

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

XX НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
АСПИРАНТОВ И СТУДЕНТОВ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО
ФАКУЛЬТЕТА, ПОСВЯЩЕННАЯ
50-ТИ ЛЕТИЮ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ
КАЛИНИНСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПЕДАГОГИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА
В ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННОЙ
УНИВЕРСИТЕТ

20 мая 2021 года

Тверь

Тезисы докладов

ТВЕРЬ 2021

Ответственный за выпуск
ассистент, А.А. Крылов

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

Оглавление

Секция биохимии и биотехнологии

Аксёнова Е.А. Технология производства и разработка рецептуры мучного кондитерского изделия типа «Ромовая баба»	7
Андреев А.А. Некоторые проблемы чрезмерного употребления сахара	8
Богаченков Н.А. О возможности введения в школьный рацион пастилы	9
Веселова А.К. Клюквенный мармелад с добавлением базилика	10
Витковская М.В. Технология приготовления печенья «курабье» с добавлением сухого имбиря	11
Вольга А.А. Разработка кондитерских изделий из нетрадиционных видов сырья	13
Графова Е.С. Основы рационального питания	14
Греули Л.Г. Технология производства и идентификация макаронных изделий	15
Егоров Д.Р. Исследование качества сухарных изделий	16
Ефимова Т.А. Технология производства и разработка рецептуры хлебобулочных изделий для детского питания с добавлением различных видов муки	17
Зограбян А.А. Технология производства бараночных изделий на ОАО «Волжский пекарь»	18
Костюкова И.Н. Золотая фасоль как оригинальное сырье для производства продуктов питания и продовольственного сырья	19
Крылов А.А. Технология производства цельнозерновых хлебцев с добавлением различных видов клетчатки	20
Кудряшова Е.Д. Характеристика пищевых продуктов по пищевой ценности	21
Курилов Н.А. Определение щелочности и массовой доли влаги различных видов овсяного печенья	22
Машкин Л.О. Технология приготовления хлебобулочного изделия Пита с добавлением различных видов муки	23
Паршина М.Н. Использование ферментов при производстве соковой продукции	24
Платнова А.А. Роль минеральных веществ в питании человека и регулировании обмена веществ	25
Разуева И.В. Лапша - как яркий представитель макаронных изделий	26
Рыбаков А.М. Как выбрать «шоколадные» конфеты	27
Смирнова Е.С. Генно-модифицированные организмы: «за» и «против» использования в продуктах питания	28
Смирнова И.В. Классификация пищевых продуктов	29

Секция неорганической и аналитической химии

Алексеева А.В. Термический анализ ацетилсалициловой кислоты	30
Алиева Б.М. Изучение комплексов переходных металлов с основаниями шиффа.....	31
Вахрушкина М.В. Анализ минерального состава муки различных сортов и регионов	32
Голованов И.В. Анализ содержания свинца в придорожной почве	33
Грачев Е.М. Исследование электрохимических свойств сенсоров с откликом на антигистаминные препараты	34
Ершов Н.А. Усовершенствование ферментационно- экстракционной технологии получения биосредств для растениеводства	35
Зверькова О.А. Спектрофотометрическое исследование комплексообразования меди(2) с некоторыми аналитическими реагентами ...	36
Зуева А.С. Титриметрический анализ ацетилсалициловой кислоты различных производителей	37
Крылов А.А. Потенциометрический сенсор с непосредственным отсчетом на основе поли-о-толуидина	38
Крюков Т.В., Скобин М.И. Твердые комплексы самария и гадолиния с цефазолином	39
Куденко П.Е. Ионные ассоциаты цефтриаксона с гетерополикислотами	40
Ларионова О. Анализ физико-химических свойств высокотемпературных органических теплоносителей	42
Радин А.С. Термокаталитический сенсор для течеискателей хладагентов на основе гетерополисоединения типа Андерсона в матрице диоксида олова....	43
Ракитская Н.С. Определение щелочных и щёлочноземельных металлов в природных водах	44
Салакзин Н.С. Влияние электрогидродинамических эффектов второго рода на интенсификацию процессов концентрирования РЗЭ.....	45
Скобин М.И., Крюков Т.В. Термическое и спектроскопическое исследование среднего комплекса лютеция с гепарином.....	46
Софронова Ю.И. Применение имидазолинов и четвертичных солей на основе жирных кислот таллового масла для разделения двойных неводных азеотропных систем	47
Торопыгина К.О. Расчёт энергии молекулярных орбиталей комплексонов диаминового ряда.....	49
Федорова А.А. Анализ некоторых 3-dметаллов в сточных водах гальванического производства	50
Чеботарева Е.С. Ик-спектроскопический анализ афобазола.....	51
Шачнева К.С. Физико-химическое определение подлинности парацетамола	52

Секция органической химии

Андреева О.О. Синтез и свойства ионных жидкостей с металлатным анионом	53
Барсукова Е.В. Химический состав наперстянки пурпурной	54
Буренина А.Ю. Изучение свойств органических фосфатов	55
Деревцова А.С. Четвертичные соли аминов с комплексным металлатным анионом	56
Каленова Н.С. Изучение пенообразующей способности алкилсульфосукинатов	57
Коломыйцева О.А. Трехкомпонентные реакции в синтезе гетероциклических соединений.....	58
Костромина А.А. Получение N-алкилпроизводных морфолина.....	59
Кружков С.М. Влияние функциональных добавок на свойства водно-дисперсионных полиакриловых красок.....	60
Кудряшова Е.А. Получение азогидразонов на основе пропандиовой кислоты	61
Мелиева Ш.Б. Синтез 1-(4-карбоксифенил)содержащего формазана.....	62
Капустина С.С. Экологически-безопасные незамерзающие стеклоомывающие жидкости	63
Околота Д.А. Димерные поверхностно-активные вещества на основе многоосновных кислот	64
Рассказова Н.Ю. Синтез и изучение физико-химических свойств тетрафторборатов N-алкилпиридиния	65
Скачкова Д.М. Исследование коллоидно-химических свойств смесей анионных поверхностно-активных веществ с алкилполиглицозидами	66
Суратова Е.С. Синтез ионных жидкостей на основе четвертичных солей N-алкилпиридиния с неорганическими анионами и их свойства	67
Чистякова М.М. Поверхностно-активные вещества в нефтехимии.....	68
Шекина К.Д. Электропроводность растворов ионных жидкостей синтезированных на основе четвертичных солей N-алкил-2-метилпиридина	69
Шемякина Д.В. Получение 1,3-дифенил-5-аминокарбонилфармазана.....	70
Юлмасов Г.С. Ионные жидкости на основе тетрахлолопалладат-аниона	71

Секция физической химии

Афонькин Н.С. Синтез наночастиц серебра с помощью водных экстрактов листьев крапивы двудомной	72
Багиров Т.Л. Энтальпия образования тиоэфиров	73
Завилейская В.А. Электронные параметры конформеров цистеина	74
Зиганшин А.В. Электронные свойства групп 15-краун-5 и 1,4,7,10,13-пентатио-15-краун-5	75
Калюжная Л.А. Корреляция «структура-свойство» тиоспиртов. Топологический подход.	76
Курочкин Г.А. Интегральные электронные характеристики димеров тиофена	77
Мамаев П.В. Изучение поверхностно активных веществ с помощью метода кондуктометрии	78
Матус Я.А. Аспарагин и аспарагиновая кислота в постулатах QTAIM	80
Нефедова И.А. QTAIM исследования изомеров декансульфона	81
Савельева Т.А. Энергетические характеристики двухатомных спиртов	82
Стычинский Д.М. Изучение влияния антропогенных факторов на образование наночастиц серебра в экстрактах хвои ели европейской	83
Шухина К.А. Исследование влияния нитрата серебра на процессы самосборки в низкоконцентрированных водных системах глицин-поливиниловый спирт	84
Щенухина А.С. Сравнение энергий некоторых конформеров метилового красного	85

Секция биохимии и биотехнологии

Технология производства и разработка рецептуры мучного кондитерского изделия типа «Ромовая баба»

Аксёнова Е.А. (бакалавр, 4 курс)

Научный руководитель: к.х.н., доцент, Рыжков Ю.А.

Кондитерская промышленность постепенно и плавно входит в мировой рынок, этот процесс является положительным явлением. Поэтому сегодня остро стоит вопрос обеспечения устойчивого экономического развития в условиях высокой мировой конкуренции и создания конкурентных преимуществ отечественного производства.

После проведения исследования соответствие состава кондитерского изделия типа «Ромовая баба» нескольких производителей, пришли к выводу, что производители не изготавливают свои изделия «Ромовая Баба» строго по нормативным документам (ТУ), предпочитая заменять некоторые компоненты дешевыми аналогами. Тем самым себестоимость продукта уменьшается, хотя на рынке цена остается прежней или вырастает, а качество может ухудшиться. Наша задача разработать новую рецептуру, чтобы она была полезной и вкусной.

При разработке своей новой рецептуры кондитерского изделия «Ромовая баба» заменила: изюм – на кумкват сушеный; помаду №100 – на помаду №101.

Сушеный кумкват – это разновидность сухофруктов, которые получают путем сушки плодов кустарников рода фортунелла. Они представляют собой высушенный (при определенных условиях) вместе с кожурой плод. Кумкват очень полезный и он является эффективным диетическим продуктом, так как низкокалориен.

1. ТУ 10.72.12-736-37676459-2017 Бабы ромовые.

2. Валентина Скворцова «СУШЕНЫЙ КУМКВАТ ПРИМЕНЕНИЕ, ПОЛЬЗА И ВРЕД»

Некоторые проблемы чрезмерного употребления сахара

Андреев А. А. (бакалавр, 4 курс)

Научный руководитель: доцент, к.воен.н. Ушаков С.И.

Многие склонны утверждать, что рафинированный сахар - это сладкий яд. Так, например, в середине XX века доктор Вильям Мартин определил сахар как продукт, лишенный своей жизненной силы, витаминов и минералов. Он утверждал, что сахар не переваривается или накапливается в теле, что может привести к развитию различных заболеваний.

Сахар необходим человеческому организму. Многие растительные продукты (фрукты, ягоды, овощи, орехи) содержат естественный сахар – фруктозу. Он легко и полностью усваивается организмом человека. Если человек получает недостаточное количество фруктозы, он испытывает непреодолимое желание съесть сладкий торт или конфету, и организм постепенно привыкает к вредному рафинаду, который в больших количествах присутствует в этих продуктах. Регулярное неумеренное употребление рафинированного сахара создает благоприятную среду для развития микробов, разрушающих зубную эмаль, он провоцирует заболевание зубов и десен. Рафинад препятствует белым кровяным клеткам убивать микробы, поэтому происходит нарушение функции иммунной системы организма. Он превращает глюкозу в триглицерид, отчего значительно увеличивается содержание жиров в крови.

По данным Всемирной организации здравоохранения, на сегодняшний день заболевание зубов вышло на 3-е место после сердечно-сосудистых заболеваний и рака. Белый сахар является основной причиной при нарушении пищеварения, гипогликемии и обмена веществ.

Такой же эффект производят искусственные сахарозаменители, такие как аспартам (самый распространенный), сахарин, сукламат. Их единственный плюс - низкая калорийность - при ближайшем рассмотрении оказывается минусом и приводит к увеличению веса. Ко всему прочему, они лишены необходимых для нашего организма минералов и витаминов.

О возможности введения в школьный рацион пастилы

Богаченков Н.А. (бакалавр, 4 курс)

Научный руководитель: доцент, к.воен.н. Ушаков С.И.

Пастила́ – кондитерское изделие из подсушенного фруктово-ягодного пюре или сока. Блюдо русской кухни (известно с XIV в.).

Таблица 1 Физиологическая потребность в макронутриентах

Макронутриенты	Для взрослых		Содержание г в 100 грамм яблок
	мужчины	женщины	
Белки г/сутки	65 - 117	58 - 87	0,4г
Жиры г/сутки	70 – 154	60 - 102	0,4
Углеводы г/сутки	170 - 420	170 - 420	9,8

Таблица 2 Физиологическая потребность в минеральных веществах

Макронутриенты	Для взрослого человека	Содержание мг в 100 грамм яблок
Кальций мг/сутки	400-1000	11
Калий мг./сутки	400 - 2500	195
Медь мг/сутки	0,5 - 1	0,05

Подлинная пастила – яблочное пюре, протертое через сито и высушенное в печи. Основу такого пюре составляет яблочный пектин, который представляет собой тип растворимой клетчатки с несколькими потенциальными полезными свойствами: адсорбирует соли тяжелых металлов; регулирует содержание холестерина; нормализует кишечную микрофлору; способствует перевариванию, всасыванию пищи; повышает защитные силы организма.

Основное назначение пектина – гелеобразование, капсулирование, в пищевых продуктах выступает в качестве загустителя и стабилизатора (E440).

Проведенные исследования показали, что, употребляя подлинную пастилу, человек тем самым удовлетворяет потребности организма в незаменимых пищевых веществах.

Клюквенный мармелад с добавлением базилика

Веселова А.К. (бакалавр, 4 курс)

Научный руководитель: д.б.н., профессор Алексеева Л.В.

Мармелад — это сахаристое кондитерское изделие студнеобразной консистенции, которое имеет определенную заданную форму и получается путем уваривания желирующего фруктового и (или) овощного сырья и (или) раствора студнеобразователя с сахаром[1].

Первичным сырьем для мармелада являются ягоды и фрукты. При этом в мармеладе содержится в 3-5 раз меньше воды, а также увеличено количество сахара, по сравнению со свежими плодами[2].

Изначально желейный мармелад не содержит витамины и жиры, содержит незначительное количество белка и пищевых волокон. Основными пищевыми веществами являются моносахариды. Минеральных веществ также содержится очень мало. Основными из них можно назвать железо и натрий.

Из-за отсутствия в готовом продукте витаминов и низком содержании минеральных веществ необходимо применение современных видов сырья. Это предоставляет возможность обогащения мармелада витаминами и минеральными веществами.

К примеру, добавление в рецептуру пюре клюквы повысит содержание пищевых волокон, аскорбиновой кислоты и токоферолов в мармеладе.

А добавление базилика не только повлияет на органолептические показатели готового продукта, но и обогатит его необходимыми для организма человека минеральными веществами и витаминами А, Е, С.

В результате такой мармелад становится в разы полезнее и предпочтительнее для употребления в пищу.

1. ГОСТ 6442-2014 «Мармелад. Общие технические условия».
2. Горячева Г.Н., Викторова Г.К. Традиции и перспективы. -Кондитерская фабрика. 2008. - №9-10. - с. 20-21.

Технология приготовления печенья «курабье» с добавлением сухого имбиря

Витковская М.В. (бакалавр, 4 курс)

Научный руководитель: д.б.н., проф. Алексеева Л.В.

Печенье «Курабье» – это мучная восточная сладость, изготовленная из песочного теста. Вырабатывается на основе сборника рецептов «Восточные сладости» [1].

Таблица 1. Рецептúra печенья «Курабье»

Наименование сырья	Содержание сухих веществ, %	Расход сырья, кг на 1т готовой продукции	
		в натуре	в сухих веществах
Мука пшеничная хлебопекарная в/с	85,50	578,10	494,28
Пудра сахарная	99,85	150,20	149,97
Масло сливочное	84,00	346,90	291,40
Яйцо куриное	27,00	40,40	10,91
Подварка	54,90	57,90	31,79
ИТОГО		1173,50	978,34
ВЫХОД	95,00	1000,00	950,00

Для улучшения рецептуры и обогащения полезными веществами возможно введение порошка имбиря в соотношении 2% от количества муки.

В корневище имбиря содержится очень много полезных витаминов, минералов и аминокислот, в числе которых витамины С, В1, В2, незаменимые аминокислоты, необходимые для нормального функционирования всех систем организма, эфирное масло, минералы (натрий, калий, цинк).

Печенье с добавлением порошка имбиря приобретает слегка островатый вкус с сохранением первоначальных органолептических показателей.

1. Могильный М.П. Восточные сладости (технология, рецептуры, рекомендации). – М.: ДеЛи принт, 1002. – 148 с.

Разработка кондитерских изделий из нетрадиционных видов сырья

Вольга А.А. (бакалавр, 1 курс)

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

Японская кухня известна во всём мире. Главное, что отличает японские сладости от европейских, – это натуральные ингредиенты, низкое содержание сахара, а также то, что главной основой для вагаси (японских сладостей) является рис. Моти (мочи) – это лакомство в форме шариков или лепешек, приготовленное из липкого упругого теста, которое готовят на пару из толченого белого японского клейкого риса. Клейкий рис отличается от обычного риса отсутствием или минимальным содержанием амилозы и высоким содержанием амилопектина. Преимущества рисовой муки: наличие ценных пищевых волокон, не содержит глютен, улучшает работу печени.

Актуальность работы заключается в том, что в настоящее время японские сладости набирают всё большую популярность среди российского населения, но приобрести их можно, как правило, через ресурсы интернет или на различных фестивалях. Малые предприятия, выпускающие японские сладости, привлекают к себе не только любителей японской культуры, но и тех потребителей, которые ищут, что-то новое, полезное и необычное.

Целью работы является – разработка кондитерских изделий из нетрадиционных видов сырья.

Предметом исследования является японская сладость из рисовой муки.

В работе изучена технология и подобрано технологическое оборудование для производства моти; разработана рецептура на пирожное моти массой 20 грамм, состоящее из заварного полуфабриката и творожной начинки; проведены расчёты пищевой и энергетической ценности моти; изучены органолептические показатели моти. Практическая значимость проводимой работы заключается в дальнейшей возможности применения полученных результатов и их апробации для внедрения продукции в реальное производство.

Основы рационального питания

Графова Е.С. (бакалавр, 2 курс)

Научный руководитель: старший преподаватель Лихуша П.С.

Основы рационального питания является составной частью нутрициологии – науки о питании, и включает основные положения физиологии, биохимии, гигиены, витаминологии, микробиологии и др [1].

Рациональное питание – это физиологически полноценное питание здорового человека с учетом его пола, возраста, характера труда, климатических условий обитания. Оно способствует сохранению здоровья, хорошей физической и умственной работоспособности, высокой сопротивляемости организма к воздействию вредных факторов окружающей среды и активному долголетию. Определенные коррективы в питание людей вносят традиции, религиозные воззрения, уровень культуры и другие факторы.

Многочисленными исследованиями установлено, что правильное питание обеспечивает нормальный рост и развитие организма, улучшает сопротивляемость к вредным влияниям внешней среды, развивает функциональные возможности, способствует повышению работоспособности и продлению жизни [2].

В результате прогресса биологических наук стало возможным охарактеризовать некоторые общие закономерности питания на всех уровнях организации биологических систем - от клеточного до популяционного и биосферного, включая эволюционные и экологические аспекты. Все это привело к формированию новых фундаментальных 8 концепций и позволило нам, начиная с 1980 г., сформулировать основные положения трофологии [3].

1. Скальный А. Основы правильного питания
2. А.Г. Сушанский, В.Г. Лифляндский, 2000
3. Уголев А.М. Теория адекватного питания и трофология

Технология производства и идентификация макаронных изделий

Греули Л.Г. (бакалавр, 4 курс)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Рыжков Ю.А.

Одним из направлений работы технолога пищевой промышленности является работа в лаборатории. Идентификация продуктов - очень важная операция контроля их качества.

Идентификация продукции – установление соответствия конкретной продукции образцу и (или) ее описанию[1].

Целями идентификации являются: 1 - защита потребителя от недобросовестного изготовителя (поставщика, продавца); 2 - обеспечение безопасности продукции для окружающей среды, жизни, здоровья потребителя, его имущества и в целях подтверждения соответствия продукции предъявленным к ней требованиям[1].

В рамках выпускной квалификационной работы по теме «Технология производства и идентификация макаронных изделий» в качестве эксперимента была проведена идентификация 6 образцов макаронных изделий различных производителей. Была поставлена задача – подтвердить данные на упаковках об отсутствии муки из мягкой пшеницы. Метод определения основан на различной растворимости пальмитата β -ситостерола в ацетоне при различных температурах [2].

Конечный результат эксперимента с учетом погрешностей при взятии проб подтвердил данные о качестве изделий, указанные на упаковках образцов.

1. ГОСТ Р 51293-99 Идентификация продукции. Общие положения.
2. ГОСТ 31750-2012 Изделия макаронные. Методы идентификации.

Исследование качества сухарных изделий

Егоров Д.Р. (бакалавр, 4 курс)

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

Для исследования были взяты сухари марок «Моя цена» и ЗАО «Кимовский хлебокомбинат». Целью исследования была проверка образцов на соответствие ГОСТ-8494-96, а именно показатели влажности и кислотности.

Проверка на влажность осуществлялась по ГОСТ-8494-96. Измельченные навески по 5г засыпали в бюксы и поставили в сушильный шкаф на 45 минут при $t=130\text{ }^{\circ}\text{C}$. После высушивания охладили в эксикаторе и взвесили.

Проверка на кислотность проводилась по ГОСТ 5670-96. Образцы массой по 10г были измельчены и смешаны со 100мл дистиллированной воды температурой $18-25\text{ }^{\circ}\text{C}$, перемешаны и оставлены на оттаивание в течении 15 минут. Затем от полученной жидкости были отобраны фильтраты по 25 см^3 и протитрованы раствором молярной концентрации $0,1\text{ моль/дм}^3$ гидроокиси натрия с фенолфталеином (5 капель) до получения розового окрашивания, не исчезающего в течение 1 минуты.

Показатель	Значение по ГОСТ	Полученное значение	
		«Моя цена»	ЗАО «Кимовский хлебокомбинат»
Влажность	Не более 8%	5,35%	5,53%
Кислотность	Не более 4 град.	4,431	3,474

По итогам исследования можно сделать вывод о качестве анализируемых образцов. Так, образцы сухарей ЗАО «Кимовский хлебокомбинат» хорошего качества, а сухари «Моя цена» имеют повышенную кислотность. Для исправления ситуации, в технологию приготовления следует внести коррективы, уменьшающие кислотонакопление (снизить температуру и продолжительность брожения, уменьшить количество закваски, снизить кислотность закваски и т.д.).

1. ГОСТ 8494-96 Сухари сдобные пшеничные. Технические условия

Технология производства и разработка рецептуры хлебобулочных изделий для детского питания с добавлением различных видов муки

Ефимова Т.А. (бакалавр, 4 курс)

Научный руководитель: к.х.н., доцент Рыжков Ю.А.

В период с осени 2019 по весну 2021 проделана большая работа, целью которой являлась разработка оригинальной рецептуры детской булочки, чтобы она полно удовлетворяла потребность детей в витаминах, минералах и в других полезных компонентах. На данный момент проведены исследования в сети интернет, проанализировано меню предприятий детского питания Московской и Тверской областей, а также подобраны такие натуральные красители, которые больше всего будут подходить для внедрения в детское питание. Выполнены пробные выпечки. Изучен теххимический контроль и оценена эффективность его на приготовленной булочке. Продолжением работы был расчёт биологической ценности.



Рис. 1

На рис. 1 представлены булочки по разработанной рецептуре рис. 2 за основу, которой была взята булочка октябрёнок

Наименование сырья	Массовая доля сухих веществ, %	Расход сырья на 100 шт. готовых изделий, г	
		в натуре	в сухих веществах
Мука пшеничная 1-го сорта	85,5	3533,3	3020,9
Мука пшеничная 1-го сорта (на подпыл)	85,5	108,0	92,34
Мука рисовая	88,80	1766,6	1568,7
Сахар-песок	99,85	649,0	648
Масло растительное	100,00	162,0	162
Молоко сухое обезжиренное	95,00	1081,0	1026,9
Дрожжи прессованные	25,00	162,0	40,5
Соль	96,50	81,0	78,16
Итого сырья		7542,9	6637,5
Вода		3290,0	
Масса полуфабриката		10832,9	
Выход		10000	
Влажность не более 39,00%			
Кислотность не более 4,0 град.			

Рис. 2

[1]. Особенностью данной булочки служит добавление рисовой муки к пшеничной по соотношению 2 к 1 и присоединение такого сырья, как натуральные красители, а именно высушенная свёкла, куркума и шпинат.

1. «Сборник рецептов мучных кондитерских и булочных изделий для предприятий общественного питания»: Справочник. – СПб.: Троицкий мост, 2017. — С. 181.

Технология производства бараночных изделий на ОАО «Волжский пекарь»

Зограбян А.А. (бакалавр, 4 курс)

Научный руководитель: Ушаков С. И.

Бараночные и сухарные изделия занимают особое место среди хлебобулочных изделий благодаря своим вкусовым и питательным свойствам. Они могут храниться продолжительное время и выдерживают транспортировку на дальние расстояния. Для производства бараночных и сухарных изделий создают специализированные производства или строят отдельные цехи.

Для организации производства этих изделий с высокими показателями эффективности необходимо применять линии, позволяющие обеспечить высокую производительность труда.

На основании проделанного исследования можно сделать вывод, что бараночные изделия от «Волжского пекаря» имеют достаточно широкий ассортимент продукции. Он включает в себя более 17 видов сушек, бубликов и баранок.

ОАО «Волжский пекарь» - предприятие с богатой историей, впитавшей в себя вековые традиции тверского хлебопечения.

Сегодня «Волжский пекарь» - это современное, динамично развивающееся предприятие, чьи цеха оснащены автоматизированными линиями последнего поколения от лучших европейских и российских производителей.

В процессе проделанной работы выяснилось, что на предприятии ОАО «Волжской пекарь» установлены семь автоматизированных линий для производства бараночных изделий с общей мощностью 60 тонн в сутки.

1. ГОСТ 7.1-2003. «Библиографическая запись. Библиографическое описание. «Общие требования и правила составления»

Золотая фасоль как оригинальное сырье для производства продуктов питания и продовольственного сырья

Костюкова И.Н. (бакалавр, 3 курс)

Научный руководитель: к.х.н., доцент Рыжков Ю.А.

Фасоль золотистая или Маш относится к бобовым культурам. На территории Российской Федерации на данную продукцию действует межгосударственный стандарт ГОСТ ISO 5526 - 2015 [1]. Бобовые являются источником легкоусвояемого белка, фитоэстрогенов и ингибиторов протеазы. Бобы мунг широко применяются в азиатской кулинарии в отварном виде. Маш употребляют неочищенным, лущеным, как целиком, так и измельченным. Содержание крахмала и декстринов в бобах мунг составляет 42,4% [2]. Из бобов мунг производят многие продукты питания. Так же золотую фасоль используют и в непродовольственной сфере для изготовления косметических средств. К основным вопросам исследования относятся:

- обоснование выбора семян маша для производства макаронных изделий.
- разработка технологии изготовления макаронных изделий быстрого приготовления из муки бобов мунг.
- изучение физико-химических показателей после использования нового сырья и изменения традиционной методики.
- обоснование, что маш является перспективным сырьем для изготовления продуктов питания.

1. «Использование модифицированных семян маша в производстве функциональных продуктов питания»: диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук / Казымов, Сакит Акиф Оглы Краснодар, 2013; 131 с

2. ГОСТ ISO 5526 – 2015. Зерновые, бобовые и другие продовольственные зерновые культуры. Номенклатура. Межгосударственный стандарт.

Технология производства цельнозерновых хлебцев с добавлением различных видов клетчатки

Крылов А. А. (бакалавр, 4 курс)

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

В настоящее время всё больше людей становится заинтересованными в правильном питании, частью которого могут послужить хлебцы.

Хрустящий хлеб (также известный как хрустящие хлебцы), представляет собой сухой хрустящий хлеб, обычно в виде тонких проколотых кусочков прямоугольной или круглой формы. Хрустящие хлебцы приготавливают из теста на основе муки тонкого или грубого помола, непросеянной муки или муки из цельного зерна ржи, овса, ячменя или пшеницы, разрыхленного при помощи дрожжей, закваски или прочих разрыхлителей или сжатого воздуха. Содержание воды не превышает 10 мас. % [1].

При проведении пробных выпечек были выявлены оптимальные параметры для достижения наилучших характеристик готового изделия, такие как время, влажность и температура расстойки, температура и время выпечки продукта. Помещаем заготовки в расстойный шкаф температура которого равняется 35-40°C, влажность должна составлять 40%, а длительность расстойки 15 мин. Выпечка проходит при температуре 200°C, продолжительностью 12 мин.

1. Пояснения к Товарной номенклатуре внешнеэкономической деятельности Российской Федерации (ТН ВЭД России) (подготовлены ГТК РФ) (том 1, разделы I–VI, группы 1–29)

Характеристика пищевых продуктов по пищевой ценности

Кудряшова Е.Д. (бакалавр, 2 курс)

Научный руководитель: старший преподаватель Лихуша П.С.

Пищевые продукты разнообразны по химическому составу, перевариваемости, характеру воздействия на организм человека, это нужно учитывать при построении лечебных диет, а также при выборе оптимальных способов кулинарной обработки продуктов. Продукты питания определяет их пищевая, биологическая и энергетическая ценность [1].

Пищевая ценность – это совокупность свойств продукта, при наличии которых удовлетворяются физиологические потребности человека в необходимых веществах и энергии. Только разнообразное и гармоничное поступление пищевых продуктов, входящих в состав рациона питания, способно обеспечить человека необходимыми макро- и микронутриентами (белками, жирами, углеводами, витаминами, минеральными веществами) и энергией [2].

Только широкий продуктовый набор обеспечивает организм всеми пищевыми веществами. Расстройства питания организма нередко связаны с недостатком или избытком одних продуктов в ущерб другим. Учет этого особенно важен при составлении меню лечебного питания. При сопоставлении нужно принимать во внимание количество используемых в питании продуктов, национальные особенности питания и другие факторы [1].

1. Общая характеристика пищевых продуктов – URL: <http://msestra.ru/books/item/f00/s00/z0000018/st013.shtml> (дата обращения: 04.05.21). – Текст: электронный

2. Значение в лечебном питании пищевых продуктов и показатели их качества – URL: http://spravpit.liferus.ru/2_karakteristika.htm (дата обращения: 04.05.21). – Текст: электронный

Определение щелочности и массовой доли влаги различных видов овсяного печенья

Курилов Н.А. (бакалавр, 4 курс)

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

В настоящее время овсяное печенье пользуется широким спросом потребителей, и поэтому актуальным является необходимым установить, а соответствует ли овсяное печенье установленным требованиям в ГОСТ. Для эксперимента были выбраны два показателя качества: титрование и влагосодержание. В качестве образцов были взяты печенье «классическое» марок «Любятово», «КухМастер» и «Посиделкино».

По результатам эксперимента было установлено: что овсяное печенье «Класическое», таких марок как «Любятово», «КухМастер» и «Посиделкино» находятся в пределах норм щелочности установленных ГОСТ 5898-87 (не более 2.0 град.) А именно щелочность печенья «КухМастер» составляет 0.25 град., печенье «Любятово» составляет 0.31 град., печенья «Посиделкино» составляет 0.86 град.

Сущность метода определения массовой доли влаги высушиванием заключается в высушивании анализируемой пробы продукта при определенной температуре и вычислении потери массы по отношению к массе анализируемой пробы до высушивания [2].

По результатам исследования было выявлено: что в печенье «Класическое» марки «КухМастер» массовая доля влаги составила 4%, тогда как в печенье марок «Любятово» и «Посиделкино» массовая доля влаги составляет 2%

1. ГОСТ 5898-87 Изделия кондитерские. Методы определения кислотности и щелочности. (1989). 22 – 23 с.

2. ГОСТ 5900 – 2014 Изделия кондитерские Методы определения влаги и сухих веществ. (2014). 3 – 4 с.

Технология приготовления хлебобулочного изделия Пита с добавлением различных видов муки.

Машкин Л.О. (бакалавр, 4 курс)

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

Пита – хлеб и упаковка для блюд. Особенность этой выпечки – в ее пустой середине. В эту середину можно накладывать любые блюда из мяса, круп, овощей [1].

В экспериментальной части для приготовления Питы использованы пять видов муки: высшего сорта, 1 сорта, пшеничная цельно зерновая, пшеничная общего назначения и сорта Экстра. Произведен анализ сырья из пшеничной (традиционной) и кукурузной муки:

Пшеничная мука, высшего сорта	Кукурузная мука
В1 - 11,3 %,	В1 - 23,3 %
Витамином РР - 15 %	витамином РР - 15 %,
кремнием - 13,3 %	фосфором - 13,6 %
кобальтом - 16 %,	железом - 15 %,
марганцем - 28,5 %,	селеном - 19,1 %
молибденом - 17,9 %	

Как видно из таблицы, кукурузная мука содержит больше витамина В1, она богата фосфором, железом и селеном, в ней меньше примесей и она считается полезнее. Но дальнейшие исследования показали, что ее высокая влажность плохо влияет на качество и способ приготовления Питы.

При использовании муки высшего сорта и сорта Экстра Пита получается высококачественной (вкусной, не подгорелой, мягкая внутри и с корочкой снаружи, с большим карманом), не возникает сложности при приготовлении ее в домашних условиях, лепешка готовится быстро и получается вкусной, а главное универсальной в использовании.

Использование ферментов при производстве соковой продукции

Паршина М.Н (бакалавр ,2 курс)

Научный руководитель: старший преподаватель, Лихуша П.С

Ферменты играют важнейшую роль в технологии переработки пищевых продуктов растительного и животного происхождения. С реакцией ферментации связано размягчение плодов и овощей в результате протекания в них метаболических процессов, регулирующие собственными, естественно содержащимися в них энзимами [1].

Подбор энзим и способов их применения для получения оптимальных результатов, которые при переработке соков производится с учетом некоторых факторов.

Осветление сока предусматривает освобождение сока от взвесей и большей части коллоидных веществ.

При классических методах ферментативной обработки сырья ферменты используют «однократно», так они остаются в продукте или инактивируются. По данной причине созданы новые формы ферментных препаратов, используемых многократно. Они известны под названием иммобилизованных, связанных, фиксированных, матрицированных и т. д., но чаще всего применяется термин иммобилизованные ферменты [2].

1. Применение ферментов при переработке и консервировании пищевых продуктов – URL: <https://www.activestudy.info/primenenie-fermentov-pri-pererabotke-i-konservirovanii-pishhevyyh-produktov/> (дата обращения: 10.05.21). – Текст: электронный

2. Обработка ферментными препаратами – URL: <https://studfile.net/preview/10101181/page:15/> (дата обращения: 10.05.21). – Текст: электронный

Роль минеральных веществ в питании человека и регулировании обмена веществ

Платонова А.А (бакалавр, 2 курс)

Научный руководитель: старший преподаватель, Лихуша П.С

Минеральные вещества имеют очень большое значение для жизнедеятельности организма. Ежедневная потребность человека в минеральных веществах должна покрываться за счет разнообразного питания. При однообразной пище или резком ограничении пищевого рациона в организме могут возникнуть нарушения, связанные с недостатком тех или иных минеральных веществ.

В рациональном питании минеральные вещества имеют ничуть не меньшее значение, чем белки, жиры, углеводы и витамины. Так же, как и при недостатке основных пищевых веществ или витаминов, при дефиците минеральных веществ в организме человека возникают специфические нарушения, приводящие к характерным заболеваниям [1].

Обмен веществ – основное жизненное свойство организма, с прекращением обмена веществ наступает смерть. Обмен веществ включает два взаимосвязанных процесса: усвоение поступающих в организм веществ – ассимиляцию и их распад – диссимиляцию [2].

1. Минеральные вещества в продуктах питания – URL: <https://www.stud24.ru/merchandizing/mineralnye-veshhestva-v-produktah-pitaniya/150401-440273-page7.html> (дата обращения: 07.05.21). – Текст: электронный

2. Общие понятия об обмене веществ – URL: https://nsportal.ru/sites/default/files/2019/06/09/obmen_veshchestv.pdf (дата обращения: 07.05.21). – Текст: электронный

Лапша - как яркий представитель макаронных изделий

Разуева И.В. (бакалавриат, 4 курс)

Научный руководитель: доцент, к.воен.н. Ушаков С.И.

Макаронные изделия играют крайне важную роль в структуре питания населения в нашей стране. Это обусловлено достаточно большим количеством факторов, основными из которых, являются:

во-первых, относительная простота изготовления;

во-вторых, благодаря стабильной низкой цене, и, как правило, шаговой доступности, данный продукт достаточно популярен;

в-третьих, макаронные изделия, как правило, не имеют сложного состава, и могут быть обогащены достаточным количеством питательных веществ;

в-четвертых, они легко усваиваются и не обладают большим содержанием жира, и могут храниться достаточно длительное время при соблюдении условий хранения.

Сегодня ассортимент макаронных изделий достаточно широк. При этом выбор какие макароны выбрать остается за потребителем.

Вместе с тем, в современных условиях, с одной стороны, с появлением различных пищевых добавок идет постоянное совершенствование состава макарон, с другой стороны, увеличение масштабов постоянно требует совершенствования технологии их приготовления.

Лапша – это тоже макаронные изделия, длинные узкие полосы теста, делается из пшеничной или рисовой муки, замешивается на воде, но может содержать различные добавки, например, яйца или яичный порошок (яичная лапша).

Она имеет особый, отличающийся от других видов макаронных изделий, вкус, обладает высокой эластичностью, упругостью. Ее принято добавлять в различные салаты, супы, готовить на основе пасты многокомпонентные горячие блюда, а также сладкие десерты. Блюда на основе лапши, незаконно забытые в конце XX-го века, потихоньку завоевывают своего потребителя.

Как выбрать «шоколадные» конфеты

Рыбаков А.М. (бакалавриат, 4 курс)

Научный руководитель: доцент, к.воен.н. Ушаков С.И.

Шоколадные конфеты с начинками близки к шоколаду, но имеют фигурную форму и равномерный рисунок на поверхности. Они состоят из молочно-шоколадной оболочки (55-60%), внутри которой находится начинка (40-45%).

Основным способом различия видов шоколадных конфет является разделение по виду начинки. Существует несколько основных видов начинки для шоколадных конфет: грильяж, суфле, помадка, нуга, марципан и т.д.

Главными составляющими молочно-шоколадной оболочки являются какао-продукты. К ним относятся: какао-масло, какао-порошок, тертое какао. Последний ингредиент свидетельствует о качестве сладостей.

Существует ли ГОСТ для шоколадных конфет? Такой стандарт существует. Но сейчас производители нередко опираются на ТУ (технические условия). Такая хитрость позволяет им отклоняться от требований ГОСТа, меняя рецептуры.

При выборе шоколадных конфет потребители вынуждены надеяться на добросовестность производителя и изучать состав и делать самостоятельные выводы.

При изучении состава шоколадных конфет, как это ясно из названия, на первом месте в списке компонентов этих сладостей должно быть какао. Какао-масло стоит недешево. Вот почему многие производители заменяют его менее дорогими: пальмовое, соевое, подсолнечное, рапсовое масла.

Также нужно следить, не сэкономил ли производитель на натуральных ингредиентах. Нужно выбирать только качественные конфеты без присутствия в их составе растительных жиров. Если вы берете конфеты с банановой начинкой, то в их составе должен быть именно банан, а никак не банановый ароматизатор.

Генно-модифицированные организмы: «за» и «против» использования в продуктах питания

Смирнова Е.С. (бакалавр, 2 курс)

Научный руководитель: старший преподаватель Лихуша П.С.

Генная инженерия может иметь смысл для обеспечения лучших или более доступных лекарств, таких как инсулин, или для выращивания специальных бактерий, которые поглощают разливы нефти и превращают в биомусор. Зачем, однако, портить нашу еду? Ответ прост и довольно очевиден: укрепить жизненные циклы и урожайность нашей пищи. Наше население составляет 7 миллиардов человек, и, вероятно, оно достигнет 9 миллиардов до середины века. Урожайность и безопасность продовольствия, безусловно, являются одними из важнейших вопросов для поддержания жизни такого большого числа людей. Повышение долговечности и урожайности наших продуктов питания с помощью генетической модификации (ГМ), возможно, является стратегией для удовлетворения потребностей этой численности населения. В настоящей работе представлены основные преимущества генно-модифицированных организмов (ГМО) в продуктах питания и их недостатки. Также освещается вопрос об отношении потребителей к этой отрасли. И, несмотря на то, что дебаты о ГМО идут активно и у этой технологии нет недостатка в противниках, научное сообщество в значительной степени объединилось и пришло к выводу, что потребление ГМ-продуктов больше не опасно и есть традиционно отобранные культуры.

1. Генно-модифицированные организмы и их воздействие на экологию / Новикова А.Л.: Экология и безопасность в техносфере: современные проблемы и пути решения: сборник трудов, 2015. 108-111с

Классификация пищевых продуктов

Смирнова И.В. (бакалавр, 2 курс)

Научный руководитель: старший преподаватель Лихуша П.С.

Классификация необходима в любой отрасли науки для упорядочивания и систематизации свойств и явлений. Для продовольственных товаров классификация играет важную роль вследствие большого разнообразия и многочисленности изучаемых объектов.

Согласно ГОСТ Р 51074, к пищевым продуктам относится продукция животного, растительного, минерального и биосинтетического происхождения, предназначенная для употребления людьми в пищу в свежем или переработанном виде. Сюда же входят любые напитки, жевательная резинка, а также те или иные вещества, применяемые при изготовлении, подготовке и переработке пищевых продуктов.

В основу классификации товаров могут входить такие признаки, как происхождение, химический состав, степень обработки сырья, назначение товаров и т.д. Так, в зависимости от происхождения пищевые продукты можно подразделить на продукты животного, растительного и минерального происхождения; по химическому составу – на белковые, жировые, углеводные, минеральные; по степени обработки – на сырые, полуфабрикаты, готовые изделия; по назначению – на пищевые и вкусовые [2].

1. <https://zakonguru.com/zpp/tovary/prodovolstvie.html>
2. Кременевская М.И. Товароведение и экспертиза продовольственных товаров: Учеб.-метод. пособие. – СПб.: Университет ИТМО, 2015. – 97 с.

Термический анализ ацетилсалициловой кислоты

Алексеева А.В. (магистрант, 2 года обучения)

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

Дифференциальный термический анализ дает возможность определять наличие разложения или загрязнения лекарственных веществ при хранении, прогнозировать сроки годности, определять однородность партии продукции, изучать явления полиморфизма, контролировать чистоту лекарственных веществ [1].

Методом ДСК были зарегистрированы термограммы ацетилсалициловой кислоты (ЗАО «Медисорб»). Поведение исследуемых соединений в процессе нагревания было изучено на приборе для синхронного термического анализа STA 449 F3. Все испытания проводились в стандартных условиях; скорость нагрева 10°C/мин в статической атмосфере воздуха, тигли алюминиевые. Из приведенных в таблице 1 данных следует, температура плавления имеют более высокие значения по сравнению со стандартной температурой плавления [1], что говорит о наличии примесей, имеющих более высокие значения температуры плавления (табл.1). Количество примесей колеблется от 0,8 до 3,8%. В связи с этим встает вопрос о дополнительной очистке исследуемых образцов.

Таблица 1 Температуры плавления ацетилсалициловой кислоты

Исследуемое вещество	Температура плавления, °С	Температура плавления, °С [2]
Ацетилсалициловая кислоты (ЗАО «МЕДИСОРБ»)	137,6	135,0

Список литературы

1. Лузин А.А. Применение физико-химических методов для стандартизации и контроля качества лекарственных веществ, относящихся к карбоновым кислотам и их производным: автореф. дис. на соиск. учен. степ. канд. фарм. наук. – М., 2008. -24 с.
2. Пельман В.И. Краткий справочник химика. – М.: Химия, 1964. – 624 с.

Изучение комплексов переходных металлов с основаниями шиффа

Алиева Б.М.(бакалавр, 4 курс)

Руководитель: И.Н. Веселов

Полиядерные комплексы переходных металлов являются объектами пристального внимания различных исследователей из-за уникальных особенностей строения такого рода молекул и, как следствие, набора необычных химических и физических свойств. Так, в последние годы значительное количество работ посвящено синтезу и изучению химического поведения полиядерных соединений с карбоксилатными и тиолатными мостиковыми группами, моделирующих фрагменты активных центров металлосодержащих ферментов. Полиядерные соединения с высокоспиновыми магнитными центрами оказываются весьма перспективными с точки зрения создания нового типа материалов - молекулярных магнетиков .

При этом комплексы, содержащие два или несколько металлических ионов в полости одного макроциклического лиганда в непосредственной близости друг к другу, особенно интересны, поскольку одинаковые или разные атомы металла в них могут согласованно взаимодействовать с различными молекулами-субстратами, обеспечивая их координацию и активацию. Сам по себе макроциклический лиганд в этой ситуации выполняет несколько функций: избирательно экранирует металлоцентры от спонтанных взаимодействий с другими молекулами, задает геометрические параметры металлоостова, регулирует электронные характеристики металлофрагментов и сам по себе потенциально может принимать участие в формировании супраструктур за счет возникновения различного рода невалентных взаимодействий. Выполнение этих условий весьма важно для эффективной работы катализаторов, поэтому неудивительно, что подобного рода «металлосодержащие блоки» присутствуют в природных ферментах.

Анализ минерального состава муки различных сортов и регионов

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

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

Целью нашего исследования было установление зависимости содержания биологически важных металлов в муке от содержания этих металлов в почве регионов произрастания пшеницы. Среди биологически важных металлов особая роль принадлежит железу, кальцию, магнию, натрию и калию. Нами проанализирована мука, полученная из пшеницы Ставропольского края, Тульской и Вологодской областей (Табл. 1).

Таблица 1. Анализ пшеничной муки высшего сорта различных регионов

Ис-комый металл	Содержание металлов, мг/100 г муки		
	Вологодская обл.	Тульская обл.	Ставропольский край
Ca	120,5±0,8	16,3±0,3	17,0±0,3
Mg	11,2±0,3	28,1±0,4	137,8±0,7
K	7,2±0,3	11,6±0,3	17,2±0,5
Na	18,7±0,4	29,0±0,4	40,8±0,5
Fe	0,7±0,1	1,4±0,1	1,5±0,1

Результаты исследования свидетельствуют о том, что мука из ставропольской пшеницы наиболее богата магнием, калием и натрием. И почва там хорошо обеспечена макро- и микроэлементами. Меньше всего ключевых питательных элементов содержится в муке из пшеницы Вологодской области, при аномально высоком содержании кальция.

1. Агрономическая характеристика основных типов почв Европейской части Нечерноземной зоны России: Учебное пособие / О.В. Чухина, А.Н. Налиухин, С.М. Хамитова, Ю.М. Авдеев. — Вологда-Молочное, ВГМХА, 169 с.

Анализ содержания свинца в придорожной почве

Голованов И.В. (специалист, 5 курс)

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

Целью нашего исследования было установление содержания свинца в придорожной почве.

Определение содержания свинца в анализируемых пробах осуществляли спектрофотометрическим методом анализа.

Для работы использовали спектрофотометр СФ-2000. Калибровочный график строили для окрашенного комплекса свинца с индикатором ксиленоловым оранжевым. Пробы почвы обугливались, обрабатывались азотной кислотой для экстракции металла с последующим осуществлением процесса комплексообразования свинца с ксиленоловым оранжевым.

Полученные результаты определения содержания свинца в образцах почвы, взятых на расстоянии 50 – 200 м на наветренной и подветренной сторонах автодороги с поверхности и на глубине 0,1 м. сведены в табл.1

Таблица 1. Результаты определения содержания свинца в придорожной почве, мг/кг почвы.

Подветренная сторона. Верхний слой	Подветренная сторона. Глубина 0,1 м	Наветренная сторона. Верхний слой	Наветренная сторона. Глубина 0,1 м	Расстояние от дороги, м
115,45±0,05	73,19±0,05	113,93±0,05	68,1±0,05	50 м
48±0,05	29,21±0,05	29,83±0,05	27,71±0,05	100 м
23,95±0,05	17,93±0,05	19,52±0,05	14,08±0,05	150 м
12,23±0,05	11,71±0,05	11,98±0,05	11,22±0,05	200 м

Сравнение полученных результатов по содержанию свинца в придорожной почве с ПДК_{рв} =32 мг/кг почвы [1] показывает, что гарантированное содержание свинца ниже ПДК наблюдается в 150 м от дороги.

1. Мотузова Г.В. Экологический мониторинг почв / Г.В. Мотузова, О.С. Безуглова. – М. : Академический Проект ; Гаудеамус, 2007. – 237 с.

Исследование электрохимических свойств сенсоров с откликом на антигистаминные препараты

Грачев Е.М. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Потенциометрические методы, в частности, с использованием ионоселективных электродов (ИСЭ) отличаются простотой и экспрессностью анализа, применение этого метода для определения антигистаминных препаратов не описано в литературе, поэтому целью настоящей работы явилось создание ИСЭ для определения препаратов, изучения потенциометрических характеристик ИСЭ и разработка методики ионометрического определения антигистаминных препаратов.

В работе использовали : Супрастин, Цетрин и Фексадин фармакопейной чистоты, фосфорно-молибденовую (ФМК) и фосфорновольфрамную (ФВК) кислоты ч.д.а., дибутилфталат (ДБФ) ч.д.а., поливинилхлорид (ПВХ) марки С-70 х.ч. Электроактивные вещества (ЭАВ) получали добавлением к растворам препаратов растворов гетерополикислот (ФВК и ФМК) до полного выпадения осадка.

Пластифицированные мембраны имели следующий состав (в масс. %): ПВХ-35, ДОФ-60, ЭАВ-5. ИСЭ перед применением вымачивали в 0,05 М растворе лекарственного препарата.

Электроды обладали хорошими потенциометрическими характеристиками. Интервал линейности электродной функции находится в промежутке 1-4 рС, крутизна электродной функции близка к теоретическому значению, время отклика составляло 5-10 с. Определение препаратов в готовых лекарственных формах показало работоспособность созданных ИСЭ.

1. Мембранные электроды. / Н. Лакшминараянах / ред. А. А. Белюстина. Л.: Химия, 1990. 360 с.

Усовершенствование ферментационно- экстракционной технологии получения биосредств для растениеводства

Ершов Н.А. (специалист, 1 курс)

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

Одной из перспективных технологий получения жидких биосредств содержащих питательные вещества для растений является ферментационно-экстракционная технология получения жидких биосредств.

В базовой технологии в качестве исходного сырья выступают навоз крупно рогатого скота, торф и зола. Основная часть микроорганизмов содержится в навозе. Их численность составляет 372,2 млн. клеток/г в итоге получается жидкое биосредство со следующими характеристиками: микроорганизмы использующие органические формы азота $17,2 \cdot 10^8$ млн КОЕ/мл, минеральные формы азота $1,3 \cdot 10^9$ млн КОЕ/мл, каталазная активность 0,19 см³ O₂/мл/мин, дегидрогеназная активность 0,46 мг ТФФ/мл/24 ч.

Усовершенствование технологии заключалось в использовании другого сырья, обладающего большей биогенностью: навоз крупного рогатого скота, был заменен куриным пометом. Использование куриного помета способствовало более активному протеканию ферментационного процесса и в готовом стабилизированном продукте ферментации суммарная численность доминирующих азот-трансформирующих микроорганизмов стала выше ~ в 3 раза (1308,6 млн. клеток/г против 452,3 млн. клеток/г в случае применения навоза) на фоне соблюдения санитарной чистоты готового продукта – микроскопические грибы и энтеробактерии отсутствовали. После проведения дальнейшей экстракции жидко-фазное биосредство, полученное по усовершенствованной технологии, превосходило жидкофазное биосредство, полученное по базовой технологии.

Спектрофотометрическое исследование комплексообразования меди(2) с некоторыми аналитическими реагентами

Зверькова О.А. (бакалавр, 4 курс)

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

Медь относится к числу тех металлов, которые обладают хромофорными свойствами, поэтому среди многочисленных фотометрических методов определения меди имеются как методы, основанные на использовании окрашенных реагентов с хромофорными группами, так и методы, в которых применяют бесцветные реагенты.

В работе использовали : Сульфат меди, Эриохром красный Б, Мурексид, Глицинтимоловый синий, гидроксид аммония, хлоруксусную кислоту и уротропин. Растворы получали путем смешивания соли меди и реагентов в специальной концентрации рассчитанной для данного опыта. Кислотность растворов устанавливали титрованием реагентов.

Вещества имели следующую концентрацию: реагенты (эриохром красный Б, мурексид и глицинтимоловый синий) имели концентрацию 0,01 М, сульфид меди 0,1 М. Буферные растворы готовили концентрацией 0,01 М.

Оптическую плотность рассчитывали на спектрофотометре СФ-2000. Длину волны выбирали от 400-800 нм, кювету брали с $\epsilon=19,999$.

Опыт показал, что наилучшую способность образовывать комплекс с медью показал – мурексид. Так как светопоглощение мурексида с медью имеет максимум при длине волны 480 нм, в отличии от раствора меди без реагента, у которого светопоглощение происходит при длине волны 520 нм.

1. Бабко А.К. Металл–индикаторный метод изучения комплексов в растворе. – Киев, 1996.

Титриметрический анализ ацетилсалициловой кислоты различных производителей

Зуева А.С. (магистрант, 1-го года обучения)

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

Одной из важнейших проблем отечественного здравоохранения в наше время – контроль качества лекарственных препаратов. Несоответствие заявленной и фактической дозировки активного вещества может повлечь за собой серьёзные последствия при лечении пациентов.

В качестве объекта исследования был выбран аспирин четырёх различных производителей, содержащий ацетилсалициловую кислоту в качестве активного вещества. Количественное определение ацетилсалициловой кислоты проводили методом алкалиметрического титрования [1]. Результаты исследования приведены в таблице 1.

Таблица 1

Результаты количественного определения ацетилсалициловой кислоты

Алкалиметрический анализ	Масса ацетилсалициловой кислоты, мг	
	Теоретическая масса	Практическая масса
АО «ПФК Обновление», Россия	500,00	495,73
ОАО «Фармстандарт- Лексредства», Россия	500,00	499,04
«Байер Биттерфельд ГmbH», Германия	300,00	295,05
«ФП Оболенское», Россия	50,00	46,85

В результате проведенного анализа можно сделать вывод о соответствии заявленного и фактического количества активного вещества в одной, что подтверждает подлинность данных препаратов.

1. Государственная фармакопея XIV. Ацетилсалициловая кислота. – М: МЗ РФ, 2018. – С.3413.

Потенциометрический сенсор с непосредственным отсчетом на основе поли-о-толуидина

Крылов А.А. (молодой ученый)

Руководитель: В.Г. Алексеев

Ранее было показано, что для плёнок поли-о-нафтиламина наблюдается электромеханический эффект, состоящий в изменении их геометрических размеров в процессе электрохимического окисления-восстановления. На электромеханические свойства плёнок влияют рН и допирующие ионы. В данной работе исследовалась возможность использования данных эффектов для создания потенциометрического сенсора на основе полупроводникового полимера. Для этого на платиновую подложку длиной 30 мм и шириной 3 мм методом ЦВА был нанесен слой поли-0-нафтиламина толщиной 0,5 мм. Исследования отклика полученного сенсора с использованием модельных смесей $\text{Sn}^{2+}/\text{Sn}^{4+}$ и $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}$ и потенциометрического титрования, рис. 1. Контроль потенциала среды осуществлялся с помощью иономера И-160 с использованием платинового и хлорсеребряного электродов.

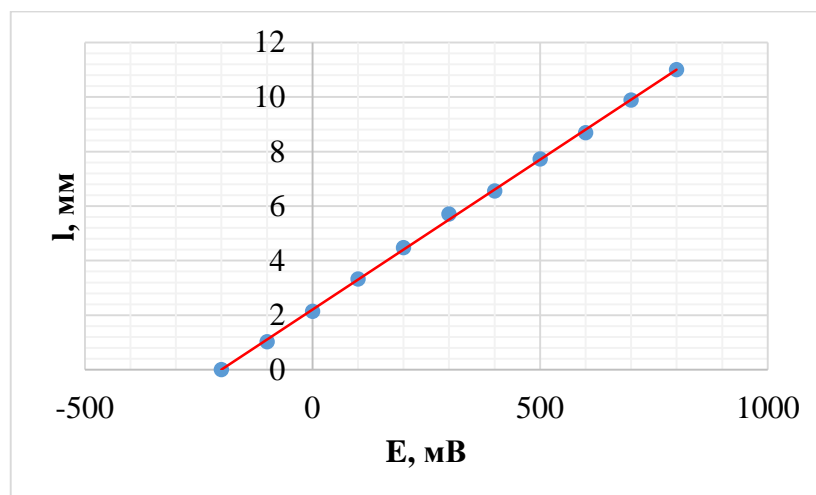


Рис. 1 Зависимость отклонения ЭХА от окислительно-восстановительного потенциала среды

Полученный сенсор обладает высокой химической стойкостью и не разрушается в процессе титрования. Единственным ограничением является превышение 1100 мВ, из-за постепенного разрушения полимера.

Твердые комплексы самария и гадолиния с цефазолином

Крюков Т.В. (молодой ученый), Скобин М.И. (молодой ученый)

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

Взаимодействием водных растворов хлорида самария и гадолиния и натриевой соли цефазолина (NaCzl) были получены и выделены в твердом виде комплексы цефазолина. Полученные соединения исследованы методом ИК-спектроскопии.

Цефазолин – антибиотик цефалоспориновой группы относящийся к первому поколению, представляет собой антибиотик кислотного типа и содержит одну карбоксильную группу [1]. В медицине используется в виде натриевой соли NaCzl.

Комплексы были получены в виде осадков в результате взаимодействия в нейтральном водном растворе хлоридов неодима и европия и натриевой соли цефазолина в мольном соотношении 1:4 затем были высушены на воздухе при комнатной температуре.

Данные ИК-спектроскопии

Образец	Отнесение колебаний		
	$\nu(\text{C}=\text{O})$ Амид	$\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)$ (асимм)	$\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)$ (симм)
NaCzl	1668	1601	1389
SmCzl	1682	1602	1426
GdCzl	1685	1604	1425

Исследование полученных образцов методом ИК-спектроскопии показало, что в процессе получения комплексов химическая структура антибиотиков не претерпела изменений. При этом отмечается смещение полос поглощения валентных колебаний $\text{-C}=\text{O}$ бета-лактамной и амидной $\text{-C}=\text{O}$, что можно расценивать как координацию этих групп с трехвалентными ионами этих металлов.

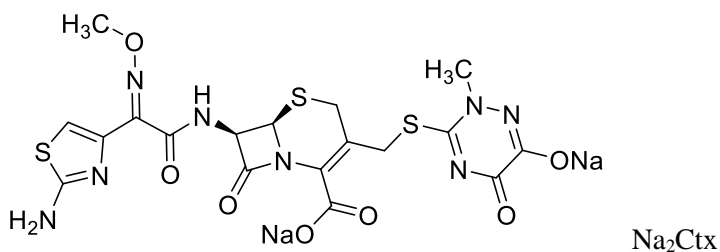
1. Алексеев В.Г. // Хим.-фарм. журн. 2010. Т.44, № 1. С. 16–26.

Ионные ассоциаты цефтриаксона с гетерополикислотами

Куденко П.Е. (бакалавр, 4 курс)

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

Ионные ассоциаты цефалоспоринового антибиотика цефтриаксона с фосфорномолибденовой, кремнемолибденовой и фосфорновольфрамовой кислотами получены в виде осадков при взаимодействии водных растворов динатриевой соли цефтриаксона (Na_2Ctx) и гетерополикислот. Осадки промыты на фильтре холодной водой и высушены при $80\text{ }^\circ\text{C}$. Элементный анализ полученных ассоциатов был проведен методом электронно-зондового рентгеноспектрального анализа с помощью энергодисперсионного спектрометра INCA Energy 350, используемого в качестве аналитической приставки к растровому электронному микроскопу JEOL JSM-6610LV. Состав полученных ассоциатов: $\text{H}_7[\text{P}(\text{Mo}_2\text{O}_7)_6]\cdot 3\text{Ctx}$, $\text{H}_7[\text{P}(\text{W}_2\text{O}_7)_6]\cdot 3\text{Ctx}$, $\text{H}_8[\text{Si}(\text{Mo}_2\text{O}_7)_6]\cdot 4\text{Ctx}$ – определён по соотношению содержания серы и фосфора, либо серы и кремния в атомных процентах.



Образец	Результаты анализа в атомных %, среднее значение из четырёх измерений
$\text{H}_7[\text{P}(\text{Mo}_2\text{O}_7)_6]\cdot 3\text{Ctx}$	P 0.53, S 4.85, Mo 6.56
$\text{H}_7[\text{P}(\text{W}_2\text{O}_7)_6]\cdot 3\text{Ctx}$	P 0.55, S 4.97, W 6.69
$\text{H}_8[\text{Si}(\text{Mo}_2\text{O}_7)_6]\cdot 4\text{Ctx}$	Si 0.41, S 5.01, Mo 4.78

Полученные ассоциаты могут быть использованы в качестве электродно-активных веществ в химических сенсорах для определения цефтриаксона.

Анализ физико-химических свойств высокотемпературных органических теплоносителей

Ларионова О. (специалист, 5 курс)

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

Теплоносители – это вещества, участвующие в процессе передачи тепла. В качестве теплоносителей используют металлы и их сплавы, перегретую воду, водяной пар, органические жидкости и т. д.

Высокотемпературные органические теплоносители (ВОТ) обладают рядом преимуществ перед остальными теплоносителями: широким рабочим диапазоном, высокой плотностью, низкой коррозионной активностью и т. д.

Цель исследования – сравнение физико-химических свойств и выбор рационального высокотемпературного органического теплоносителя.

Результаты исследования представлены в таблице 1.

Таблица 1. Физико-химические свойства ВОТ

Показатель	Название высокотемпературного органического теплоносителя	
	Дифенильная смесь	Гидрированные терфенилы
Внешний вид	прозрачная, однородная бесцветная жидкость без механических примесей, имеет запах герани	прозрачная, однородная жидкость желтого цвета без механических примесей со слабым специфичным запахом
Плотность, г/см ³	1,063 ± 0,001	1,016 ± 0,001
Температура начала кристаллизации, °С	+10 ± 1,2	—
Температура застывания, °С	+2 ± 1	-32 ± 1
Температура вспышки в закрытом тигле, °С	116 ± 0,4	157 ± 0,4
Температура кипения, °С	256 ± 0,3	360,5 ± 0,4
Кинематическая вязкость, мм ² /с	4,02	118,25
Динамическая вязкость, мПа*с	4,27	120,14

Основываясь на данные экспериментов, можно сделать вывод, что дифенильная смесь – более рациональный ВОТ, чем гидрированные терфенилы.

Термокаталитический сенсор для течеискателей хладагентов на основе гетерополисоединения типа Андерсона в матрице диоксида олова

Радин А.С. (аспирант, 3-го года обучения)

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

Существует актуальная проблема по обнаружению микроутечек (на уровне $1 \text{ см}^3/\text{год}$) фреонов и их заменителей из бытовых холодильников, а также бытовых и автомобильных кондиционеров.

Для обнаружения столь малых утечек хладагента требуются высокочувствительные сенсоры, устойчивые к воздействию влаги, обладающие малыми размерами и энергопотреблением, чтобы иметь возможность встраиваться в гибкие щупы переносных течеискателей. В качестве основы чувствительного элемента подобного сенсора могут выступать гетерополисоединения (ГПС), в частности – $\text{K}_3[\text{CoW}_6\text{O}_{24}\text{H}_6]$. Гетерополисоединения такого строения термически устойчивы, а также обладают способностью к обратимым многоэлектронным и многопротонным переходам при взаимодействии с анализируемыми веществами, что сопровождается значительным изменением их электропроводности.

Термокаталитический сенсор был изготовлен введением в нейтральную термопасту смеси измельчённых порошков диоксида олова и выбранной ГПС. Полученная смесь нанесена на поликоровую пластину с взаимопроникающими гребенчатыми электродами, после чего пластина установлена на полупроводниковый нагреватель. Сенсор реагирует с хладагентами при 70°C , меняя при этом свою электропроводность. Разработанный сенсор обладает высокой чувствительностью, что позволяет обнаруживать утечки фреонов (к примеру, марок 12 и 22) из микротрещин устройств холодильной техники. Относительный невысокий нагрев сенсора обеспечивает энергосбережение аккумуляторной батареи и долговременный срок службы. На основе данного сенсора были разработаны действующие модели течеискателей.

Определение щелочных и щёлочноземельных металлов в природных водах

Ракитская Н. С. (бакалавр, 4 курс)

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

В настоящее время для анализа химических элементов в минеральных водах используют экспрессный и точный метод пламенной фотометрии.

В настоящей работе анализ был проведён на пламенном фотометре. Для серий стандартных растворов путём введения пробы в пламя горелки было определено напряжение. По результатам измерений построен градуировочный график в координатах «ток – концентрация», который позволяет соотнести ток для исследуемого раствора с известной концентрацией стандартной серии. На основе полученных данных были найдены концентрации определяемых элементов.

Для серий стандартных растворов в таблице представлена характеристика.

Эле- мент	Длина волны, нм	Чувствительность, мг/мл
Li	670,8	0,01
Na	589 – 589,6	0,001
K	766,5 – 769,9	0,01
Ca	422,2	0,06
Mg	285,2	5
Sr	460,7	0,05

Методом фотометрии пламени определено содержание натрия, калия, лития, стронция, кальция, магния, проведена оценка токсичности природных вод Андреапольского района Тверской области.

Влияние электрогидродинамических эффектов второго рода на интенсификацию процессов концентрирования РЗЭ.

Салазкин Н.С. (бакалавр, 4 курс)

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

Редкоземельные металлы(РЗЭ) играют важную роль в современном мире [1]. Несмотря на то, что РЗЭ присутствуют во многих минералах, их средняя концентрация в земной коре достаточно низка. Поэтому поиск путей эффективного концентрирования РЗЭ имеет важное научное и практическое значение.

В настоящей работе было исследовано влияние электрогидродинамических эффектов второго рода, возникающих в окрестности ионитов [2]. на скорость сорбции РЗЭ ионообменными смолами.

В исследованиях использовали катионит марки КУ 2-8, р-ры нитрата лантана и формиата церия, платиновые электроды, генератор переменного тока. Для определения концентраций исследуемых растворов применяли спектрофотометрические и комплексонометрические методы анализа.

Эксперименты проводили в статическом режиме - без влияния на систему ионит – р-р РЗЭ переменного электрического поля, и в динамическом режиме – воздействуя на систему переменным электрическим полем.

Согласно полученных результатов было показано, что влияние переменного электрического поля приводит к увеличению скорости сорбции РЗЭ в 7-10 раз, в зависимости от параметров электрического поля (частота, напряжение), по сравнению со статическими условиями сорбции.

1. . Кудреватых Н.В. Физика металлов. Редкоземельные металлы и их соединения / Н.В. Кудреватых, А.С. Волегов. — М.: Юрайт, 2019. — 197 с.

2. . Гамаюнов Н. И., Мантров Г. И., Мурцовкин В. А. // Коллоидн. Журн. 1992. Т. 54. № 1, 168

Термическое и спектроскопическое исследование среднего комплекса лютеция с гепарином

Скобин М.И. (молодой учёный), Крюков Т.В. (молодой учёный)

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

Комплексообразование в системе $\text{LuCl}_3 - \text{Na}_3\text{Hep} - \text{H}_2\text{O}$ исследовали методом рН-метрического титрования. Раствор, содержащий $1.26 \cdot 10^{-4}$ моль LuCl_3 и $\{\text{Na}_3\text{Hep}\}_n$ на фоне 0.15 моль/л титровали 0.05 моль/л раствором HCl . При этом принимали допущение, что каждое мономерное звено макромолекулы гепарина ведет себя как обычный низкомолекулярный анион.

Константы протонирования рассчитывали из усредненной кривой, используя следующую модель равновесий: $\text{H}^+ + \text{OH}^- \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}$; $\text{Hep}^{3-} + \text{H}^+ \rightleftharpoons \text{HHep}^{2-}$; $\text{Lu}^{3+} + \text{Hep}^{3-} \rightleftharpoons \text{LuHep}$. В результате расчета было получено значение $\lg\beta([\text{LuHep}]) = 4.22 \pm 0.03$. Расчеты моделей химических равновесий и определение соответствующих констант выполнены с помощью комплекса вычислительных программ New DALSFЕК (КСМ Soft, 2000).

Твердый комплекс $[\text{Lu}(\text{H}_2\text{O})_x\text{Hep}]_n$ был получен смешением растворов хлорида лютеция и натриевой соли гепарина в эквивалентных количествах при температуре 37°C . После центрифугирования и высушивания до 110°C было получено порошкообразное вещество бледно-желтого цвета. Методом синхронного термического анализа установлено наличие четырех молекул внутрисферной воды.

ИК спектры записывали на приборе Bruker Equinox 55 в диапазоне $450 - 7500 \text{ см}^{-1}$ для образцов в виде таблеток с KBr . Исследование комплекса методом ИК-спектроскопии показало смещение полос комплекса $[\text{Lu}(\text{H}_2\text{O})_4\text{Hep}]_n$ относительно спектра $\{\text{Na}_3\text{Hep}\}_n$ у гидроксильной ($\nu(\text{O}-\text{H})$) от 3443 до 3436 см^{-1} , карбоксилатной ($\nu_s(\text{C}=\text{O})$) от 1424 до 1440 см^{-1} , сульфатной и аминосульфатной групп ($\nu_{\text{as}}(\text{S}=\text{O})/\nu_s(\text{S}=\text{O})$) от $1235/1028$ до $1229/1035 \text{ см}^{-1}$.

Применение имидазолинов и четвертичных солей на основе жирных кислот таллового масла для разделения двойных неводных азеотропных систем

Ю.И. Софронова (аспирант, 3 год обучения)

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

Цель работы – использовать имидазолин и имидазолиновые соли для разделения двойных азеотропных систем. В данной работе рассматривается возможность применения 1-гидроксиэтил-2-алкенил-2-имидазолина и имидазолиновых солей на его основе – хлорида и тетрафторбората 1-гидроксиэтил-2-алкенил-3-бензил-2-имидазолина для разделения распространенных неводных двойных азеотропных смесей ацетон–метанол, метилацетат–метанол, этилацетат–этанол и хлороформ–метанол. Использование двух анионов имидазолиновой соли объясняется тем обстоятельством, что тетрафторборат-анион является одним из распространенных анионов ионных жидкостей имидазолиевого типа.

В работе использован промышленный продукт – 1-гидроксиэтил-2-алкенил (или «таллил»)-2-имидазолин (EnvaCor 2057, Ingevity (США)), полученный на основе жирных кислот таллового масла (поэтому алкенильный или «жирный» остаток кислот этого типа упрощенно назван в данной работе «таллилом») на основе которого были синтезированы соответствующие имидазолиновые соли. После абсолютизации растворители хранили над молекулярными ситами. Смеси соответствующих составов готовили гравиметрическим методом.

Наибольшая эффективность разделения с точки зрения минимальной концентрации разделяющих агентов обнаружена в отношении системы ацетон-метанол. Однако известно, что ионные жидкости имидазолиевого типа показывают большую эффективность применения с точки зрения минимальных концентраций для разделения рассматриваемых азеотропных систем на компоненты [5].

В ходе работы было установлено незначительное влияние аниона в имидазолиновой соли на эффективность разделения смесей с точки зрения минимальной концентрации соли. Электролитная модель NRTL была использована для

корреляции экспериментальных данных в системах на основе имидазолиниевых солей.

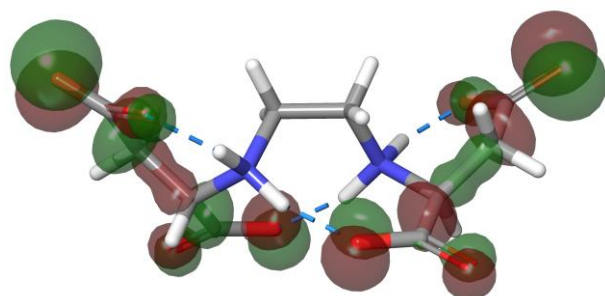
Расчёт энергии молекулярных орбиталей комплексонов диаминного ряда

Торопыгина К.О. (бакалавр, 4 курс)

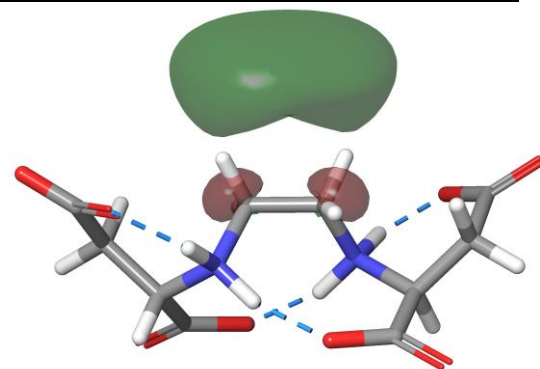
Научный руководитель: профессор, д.х.н. Алексеев В.Г.

Методом DFT / MN15-L / 6-31G**++ рассчитана энергия НОМО и LUMO изомерных комплексонов: этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТА, H₄edta) и *SS*, *RS* и *RR* оптических изомеров этилендиаминдиянтарной кислоты (ЭДДЯК, H₄edds). Расчёт проведён для цвиттер-ионных форм комплексонов, характерных для растворов, рН которых близок к нейтральной среде. Результаты приведены в таблице. Видно, что для ЭДДЯК характерны меньшие значения ΔE, чем для ЭДТА. Таким образом, расчёт показывает, что для активации цвиттер-иона ЭДДЯК и перевода его в нестабильное возбуждённое состояние требуется меньшая энергия, чем для цвиттер-иона ЭДТА. Это согласуется с экспериментальными данными о меньшей химической устойчивости ЭДДЯК по сравнению с ЭДТА, что делает её экологически менее опасным реактивом.

Ион	E _{НОМО} , eV	E _{LUMO} , eV	ΔE = E _{LUMO} – E _{НОМО}
H ₂ Edta ²⁻	-0,12	4,32	4,44
<i>RR</i> -H ₂ Edds ²⁻	0,05	4,02	3,97
<i>RS</i> -H ₂ Edds ²⁻	0,15	3,99	3,84
<i>SS</i> -H ₂ Edds ²⁻	0,05	4,02	3,97



RS-H₂Edds²⁻, HOMO



RS-H₂Edds²⁻, LUMO

Секция органической химии

Анализ некоторых 3-dметаллов в сточных водах гальванического производства

Федорова А.А. (бакалавр, 4 курс)

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

Цинк и железо относятся к 3-dметаллам и активно используются в гальванических производствах для нанесения защитных покрытий на металлические изделия. Сточные воды таких производств могут загрязнять окружающую среду. Для контроля сточных вод гальванического производства Тверского завода «Ритм» на содержание цинка и меди нами применялись методы комплексонометрического титрования с 8-оксихинолином и Трилоном Б. Результаты определения содержания цинка и меди в сточной воде гальванического производства представлены в таблице.

Объем пробы, мл	Масса металла в пробе, мг		Количество эквивалентов металла, 10^4	
	Цинк	Медь	Цинк	Медь
100	0,898±0,007	-	2,750	-
100	-	0,716±0,008	-	2,256

Значения предельно-допустимых концентраций для воды культурно-бытового назначения (ПДК) по цинку [1] и меди [2] имеют одинаковые значения, составляющие 1 мг/л. В анализируемой пробе воды содержание металлов превышает ПДК практически на порядок. Поэтому воды гальванического производства Тверского завода «Ритм» при сбросе в общую канализацию требуют десятикратного разбавления.

1. ГОСТ 18293-72. **Методы определения содержания свинца, цинка, серебра**
2. ГОСТ 4388-72. **Методы определения массовой концентрации меди**

Ик-спектроскопический анализ афобазола

Чеботарева Е.С. (специалист, 5 курс)

Руководитель: Баранова Н.В.

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

В качестве объекта исследования был выбран афобазол (ФАРМСТАНДАРТ-ЛЕКСРЕДСТВА, ОАО (Россия)). В качестве метода анализа использовали Ик-спектроскопию в ближней области. На спектрах афобазола можно выделить следующие характеристические полосы поглощения: $-\text{CH}_2$ группа, $-\text{CH}_3$ группа, $-\text{C}=\text{N}$ группа, вторичные амины (табл. 1).

Таблица 1 Характеристические полосы поглощения афобазола

Функциональные группы	Полосы поглощения	
	Теоретические значения [19,20]	Афобазол «Фармстандарт-Лексредства»
$\nu (\text{C} - \text{N})$	1230-1020	1202
$\nu (\text{C} = \text{N})$	1657-1641	1656,38
$\nu \text{Ar-O-Alk}$	1180-1050	1167
$\nu(-\text{CH}_2-)$	2926	2917,18
$\delta (-\text{CH}_2-)$	1470-1430	1426
$\nu(=\text{N} - \text{H})$	3400-3300	3342,78

Поглощение в области 1657-1641 характерное для валентных колебаний $\text{C}=\text{N}$ группы, сопряженной с ароматическими радикалами, проявляется в виде полос 1660 см^{-1} . Наличие N-H -группы в афобазоле определили по полосам 3337 см^{-1} , характерным для валентных колебаний аминогруппы. Полосы поглощения 1086 см^{-1} , принадлежат валентным колебаниям группы Ar-O-Alk .

По результатам проведенного исследования можно сделать вывод, что исследуемый образец является подлинным.

Физико-химическое определение подлинности парацетамола

Шачнева К.С. (бакалавр 4 курс)

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

Контроль над качеством лекарственных веществ имеет огромное значение и является актуальной проблемой для здравоохранения России. Появление фальсифицированных лекарственных препаратов спровоцировала конкуренция на фармацевтическом рынке и ряд других факторов. Недоброкачественная продукция может нанести вред здоровью, либо не оказать никакого терапевтического эффекта.

В качестве объекта исследования был выбран нестероидный жаропонижающий парацетамол. Спектрофотометрический анализ проводился на спектрофотометре SPECORDM 40 в УФ области. Методом удельного коэффициента поглощения было найдено содержание п-ацетаминофена в лекарственных средствах [1]. ИК-спектроскопический анализ проводился на ИК-Фурье спектрометре Bruker в области $400-4000\text{ см}^{-1}$.

В ходе спектрофотометрического анализа в УФ области было выяснено, что максимальное поглощение парацетамола происходит при длине волны равной 257 нм. В полученных ИК-спектрах можно выделить характеристические полосы поглощения: ν -CH₃ 2926 см^{-1} , σ $1470-1430\text{ см}^{-1}$, $1175-1165\text{ см}^{-1}$, $1380-1370\text{ см}^{-1}$; ν -C=O $1820-1650\text{ см}^{-1}$; ν -NH $3500-3100\text{ см}^{-1}$, σ $1580-1490\text{ см}^{-1}$; ν Ar-NH-R $1350-1280\text{ см}^{-1}$; ν -OH $3636-3150\text{ см}^{-1}$, σ $1450-1200\text{ см}^{-1}$, $<700\text{ см}^{-1}$; ν ароматического кольца $3080-3030\text{ см}^{-1}$, $1625-1575\text{ см}^{-1}$, σ $1225-1175\text{ см}^{-1}$, $1125-1090\text{ см}^{-1}$, $860-800\text{ см}^{-1}$. На основании сравнительного анализа ИК-спектров подтвердили наличия моноклинной формы (I) п-ацетаминофенола во всех образцах.

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

Синтез и свойства ионных жидкостей с металлатным анионом

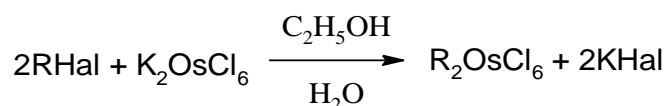
Андреева О. О. (специалист, 5 курс)

Научный руководитель: д. б. н., доцент, Левина А. С.

Металлосодержащие ионные жидкости представляют собой особый подкласс ионных жидкостей, объединяющие свойства ионных жидкостей с магнитными, оптическими или каталитическими свойствами, эти соединения представляют собой твердые вещества с высокими температурами плавления.

Ионные жидкости (ИЖ), содержащие комплексы переходных металлов, особенно палладия и платины, представляют особый интерес, поскольку обладают высокой каталитической активностью, широко изучены и используются в органическом синтезе [1].

В данной работе были синтезированы ИЖ с комплексным гексахлоросмат-анионом. Синтез проводили по следующей схеме в среде полярных растворителей:



Строение полученных ионных жидкостей было подтверждено методами ИК- и электронной спектроскопии. Был проведён гидрофильно-липофильный тест и получены снимки электронного микроскопа для некоторых комплексов с целью визуализации кристаллической структуры соединений. По результатам исследований заключены выводы о влиянии природы катиона на взаимодействие в ионной паре K^+A^- по данным электронной спектроскопии.

1. Чабаква А. К. Ионные жидкости в органическом синтезе / Успехи современного естествознания / А. К. Чабаква, Е. В. Щепетова, Н. М. Абдурахманова. – М.: Наука, 2018. – 216-226 с.

Химический состав наперстянки пурпурной

Барсукова Е.В. (бакалавр, 4 курс)

Научный руководитель: доцент, к.б.н., Левина А.С.

Наперстянка пурпурная служит природным источником кардиостероидов, широко применяемых в современной фармакотерапии и не имеющих синтетических аналогов. Фармакологические свойства наперстянки определяют сердечные гликозиды, стероидные сапонины, флавоноиды, дубильные вещества и др. Сердечные гликозиды подразделяются на полярные и неполярные. В связи с этим интересен вопрос о природе экстрагента.

Для извлечения кардиотонических гликозидов использовалась *спирто-хлороформная* смесь (1:3). Присутствие сердечных гликозидов в вытяжке подтверждено рядом качественных реакций, основанных на образовании сопряженных ненасыщенных систем, дающих интенсивно окрашенные продукты, изменяющие окраску во времени. Наличие стероидного цикла подтверждено реакцией Либермана-Бурхарда. При использовании уксусного ангидрида и концентрированной серной кислоты (5:1) развивалось красно-оранжевое окрашивание, переходящее в зеленое и синее. Положительный результат получен и при использовании трихлоруксусной кислоты (реакция Розенгейма): в присутствии гликозидов появляется фиолетовое окрашивание, переходящее в синее. Отличительной особенностью кардиостероидов является наличие 5-членного ненасыщенного лактонного кольца. При использовании насыщенного раствора пикриновой кислоты (реакция Балье) появляется оранжево-красное окрашивание в течение 5 минут.

Использование вышеперечисленных экстрагентов проверено практически и может быть применено в дальнейших исследованиях.

1. Сердечные гликозиды. / Б.Е. Вотчал, М.Е. Слущкий. М.: Медицина, 1993.

Изучение свойств органических фосфатов

Буренина А. Ю. (бакалавр, 4 курс)

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

Органические фосфаты являются сложными эфирами фосфорной кислоты и спиртов, этоксиатов спиртов, этоксиатов алкилфенолов эфиров этоксилированных аминов.

Органические фосфаты применяются в различных областях промышленности, но наибольший интерес представляет использование их в качестве полимерной добавки в огнезащитные материалы.

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

Наиболее доступным лабораторным методом получения является синтез на основе одно- или двухосновных спиртов и оксида фосфора P_2O_5 .

Данный метод мы использовали в работе. В качестве первого компонента взяли 1,4-бутандиол (3 моль) и провели реакцию с безводным P_2O_5 (2 моль) при температуре 45°C и выдержали в течение 4-х часов [1].

После проведения реакции, для подтверждения огнезащитных свойств, мы нанесли наше вещество на лист бумаги и подожгли. Поверхность, где было нанесено наше вещество осталось нетронуто огнем, а остальная часть бумаги сгорела.

1. Аслин Дейвид Чарлз патент. Ru (11) 2 370 503(13) с2, 2009

Четвертичные соли аминов с комплексным металлатным анионом

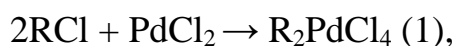
Деревцова А. С. (специалист, 5 курс)

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

Ионные жидкости с анионами, содержащими комплексы переходных металлов, представляют интерес как магнитные и магнитореологические жидкости, поскольку они содержат достаточно высокую концентрацию металлических центров. Они обладают низкой летучестью, хорошей электрической проводимостью, кроме того их гидрофильность легко контролировать, варьируя катион и анион.

Поэтому целью данной работы было синтезировать ионные жидкости – тетрахлолопалладаты с катионами различной природы и изучить их физико-химические свойства.

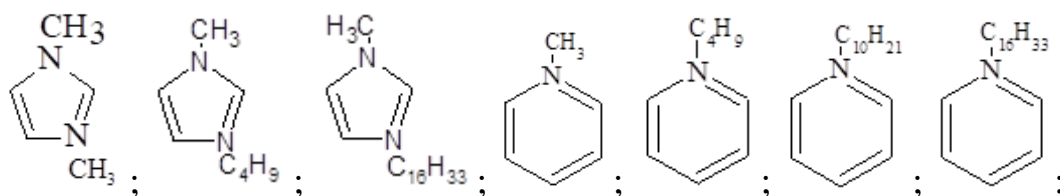
Комплексные соли палладия получены двумя способами, с целью выявления наиболее эффективной, по следующей схеме:



Где R = $(C_2H_5)_3NCH_2C_6H_5$; $(CH_3)_3NC_{16}H_{33}$; $(C_5H_5)NC_{10}H_{21}$.



Где R = $(C_4H_9)_4N$; $(CH_3)_4N$; $(C_2H_5)_3NCH_2C_6H_5$; $(CH_3)_3NC_{16}H_{33}$;



Где Hal = Cl; Br; I.

Полученные соединения охарактеризованы с помощью физико-химических констант, УФ- и ИК- спектроскопии.

Изучение пенообразующей способности алкилсульфосукцинатов

Каленова Н. С. (специалист, 5 курс).

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

Алкилсульфосукцинаты являются солями моно- и диэфиров янтарной кислоты, обладают широким комплексом полезных свойств. Они выступают в роли хороших пенообразователей, не токсичны, имеют способность значительно менять поверхностное натяжение воды, обладают высокой биоразлагаемостью.

В данной работе были синтезированы алкилсульфосукцинаты на основе малеинового ангидрида и гидроксилсодержащих соединений: додеканола, неонола-9,10, неонола-9,12 и лаурета-7, по известной методике [1]. Для полученных веществ были изучены пенообразующая способность и устойчивость образуемой ими пены.

Пенообразующая способность синтезированных веществ возрастает при увеличении концентрации раствора, причем для веществ на основе додеканола и лаурета-7 при малых концентрациях она равна нулю, но с увеличением концентрации они показывают наибольшие значения пенообразования, чем алкилсульфосукцинаты на основе неонола-9,10 и неонола-9,12. Это можно объяснить тем, что значение пенообразующей способности увеличивается при уменьшении углеводородного радикала. Устойчивость пены, синтезированных веществ растет с увеличением концентраций исследуемых растворов. Наибольшей устойчивостью обладает пена алкилсульфосукцината на основе лаурета-7. Алкилсульфосукцинаты неонола-9,10 и неонола-9,12 показывают схожие значения. Наименьшей устойчивостью обладает алкилсульфосукцинат на основе додеканола.

1. Ланге К.Р. Поверхностно-активные вещества: синтез, свойства, анализ, применение / К. Р. Ланге, под науч.ред Л.П. Зайченко. – СПб.: Профессия, 2007. – 240 с.

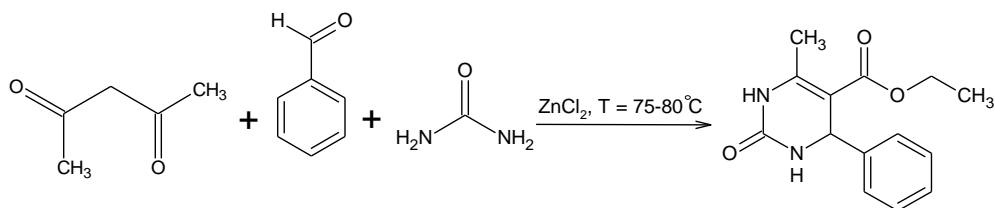
Трехкомпонентные реакции в синтезе гетероциклических соединений

Коломыйцева О. А. (бакалавр, 4 курс)

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

Одним из основных путей развития органической химии является разработка удобных, одностадийных методов синтеза сложных органических соединений, в частности гетероциклических соединений, которые могут проявлять высокую биологическую активность. Трехкомпонентные реакции – это реакции, протекающие при непосредственном смешении трех исходных соединений, причем конечная структура должна содержать фрагменты всех исходных соединений. Примером таких реакций является реакция Биджинелли.

В данной работе были получены гетероциклические соединения по реакции Биджинелли. Схема классической реакции Биджинелли:



В работе исходными соединениями являлись ацетоуксусный эфир, ацетилацетон, бензальдегид, мочеви́на. В качестве катализаторов были использованы хлорид цинка и ионные жидкости, ранее синтезированные на кафедре органической химии. В результате были получены 3,4-дигидроприми́дин-2-оны-4 – твердые вещества желтого цвета, определены их температуры плавления, строение и состав полученных соединений подтверждены данными ИК-спектроскопии, исследовано влияние катализаторов – ионных жидкостей на выход продуктов.

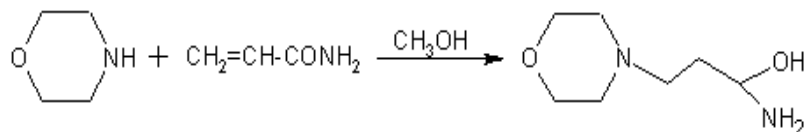
1. Избранные методы синтеза и модификации гетероциклов, ТОМ 2 / Под редакцией Карцева В. Г. – Москва: IBS PRESS, 2003. – 566 с.

Получение N-алкилпроизводных морфолина

Костромина А.А. (бакалавр, 4 курс)

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

Морфолин выбран нами в качестве аминной компоненты для реакции получения его N-алкилпроизводных, в связи с тем, что как известно из источников литературы, они проявляют высокую физиологическую активность и используются в качестве анальгетиков, анестетиков. Четвертичные соли таких производных, содержащие длинноцепочечные радикалы представляют интерес как катионные ингибиторы коррозии металлов. Также они входят в состав различных алкалоидов, таких как анабазин, морфин, бобелин, трофин и др. Одним из способов получения производных морфолина является присоединение к нему производных акриловой кислоты. В данном случае используется акриламид.



Компонентами реакции являются морфолин, акриламид и метанол в качестве растворителя. Реакцию проводят при комнатной температуре. На первой стадии реакция сопровождалась выделением теплоты. Далее в течение суток реакционная смесь приобрела красный цвет. Выход продукта составил 75-80%, после перекристаллизации продукт представлял собой белые кристаллические вещества с четкой температурой плавления, растворимые в воде. Состав подтвержден совпадением температуры с литературными данными.

1. Гайле А.А. Морфолин и его производные: Получение, свойства и применение в качестве селективных растворителей / А.А. Гайле, В.Е. Сомов, Г.Д. Залищевский. – СПб.: Химиздат, 2007. – 332 с.

Влияние функциональных добавок на свойства водно-дисперсионных полиакриловых красок

Кружков С.М. (бакалавр, 4 курс)

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

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

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

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

Значение МТП определяли нанесением однородного слоя полимерной дисперсии, содержащей различные количества коалесцента, на поверхность с контролируемым градиентом температуры. Минимальное количество коалесцентов устанавливали по отсутствию трещин при формировании пленок. Полученные пленки характеризуются при этом различными значениями блеска, что связано с различной шероховатостью поверхности.

В ходе работы было выявлено, что коалесцент тексанол является наиболее эффективным, так как он снижает МТП, придает хорошие значения твердости пленки и её блеска.

Получение азогидразонов на основе пропандиовой кислоты

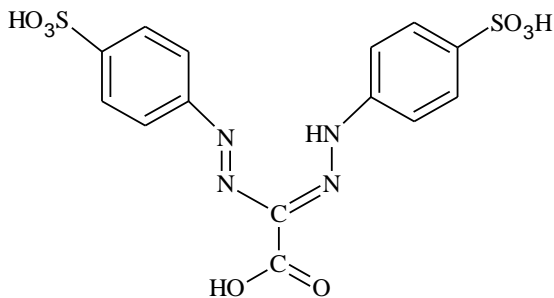
Кудряшова Е.А. (бакалавр, 4 курс)

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

Азогидразоны муравьиной кислоты – формазаны, содержат структурный фрагмент, в котором π -электроны кратной связи и p -электроны неподеленной пары атомов азота обуславливают донорные свойства и их способность образовывать различные производные: металлокомплексы, фотохромные формазаны, формазансодержащие полимеры, красители и др. Формазаны широко применяются как комплексообразователи, используются при изучении ферментативных процессов в клетках. Образуют с ионами переходных металлов ярко окрашенные хелатные комплексы, которые применяются как свето- и термостойкие красители для полиэфирных и полиамидных волокон, а также шерсти. Представленная работа посвящена получению азогидразонов на основе пропандиовой кислоты.

Методом синтеза формазанов является реакция азосочетания арилдиазониевых солей с гидразонами альдегидов и α -кетокислот (в данном случае диазосочетание сопровождается декарбоксилированием), а также с соединениями, содержащими активированную электронакцепторными заместителями метиленовую группу, при этом на начальном этапе диазотирования образуются соответствующие гидразоны, далее диазотирующиеся с потерей уходящей группы до формазанов. В данной работе взаимодействием сульфанилдиазония хлорида с пропандиовой (малоновой) кислотой получен

1,5-сульфанил-3-карбоксиазогидразон.



Определены температура плавления и растворимость, с помощью ИК-спектроскопического анализа подтверждено строение полученного азогидразона.

Синтез 1-(4-карбоксифенил)содержащего формазана

Мелиева Ш. Б. (специалист, 5 курс)

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

Формазаны широко применяются в органическом синтезе и аналитической химии. Это обусловлено наличием в них сопряженной системы, состоящей из *азо-* и *гидразонной* групп, и соединяющего их атома углерода. Благодаря чему, молекулы формазанов являются конформационно и таутомерно подвижными.

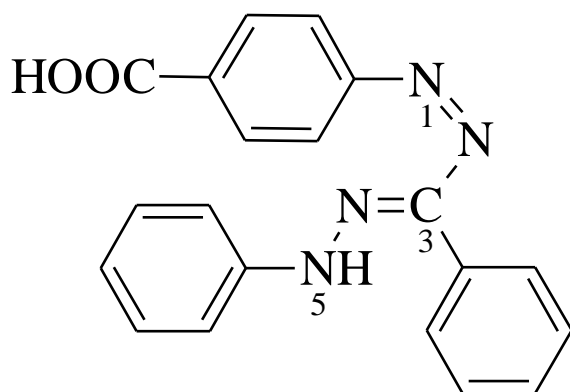


Рис. 1. 1-(4-карбоксифенил)-3,5-дифенилформазан

Представленная работа посвящена получению 1-(4-карбоксифенил)-3,5-дифенилформазана.

Синтез 1-(4-карбоксифенил)-3,5-дифенилформазана проведен в три стадии. Стадия 1 – получен фенилгидразон бензальдегида взаимодействием

солянокислого фенилгидразина с бензальдегидом в уксуснокислой среде (рН=1). Стадия 2 – синтезирован хлорид *n*-карбоксифенилдиазония постепенным введением щелочного раствора соли *n*-аминобензойной кислоты и водного раствора нитрита натрия в охлажденный до 0-5°C раствор соляной кислоты. Стадия 3 – получен 1-(4-карбоксифенил)-3,5-дифенилформазан реакцией азосочетания щелочно-спиртового раствора фенилгидразона бензальдегида с синтезированной ранее солью диазония при 0-3°C при интенсивном перемешивании смесей в течении 2 часов и постепенным прибавлением к ним карбоната натрия для поддержания рН среды до 9-10.

Соединение 1-(4-карбоксифенил)-3,5-дифенилформазан – мелкокристаллическое вещество светло-оранжевого цвета, $T_{пл.} = 151-152^{\circ}\text{C}$. Структура синтезированных соединений подтверждена методом ИК-спектроскопического анализа, исследованы растворимость и хелатирующая способность формазана.

Экологически-безопасные незамерзающие стеклоомывающие жидкости

Капустина С.С. (магистрант, 2 года обучения)

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

Использование специальной жидкости для смачивания и очистки лобового стекла автомобиля в зимнюю пору стало привычным явлением для подавляющего большинства современных водителей. Однако, проблемы качества, надежности и безопасности использования таких жидкостей все еще остаются нерешенными.

В настоящее время в качестве средств для очистки стекол используют стеклоомыватели на водно-спиртовой основе (этанол и изопропанол) с добавлением поверхностно-активных веществ, антикоррозионных добавок, солубилизаторов и комплексонов, способствующих растворению добавок в водно-спиртовой среде. Как и ко всем продуктам, к омывающей жидкости предъявляют определенные требования качества и относительной безопасности.

Прогрессивным направлением является создание современных не спиртовых экологически-безопасных незамерзающих жидкостей. В качестве незамерзающих компонентов использовались метиловый эфир пропиленгликоля, а также водный раствор диметилсульфоксида. В качестве поверхностно-активных веществ в работе использовались синергические смеси сульфонол – неонол АФ 9-12 подобранные в соответствии с параметром взаимодействия смешанных бинарных систем. Свойства экспериментальных растворов были исследованы по известным методикам, приведенным в ГОСТах.

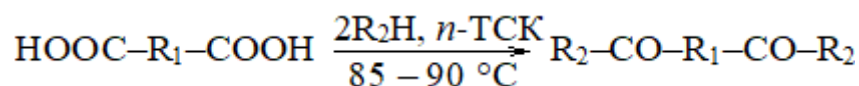
Димерные поверхностно-активные вещества на основе многоосновных кислот

Околота Д. А. (специалист, 5 курс)

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

Димерные поверхностно-активные вещества (ПАВ) обладают свойствами, отличающимися от свойств мономерных ПАВ. Они имеют низкие значения критической концентрации мицеллообразования (ККМ) в растворах; лучше понижают поверхностное натяжение воды; в растворе могут образовывать разные морфологические структуры; обладают большей солубилизирующей способностью, чем мономерные ПАВ. Все эти свойства димерных ПАВ позволяют их применять в производстве лакокрасочных материалов, а также использовать в качестве эмульгаторов, ингибиторов коррозии и диспергаторов.

В работе были синтезированы димерные ПАВ — диэфиры, на основе многоосновных кислот: адипиновой и глутаровой. В качестве веществ, содержащих ОН-группы были использованы синтанол АЛМ-7, неонол АФ-6,9 и неонол АФ-9,10. Процесс протекает по схеме:



$\text{R}_1 = (\text{CH}_2)_3$ или $(\text{CH}_2)_4$, $\text{R}_2 = \text{C}_{12}\text{H}_{25}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_7\text{O}-$ или $\text{C}_9\text{H}_{19}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{O}- (\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_n-$.

В качестве катализатора была использована *n*-толуолсульфо кислота (*n*-ТСК).

Строение полученных веществ было подтверждено данными ИК-спектроскопии.

Для синтезированных веществ были исследованы коллоидно-химические свойства их водных растворов: поверхностное натяжение, пенообразующая способность и устойчивость пены, размеры молекул. Так как, полученные соединения являются неионогенными веществами, то были опеределены температуры помутнения их растворов (кроме диэфиров неонола АФ-6,9) с присутствием и без присутствия электролита – хлорида натрия.

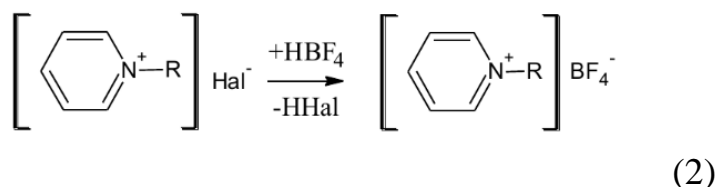
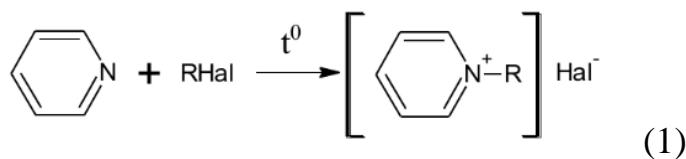
Синтез и изучение физико-химических свойств тетрафторборатов N-алкилпиридиния

Рассказова Н.Ю. (магистрант, 1 год обучения)

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

Ионные жидкости (ИЖ) представляют собой класс солей, являющихся жидкостями с низкими температурами плавления ($<100^{\circ}\text{C}$). Преимущество использования заключается в связи с их уникальными физико-химическими свойствами: сочетание свойств как растворителей, так и катализаторов. Большой интерес представляет изучение влияния структуры органического катиона и природы аниона в составе ионной жидкости на свойства их растворов.

В данной работе были получены четвертичные соли N-алкилпиридиния по реакции нуклеофильного замещения (схема 1). По реакции метатезиса (схема 2) получены тетрафторбораты N-алкилпиридиния, с различной длиной алкильных заместителей: CH_3 , C_4H_9 , C_8H_{17} , $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$. Полученные соединения представляют собой жидкости или низкоплавкие твердые вещества белого или кремового цветов. Хорошо растворимы в полярных органических растворителях (спирт, ацетон, ацетонитрил), плохо растворимы в воде. Все синтезированные соединения охарактеризованы данными ИК-спектроскопии.



Для оценки температурного интервала, в котором возможно использование полученных ионных жидкостей была изучена их термическая стабильность в воздушной атмосфере в температурном интервале $25\text{-}500^{\circ}\text{C}$. Установлено, что все тетрафторбораты стабильны до $200\text{-}250^{\circ}\text{C}$ и разлагаются в несколько стадий в интервале $230\text{-}350^{\circ}\text{C}$.

Исследование коллоидно-химических свойств смесей анионных поверхностно-активных веществ с алкилполиглюкозидами

Скачкова Д. М. (бакалавр, 4 курс)

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

Алкилполиглюкозиды проявляют хорошие моющие свойства, очищающие и смачивающие, обладая при этом мягким дерматологическим действием, благодаря чему пригодны и активно используются в различных косметологических средствах.

Полученный в работе модифицированный алкилполиглюкозид с входящим в его состав алкилкарбоксилатом, обладающим свойством анионного поверхностно-активного вещества (ПАВ), сохраняет моющую способность и обеспечивает меньшую концентрацию ввода ПАВ в смеси.

Синтез осуществляли при температуре 90 °С, пониженном давлении и введении катализатора, который кроме сильной неорганической кислоты, содержал алкилкарбоновую кислоту, которая является анионным поверхностно-активным веществом (ПАВ), обладает термостабильностью, устойчивостью к окислительным агентам, кислотам и щелочам, проявляет превосходные эмульгирующие свойства. В качестве жирных спиртов были выбраны гексиловый и октиловый спирты. После завершения реакции катализатор нейтрализовали щелочью до pH 9-11, а избыток не прореагировавшего спирта удалили в тонкопленочном испарителе.

Строение алкилполиглюкозидов было подтверждено данными ИК-спектроскопии. Для полученных соединений были определены поверхностное натяжение, пенообразующая способность их водных растворов, критическая концентрация мицеллообразования, краевой угол и работа смачивания поверхности.

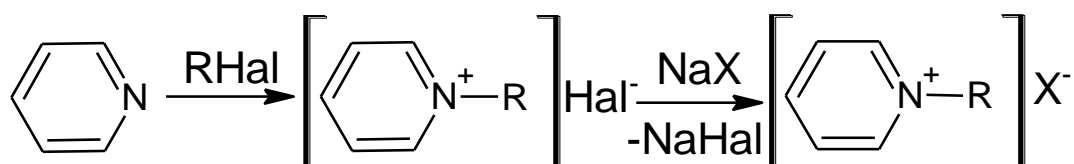
Синтез ионных жидкостей на основе четвертичных солей N-алкилпиридиния с неорганическими анионами и их свойства

Суратова Е.С. (бакалавр, 4 курс)

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

Ионные жидкости (ИЖ) – это органические соли, находящиеся в жидком состоянии при температурах ниже 100°C. Изменение структуры катиона или аниона в ИЖ влечет за собой изменение ее физико-химических свойств, в частности на их термические свойства [1].

Нами были синтезированы ИЖ с гексафторфосфат- и тетрафторборат-анионами и катионом N-алкилпиридиния с различной длиной алкильных заместителей (CH₃-, C₄H₉-, C₆H₅CH₂-, C₈H₁₇-, C₁₀H₂₁-). Схема реакций представлены ниже. ИЖ растворимы в полярных органических растворителях (спирт, ацетон, ацетонитрил), плохо растворимы в воде. Все синтезированные соединения охарактеризованы данными ИК-спектроскопии. Чистота подтверждена ТСХ. Определены основные физико-химические константы. Также определена электропроводность разбавленных растворов ИЖ в ацетонитриле.



где **R**: CH₃-, C₄H₉-, C₆H₅CH₂-, C₈H₁₇-, C₁₀H₂₁-

Hal: I, Br. **X**⁻: BF₄⁻, PF₆⁻.

1. Петров, Б. И. Современное состояние экстракционного метода : учебное пособие / Б. И. Петров, А. Е. Леснов. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 356 с.

Поверхностно-активные вещества в нефтехимии

Чистякова М.М. (специалист, 3 курс)

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

С 2017 года в нефтехимии особую актуальность приобрело применение поверхностно-активных веществ (ПАВ) для повышения производительности добычи нефти и увеличения срока использования скважин.

При закачивании в скважину концентрированного раствора ПАВ, растворителем является нефть, межфазное натяжение снижается, нефть вытесняет воду из призабойной зоны. Использование скважины после данной операции доступно уже через 2-3 суток. Концентрации применяемых растворов ПАВ-от 0,5 до 5%.

В основном применяются анионоактивные, неионогенные ПАВ на основе спиртов и гликолей: сульфанол НП-3, ДС-РАС; смесь натриевых солей алкилсульфокислот с алкильными остатками, содержащими 12-18 атомов углерода; нейтрализованный черный контакт (НЧК), представляющий собой соли водорастворимых сульфокислот. Исследования их свойств и применение изучалось ещё в СССР.

В настоящее время ООО «Газпром» занимается разработкой и внедрением многокомпонентных твёрдых ПАВ: ТПАВ-07, ТПАВ-04, ТПАВ-С-3, ТПАВ-С, ТПАВ-Л, ТПАВ-ВАС, а также жидких: ЖПАВ-С, ЖПАВ-НК, ЖПАВ-1.

При выборе растворов ПАВ учитывается минерализация продукта и коррозионная устойчивость оборудования.

Использование ПАВ позволяет увеличить добычу нефти до 30-60 % на месторождении. Развитие данной области продолжается, необходимость производства доступных и эффективных ПАВ крайне велика.

Электропроводность растворов ионных жидкостей синтезированных на основе четвертичных солей N-алкил-2-метилпиридина

Шекина К.Д. (специалист, 5 курс)

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

В настоящее время ионные жидкости (ИЖ) находят широкое применение в качестве экстрагентов, растворителей, в синтезе электропроводящих полимеров, в частности, ионные жидкости в смеси с молекулярными растворителями находят применение в качестве каталитических сред, электролитов для батарей и суперконденсаторов.

В настоящей работе в качестве объектов исследования были выбраны ИЖ с катионом N-алкил-2-метилпиридиния и различными неорганическими анионами (Cl^- , Br^- , BF_4^- , PF_6^-). Длина алкильного заместителя варьировалась от C_1 до C_8 . Для изучения поведения ИЖ в растворах нами проведено кондуктометрическое исследование растворов ИЖ в ацетонитриле. На основе кондуктометрических измерений, были построены зависимости эквивалентной электропроводности (ЭП) от концентрации. Были рассчитаны константы ионной ассоциации (K_a), предельные молярные ЭП (λ_0), а также энергия Гиббса ассоциации ΔG . Для расчета этих параметров по кондуктометрическим данным для коэффициентов активности и электропроводности использовалось второе приближение теории Дебая-Хюккеля и уравнение Ли-Уитона.

Установлено, что зависимость ЭП растворов ИЖ в ацетонитриле от концентрации схожа с таковой для водных растворов сильных электролитов. Значения констант ассоциации ИЖ в ацетонитриле зависят от размера и природы, как катиона, так и аниона в ИЖ. Наиболее ассоциированной ИЖ из изученных нами является хлорид N-бензил-2-метилпиридиния. Галогениды четвертичного N-алкил-2-метилпиридиния обладают наибольшими значениями эквивалентной электропроводности по сравнению с гексафторфосфатами и тетрафторборатами.

Получение 1,3-дифенил-5-аминокарбонилфармазана

Шемякина Д.В. (специалист, 5 курс)

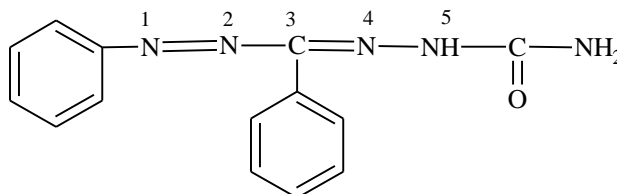
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Егорова И.Ю.

Формаза́ны (азогидразоны) - это соединения, содержащие соответствующую цепочку атомов ($-N=N-C=N-NH-$), в котором π -электроны кратной связи и p -электроны неподеленной пары электронов атомов азота определяют донорные свойства и их способность образовывать различные производные. В зависимости от исходных веществ, производные могут быть окрашены в различные цвета: от красного до оранжевого или темно-фиолетового цвета.

Формаза́ны широко изучаются благодаря их легкой доступности, разнообразной химической способности, широкому спектру биологической активности и широкому спектру применения.

Формаза́ны (азогидразоны) используются в качестве красителей, лигандов в реакциях комплексообразования и в качестве аналитических реагентов, где их глубокий цвет делает хорошими индикаторами окислительно-восстановительных реакций. Представленная работа посвящена получению аминокарбонилфармазана на основе семикарбазида.

Получение фармазана происходило в два этапа. На первой стадии получили семикарбазон бензальдегида взаимодействием бензальдегида с хлористоводородным семикарбазидом. На второй стадии реакцией взаимодействия семикарбазона бензальдегида и фенилдиазоний хлорида получили 1,3-дифенил-5-аминокарбонилфармазан, структура которого приведена ниже:



Синтезированное соединение представляет собой кристаллическое вещество коричневого цвета. Строение подтверждено данными ИК- спектроскопического анализа и температурой плавления.

Ионные жидкости на основе тетрахлолопалладат-аниона

Юлмасов Г.С. (аспирант, 1-го года обучения)

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

Включение металлов в состав ионных жидкостей (ИЖ) позволяет придать им свойства экологически чистых растворителей, катализаторов и реагентов для органического синтеза [1]. Палладий является катализатором для множества органических реакций и его включение в состав ИЖ позволяет получить высокоэффективные катализаторы [2].

В настоящей работе были синтезированы 2 типа ИЖ – с аммониевыми и пиридиниевыми катионами с тетрахлолопалладат анионом, измерена их температура плавления и записаны ИК-спектры в диапазоне 4000-400 см⁻¹. Кроме того, были проведены квантово-химические расчеты полученных соединений в программе Jaguar методом теории функционала плотности (DFT) с использованием функционала M06-2X и базиса LACVP**+.

Измеренные температуры плавления позволяют отнести полученные соединения к классу ионных жидкостей. ИК-спектры помогают подтвердить, что получены искомые соединения. Квантово-химические расчеты позволили получить примерную геометрию молекул, дающую возможность судить о наличии водородных связей H---Cl, которая может быть проверена по смещению полос в ИК-спектрах; также были рассчитаны энергии молекул, значения которых позволяют понять, какое расположение ионов является более выгодным

1. Lin I. J. B., Vasam C. S. Metal-containing ionic liquids and ionic liquid crystals based on imidazolium moiety //Journal of organometallic chemistry. – 2005. – Т. 690. – №. 15. – С. 3498-3512.

2. Song H. et al. Evaluation of ionic liquid soluble imidazolium tetrachloropalladate pre-catalysts in Suzuki coupling reactions //Catalysis Today. – 2012. – Т. 183. – №. 1. – С. 172-177.

Секция физической химии

Синтез наночастиц серебра с помощью водных экстрактов листьев крапивы двудомной

Афонькин Н.С. (специалист, 5 курс)

Научный руководитель: С. Д. Хижняк

Растения способны взаимодействовать с катионами благородных и тяжелых металлов, при этом происходит восстановление катиона металла до нейтральных атомов с последующей их агрегацией. В качестве биовосстановителей выступают биологически активные вещества – метаболиты, содержащиеся в клетках и тканях растений. Цель данной работы – изучение воздействия биоактивных веществ, содержащихся в образцах крапивы двудомной, на синтез наночастиц серебра (НЧС) с помощью методов спектроскопии УФ-видимого диапазонов и динамического светорассеяния. Растения были собраны в 2020 г. в шести районах г. Твери: “СНТ” Светлый, парк Победы, площадь Гагарина, ЖК «Volga Life», микрорайон Мигалово, “СНТ” Рябинки. Синтез НЧС осуществили добавлением раствора AgNO_3 ($1 \cdot 10^{-2}$ М) в водные экстракты растений. Формирование НЧС контролировали через разные интервалы времени – 5 мин, 2 ч, 1 день. С помощью спектральных исследований была установлена корреляция между содержанием биоактивных веществ в растениях и концентрацией НЧС, их стабильностью. Таким образом, крапива двудомная, являясь лекарственным растением, может быть успешно использована для синтеза НЧС с целью дальнейшего их применения в различных областях в качестве антимикробного средства.

Данная работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии ЦКП ТвГУ.

Энтальпия образования тиоэфиров

Багиров Т.Л. (специалист, 4 курс)

Руководитель: М.Г. Виноградова

Целью настоящей работы является – проведение численных расчетов энтальпии образования ($\Delta_f H^0_{298(K)}$) тиоэфиров

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи: оценка и анализ экспериментальных данных по энтальпии образования исследуемых соединений; построение расчетных схем и проведение численных расчетов. Для этого в работе применялись – феноменологические методы, методы статистического анализа и линейной алгебры, метод наименьших квадратов.

В работе для тиоэфиров в четвертом приближении построена расчетная схема

$$P(C_n H_{2n+1})_2 S = h_{cc} p_{c-c} + h_{cs} p_{c-s} + h_{cn} p_{c-n} + x_{cc1} \Gamma_{cc} + x_{cs1} \Gamma_{cs} + x_{ccc1} \Delta_{ccc} + x_{ccs1} \Delta_{ccs} + x_{cc2} \tau_{cc} + x_{cs2} \tau_{cs} + x_{cc3} \omega_{cc} + x_{cs3} \omega_{cs} + x_{cc4} \nu_{cc} + x_{cs4} \nu_{cs}$$

Здесь $h_{cc}, h_{cs}, h_{cn}, x_{cc1}, \dots$ – число взаимодействий пары атомов С (С и S, С и Н) соответственно через 0, 1, 2 и т.д. атомов углерода. ; $p_{c-c}, p_{c-s}, p_{c-n}, \Gamma_{cc}, \dots$ - соответствующие параметры.

По данной схеме проведены численные расчёты $\Delta_f H^0_{298(K)}$ тиоэфиров, согласующиеся с экспериментом. Получены новые данные.

Так как в результате нехватки экспериментальных данных получилась система с линейнозависимыми столбцами, то параметр ν_{cs} пропадает, а параметры p_{cc}, p_{cn} и p_{c-s} были заменены на параметр $a = p_{cc} + p_{c-s} + p_{cn}$.

Найденные МНК значения энтальпийных параметров расчета энтальпий образования ряда тиоэфиров следующие:

a	Γ_{cc}	Γ_{cs}	Δ_{ccc}	Δ_{ccs}	τ_{cc}	τ_{cs}	ω_{cc}	ω_{cs}	ν_{cc}
-3,161	-10,388	-14,747	9,401	4,300	-0,976	-3,727	1,684	-1,511	1,590

Причем средняя абсолютная ошибка расчета $|\bar{\varepsilon}| = 0,5$ кДж/моль, а максимальное отклонение $\varepsilon_{max} = 3,2$ кДж/моль.

Электронные параметры конформеров цистеина

Завилейская В.А. (магистрант, 1-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, Русакова Н. П.

Методом B3LYP получено распределение электронной плотности $\rho(r)$ четырех стереоизомеров цистеина: две *L*-формы (с наличием водородных взаимодействий N[⋯]H и O[⋯]H молекула I, без – II) и два *D*-конформера (с N[⋯]H - III, без - IV). Внутримолекулярное слабое взаимодействие N[⋯]H изомеров I и III сформировано атомом водорода из COOH и азотом NH₂. ВМСВ O[⋯]H в I образовано Н тиогруппы и кислородом карбоксильной. Наличие ВМСВ подтверждено сигнатурой критической точки связевых путей O[⋯]H и N[⋯]H.

Таблица:

*Заряд $q(R)$, относительная энергия $E(R)$ и объем $V(R)$ групп *L*- и *D*-цистеина*

$q(R)$, а.е.					
молекула	NH ₂	CH	COOH	CH ₂	SH
I	-0,316	0,398	-0,107	0,011	0,014
II	-0,294	0,409	-0,136	0,046	-0,025
III	-0,350	0,446	-0,144	0,074	-0,026
IV	-0,303	0,441	-0,141	0,032	-0,029
$\Delta E(R)$, кДж/моль					
I	40	0	60	0	30
II	80	30	0	20	10
III	0	80	20	50	0
IV	50	60	20	0	10
$V(R)$, Å ³					
I	25,74	13,62	45,24	23,02	38,04
II	26,52	13,82	45,80	22,61	38,70
III	26,02	13,44	46,33	22,41	38,30
IV	26,40	13,44	46,26	22,69	38,58

Наличие ВМСВ O[⋯]H в I объясняет отток $\rho(r)$ от SH в атомный бассейн COOH, вследствие которого заряд SH повышается, а её объем становится значительно меньше по сравнению с $V(\text{SH})$ структур II, III и IV. При этом наибольшая стабильность SH найдена для соединения III, поскольку только в этом случае электронная энергия SH минимальна ($\Delta E(\text{SH}) = 0$ кДж/моль).

Электронные свойства групп 15-краун-5 и 1,4,7,10,13-пентатио-15-краун-5

Зиганшин А.В. (специалист, 5 – года обучения)

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

Структурные формулы краун-эфиров: 15-краун-5 (I) и 1,4,7,10,13-пентатио-15-краун-5 (II) (Рис.) отличаются составом гетероатомов, в случае II – это атомы серы. Методика проведения квантовохимического исследования подробно разобрана в работе [1].

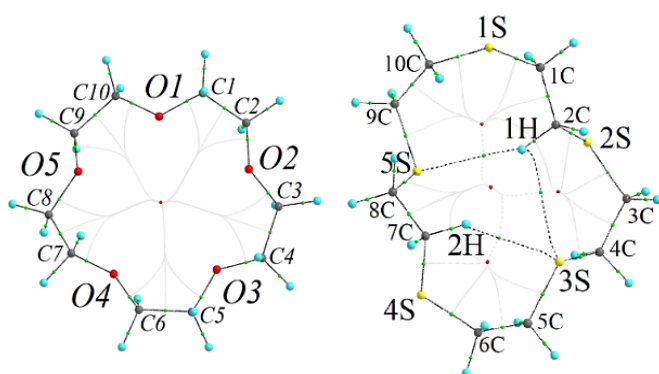


Рис. Оптимизированная геометрия 15-краун-5 (I) и 1,4,7,10,13-пентатио-15-краун-5 (II)

Найдены внутримолекулярные слабые взаимодействия типа, $S \cdots H$, $O \cdots H$, $S \cdots O$ в молекуле II. Для II получены КТ трех сигнатур: ядра атомов (3; -3), цикла (3; +1), связевого пути (3; -1).

Вычислены заряды, объемы и электронные энергии метиленов и гетероатомов рассматриваемых краун-эфиров. Определены акцепторы электронной плотности для групп CH_2 , ими являются гетероатомы S и O. Показано сильное деформационное воздействие S на $E(CH_2)$ и $V(CH_2)$ соседних метиленов по сравнению с O. Выявлено более сильное влияние O на заряды CH_2 групп по сравнению с S. Установлено, что электронная плотность O менее подвижна, чем электронная плотность S.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Зиганшин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Распределение электронной плотности в 15-краун-5 и его тиоаналогах // Вестник ТвГУ. Серия: химия. 2021. № 1 (43). С. 94-103.

Корреляция «структура-свойство» тиоспиртов. Топологический подход.

Калюжная Л.А. (специалист, 5 курс)

Научный руководитель: д.х.н. проф. Виноградова М.Г.

Для определения связи между строением и свойствами молекул используют различные методы математического моделирования, в том числе и методы, основанные на теории графов. Экспериментальных сведений по корреляциям «структура-свойство» для тиоспиртов немного.

В работе применяются методы статистической обработки данных, методы регрессионного анализа, метод наименьших квадратов (МНК) и методы теории графов.

Проанализированы графические зависимости «Свойство – топологический индекс», «Свойство – номер изомера» и «Топологический индекс – номер изомера». и др., позволяющие графическим путём получать недостающие значения о свойствах.

Исследованы зависимости вида $P=f(\text{ТИ})$. Выявлены уравнения, отвечающие наиболее тесной корреляционной связи между термодинамическими свойствами тиоспиртов и топологическими индексами.

Проведены численные расчеты, согласующиеся с экспериментом. Получены новые ранее неизвестные значения.

Построены и проанализированы графические зависимости “Свойство – ТИ”, “Свойство - номер изомера” и “ТИ - номер изомера”. Найдено, что величины $\square_{\text{f}}\text{H}^0_{298(\text{r})}$, $\square_{\text{f}}\text{G}^0_{298(\text{r})}$ и $S^0_{298(\text{r})}$ хорошо коррелируют с индексами W и W' , а величины $\Delta C_p^0_{298(\text{r})}$ – с J и H . С увеличением числа изомеров корреляции между энтальпией образования и ТИ усложняются, что необходимо учитывать при аналитическом изучении зависимостей “Свойство – ТИ”.

Интегральные электронные характеристики димеров тиофена

Курочкин Г.А. (магистрант, 1 года обучения)

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

Полиothiофен и его производные находят основное применение в качестве проводящих полимеров и сенсоров, как мономеры входят в состав различных сложных соединений, дополняя или изменяя их физико-химические параметры и т.д. Поэтому определение и уточнение их физико-химических свойств является актуальным.

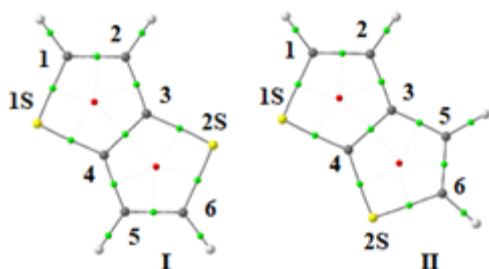


Рис.: Димеры тиофена: I - тиено[3,2-*b*]тиофен, II - тиено[2,3-*b*]тиофен

Сера в димерах (I и II) является донором электронной плотности $\rho(r)$ для ближайших атомов С и групп СН, что выражено в положительной величине заряда ее атомного бассейна (Табл.). Распределение $\rho(r)$ по С и СН носит симметричный характер, молекула I обладает S_2 , а II - C_{2v} группой симметрии. Сопряжение электронной системы С и СН в I и II неравномерно, что следует из увеличения $\rho(r)$ в С и СН (отрицательная величина их $q(R)$), ближайших к S, и уменьшения $\rho(r)$ в С и СН, расположенных далее (положительная величина их $q(R)$).

Таблица: Заряды ($q(R)$) групп С, СН, S* молекул I и II, в а.е.

	1	2	3	4	1S	5	6	2S
I	-0,131	0,074	-0,184	-0,184	0,240	0,074	-0,131	0,240
II	-0,133	0,056	0,019	-0,410	0,273	0,056	-0,133	0,273

*Цифры в верхней строке соответствуют номеру С и СН соединений на Рис.

Изомеры I и II отличаются расположением серы, которое вносит свой вклад в сопряжение систем. Так в случае II с серы в область ароматического кольца отток $\rho(r)$ больше, чем в I, что выражено в $q(S)$ (в I $q(S) = 0,240$ а.е., а в II $q(S) = 0,273$ а.е.).

Изучение поверхностно активных веществ с помощью метода кондуктометрии

Мамаев П.В. (бакалавр, 4 курс)

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

В наше время четвертичные аммониевые соединения с различным строением углеводородных радикалов у атома азота находят широкое применение как ионные жидкости.

Цель работы - влияния концентрации на удельную электропроводность водных растворов ионной жидкости на примере тетраметиламмоний бромида (ТМАБ). Измерение удельной электропроводности проводили с помощью кондуктометра «Анион 4100» в интервале концентраций от 10^{-4} до 10^{-1} моль/л. Полученные результаты представлены на рисунке в полулогарифмических координатах.

Из графика видно, что исследуемое соединение ведет себя как сильный электролит. В области концентраций $(2-5) \cdot 10^{-2}$ моль/л электропроводимость раствора ТМАБ резко возрастает. Такой скачок электропроводности характерен для водных растворов тетраалкиламмониевых соединений в области критической концентрации мицеллообразования.

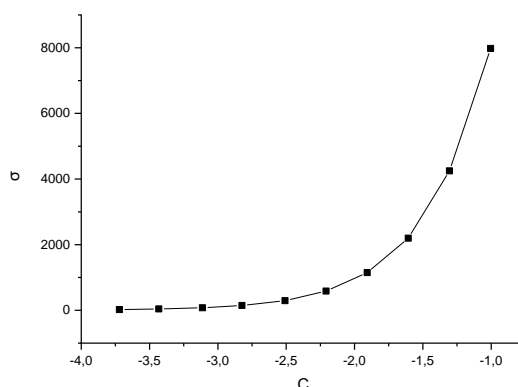


Рисунок. Удельная электропроводность водных растворов ТМАБ в зависимости от концентрации раствора

Аспарагин и аспарагиновая кислота в постулатах QТАИМ

Матус Я.А. (специалист, 4 курс)

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

Аспарагиновая кислота (I) и аспарагин (II) играют важную роль в жизни человека. Для I и II была проведена оптимизация геометрии методом ВЗЛУР и получены заряды и объемы атомов в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» (QТАИМ), которые затем были суммированы в групповые характеристики: $q(R)$ и $V(R)$.

Отрицательная величина $q(R)$ групп NH_2 и COOH показывает наличие индуктивного эффекта на соседние группы, который проявляется в оттоке с CH и CH_2 электронной плотности в атомный бассейн NH_2 и COOH . Сопоставление $q(R)$ (Таблица) АМК выделяет в II наиболее электроотрицательную аминогруппу, связанную с карбонилем, что отражается в более низкой величине ее $q(R)$ ($q(2\text{NH}_2) = -0,345$ а.е.). В этом же соединении карбоксильная группа также обладает наименьшим $q(\text{COOH})$ по сравнению с I. Такое возможно вследствие меньшего индуктивного эффекта фрагмента $\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$ на ближайшие метиленовые группы в II ($q(\text{C}(\text{O})\text{NH}_2) = -0,066$ а.е.) по сравнению с находящейся в идентичном положении COOH в I.

Таблица: Заряды групп $q(R)$ и объемы групп $V(R)$ молекул I и II.

$q(R)$, а.е.							
	1NH_2	CH	1COOH	CH_2	2COOH	CO	2NH_2
I	-0,291	0,447	-0,160	0,147	-0,144		
II	-0,297	0,458	-0,171	0,080		0,274	-0,345
$V(R)$, в Å^3							
I	26,9	12,9	46,5	22,1	46,6		
II	27,0	12,8	46,6	22,5		25,8	26,6

Сопоставление зарядов групп COOH , NH_2 и CO аминокислот I и II (Таблица) позволило составить качественную шкалу групповых электроотрицательностей:

$$\chi(\text{CO}) < \chi(\text{COOH}) < \chi(\text{NH}_2).$$

QТАІМ исследования изомеров декансульфона

Нефедова И.А. (специалист, 3 курс)

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

Алкилсульфоны и их производные являются одними из важных объектах исследования в органической химии в наше время. Они занимают важную роль в биохимических процессах и могут применяться в фармакологических препаратах. Наиболее важными являются соединения, которые содержат серу в характерных для нее высшей и низшей степени окисления, такие как сульфоны и сульфиды. Но недостаточная изученность данных соединений может объясняться высокой химической активностью атома серы. Целью данного исследования стало получение интегральных характеристик распределения электронной плотности и объема изомеров *n*-декансульфона $(\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_k\text{-R}-(\text{CH}_2)_l\text{-CH}_3$, где $\text{R}=\text{S}(\text{O})_2$, $0 \leq k, l \leq 8$).

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

Выделены стандартные значения заряда $q(\text{R})$ и объема $V(\text{R})$ для групп SO_2 и CH_2 ($q(\text{SO}_2)_{\text{ст}} = -0,159$ а.е. $V(\text{SO}_2)_{\text{ст}} = 47,8 \text{ \AA}^3$, $q(\text{CH}_2)_{\text{ст}} = 0,000$ а.е., $V(\text{CH}_2)_{\text{ст}} = 23,5 \text{ \AA}^3$). Стандартные значения $q(\text{R})$ и $V(\text{R})$ у CH_2 появляются, когда между ней и SO_2 находится четыре метильные группы (k и/или $l \geq 5$). Таким образом определена дальность индуктивного эффекта SO_2 , которая составила по четыре CH_2 в обе стороны алкильной цепи. Размер объема атомный бассейна SO_2 достаточно велик, чтобы «продавить» и уменьшить объем соседней CH_2 ($V(\text{CH}_2) = 23,0 \text{ \AA}^3$). Это сопровождается тем, что часть электронной плотности (стягиваемая SO_2) задерживается в атомном бассейне этого метилена и его заряд уменьшается ($q(\text{CH}_2) = -0,043$ а.е.).

Энергетические характеристики двухатомных спиртов

Савельева Т. А. (бакалавр, 4 курс)

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

Спирты представляют собой обширный и разнообразный класс соединений: они весьма распространены и часто выполняют важные функции в живых организмах.

Анализ экспериментальных данных по энтальпии образования гликолей показал: энтальпия образования линейно зависит от длины цепи молекулы для гомологов аналогичного строения, что связано с постоянным энергетическим вкладом CH_2 -группы; значения $\Delta_f H_{0, 298(\text{ж})}$ гликолей уменьшаются при увеличении длины цепи молекулы; между структурными изомерами гликолей разности энергий достигают 40 кДж/моль, при этом, наименьшее значение $\Delta_f H_{0, 298(\text{ж})}$ имеют неразветвленные двухатомные спирты с гидроксильными группами, расположенными у соседних атомов углерода; энтальпия образования двухатомных спиртов уменьшается с разветвлением молекул.

Анализ экспериментальных данных по энергиям разрыва связей в двухатомных спиртах позволил выявить некоторые закономерности: энергии разрыва связей D_{298} изменяются в широких пределах; энергии разрыва С-О связей зависят от расположения гидроксильных групп (диолы, содержащие две гидроксильные группы у одного атома углерода, имеют более высокое значение D_{298}); энергии разрыва С-Н связей в гликолях зависят от расположения гидроксильных групп – чем меньше они удалены друг от друга по цепи молекулы, тем меньше энергия разрыва связи.

В работе проведены численные расчеты согласующиеся с экспериментом.

Изучение влияния антропогенных факторов на образование наночастиц серебра в экстрактах хвои ели европейской

Стычинский Д.М. (бакалавр, 4 курс)

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

Цель данной работы – изучение влияния антропогенных факторов на химический состав хвои ели европейской методом УФ спектроскопии. Объектами исследования были образцы хвои ели, собранные в период с 1-10 октября, разделенные на 4 группы в зависимости от возраста иголок по годам. Сбор происходил в 4 местах г. Твери: вагоностроительный завод; полигон свалки твердых бытовых отходов; Тверская ТЭЦ-3; территория, прилегающая к трассе М10. Предполагаемые поллютанты в данной местности из-за большого трафика - монооксид углерода; альдегиды; диоксид серы; сернистый ангидрид и бензпирен.

Для исследований образцы иголок ели были высушены и измельчены, приготовлены водные и спиртовые экстракты. Кинетику формирования НЧС изучали на спектрометре «Evolution Array» фирмы «Thermo Scientific». Для этого к водным экстрактам образцов добавляли нитрат серебра (AgNO_3) с концентрацией $1 \cdot 10^{-2}$ М и через определенные промежутки времени регистрировали спектры. Установлено, что в водных растворах хвои ели европейской при добавлении нитрата серебра происходит образование наночастиц серебра (НЧС), которым в электронных спектрах соответствует широкая полоса поглощения с максимумом в диапазоне 440-450 нм. Обнаружено, что существует прямая связь между концентрацией НЧС, скоростью их образования и загрязненностью места сбора образцов. Следовательно, изучение химического состава хвои ели европейской и кинетики образования НЧС с помощью УФ спектроскопии может быть использовано для оценки влияния антропогенных факторов на состояние окружающей среды.

Исследование влияния нитрата серебра на процессы самосборки в низкоконцентрированных водных системах глицин-поливиниловый спирт

Шухина К.А. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Целью данной работы является изучение влияния частиц серебра на процесс самосборки в низкоконцентрированных растворах Gly-ПВС [1]. Полученные системы Gly-AgNO₃-ПВС могут найти применение в медицине, в частности, как плёночные материалы для заживления ран.

Были исследованы двухкомпонентные (AgNO₃-ПВС) и трёхкомпонентные (Gly-AgNO₃-ПВС) образцы с различным объёмным соотношением и концентрациями исходных компонентов, из которых методом отлива из раствора в чашке Петри были получены плёнки. Концентрация исходных компонентов: глицина и AgNO₃ - составляла 0,01 М, концентрация ПВС - 5 и 10%. Исследование образцов было проведено с помощью различных физико-химических методов: УФ, ИК-спектроскопии, динамического светорассеяния, вискозиметрии, сканирующей электронной микроскопии.

Формирование наноагрегатов в образцах было доказано с помощью ДСР. Данные вискозиметрии подтверждают, что Gly, связывая макромолекулы ПВС в качестве гибкого линкера, влияет на пространственную конфигурацию молекул полимера. В электронных спектрах систем была выявлена характеристическая полоса в области 420 нм, что соответствует частоте плазмонного резонанса наночастиц серебра. Сканирующая электронная микроскопия подтверждает наличие наночастиц серебра.

1. Шухина К.А. Процессы самоорганизации в водных растворах глицина, нитрата серебра и поливинилового спирта / Шухина К.А., Хижняк С.Д., Пахомов П.М. // Вестник Тверского государственного университета. Серия: химия - 2019 - №4 (38) – С. 177-187

Сравнение энергий некоторых конформеров метилового красного

Щенухина А.С. (специалист, 3 курс)

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

Методом V3LYP и в рамках QTAIM были исследованы шесть изомеров метилового красного, с *транс*- (I - III) и *цис*- (IV - VI) положением ароматических колец относительно диазогруппы -N=N- (Рис. 1). Найдены внутримолекулярные слабые взаимодействия (ВМСВ) типов: C[⋯]H, N[⋯]O и N[⋯]H. Взаимодействие C[⋯]H обнаружено только в *цис*-формах и соединяет атомы двух бензольных колец, образуя цикл из шести атомов, а взаимодействие N[⋯]O возникает между N диазогруппы и атомами O или H фрагмента OH карбоксильной группы.

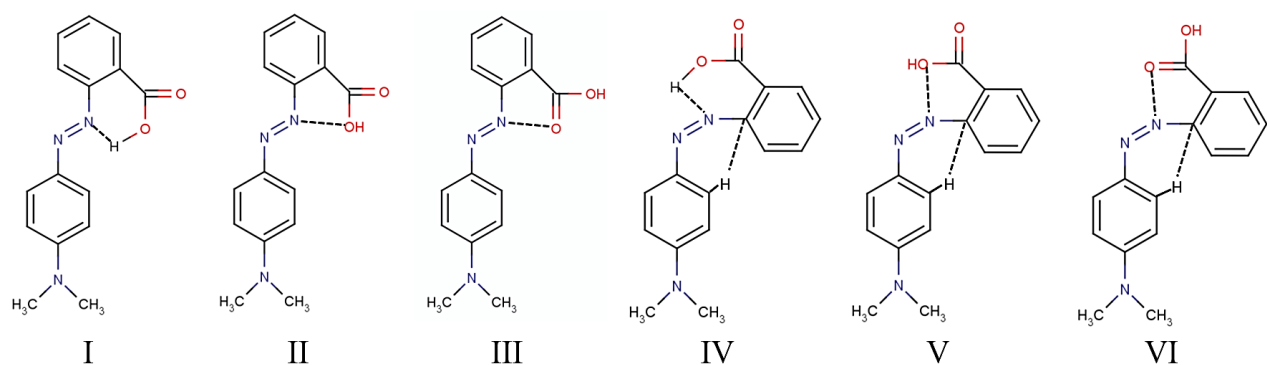
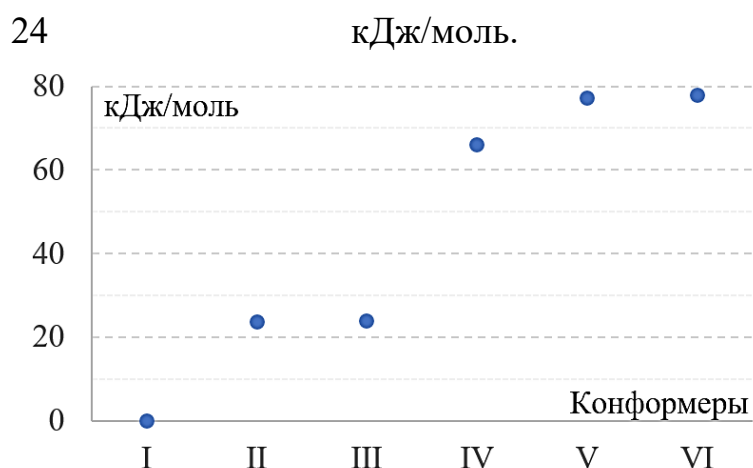


Рис. 1: Конформеры метилового красного; ВМСВ показаны пунктиром

Расчет полных электронных энергий конформеров (E_{total}) показал наиболее стабильным и энергетически выгодным состоянием - структуру I (Рис 2). Отличие в E_{total} между I и остальными *транс*-формами составило



Расчет E_{total} *цис*-состояний показал ее повышение на 66 кДж/моль для IV и 77 кДж/моль в случае остальных конформеров

Рис. 2.: Полная электронная энергия конформеров