстрактов листьев клёна через 7 дней после добавления AgNO_3

Основные характеристики НЧ изучали с помощью методов УФ спектроскопии, динамического светорассеяния, сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и атомно-силовой микроскопии. На рис. 1 показаны электронные спектры водных экстрактов листьев клена из различных мест сбора через 7 дней после добавления нитрата серебра. Так, в спектрах исходных образцов обнаружены полосы поглощения различной интенсивности с максимумами поглощения ~ 285 , ~ 330 нм, которые соответствуют различным биологически активным веществам. Добавление раствора нитрата серебра к водным экстрактам листьев приводит к существенным изменениям электронных спектров образцов – появлению полосы

плазмонного резонанса (ППР) наночастиц с максимумом ~ 420 – 430 нм.

Для оценки влияния концентрации Ag^+ на скорость образования НЧ и на их размеры были приготовлены образцы из листьев, собранных в Мамулино, в

которых варьировали соотношение: объем водного экстракта/ Ag^+ следующим образом: 1:0,5; 1:1; 1:2. На рис. 2 представлены электронные спектры этих образцов через 7 дней после добавления AgNO_3 , из которых видно, что скорость синтеза НЧ прямо пропорциональна количеству добавленной соли, однако форма и положение максимума ППП различаются.

С помощью СЭМ, позволяющей визуализировать НЧС и изучить их морфологию, было подтверждено влияние концентрации нитрата серебра в экстракте на размер наночастиц, при прочих равных условиях. Было обнаружено, что в образцах с низким содержанием AgNO_3 формируются более крупные агрегаты, что можно объяснить разным характером нуклеации НЧ (рис 3).

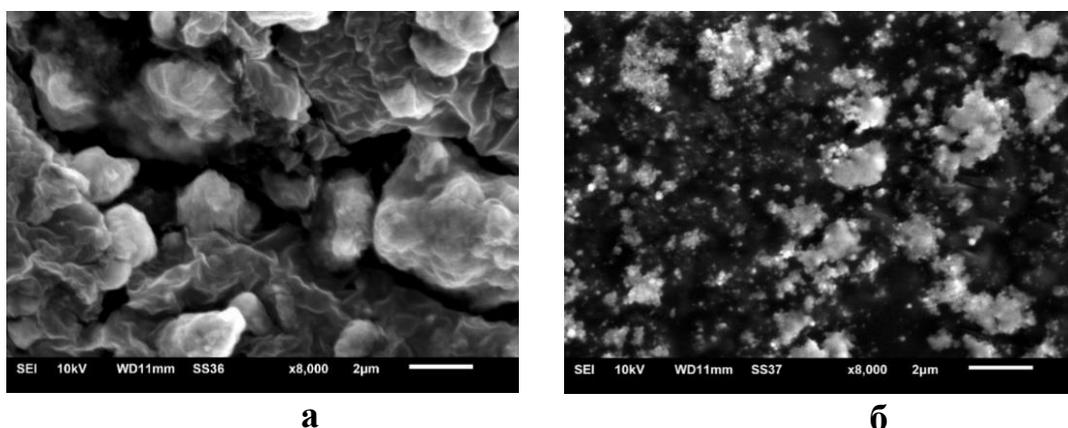


Рис. 3. СЭМ изображения образцов НЧС, полученных в экстрактах с разным содержанием нитрата серебра: а - 1:0,5; б - 1:2

Данная работа выполнена на оборудовании лабораторий электронной микроскопии и спектроскопии ЦКП ТвГУ

Список апробаций:

1. Волкова В. М. Оценка эффекта антропогенных факторов на химический состав листьев клёна // XXVII Каргинские чтения. – 2021. – С. 47.
2. Волкова В.М. Зеленый синтез наночастиц серебра с использованием водных экстрактов листьев клена // Сборник материалов Конкурса научно-исследовательских работ, 20 декабря 2021 г./ – Тверь: Тверской государственный университет, химико-технологический факультет 2021. – С. 11-12.
3. Волкова В. М. Анализ наночастиц серебра, полученных с использованием водных экстрактов клёна, с помощью спектральных методов // XXVIII Каргинские чтения. – 2022. – С. 46.
4. Волкова В.М. Кинетика синтеза наночастиц серебра с использованием водных экстрактов листьев клёна // Двенадцатая международная научная конференция “Химическая термодинамика и кинетика”, 16-20 мая, 2022. – С. 77-78.
5. Волкова В.М. Зелёный синтез наночастиц серебра с использованием водных экстрактов клёна // XXI научная конференция аспирантов и студентов химико-технологического факультета, 23 мая 2022 г./ - Тверь: Тверской государственный университет, химико-технологический факультет 2022. – С. 69.

12 декабря 2022 г.

Кинетика синтеза наночастиц серебра в водных экстрактах листьев дуба

Гешко В. В. (специалист, 5 курс)

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

Целью данной работы является изучение зеленого синтеза наночастиц серебра с использованием водных экстрактов листьев дуба с помощью УФ-видимой спектроскопии, динамического светорассеяния, сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Листья дуба были собраны в Центральном районе г. Твери (ул. Троицкая – «Белая троица», городской парк, колледж им. Коняева) в августе 2021 г. Основным экологическим поллютантом в этом районе является автотранспорт. Листья были высушены, измельчены и на их основе получены водные экстракты. НЧА_g синтезировали по зеленой технологии путем восстановления ионов серебра в водных экстрактах листьев при комнатной температуре.

Изучение процесса формирования НЧС с помощью УФ спектроскопии показало, что в электронных спектрах водных экстрактов листьев после добавления раствора нитрата серебра появляется полоса поглощения в диапазоне ~400-430 нм – полоса плазмонного резонанса (ППР). Анализ ППР позволяет контролировать процессы синтеза и агрегации НЧ. Кинетика образования НЧС в водных экстрактах листьев дуба, собранных в местах с разной антропогенной нагрузкой, после добавления нитрата серебра показана на рис. а-в. Кроме того, установлено, что полоса плазмонного резонанса в электронных спектрах образцов в диапазоне ~ 420-430 нм соответствует наночастицам с диаметром ~107 нм, согласно данным ДСР (рис. г). Результаты исследования с помощью СЭМ подтверждают зависимость основных характеристик НЧ (форма, размер, стабильность) от места сбора образца, а, следовательно, от антропогенного фактора, которые определяют содержание биоактивных веществ, участвующих в восстановлении ионов серебра и модификации поверхности наночастиц.

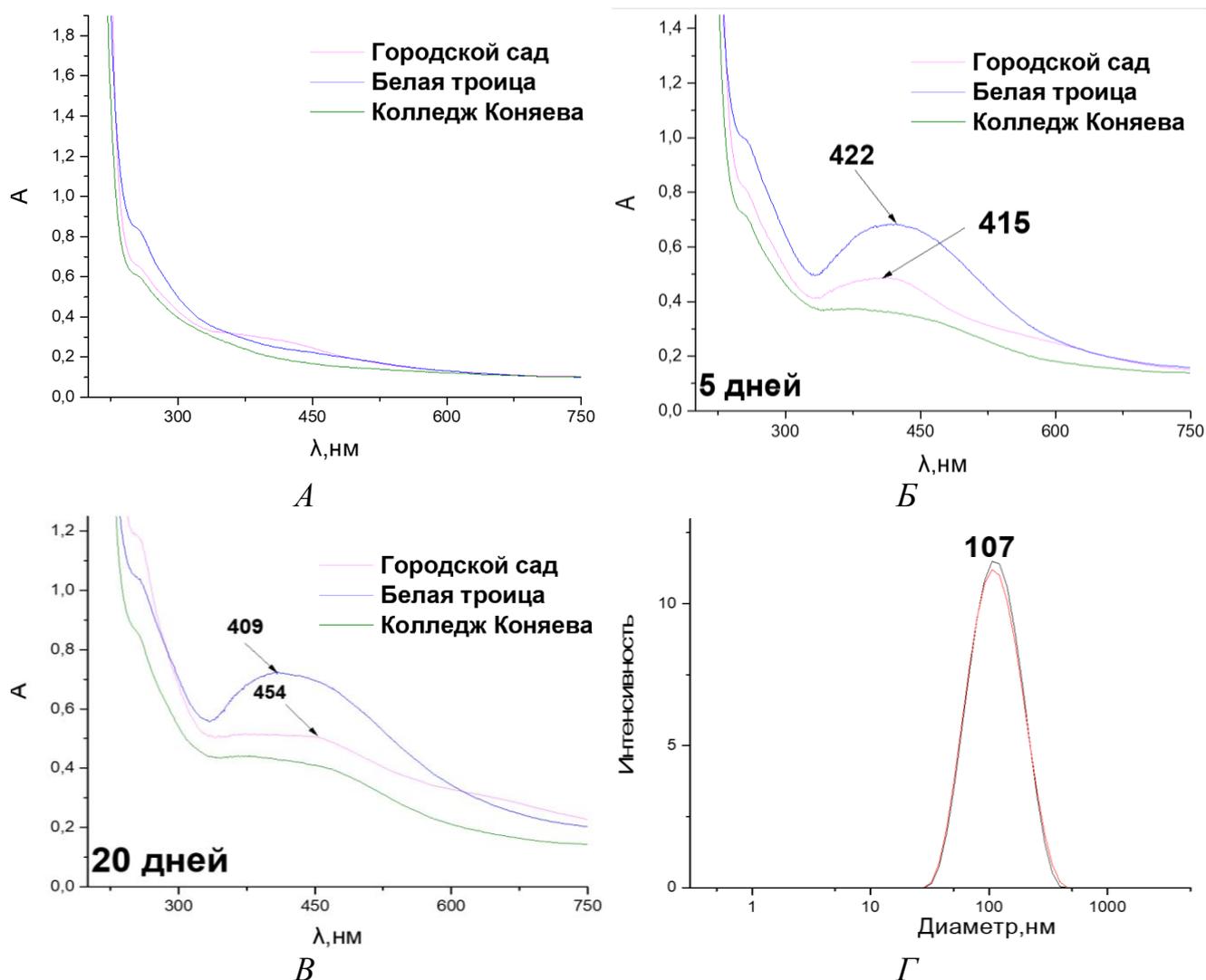


Рис. Электронные спектры водных экстрактов листьев дуба из разных мест сбора в зависимости от времени с момента добавления в экстракт нитрата серебра (а-в), распределение частиц по размерам в образце, собранном на ул. Троицкая (г)

Список апробаций

1. Гешко В.В., Хижняк С.Д. Анализ стабильности наночастиц серебра синтезированных из экстрактов дуба черешчатого //Химическая кинетика и термодинамика, Сборник материалов. 2022, С.79.
2. Гешко В.В., Хижняк С.Д. Зеленый синтез наночастиц серебра с помощью водных экстрактов дуба // XXVII Каргинские чтения, ТвГУ. 2021. С. 51.
3. Гешко В.В., Хижняк С.Д. Биосинтез наночастиц серебра с использованием водных растворов листьев клена и дуба // 5 всероссийская конференция Физика водных растворов, Сборник материалов.2022, С.89.

Примечание: работа выполнена на оборудовании лабораторий спектроскопии и электронной микроскопии центра коллективного пользования ТвГУ.

12 декабря 2022 г.

Гелеобразование в водных низкоконцентрированных растворах L-цистеина, нитрата серебра, сульфата меди и хитозана

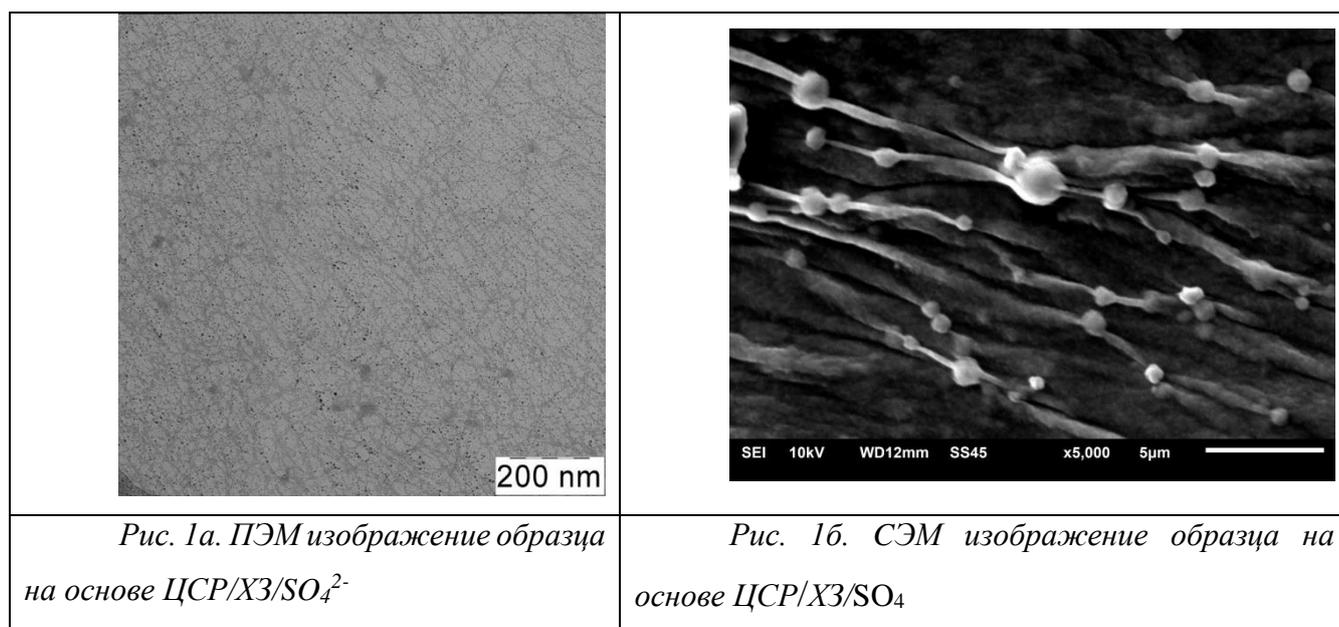
Зеников Г.Р. (бакалавр, 4 курс)

Научный руководитель: Хижняк С.Д.

Изучение супрамолекулярных гидрогелей на основе низкомолекулярных соединений (аминокислот, пептидов и т.д.) представляет огромный интерес в связи с возможностью их применения в различных областях – медицине, фармакологии, косметологии и т.д. В данной работе изучается гелеобразование в водных растворах серосодержащей аминокислоты L-цистеин (L-Cys), нитрата серебра и полисахарида хитозана (ХЗ). Биополимер ХЗ обладает уникальными свойствами, например биосовместимостью, способностью к биодеградации, нетоксичностью, антимикробной активностью, что расширяет спектр потенциального применения материалов на основе L-Cys-AgNO₃ гидрогелей.

Исследуемые образцы были получены двухстадийным методом: 1 стадия – получение цистеин-серебряного раствора (ЦСР), 2 стадия – введение в ЦСР инициатора гелеобразования. Были синтезированы серии образцов с различной концентрацией низкомолекулярного водорастворимого ХЗ, который, как было установлено в ходе эксперимента, способствует формированию гель-структуры. Для сравнения получены гидрогели, содержащие в качестве инициаторов гелеобразования ХЗ и электролит (сульфат меди). При этом концентрация L-Cys в образцах составляла 3,0 мМ, нитрата серебра – 3,75 мМ, сульфата меди – от 0,2 до 0,6 мМ, ХЗ – от 0,01 до 0,05 об.%. Низкое содержание компонентов в гидрогелях позволяет назвать их низкоконцентрированными. Процессы гелеобразования изучались методами вибровискозиметрии, УФ спектроскопии, динамического светорассеяния (ДСР), ПЭМ, СЭМ и элементного анализа.

Результаты, полученные на вибрационном вискозиметре, показывают, что гель-структура образцов устойчива во времени в достаточно узком



концентрационном диапазоне SO_4^{2-} и ХЗ, кроме того, гидрогели обладают свойством тиксотропии [1-2].

Методом ДСР установлено, что введение сульфат-аниона в ЦСП вызывает рост размеров агрегатов с течением времени за счёт межмолекулярных взаимодействий различной природы, что приводит к формированию фрагментов пространственной гель-сетки. Морфология гидрогелей различного состава (двух- и трехкомпонентных) изучена с помощью ПЭМ и СЭМ (рис. 1), обнаружено, что ХЗ способствует формированию волокнообразных структур, в которые встроены наночастицы.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

1. Г. Зеников, С. Хижняк, П. Пахомов. Супрамолекулярные гидрогели на основе аминокислоты L-цистеин, нитрата серебра и хитозана. Вестник Тверского Государственного Университета, серия “Химия” №4(46), 2021, с. 131-141.
2. Г.Р Зеников, С.Д Хижняк, А.И Иванова, П.М Пахомов. Процессы гелеобразования в низкомолекулярных водных растворах L-цистеина, нитрата серебра, сульфата меди и хитозана // Тезисы докладов 5-й всероссийской конференции «Физика водных растворов». – 2022. – с. 62.

12 декабря 2022 г.

Теоретико-графовый подход в исследовании корреляций «структура – свойство» гликолей

Козлова Р.Р. (магистр, 2 год обучения)

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

Экспериментальных данных по физико-химическим свойствам веществ немного, в том числе и для гликолей. Поэтому актуальной задачей современной химии является установление связи между структурой соединений и их свойствами [1-2]. Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций «структура-свойство» в двухатомных спиртах. Для решения данной задачи, в работе применяются методы теории графов и линейной алгебры, метод наименьших квадратов (МНК), методы статистической обработки данных. Для достижения поставленной цели были выведены расчётные схемы в третьем приближении [3-5]

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

Здесь p_2, p_3, p_4, \dots – соответственно такие индексы как число путей длины два, три; R – число троек смежных рёбер; n – число атомов углерода; b, Γ_{CC}, \dots – соответствующие параметры. По данной схеме проведены численные расчеты физико-химических свойств гликолей, согласующиеся с экспериментом [3-10] В результате нехватки экспериментальных данных, для энтальпии образования параметры $\Gamma_{CO}, \Gamma_{OO}, \Delta_{COO}$ и ω_{CC} пропадают, а параметры Δ_{CCC} и Δ_{CCO} были заменены на параметр $c = R\Delta_{CCC} + R'\Delta_{CCO}$, τ_{CC} и τ_{CO} – на параметр $d = p_3\tau_{CC} + p'_3\tau_{CO}$ и ω_{CO}, ω_{OO} были заменены на параметр $f = p_4\omega_{CO} + p''_4\omega_{OO}$. Для теплоёмкости параметры $\Gamma_{CC}, \Gamma_{OO}, \Delta_{CCO}, \Delta_{CCC}, \tau_{CC}, \tau_{OO}, \omega_{CC}, \omega_{OO}$ пропадают, а параметры b и b' были заменены на параметр $a = p_1b + p'_1b'$ (табл.1). Топологические индексы можно использовать и при построении графических зависимостей вида «Свойство – ТИ», «Свойство – номер изомера» и «ТИ – номер изомера» [7].

Результаты расчета C_p^0 (ж, 298 К) гликолей в третьем приближении (в Дж/мольК)

Значения параметров оценки C_p^0 (ж, 298 К) и результаты расчёта	Параметр			
	a	Γ_{CO}	τ_{CO}	ω_{CO}
	118,236	-101,964	13,355	-106,191
$\bar{\varepsilon}$	2,1			
ε_{max}	$\pm 3,0$			

Найдено, что в одних случаях наблюдается симбатное изменение энтальпии образования и ТИ, например, энтальпии образования и индексов p'_2 , H - числа Харари, J - индекса Балабана для изомеров $C_3H_8O_2$, что свидетельствует о хорошей корреляции между свойством и ТИ. В других случаях такой взаимосвязи нет, как между энтальпией образования и W . Полученные данные могут быть использованы химиками-технологами и инженерами-химиками при проведении ими термодинамических расчётов технологических процессов в нефтехимии и химии топлива.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Lange's Handbook of Chemistry / Editor: J.A. Dean. (15th Edition), McGraw-Hill. 1999. [Электронный ресурс]. — URL: <http://fptl.ru/biblioteka/spravo4niki/dean.pdf> (дата обращения: 15.09.22).
2. M.G. Vinogradova, Yu.A. Fedina, and Yu.G. Papulov. Graph Theory in Structure–Property Correlations//Russian Journal of Physical Chemistry A.–2016.-Vol.90.-No.2.-pp. 411–416.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

1. Козлова Р.Р., Виноградова М.Г. Корреляции «структура – энтальпия образования» двухатомных спиртов. // Математика и математическое моделирование. Сборник материалов XV Всерос. молодёж. научно-инновационной школы. – Саров, Интерконтакт, 2021. С. 34-35.
2. Виноградова М.Г., Козлова Р.Р., Савельева Т.А. Энтальпия образования двухатомных спиртов. Численные расчёты и основные закономерности.// Вестник ТвГТУ. Серия «Строительство. Электротехника и химические технологии». 2021. № 1 (9). С. 71-79.
3. Козлова Р.Р. Теория графов в исследовании корреляций «структура – энтальпия образования» гликолей //XXVII Каргинские чтения. Тезисы докладов Всерос. научно-технич. конф. молодых учёных, посвящённой Году науки и технологий. Тверь, 2021. С 77.
4. Виноградова М.Г., Козлова Р.Р., Крылов П.Н. Корреляции энтальпия образования – топологические индексы в двухатомных спиртах. // Вестник ТвГУ: Сер. Химия. 2021. № 1 (43). С. 104-108.
5. Виноградова М.Г., Козлова Р.Р. Графические зависимости в исследовании корреляций структура – свойство гликолей. // Вестник ТвГУ: Сер. Химия. 2021. № 3 (45). С. 123-131.
6. Козлова Р.Р. Теоретико-графовый подход в исследовании корреляций «структура – теплоёмкость» гликолей //XXVIII Каргинские чтения. Тезисы докладов Всерос. научно-технич. конф. молодых учёных. Тверь, 2022. С 77.
7. Козлова Р.Р., Виноградова М.Г. Теоретико-графовый подход в изучении корреляций «структура-свойство» двухатомных спиртов// Тезисы докладов 12 междунац. конф. «Химическая термодинамика и кинетика». Тверь, 2022. С 133-134.

12 декабря 2022 г.

Физико-химические методы анализа комбинированных лекарственных средств

Кравец О.Б. (магистр, 1 курс)

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

Витамины и лекарственные препараты улучшают качество нашей жизни и укрепляют здоровье. Поэтому контроль определение подлинности состава лекарственного средства помогает определять их эффективность для человеческого организма.

В настоящей работе было определено количественное содержание солей магния и висмута в лекарственном препарате «Викаир». «Викаир» – комбинированное лекарственное средство, оказывающее вяжущее, антацидное, слабительное и спазмолитическое средство. Карбонат магния, входящий в состав препарата снижает кислотность желудочного сока, уменьшает активность пепсина. Нитрат висмута образует защитную пленку на слизистой оболочке желудка, оказывая противовоспалительное, бактерицидное средство.

В качестве метода анализа был выбран титриметрический анализ. Раствор препарата титровали Трилоном Б в присутствии индикаторов ксиленолового оранжевого и эриохрома черного Т, соответственно [1]. Результаты исследования приведены в таблице 1.

Таблица 1

Результаты количественного определения содержания солей магния и висмута в препарате «Викаир»

Объект исследования	Карбонат магния		Нитрат висмута	
	$m_{\text{теор}}$, Г	$m_{\text{пр}}$, Г	$m_{\text{теор}}$, Г	$m_{\text{пр}}$, Г
«Викаир», АО «Фармстандарт»	0,0104	0,0098	0,1739	0,0999

На основании результатов исследования можно сделать вывод о том, что масса соли магния соответствует заявленной массе согласно аннотации на лекарственный препарат. Однако количественное содержание нитрата висмута в 1,74 раза меньше заявленной производителем. Поэтому можно сделать вывод о несоответствии содержания определяемого компонента заявленному и, соответственно, о фальсификации препарата.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Тыжигирова В. В. Анализ комбинированных лекарственных препаратов. / В. В. Тыжигирова. – Иркутск: ИГМУ, 2016. -107 с.
2. Чистякова А. С. Разработка и валидация комплексометрической методики определения кальция и магния в лекарственном растительном сырье (на примере травы PERSICARIA MACULOSA GRAY) / А. С. Чистякова, А. А. Гудкова, О. В. Тринева, А. А. Сорокина, С. А. Васильева // Химия растительного сырья. – 2020. – №3. – С. 155-162.
3. Евтифеева О.А. Титриметрический метод анализа в условиях аптек и лабораторий по контролю качества лекарственных средств: проблемы и подходы / О. А. Евтифеева, В. А. Георгиан //Фармаком. – 2008. – №2. – С.65–77.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

4. Кравец О.Б. Физико-химические методы анализа комбинированных лекарственных средств. Количественное определение содержания магния и висмута в таблетках «Викаир». / О.Б. Кравец // Тезисы докладов Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых XXIV Каргинские чтения «Физика, химия и новые технологии». – Тверь.: 2022. С.84.
5. Кравец О.Б. Физико-химические методы анализа комбинированных лекарственных средств. Количественное определение содержания магния и висмута в таблетках «Викаир». / О.Б. Кравец // Тезисы всероссийской молодежной научно-практической конференции «Актуальные проблемы биологии, экологии и химии». – Ярославль.: 2022. – с. 25.

12 декабря 2022 г.

Влияние заместителя на заряд сульфоновой группы в симметричных диалкилсульфонах.

Нефедова И.А. (специалист, 5 курс)

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

Представленный фрагмент научной работы посвящен получению и анализу электронных характеристик групп ряда симметричных диалкилсульфонов, общей формулой $R-SO_2-R$, где $1 < R \leq 7$ (Рис.). Используемые в исследовании методы и подходы подробно рассмотрены в материалах [1]; некоторые результаты квантово-химического изучения электронного строения диалкилсульфонов раскрыты в [2-10].

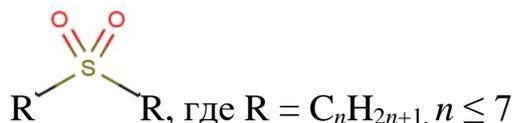


Рис.: Схема диалкилсульфонов

В работе были рассмотрены неразветвленные молекулы диалкилсульфонов с расположением углеродных атомов одного фрагмента (R) в одной плоскости. Изученные соединения обладают плоскостью симметрии, проходящей через ядра атомов S, O, O. Это подтверждают и результаты вычислений заряда групп ($q(R)$), поэтому в таблице представлены $q(R)$ только одного заместителя.

Таблица: Заряды групп $q(R)$ * молекул диалкилсульфонов $R-SO_2-R$, где $R = C_nH_{2n+1}, n \leq 7$ в а.е.

n	CH ₃	CH ₂	SO ₂	R					
1	0,045	-	-	-	-	-	-	-0,089	0,045
2	0,105	-0,026	-	-	-	-	-	-0,156	0,078
3	0,015	0,106	-0,042	-	-	-	-	-0,158	0,079
4	0,091	-0,031	0,091	-0,031	-	-	-	-0,183	0,091
5	-0,007	0,030	0,010	0,090	-0,042	-	-	-0,165	0,082
6	-0,008	0,016	0,016	0,009	0,090	-0,043	-	-0,159	0,080
7	-0,012	0,019	0,002	0,015	0,009	0,090	-0,043	-0,160	0,080

Дальность индуктивного влияния $S(O)_2$ определяется количеством соседних CH_2 , обладающих зарядом, отличным от значения «стандартной» CH_2 ($q(CH_2) = 0,002$ а.е.). Таким образом, исходя из $q(R)$ (Таблица) влиянию $S(O)_2$

подвержены восемь ближайших метиленов, по четыре в обе стороны: значение $q(\text{CH}_2)$ ближайших к $\text{S}(\text{O})_2$ отрицательно, тогда как для остальных CH_2 положительно. Данное явление связано с перераспределением электронной плотности ($\rho(R)$) с соседних CH_2 в атомный бассейн $\text{S}(\text{O})_2$, - доля $\rho(R)$ остается в бассейне ближайших CH_2 , понижая их заряд.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Котомкин А.В. Электронное строение радикалов эфиров сульфоксиловой кислоты. // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. 2019. Т. 62. № 10. С. 96–102.

АПРОБАЦИЯ:

2. Нефедова И.А., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Влияние сульфоновой группы на групповой заряд в изомерах положения декансульфона // Математика и математическое моделирование Сборник материалов XV Всероссийской молодежной научно-инновационной школы. Саров, 2021 С. 24–25.
3. Нефедова И.А., Русакова Н.П., Туровцев В.В. Электронное строение декансульфона // Сборник: XXVII Каргинские чтения. Тезисы докладов Всероссийской научно-технической конференции молодых учёных, посвященной Году науки и технологий. Тверь, 2021. С. 123.
4. Нефедова И.А. Заряды и объемы групп изомеров декансульфона // Материалы Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2021», секция «химия». Москва, 2021. С. 892.
5. Нефедова И.А. QТАИМ исследования изомеров декансульфона // XX Научная конференция аспирантов и студентов химико-технологического факультета, посвященная 50-ти летию преобразования калининского государственного педагогического института в Тверской Государственный Университет. Тверь, 2021. С. ц
6. Нефедова И.А., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Заряды групп белого стрептоцида и аминобензола // Сборник: XXVIII Каргинские чтения. Тезисы докладов Всероссийской научно-технической конференции молодых учёных. Тверь. 2022. С. 106.
7. Нефедова И.А., Русакова Н.П., QТАИМ сравнение аминобензола и белого стрептоцида // Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2022». Москва. 2022. С. 736.
8. Нефедова И.А., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Электроотрицательность заместителя в сульфонах // Математика и математическое моделирование. Сборник материалов XVI Всероссийской молодежной научно-инновационной школы. Саров. 2022. С. 154.
9. Нефедова И.А. Заряд сульфогруппы в сульфонах и влияние на него заместителя // XXI Научная конференция аспирантов и студентов, посвящённая двадцатилетию образования химико-технологического факультета. Тверь. 2022. С. 74.
10. Нефедова И.А. Влияние заместителя на заряд и объем сульфогруппы // Конкурс научно-исследовательских работ, посвящённый двадцатилетию образования химико-технологического факультета. Сборник материалов Конкурса. Тверь. 2021. С. 41-42.
11. Нефедова И.А., Русакова Н.П., Туровцев В.В. Изменение зарядов групп сульфонов при смене заместителя // Химическая термодинамика и кинетика. Сборник материалов XII Международной конференции. Тверь. 2022. С. 218-220.

12 декабря 2022 г.

Фотокаталитическая активность наночастиц $\text{Ag}/\alpha\text{-Ag}_2\text{MoO}_4/\text{h-MoO}_3$ в процессе деградации красителя метиленового синего

Петров В. Р. (специалист, 5 курс)

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

Молибдат серебра и материалы на его основе обладают уникальным спектром разнообразных свойств, включая оптические, электрические, антибактериальные. Кроме того, в последнее десятилетие особое внимание уделяется изучению фотокаталитической активности таких систем.

Для данной работы был синтезирован композитный материал на основе Ag_2MoO_4 . Для этого был использован метод *in situ* получения наночастиц серебра (НЧС) с применением «зеленых нанотехнологий» [1].

Ранее автором были опубликованы данные о самоорганизации в системах на основе N-ацетил-L-цистеина, L-цистеина и ацетата серебра [2], результаты исследования самосборки полученных систем при добавлении раствора молибдата натрия [3], а также был осуществлен синтез микросфер, представляющих собой структуру типа «ядро-оболочка», на основе водных растворов L-цистеина, ацетата серебра и гептамолибдата тетрагидрата аммония [4]. Хотя в работе [4] и упоминается о фотокаталитических свойствах полученных микросфер, хотелось бы более детально изучить процессы деградации красителя метиленового синего (МС) в присутствии этих микросфер.

Для исследования фотокаталитических свойств цистеин-серебрянных растворов (ЦСР) было поэтапно приготовлено три различных системы. На первом этапе смешивание водных растворов L-цистеина с ацетатом серебра приводит к образованию слегка желтовато-зеленого прозрачного раствора – ЦСР-1. Добавление тетрагидрата гептамолибдата аммония к этому раствору приводит к образованию мутного желтоватого обратимого геля – ЦСР-2. Наконец, добавление щелочи в ЦСР-2 дает мутный желтый раствор – ЦСР-3.

Все три полученные системы были подвергнуты ультрафиолетовому облучению либо дневного света, либо с помощью УФ-лампы.

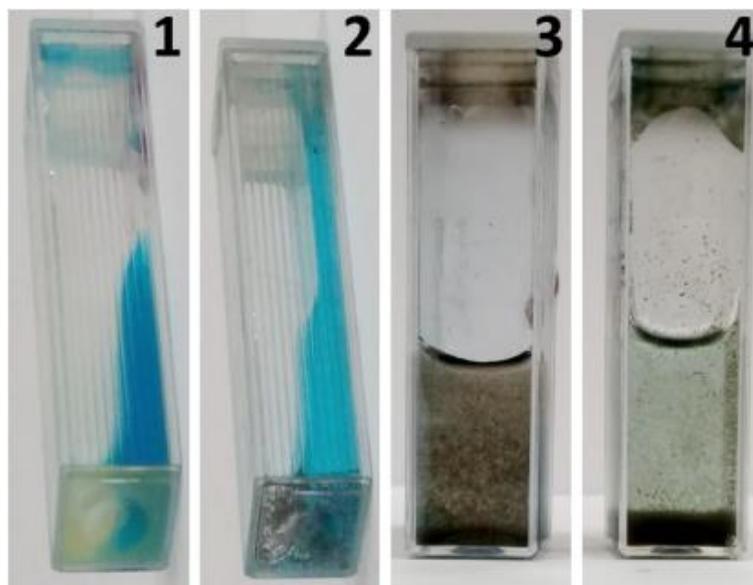


Рис. Изображение смеси ЦСР И МС после УФ облучения: 1 – ЦСР-1 под натуральным облучением света; 2 – ЦСР-1 под облучением УФ лампы; 3 – ЦСР-2 под облучением УФ лампы; 4 – ЦСР-3 под облучением УФ лампы.

Из данных рисунка можно сказать, что при переходе от ЦСР-1 к ЦСР-3 фотокаталитические свойства полученной системы сильно возрастают, что подтверждается образованием микросфер состава $\text{Ag}/\alpha\text{-Ag}_2\text{MoO}_4/\text{h-MoO}_3$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. D.V. Vishnevetskii, A.R. Mekhtiev, T.V. Perevozova, D.V. Averkin, A.I. Ivanova, S.D. Khizhnyak and P.M. Pakhomov. *Soft Matter*. 2020. 16. 9669-9673. doi.org/10.1039/D0SM01431A.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

2. Д.В. Аверкин, Д.В. Вишневецкий, В.Р. Петров, С.Д. Хижняк, П.М. Пахомов. *Вестник ТвГУ. Серия Химия*. 2020. №4 (42). С. 70-82. DOI 10.26456/vtchem2020.4.8.
3. Петров В.Р., Вишневецкий Д.В., Аверкин Д.В. Саморганализация в низкоконцентрированных водных растворах на основе L-цистеина, N-ацетил-цистеина и ацетата серебра с молибдатом натрия // XXVII Каргинские чтения. Сборник материалов. 2021. С 132.
4. Петров В.Р., Вишневецкий Д.В., Аверкин Д.В. Микросферы на основе наночастиц $\text{Ag}/\alpha\text{-Ag}_2\text{MoO}_4/\text{h-MoO}_3$: Синтез и светочувствительные свойства// XXVIII Каргинские чтения. Сборник материалов. 2022. С 114.

12 декабря 2022 г.

Определение п-ацетаминофена в лекарственных препаратах

Шачнева К.С. (магистр, 2 курс)

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

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

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

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

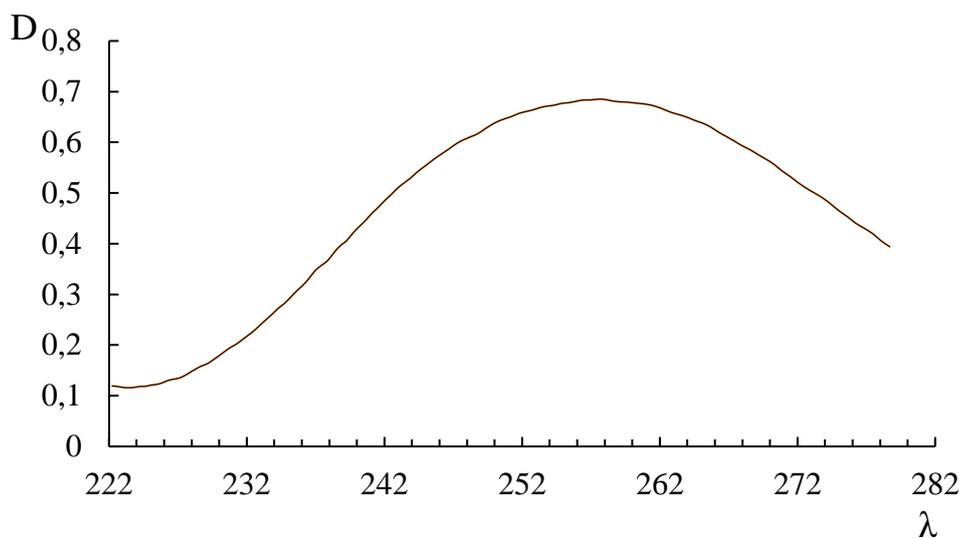


Рис. 1. УФ-спектр п-ацетаминофена (парацетамола)

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

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

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

1. Шачнева К.С. Физико-химическое определение подлинности парацетамола // V Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых. Сборник докладов. Донецк, ДонНУ. 2021. С. 64-68.
2. Шачнева К.С. Физико-химическое исследование парацетамола // Журнал Вестник Тверского государственного университета. Серия: химия – Тверь, ТвГУ. – 2021 г. – №3 (45) – С. 161-166.

12 декабря 2022 г.

Конформеры метилового красного в квантовой теории атомов в молекулах

Щенухина А.С. (магистр, 1 курс)

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

Вычислены относительные энергии шести изомеров метилового красного: форма I получена самой стабильной и энергетически выгодной. В материалах [1–11] представлена используемая методика и некоторые результаты работы.

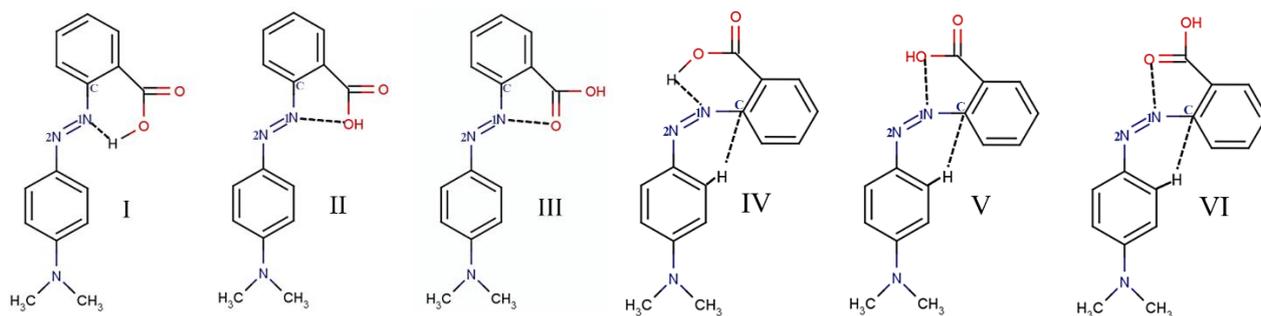


Рис. Изомеры метилового красного: пунктиром показаны слабые взаимодействия.

Относительные энергии групп ($\Delta E(R)$) всех конформеров вычислены для всех R , в качестве реперных взяты наименьшие значения энергии формы I. В материалах представлены ΔE групп и атомов, участвующих в образовании слабых внутримолекулярных взаимодействий: COOH, CH, C, 1N, для сравнения с 1N взят 2N (Таблица). Для форм II-VI увеличение параметра $\Delta E(1N)$ по отношению к I показывает дестабилизацию. В структурах II, III, V и VI отмечено уменьшение $\Delta E(\text{COOH})$, что соответствует понижению полной электронной энергии группы и стабилизации параметра. В изомерах IV и V, где слабое взаимодействие образуется между атомом 1N и одним из атомов фрагмента OH, стабилизируется энергия группы CH.

Таблица. Относительные энергии групп $\Delta E(R)$ изомеров метилового красного, в кДж/моль

	COOH	1N	2N	C	CH
I	0	0	80	480	10
II	-50	120	110	470	20
III	-60	120	120	470	30
IV	40	80	200	380	-10
V	-70	190	240	390	-10
VI	-80	190	240	390	0

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

1. Щенухина А.С., Русакова Н.П., Туровцев В.В. Внутримолекулярные слабые взаимодействия в конформерах метилового красного // Вестник Тверского государственного университета. Серия «Химия». 2022. № 1 (47). С. 52-60.
2. Щенухина А.С. Энергии групп *цис*- и *транс*-изомеров метилового красного // Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2022». Москва. 2022. С. 751.
3. Щенухина А.С. Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Распределение электронной плотности в конформерах метилового красного // Химическая термодинамика и кинетика. Сборник материалов XI Международной конференции. Великий Новгород. 2021. С. 412-413.
4. Щенухина А.С. Русакова Н.П., Туровцев В.В. Метилловый красный в квантовой теории атомов в молекулах // Химическая термодинамика и кинетика. Сборник материалов XII Международной конференции. Тверь. 2022. С. 333-334.
5. Щенухина А.С., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Внутримолекулярные слабые взаимодействия в метиловом красном // Математика и математическое моделирование. Сборник материалов XV Всероссийской молодёжной научно-инновационной школы. Саров. 2021. С. 31–33.
6. Щенухина А.С., Русакова Н.П., Туровцев В.В. Сравнение слабых взаимодействий в конформерах метилового красного // Математика и математическое моделирование. Сборник материалов XVI Всероссийской молодёжной научно-инновационной школы. Саров. 2022. С. 166-167.
7. Щенухина А.С., Русакова Н.П., Туровцев В.В. QТАИМ характеристики слабых взаимодействий метилового красного // Сборник: XXVII Каргинские чтения. Тезисы докладов Всероссийской научно-технической конференции молодых учёных, посвященной Году науки и технологий. Тверь. 2021. С. 178.
8. Щенухина А.С., Русакова Н.П., Туровцев В.В. Энергия групп трансизомеров метилового красного // Сборник: XXVIII Каргинские чтения. Тезисы докладов Всероссийской научно-технической конференции молодых учёных. Тверь. 2022. С. 179 (3 место).
9. Щенухина А.С. Сравнение энергий некоторых конформеров метилового красного // XX Научная конференция аспирантов и студентов химико-технологического факультета, посвященная 50-ти летию преобразования калининского государственного педагогического института в тверской государственной университет. Тверь. 2021. С. 85.
10. Щенухина А.С. QТАИМ заряды групп метилового красного // XXI Научная конференция аспирантов и студентов, посвящённая двадцатилетию образования химико-технологического факультета. Тверь. 2022. С. 79 (1 место).
11. Щенухина А.С. Метилловый красный в квантовой теории атомов в молекулах // Конкурс научно-исследовательских работ, посвящённый двадцатилетию образования химико-технологического факультета. Сборник материалов Конкурса. Тверь. 2021. С. 55-56 (2 место).

20 лет



12 декабря 2022



Тверской
государственный
университет

Юные таланты



Определение адсорбционной способности некоторых энтеросорбентов

Агейчева А. А. (бакалавр, 1 курс)

Научный руководитель: Скобин М. И.

Адсорбенты находят широкое применение в жизни человека, хоть и не многие об этом догадываются. Они используются при очистке газов и жидкостей от примесей, простым примером тому могут стать бытовые фильтры для очистки воды. Также, адсорбция играет важную роль в природных процессах, одним из примеров этому может послужить обогащение почв, именно благодаря адсорбции осуществляется первая стадия поглощения различных веществ из окружающей среды клетками и тканями биологических систем. Многие адсорбенты (активный уголь, каолин, иониты) служат противоядиями, поглощая и удаляя из организма вредные вещества. В промышленности адсорбция используется для сбора разливов нефти и нефтепродуктов с водных и твердых поверхностей. Природные и синтетические адсорбенты широко используют в начальных исследованиях, в медицине, в хроматографии, при получении твердых катализаторов и т.д.

В данной работе под процессом адсорбции мы понимаем — поглощение примеси из газа или жидкости твёрдым веществом (в случае газа и жидкости) или жидкостью (в случае газа) — адсорбентом вследствие нескомпенсированности сил межмолекулярного взаимодействия на разделе фаз. **Целью данной работы** является оценка адсорбционной способности некоторых энтеросорбентов относительно различных типов «мешающих» веществ.

Реактивами для данного опыта послужили: 3 вида активированного угля (чёрный уголь двух разных марок и производителей (1-дешёвый; 2-дорогой), белый уголь-3), крезоловый красный, йод, метиловый оранжевый, сульфат меди. Наша задача убедиться в том, является ли уголь адсорбентом, если да, то какой всё-таки уголь адсорбирует лучше всего.

Таблица 1.

Адсорбционные свойства исследуемых энтеросорбентов в моль/г.

Адсорбируемые вещества	Наименование марки энтеросорбента		
	Образец 1	Образец 2	Образец 3
Крезоловый красный	$3 \cdot 10^{-4}$	$1,67 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-4}$
Йод	$3,33 \cdot 10^{-2}$	$4,33 \cdot 10^{-2}$	Не адсорбирует
Метилловый оранжевый	$1,25 \cdot 10^{-3}$	$1,1 \cdot 10^{-3}$	Не адсорбирует
Сульфат меди	$3,3 \cdot 10^{-3}$	$3,3 \cdot 10^{-3}$	$3,3 \cdot 10^{-3}$

1. Причиной того, что белый уголь не адсорбировал йод и метилловый оранжевый могло стать то, что размеры молекул этих веществ больше, чем размеры пор адсорбента.
2. Когда мы проводили опыт с углём №2 и крезоловым красным, раствор окрасился в фиолетовый, что может означать, что уголь содержит примеси, и происходит щелочная реакция.
3. По данным опыта можно также отметить, что уголь №1 адсорбирует лучше, чем уголь №2.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Астафуров В. И. Основы химического анализа. М.: Просвещение, 1982
2. Мир химии. СПб, М.: М-Экспресс, 1995

Влияние неионогенных ПАВ на экстракцию флавоноидов из листьев наперстянки

Барсукова Е. В. (магистратура, 2 курс)
к.б.н., доцент, Левина А.С.

Актуальной проблемой современной фармакотерапии является способ повышения степени извлечения биологически активных веществ (БАВ) с помощью поверхностно-активных веществ (ПАВ). ПАВ снижают поверхностное натяжение между жидкостью и воздухом, находящимся в порах растительных клеток, в результате чего улучшаются процессы смачивания и проникновение экстрагента в сырьё.

В настоящей работе для исследования влияния ПАВ на экстракцию, были применены предварительно растворенные в спирте, проксанол-268, ПЭГ-115, ОС-20.

В 4 колбы вместимостью 50 мл помещали по 1 г сырья, во вторую, третью и четвертую так же добавляли по 0,5 г растворенных в спирте ПАВ. Доводили объём в колбах до 25 мл 70% спиртом. Проводили экстракцию в течении двух часов при температуре 80 °С. Фильтровали, определяли содержание суммы флавоноидов в полученных экстрактах.

Таблица 1

Влияние ПАВ на экстракцию флавоноидов из сырья

Экстрагент	Спирт 70%	Спирт 70% + ПЭГ	Спирт 70% + проксанол	Спирт 70% + ОС-20
Концентрация флавоноидов, %	2,51	2,8	3,12	3,55

Из таблицы следует, что ПЭГ-115, проксанол-268 и ОС-20 увеличивают концентрацию флавоноидов на 10, 18 и 27% соответственно.

Наилучшее значение концентрации достигается при использовании ОС-20. По сравнению со спиртовой экстракцией без использования ПАВ показатели выхода увеличиваются.

12 декабря 2022 г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Волков В.А. Коллоидная химия. Поверхностные явления и дисперсные системы // СПб.: Лань, 2015. – 660 с.
2. Холмберг К. Поверхностно-активные вещества и композиции. Справочник // М.: БИНОМ, 2015. – 530 с.
3. Муравьева Д.А. Фармакогнозия (с основами биохимии лекарственных растений) // СПб.: Медицина, 2018.

Эффект бромид и фторид-анионов на процессы самосборки в L-цистеин-серебряных растворах

Механников И.А. (бакалавр, 4 курс)

Научный руководитель: Хижняк С.Д.

Супрамолекулярные гели на основе низкомолекулярных соединений, например, аминокислот, могут быть получены в результате самосборки этих молекул за счет нековалентных взаимодействий, таких как водородное связывание, силы Ван-дер-Ваальса, электростатические взаимодействия и др. Гидрогели на основе аминокислоты L-цистеин (L-Cys) и нитрата серебра можно отнести к классу анион-чувствительных супрамолекулярных систем, гелеобразование в которых инициируется введением раствора соли (электролита). Цель работы – изучение влияния галогенид-анионов – фторида и бромид-аниона – на процесс самосборки в водных растворах аминокислоты L-цистеин (L-Cys) и нитрата серебра (ЦСР).



Рис.1. Фото образцов 0-4 (слева направо): а – свежеприготовленные, б – через 1 день. $C_{\text{КBr}}$ – 0; 0,3; 0,4; 0,5; 0,6 мМ (слева направо).

Известно, что ЦСР образует гидрогели с хлоридами различных металлов, однако такие гели не отличаются устойчивостью во времени и разрушаются через несколько дней после синтеза*. Для понимания процессов самосборки и гелеобразования в ЦСР представляется интересным сравнить воздействие ближайших соседей – галогенидов: фторид и бромид-анионов. Было установлено, что фторид-анион все же инициирует гелеобразование в ЦСР,

12 декабря 2022 г.

однако процесс этот очень длительный, составляет около 3-4 месяцев и здесь обсуждаться не будет.

В случае бромид-аниона мы имеем дело с быстро протекающими процессами. На рис. 1 показаны фотографии серии образцов ЦСР с различным содержанием KBr . Как мы видим, через 1 день фазовое разделение не наблюдается только в образце с минимальным содержанием бромид-аниона (рис. 1б). При этом в образцах с фторид-анионом за такое же время никаких заметных изменений не обнаружено, что подтверждается данными УФ спектроскопии. При этом, под воздействием бромид-аниона электронная конфигурация супрамолекулярных цепочек, состоящих из молекул меркаптида серебра, напротив, изменяется очень быстро. Увеличение содержания Br^- сначала приводит к росту поглощения в области полос поглощения с максимумами ~ 315 и 393 нм, а при достижении некоторой критической концентрации к полной перестройке электронной конфигурации супрамолекулярных цепочек $[(-\text{---}Ag-S(R)\text{---})_n]$, где R – остаток L-Cys. Такие изменения в спектрах подтверждают предположение о протекании конкурентных взаимодействий $Ag-S$ и $Ag-Br^-$, которые приводят при определенных условиях к разрушению супрамономеров.

Таким образом, изучение воздействия различных галоген-анионов на процессы, протекающие в ЦСР под их влиянием, – важный этап в понимании механизма гелеобразования в системах на основе низкомолекулярных гелеобразователей (желаторов).

*Андрианова Я.В., Хижняк С.Д., Пахомов П.М. О процессе самоорганизации в водных цистеин-серебряных растворах под воздействием хлоридов металлов // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. 2016. №2. С.99-107.

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

Способ количественного определения йодата калия в поваренной соли

Немытышева И.А. (бакалавр, 1 курс)

Научный руководитель: ассистент Скобин М.И.

Йод играет важную роль в процессе биосинтеза гормонов щитовидной железы. Дефицит йода, поступающего в организм человека, закономерно ведет к снижению синтеза тиреоидных гормонов. Это приводит к формированию такого заболевания как эндемический зоб. Поскольку гормоны щитовидной железы крайне важны для всех видов метаболизма в человеческом организме, обеспечивают выполнение многих физиологических функций, то йододефицита приводит к серьезным нарушениям жизнедеятельности организма. По результатам исследования ВОЗ Россия находится в зоне умеренного йодного дефицита. Наш регион находится в зоне с низким содержанием йода в питьевой воде и продуктах питания. Поэтому для восполнения недостатка этого микроэлемента используются разные методики, в том числе применение поваренной йодированной соли. Предполагается, что употребление данного продукта является профилактикой йододефицита.

Цель данного исследования определить содержание йода в некоторых промышленных образцах йодированной соли с использованием гравиметрического метода.

Для количественного анализа содержания йода в пищевой поваренной йодированной соли были отобраны 2 образца:

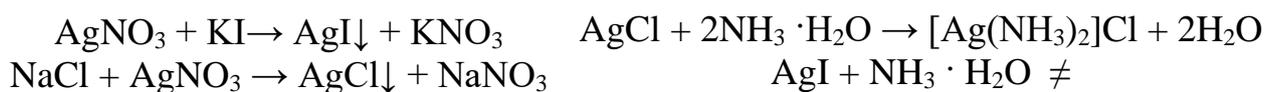
1. Соль поваренная пищевая выварочная йодированная Экстра, производитель ТДС г.Санкт-Петербург. Продукт упакован в непрозрачную пластиковую банку (образец 1).
2. Соль пищевая выварочная йодированная Щепотка, производитель ТДС ООО Салина Трейд, г.Азов. Продукт упакован в картонную тару (образец 2).

12 декабря 2022 г.

Для проведения количественного анализа нам необходимо было перевести йодат калия в йодид калия. Для этого мы прокалили исследуемые образцы соли массой 100 г при температуре 672°C в течение 3-х часов:



Охлажденные смеси солей, содержащие NaCl и KI, растворили в 300 мл воды, после чего к каждому раствору были добавлены по 5 мл AgNO₃ (0,25 Н) и аммиак в избытке:



После добавления этилового спирта выпадал аморфный осадок светло-желтого цвета, который отстаивался сутки в темноте. Выпавший осадок декантировали, промывали раствором аммиака и сушили при 50°C. После взвешивания осадка, был проведен ряд необходимых расчетов и получены основные результаты (табл.1) эксперимента.

Таблица 1.

Результаты количественного определения йодата калия.

Образец	Заявленное производителем количество йодата калия, мкг/г	Фактическое количество йодата калия, мкг/г
Проверка метода	12,3	12
1	11,25 – 40	20
2		27,82

По результатам работы можно сделать следующие выводы:

1. Относительная погрешность методики по нашей оценке составила около 2,5%, что является приемлемым результатом и подтверждает надежность наших данных.
2. В представленных образцах пищевой поваренной соли фактическое количество йода находится в заявленном производителем количественном диапазоне, однако в первом образце количество несколько ниже.

Определение важнейших характеристик бутилированной воды

Хижняк И.А. (бакалавр, 1 курс)

Научный руководитель: Скобин М.И.

Каждый день сотни людей покупают бутилированную воду, но знают ли они, что в ней содержится? В каком количестве? Как это может повлиять на их здоровье? Мы берем за аксиому, что вода, приобретаемая сегодня, полезна для нас. Или, как минимум, не вредна. А теперь представьте, что это далеко не так. Предположим, что в бутылке, казалось бы, прозрачной жидкости, все не так уж прозрачно: жесткость этой воды достаточно высокая, чтобы нанести вред организму осаждением солей, снижением моторики желудка, угнетением сердечно-сосудистой системы. Или же употребляемая вода слишком мягкая, что приводит к вымыванию полезных микроэлементов из организма, ухудшению регуляции основных обменных процессов. И это происходит изо дня в день, приближая момент серьезных проблем со здоровьем. Самым опасным для человека является потребление некачественной воды именно внутрь, поэтому целью работы является определение важных параметров, характеризующих наиболее популярную бутилированную воду в России.

Используемые реактивы и оборудование: установка для титрования, конические колбы, мерные стаканчики, воронка, рН – метр И-160МП, электрод ЭСЛК 01.7, трилон Б 0,05 Н, эриохром черный Т, аммиачный буферный раствор, НС1 0,1 Н, фенолфталеин, метилоранж, бутилированная вода (Сенежская негаз., Святой источник негаз., минеральная Эдельвейс газ).

Для определения общей жесткости в 3 колбы разлила по 100 мл воды из одной бутылки, в каждую добавила 3 капли индикатора. В качестве титранта использовала раствор трилона Б с концентрацией 0.05 N: фиксанал разбиваем в литровую емкость, используя воронку, затем растворяем в $H_2O_{дист}$ и доводим до 1л. Индикатором выступал раствор эриохрома черного Т: 0.25 г сухого вещества растворяем в 50 мл этилового спирта и тщательно перемешиваем. При его

12 декабря 2022 г.

добавлении раствор становился фиолетовым из-за присутствия ионов солей. Вода Эдельвейс плохо поддавалась окрашиванию из-за кислой среды. В конце опыта раствор приобретал насыщенный синий оттенок.

Затем исследовала временную жесткость, для этого в 3 колбы отбирала по 50 мл воды из бутылки, добавляла в каждую 3 капли фенолфталеина (проверка на наличие карбонат – ионов): 0,05 г сухого вещества растворяем в 30 мл 96% этилового спирта и доводим раствор до 50 мл дистиллированной водой; затем также 3 капли метилового оранжевого: 0,05 г вещества растворяем в 40 мл горячей $H_2O_{дист}$, после охлаждения объем р-ра доводим до 50 мл. Титровала HCl с концентрацией 0,1 N: в мерную колбу (1 л) разбиваем фиксанал с сухим веществом, затем, активно перемешивая, доливаем дистиллированную воду до риски. При добавлении индикатора в коническую колбу вода приобретала желтый цвет, по окончании титрования раствор переходил в розовый.

Результаты эксперимента сведены в таблицу 1:

Таблица 1.

Характеристики исследуемых объектов

Наименование марки воды	Щелочность, мг экв/л	Временная жесткость, мг экв/л	Постоянная жесткость, мг экв/л	Общая жесткость, мг экв/л	pH
Сенежская	7,06	5,485	≈ 0	5,485	8,06
Святой источник	3,25	3,25		3,25	7,93
Эдельвейс	5,54	3,376		3,376	6,42

Вывод: Некарбонатные соединения магния и кальция практически отсутствуют, что позволяет простыми способами значительно умягчить воду. Но для данных марок в этом нет необходимости. Норма общей жесткости питьевой воды - от 1,5 до 7 мг экв/л. Как мы видим, вся исследуемая вода соответствует установленному нормативу, а значит, ее употребление без умягчения безопасно. Уровень pH воды должен варьироваться в пределах 5,5 - 8,5. Все марки удовлетворяют этой норме, ближе к идеалу находится «Святой источник».

Оптимизация геометрии конформеров пропанола-1

Шебеченкова А.Н. (специалист, 4 курс)

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

Получение пропанола-1 сопровождается образованием неразделимой смеси всех возможных конформеров. Общие физико-химические свойства полученного вещества являются средним значением по сумме вкладов всех конформационных состояний. Описание свойств каждого поворотного изомера – одна из сложнейших химических задач, часть которой можно решить в приближениях квантовой химии. В связи с этим целью работы стало квантово-химическое изучение отличия геометрических характеристик – длин связи, валентных и торсионных углов возможных конформеров пропанола-1 (Рис.).

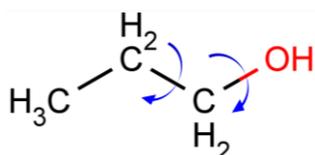


Рис.: Пропанол-1 (I); стрелочками показаны внутренние вращения

Оценка количества конформеров проведена с использованием программного пакета Marvin-Pro [1]. Оптимизация геометрии девяти поворотных изомеров пропанола-1 (I – IX) осуществлена методом B3LYP/6-311++G(3df,3pd) в программе GAUSSIAN 03 [2]. Полученные геометрические параметры: межъядерное расстояние (R), валентный (φ) и двугранный (ω) угол снесены в таблицу. Рассмотрение параметров II – IX проведено по I.

Сравнение характеристик (R, φ , ω) конформеров пропанола-1 (Таблица) показало, что отличия длин связей в структурах II – IX составило не более $\pm 0,01$ Å, валентные φ_1 , φ_5 , φ_7 , φ_8 и φ_{10} отклоняются в пределах $\pm 1^\circ$, двугранные углы ω_1 , ω_2 и ω_5 то же меняются незначительно по сравнению с I. Изменение φ_6 форм IV – IX составило 2° ; φ_9 состояний II, III, VI -IX уменьшился на 5° . Наибольшие изменения у всех поворотных изомеров по отношению к I претерпели остальные торсионные углы ω_3 , ω_4 , ω_6 - ω_9 : так, например, значение ω_3 в IV, VII, IX уменьшилось на 120° .

12 декабря 2022 г.

Таблица: длина связи (R), валентный (φ) и торсионный угол (ω) конформеров I-IX.

	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX
	Длина связи (R), в а.е.								
R ₁ (2H-1C)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
R ₂ (3H-1C)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
R ₃ (4H-1C)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
R ₄ (5C-1C)	1,53	1,53	1,53	1,53	1,53	1,52	1,53	1,53	1,53
R ₅ (6H-5C)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,10	1,09	1,09
R ₆ (7H-5C)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
R ₇ (8C-5C)	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,53	1,53	1,53	1,53
R ₈ (9H-8C)	1,10	1,09	1,10	1,10	1,10	1,10	1,09	1,09	1,10
R ₉ (10H-8C)	1,10	1,10	1,09	1,10	1,10	1,09	1,10	1,10	1,09
R ₁₀ (11O-8C)	1,43	1,42	1,42	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43
R ₁₁ (12H-11O)	0,96	0,96	0,96	0,96	0,96	0,96	0,96	0,96	0,96
	Валентный угол (φ), в °								
φ_1 (3H-1C-2H)	108	108	108	108	108	108	108	107	108
φ_2 (4H-1C-2H)	108	108	108	108	108	108	108	108	108
φ_3 (5C-1C-2H)	111	111	111	111	111	111	111	112	111
φ_4 (6H-5C-1C)	110	110	110	110	110	110	110	110	110
φ_5 (7H-5C-1C)	110	110	110	110	110	110	110	110	110
φ_6 (8C-5C-1C)	112	112	112	114	114	114	114	114	114
φ_7 (9H-8C-5C)	110	110	110	110	110	110	110	110	110
φ_8 (10H-8C-5C)	110	110	110	110	110	110	110	110	110
φ_9 (11O-8C-5C)	108	113	113	109	109	113	113	114	114
φ_{10} (12H-11O-8C)	109	109	109	109	109	109	109	109	109
	Торсионный угол (ω), в °								
ω_1 (4H-1C-2H-3H)	-116	-116	-116	-116	-116	-116	-116	-116	-115
ω_2 (5C-1C-2H-3H)	122	122	122	122	122	122	122	122	122
ω_3 (6H-5C-1C-2H)	-61	-62	-61	-178	-62	-64	-176	-60	-180
ω_4 (7H-5C-1C-2H)	-179	-179	-178	-61	-179	179	-179	-177	-62
ω_5 (8C-5C-1C-2H)	60	60	60	60	60	58	61	62	58
ω_6 (9H-8C-5C-1C)	59	60	58	-57	175	174	-56	177	-59
ω_7 (10H-8C-5C-1C)	-59	-58	-60	-175	57	56	-174	59	-177
ω_8 (11O-8C-5C-1C)	180	178	-178	64	-64	-62	62	-65	65
ω_9 (12H-11O-8C-5C)	180	62	-62	-178	178	-65	65	67	-67

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Marvin Pro: Draw and publish chemical structures seamlessly with our web-based chemistry editor (<https://chemaxon.com/marvin-pro>). Copyright © 1998–2022 Chemaxon Ltd.
2. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Pople et al. Gaussian 03 (Revision E 0.1, SMP). Gaussian Inc. Pittsburgh PA. 2007.

СПИСОК ПОБЕДИТЕЛЕЙ

Номинация:

АПРБИРОВАННОЕ НАУЧНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

- 1 место: Зеников Герман Романович (4 курс, 04.03.01)
- 2 место: Гешко Владимир Владимирович (1 курс, 04.04.01)
- 3 место: Бойкова Софья Сергеевна (4 курс, 04.05.01)
- 3 место: Шачнева Кристина Сергеевна (2 курс, 04.04.01)

Номинация:

ЮНЫЕ ТАЛАНТЫ

- 1 место: Агейчева Алена Андреевна (1 курс, 04.03.01)
- 2 место: Немьтышева Ирина Андреевна (1 курс, 04.03.01)
- 3 место: Хижняк Ирина Александровна (1 курс, 04.03.01)

Экспертное жюри:

Минина Мария Владимировна

(доцент каф. неорганической и аналитической химии)

Баранова Надежда Владимировна

(доцент каф. неорганической и аналитической химии)

Журавлев Олег Евгеньевич

(доцент каф. органической химии)

Пахомов Павел Михайлович

(профессор каф. физической химии)

Хижняк Светлана Дмитриевна

(доцент каф. физической химии)

Вишневецкий Дмитрий Викторович

(доцент каф. физической химии)

Русаква Наталья Петровна (ответственный за проведение конкурса)

(доцент каф. физической химии)