

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

XXII КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ

С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ

Всероссийская научно-техническая конференция
молодых учёных
«Физика, химия и новые технологии»

26 марта 2015 года

г. Тверь

Тезисы докладов

ТВЕРЬ 2015

УДК 54(082)
ББК Г.я431
Р32

Ответственные за выпуск:

доктор химических наук П.М. Пахомов
кандидат химических наук С.Д. Хижняк

Р32 **XXII Каргинские чтения:** тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2015. – 142 с.

Областная, а затем Всероссийская научно-техническая конференция молодых учёных в рамках Каргинских чтений проводится ежегодно начиная с 1999 г. В сборнике представлены доклады студентов, аспирантов, молодых учёных тверских вузов, а также вузов других городов. Рассмотрены современные проблемы физики, химии и новых технологий.

Настоящий сборник издан на средства РФФИ (грант №15-03-20063Г).

© Тверской государственный университет, 2015
© Авторы статей, 2015

ПРИМЕНЕНИЕ ПЕРОКСИДА КАЛЬЦИЯ ДЛЯ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД

Руководитель Р.Р. Ильясова

Башкирский государственный университет

Кафедра неорганической химии

Одной из важнейших экологических проблем современности является загрязнение водоемов ионами тяжелых металлов. Тяжелые металлы, в составе промышленных сточных вод, попадая в водоемы, ухудшают их санитарное состояние. В связи с вышеуказанным, необходима глубокая очистка сточной воды перед ее использованием для промышленных и хозяйственно-питьевых целей.

В настоящее время процессы сорбции используются для очистки сточных вод. В качестве сорбентов применяются активированный уголь, оксиды металлов и др.

Перспективными сорбентами для очистки сточной воды могут стать наноматериалы, в частности, наноразмерный пероксид кальция. Микронизированный пероксид кальция применяется в настоящее время для решения инженерных задач в области защиты окружающей среды от различного характера загрязнений, например, для удаления слизи на фильтрах, предназначенных для очистки воды.

Целью настоящей работы явилось изучение сорбционных свойств наноразмерного пероксида кальция, синтезированного на кафедре неорганической химии химического факультета Башкирского государственного университета по отношению к ионам тяжелых металлов: кадмия (II), никеля (II). Методика синтеза наноразмерного пероксида кальция основана на известной в неорганической химии реакции взаимодействия пероксида водорода с суспензией гидроокиси кальция.

Авторами изучены факторы, влияющие на установление сорбционного равновесия катионов кадмия (II) и никеля (II): pH среды, масса сорбента, температура установления сорбционного равновесия.

В результате проведенных исследований установлено, что оптимальными условиями, влияющими на установление сорбционного равновесия являются: pH – 6,2, масса сорбента – 1,5 г, температура – 20⁰С для катионов кадмия (II) и никеля (II).

При этом максимальные значения степеней извлечения составили для катиона кадмия (II) – 91 %, никеля (II) – 87 %.

ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЕ В НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ВОДНЫХ РАСТВОРАХ, СОДЕРЖАЩИХ L-ЦИСТЕИН И НИТРИТ СЕРЕБРА

Руководители: П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк
Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

В течение последних лет гидрогели на основе природных полимеров стали очень востребованы в биомедицинских и пищевых целях. А процесс гелеобразования на основе низкомолекулярных низкоконцентрированных соединений (например, аминокислот, нуклеотидов, липидов и др.) используется реже ввиду их ограниченного производства. Супрамолекулярные гели* на основе L-цистеина и AgNO_3 благодаря антибактериальным и цитостатическим свойствам с успехом могут найти применение в фармакологии и таких сферах медицины, как офтальмология (изготовление контактных линз), онкология и др.

В работе открыт процесс гелеобразования в новой системе: низкоконцентрированные водные растворы (3,0 мМ) L-цистеина и нитрита серебра. Поэтому целью работы являлось изучение строения новых гидрогелей и условий их образования с помощью таких физико-химических методов, как УФ спектроскопия, динамическое светорассеяние (ДСР) и оптическая микроскопия.

Установлено, что в результате смешивания растворов исходных компонентов (концентрация – 1,0 мМ) в соотношениях 1:1 и 1:1,25 образуется прозрачный или слегка опалесцирующий раствор, который при стоянии образует гель с желтоватым оттенком. Скорость формирования гелей зависила от концентрации исходных компонентов, их соотношения, температуры и времени стояния. Согласно данным метода УФ спектроскопии в спектрах образцов происходит увеличение интенсивности двух полос поглощения с максимумами на длинах ~ 314 и 391 нм, что может быть связано с образованием полимерных цепочек типа $\text{Ag-S(Cys) Ag-S(Cys)}$. Обнаружено также, что образующиеся в данной супрамолекулярной системе агрегаты достаточно устойчивы во времени, поэтому система цистеин– AgNO_2 оказалась идеальной для ее изучения методом ДСР. Для понимания механизма гелеобразования в системе цистеин – нитрит серебра был изучен процесс агрегации цистеина с др. металлами, такими как Cd, Cu, Zn, Ni. Было установлено, что не все рассмотренные металлы в водных растворах при соотношении компонентов 1:1 и 1:1,25 образуют комплексы с цистеином, и в результате поиска солей, образующих комплексы с цистеином, установлено, что ацетат кадмия образует очень устойчивые по размерам комплексы. Все гидрогели являются тиксотропными, то есть способны к многократному восстановлению после механического разрушения. Исследования по изучению строения и свойств гидрогелей на основе L-цистеина и нитрита серебра будут продолжены.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

* П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк, М.М. Овчинников, П.В. Комаров. Супрамолекулярные гели (монография). Тверь: ТвГУ. 2011. 269с.

Н.В. Айдинян, М.Ю. Гавалян, С.С. Рыбина, Д.В. Хохлов, Е.И. Соколова,
К.А. Морозова, Е.Е. Арямин, М.С. Воронцов

ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПРОПУСКАНИЯ СВЕТА
ИК ДИАПАЗОНА КРИСТАЛЛАМИ ГЕРМАНИЯ И ПАРАТЕЛЛУРИТА
ОТ МИКРОСТРУКТУРЫ ИХ ОПТИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ

Руководитель А.И. Колесников

Тверской государственный университет
Кафедра прикладной физики

В инфракрасном диапазоне длин волн 2–20 мкм на фурье-спектрометре «Tensor 27» измерены коэффициенты пропускания света плоскопараллельными образцами, вырезанными из монокристаллов германия и парателлуриата. Оптические поверхности образцов обработаны различными способами с применением абразивных порошков с различной крупностью зерен, а также с добавлением в состав полирующих суспензий подтравливающих химических реактивов. Микрорельеф (нанорельеф) оптических поверхностей изучен методом интерференционной профилометрии с помощью прибора NanoMap1000WLI. Полученные данные о параметрах шероховатости (R_a , S_a) поверхностей использованы для компьютерных расчетов коэффициентов пропускания света образцами с помощью разработанной программы, теоретической основой для которой является геометрикооптическая модель взаимодействия световых потоков с неровностями, размеры которых на один-два порядка меньше длины волны. Близость значений рассчитанных и измеренных коэффициентов пропускания свидетельствует о корректности модели и открывает перспективы применения разработанной программы, графической системы визуализации индикатрис пропускания и отражения света, а также измерительная методика для моделирования оптимальных параметров антиотражающих рельефов поверхностей элементов устройств оптики и фотоники.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Каравашкина К.А., Айдинян Н.В., Козинев С.Ю. и др. Приближение геометрической оптики при расчете коэффициентов пропускания света шероховатыми поверхностями прозрачных материалов и его экспериментальная проверка. // Вестник ТвГУ. Серия «Физика». 2013. Вып.18. С.63-70.
2. Каманина Н.В., Васильев П.Я., Студенов В.И. Применение нанотехнологий в оптике: о возможности увеличения прозрачности и повышения поверхностной механической прочности материалов УФ и ИК диапазонов спектра. // Оптический журнал. 2008. Т.75, №2. С.158-162.

В.А. Акопян

ВОДОРОДНЫЙ ПОКАЗАТЕЛЬ КАК ДИАГНОСТИЧЕСКИЙ КРИТЕРИЙ В МЕДИЦИНЕ И ЭКОЛОГИИ

Руководители: Н.П. Лопина, Г.Е. Бордина
Тверская государственная медицинская академия
Кафедра химии

Живой организм – это открытая стационарная система. Одним из удивительных свойств живых организмов является кислотно-основной гомеостаз – постоянство рН биологических жидкостей, тканей и органов. В процессе жизнедеятельности в организме человека образуются кислотные и основные продукты. Особенности метаболизма нашего организма таковы, что кислотных продуктов образуется больше, чем основных. Но рН при этом не изменяется. Постоянство рН поддерживают физиологические механизмы и химические буферные системы. Уровень рН крови строго регулируется и постоянно поддерживается в пределах от 7,35 до 7,45. При нарушенном балансе могут возникнуть различные серьезные заболевания. Если уровень рН крови падает ниже 7,35, то наступает состояние, называемое ацидозом, которое вызывает нарушение функции центральной нервной системы. В этом состоянии организм плохо усваивает минералы, такие как кальций, натрий, калий и магний. Повышенное содержание щелочи в организме опасно, трудно поддается коррективке и может спровоцировать: проблемы с кожей и печенью, сильный и неприятный запах изо рта и тела, обострение хронических заболеваний.

Изменения рН приводят к дисбалансу и нарушениям и в экологии в целом. При избыточной кислотности атмосферы возникает кислотные дожди – это явления, при которых наблюдается понижение рН дождевых осадков из-за загрязнений воздуха кислотными оксидами. Повышенная щелочная среда также оказывает отрицательное воздействие на экологию. В озере Натрон вода имеет рН от 9 до 11. Птицы, попадая в озеро, погибают, а их останки покрываются минеральными веществами и затвердевают. Повышенная щелочность среды, убивает гнилостные бактерии, предотвращая тем самым разложение этих останков.

Таким образом, информация о водородном показателе является неотъемлемой частью медицинского и экологического образования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Общая химия: учебник. Жолнин А.В. / Под ред. В.А. Попкова. 2012. 400 с.
2. Общая химия: учебник. Попков В.А., Пузаков С.А. 2010. 976 с.

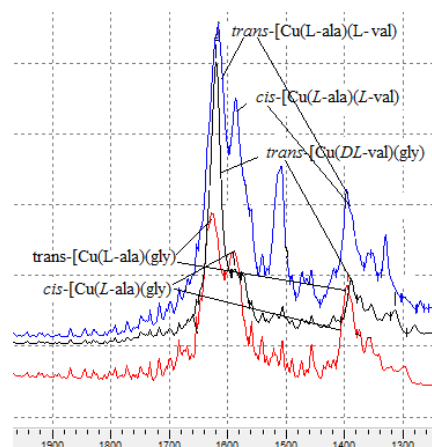
ИК-ХАРАКТЕРИСТИКИ ЦИС- И ТРАНС- РАЗНОЛИГАНДНЫХ АМИНОКИСЛОТНЫХ КОМПЛЕКСОВ Cu(II)

Руководитель Т.В. Берестова

Башкирский государственный университет
Кафедра неорганической химии

Известно [1], что комплексы природных аминокислот с биометаллами, в том числе Cu(II), обладают антибактериальной и противогрибковой активностью, а также принимают участие в окислительно-ферментативных процессах. Разнолигандные комплексы Cu(II) с аминокислотами представляют интерес, как более устойчивые и функциональные соединения, перспективные в качестве БАВ [2].

С целью изучения структуры разнолигандных аминокислотных комплексов Cu(II), нами синтезированы и охарактеризованы методами ИК-спектроскопии соединения **1-9** (табл.).

Таблица. Полосы поглощения (см⁻¹) функциональных групп **1-9** в ИК-спектрах

Комплекс	Выход, %	Полосы поглощения функциональных групп, см ⁻¹				
		ν(-C(CO))		Δν _{as,s} (COO ⁻)	ν(-CH, CH ₃)	ν(-NH ₂) (as, s)
		as	s			
<i>trans</i> -[Cu(DL-val)(gly)](1)	97	1616	1388	228	2962, 2907	3249, 3301
<i>trans</i> -[Cu(DL-thr)(gly)](2)	75	1617	1386	231	2928, 2860	3267, 3281
<i>trans</i> -[Cu(DL-val)(DL-thr)](3)	69	1614	1387	227	2976, 2885	3253, 3309
<i>trans</i> -[Cu(L-ala)(DL-val)](4)	46	1616	1397	223	2926, 2965	3138, 3246
<i>trans</i> -[Cu(L-ala)(L-val)](5a)	43	1618	1394	224	2926, 2965	3138, 3246
<i>cis</i> -[Cu(L-ala)(L-val)](5b)		1574	1379	195	2939, 2966	3153, 3244
<i>trans</i> -[Cu(L-ala)(gly)](6a)	99	1624	1394	230	2850, 2918	3161, 3269
<i>cis</i> -[Cu(L-ala)(gly)](6a)		1591, 1585	1389, 1373	202	2851, 2919	3152, 3263, 3395
<i>trans</i> -[Cu(DL-phe)(gly)](7)	36	1616	1394	222	2985, 2912	3261, 3327
<i>trans</i> -[Cu(DL-phe)(DL-val)](8)	51	1620	1387	233	2990, 2964	3300, 3256
<i>trans</i> -[Cu(DL-phe)(L-ala)](9)	30	1618	1394	224	2970, 2855	3287, 3226

Установлено, что структура и стереоизомерный состав **1-9** зависят от природы хелатирующего лиганда и используемого растворителя.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Т.В. Choi, W.M. Pardridge // J. Biol. Chem., 1986, 261(14), 6525.
2. Т.В. Берестова, Г.Ю. Амантаева, Л.Г. Кузина, Н.А. Аминева, И.А. Массалимов // Вестник Башк. ун-та, 2014, т.19, с.1182

ДИНАМИКА ИЗМЕНЕНИЯ АГРОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПАХОТНЫХ ПОЧВ ТОРЖОКСКОГО РАЙОНА ЗА ПОСЛЕДНИЕ ЧЕТВЕРТЬ ВЕКА

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

С момента начала проведения оценки уровня плодородия пахотных почв Тверской области (1964 г.) проведено 8 туров их обследования. Наиболее заметные изменения в выраженности их показателей произошли за последние 25 лет. В связи с этим, мы проанализировали за данный период динамику изменения содержания в почвах Торжокского района: органического вещества, подвижных форм фосфора и калия, выраженности их обменной кислотности.

По обменной кислотности (табл.1) наметилась четная тенденция к ее возрастанию, если в 1986 году очень сильных почв вообще не наблюдалось, а на сильно, средне-и слабо кислые приходилось 35,9%, то в 2011 году появились очень сильно кислые почвы, а площадь сильно, средне- слабо кислых возросла до 76,4%. Это связано с тем, что начиная с 1991 года в районе практически полностью прекратилось внесение извести для нейтрализации почвенной кислотности. Аналогичные изменения выявлены по динамике обменного калия (табл. 2).

Таблица 1. Динамика изменения кислотности за последние 4 тура агрохимического обследования

Тур обследования годы	Обследуемая площадь, га.	Группировка						
		Оч. сильно кислые	Сильно кислые	Средне кислые	Слабо кислые	Близкие к нейтрал.	Нейтрал.	Средне взв. значен.
4 тур. 1986г.	90167	0/0	735/0,8	7175/8,0	24430/27,1	36437/40,4	21384/23,7	5,7
8 тур. 2011г.	63817	102/0,2	1996/3,1	16917/26,5	29870/46,8	10444/16,4	4488/7,0	5,3

Таблица 2. Динамика изменения обменного калия за последние 4 тура агрохимического обследования

Тур обследования годы	Обследуемая площадь, га.	Группировка						
		Оч. сильно кислые	Сильно кислые	Средне кислые	Слабо кислые	Близкие к нейтр.	Нейтр.	Средне взв. значен.
4 тур. 1986г.	90161	1273/1,4	24103/26,7	32916/3605	20540/22,8	9312/10,3	2017/2,3	113
8 тур. 2011г.	63817	3888/6,1	35662/55,9	17038/26,7	5513/8,6	1158/1,8	558/0,9	81

Е.В. Андрианова

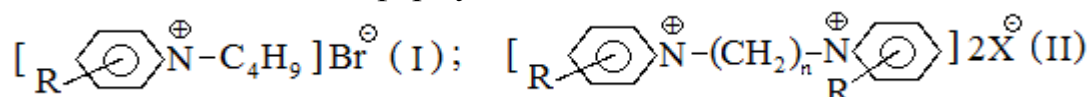
ЧЕТВЕРТИЧНЫЕ СОЛИ γ - И β - ПИКОЛИНИЯ И ПИРИДИНИЯ КАК ИОННЫЕ ЖИДКОСТИ

Руководитель Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

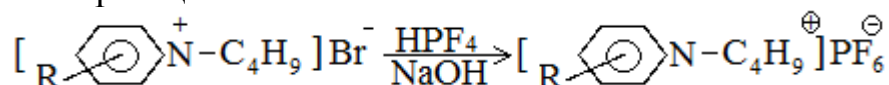
В настоящее время подход к решению проблемы замены летучих органических соединений, используемых в качестве растворителей в органическом синтезе, включает применение ионных жидкостей. Использование ионных жидкостей в качестве новых реакционных или каталитических сред может решить проблему эмиссии растворителей и повторного использования дорогостоящих катализаторов. Ионные жидкости – это соли органических кислот, жидкие при температуре ниже 100° С, содержащие объемный органический катион и разнообразные неорганические или органические анионы; в настоящее время наиболее изученными и описанными в литературе являются ионные жидкости 1,3-диалкилимидазолия, причем в основном это мономерные соли.

В данной работе синтезированы моно- и бис-четвертичные соли пиридиния, γ - и β - пиколиния и исследованы их физико-химические свойства. Ионные жидкости получены реакцией нуклеофильного замещения (S_N2) при взаимодействии аминов (нуклеофилов) с моно- и дигалоидалканами (субстратами). Реакцию проводили при кипячении в ацетоне в течение 0,5 – 2 часа при соотношении реагентов амин: алкилгалогенид 1:1 для моногалогидных солей и 2:1 в случае синтеза бис-четвертичных солей. Получены соединения общей формулы I и II.



где R=H; 4-CH₃; 3-CH₃. X=Cl; Br. n=2, 3, 4.

Синтезированные соединения представляют собой бесцветные кристаллические вещества, растворимые в воде и органических растворителях. Состав и строение подтверждены данными элементного анализа и ИК-спектроскопии. Изучено влияние структуры амина на скорость кватернизации. Установлено, что по реакционной способности амины располагаются в ряд: пиридин > γ -пиколин > β -пиколин. Гексафторфосфаты получены обменной реакцией галоидных солей с 60% гексафторфосфорной кислотой по реакции:



В отличие от галоидных солей аминов гексафторфосфаты являются гидрофобными жидкостями, не смешивающимися с водой представляющие интерес как растворители в двухфазных системах.

Я.В. Андрианова

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ВЯЗКОСТНЫЕ СВОЙСТВА ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ С ХЛОРИДАМИ МЕТАЛЛОВ

Руководители: С.Д. Хижняк, П.М. Пахомов
Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

В современном научном мире особый интерес представляют гидрогели, полученные на основе биоактивных веществ, с низким содержанием дисперсной фазы в растворе. Так, например, гель, полученный в данной работе при смешении водных растворов L-цистеина, нитрата серебра и разных электролитов обладает супрамолекулярным строением и является низкоконцентрированной ($\sim 0,01$ М), тиксотропной системой. Цель данной работы – синтезировать разные композиции гидрогелей на основе цистеин-серебряного раствора (ЦСР) с использованием биоактивных электролитов, исследовать процесс самоорганизации в рассматриваемых системах под воздействием хлоридов металлов при различной температуре методами вибрационной вискозиметрии, ИК-спектроскопии и динамического светорассеяния.

Для получения геля использовали в качестве электролитов водные растворы солей металлов (Na^+ , Mg^{+2} , Al^{+3} , Mn^{+2} , Co^{+2} , Ni^{+2} , Cu^{+2}). О наличии и свойствах пространственной гель-сетки в данной системе можно судить по изменению вязкости. Именно непрерывный каркас слабо связанных частиц дисперсной фазы придает прочностные свойства гелю. При этом изучали зависимость вязкости от времени стояния раствора, а также определяли, как быстро образец разрушается под действием вибрации. Большинство изученных нами хлоридов металлов образуют наиболее прочные гели в диапазоне от 2,5 до 3,8 мМ. Но существуют и некоторые исключения такие как, например, хлориды марганца и меди. Полученные результаты проанализировали методом вибрационной вискозиметрии. Установлено, что увеличение температуры ускоряет процесс созревания ЦСР. Таким образом, измерение вязкости в процессе гелеобразования с исследуемыми хлоридами металлов проводили при двух температурах 29° и 39°С. Данный процесс гелеобразования при тех же температурах исследовали методом динамического светорассеяния. Данные исследования показали, что изменение температуры существенно влияет на вязкость геля и процесс гелеобразования, причем с разными электролитами по-разному. С помощью метода ИК спектроскопии были изучены спектры образовавшихся в результате гелеобразования осадков.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ КОМПОСТОВ НА ОСНОВЕ ОСВ Г.ТВЕРИ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

За последние годы практически во всех регионах Российской Федерации одной из проблем экологического характера считается безопасная утилизация осадка сточных вод (ОСВ), полученных при очистке сточных канализационных вод. При хранении этого продукта на открытых площадках не исключается загрязнение окружающей среды в результате выщелачивания содержащихся в ОСВ тяжелых металлов, а также возможно наличие патогенной микрофлоры. Во многих странах, в том числе и в России, ОСВ используются в качестве удобрений. Однако большинство исследователей рекомендуют применять их не в чистом виде, а в составе компостов.

Экспериментальная партия компостов с использованием ОСВ г.Твери была заготовлена на кафедре Агрохимии, почвоведения и агроэкологии ТГСХА (табл.). В качестве наполнителей использовали опилки и торф.

Таблица. Химический состав компостов на основе ОСВ

Показатели	Единицы измерения	Состав компостов						
		контр оль (ОСВ)	осв: опилки 1:2	осв: опилки 1:3	осв: опилк и 1:5	осв: торф 1:2	осв: торф 1:3	осв: торф 1:5
Влажность	%	65,6	62,7	64,2	61,6	60,3	58,4	57,8
Зольность	%	38,0	10,1	6,13	5,2	39,51	42,3	42,10
Кислотность	pH	7,3	7,1	7,2	6,3	6,2	6,1	6,1
N общ.	%	3,45	2,12	2,00	2,00	3,37	3,27	3,48
P ₂ O ₅ общ.	%	3,15	0,56	0,39	0,29	0,55	0,49	0,41
K ₂ O общ.	%	0,32	0,12	0,10	0,08	0,14	0,12	0,12
Подвижное железо	мг/100г.	35,1	5,1	1,7	1,0	9,20	8,00	7,11
Сод.орг. в-ва	%	30,0	46,4	48,7	49,9	32,2	28,6	29,4
C/N	разы	8,7	21,9	24,3	24,9	9,5	8,7	8,4

Исходные субстраты – ОСВ, торф и опилки смешивали в указанных в таблице соотношениях, а влажность в течение всего периода компостирования поддерживали на уровне 60–65% от полной влагоемкости. Закладку провели в октябре месяце и в течение 7 месяцев компостирование осуществлялось в крытой шохе. Наиболее высокую зольность (39,5–42,3%) имели компосты, состоящие из ОСВ и торфа. В них же оказалась и более кислая реакция. Важно отметить весьма заметное превышение в компостах с торфом содержания общего азота, подвижного железа и узкое отношение C:N. Компосты с опилками, оказались богаче органическим веществом. Исходя из полученных данных можно заключить, что более быстрой трансформации в почве будут подвергаться компосты с торфом, ввиду большего количества в них азота и оптимального соотношения C:N.

Во всех компостах отмечено низкое содержание калия, что означает необходимость дополнительного внесения данного элемента в составе минеральных удобрений. В целом можно заключить, что компосты на основе ОСВ способны существенно пополнять в почве содержание углерода, азота и фосфора.

А.А. Асгаров

НЕЙРОМЕДИАТОРЫ И ЭМОЦИИ ЧЕЛОВЕКА

Руководители: Н.П. Лопина, Г.Е. Бордина

Тверская государственная медицинская академия

Кафедра химии

Нервные импульсы переходят от одной клетки к другой в нервных окончаниях, называемых "синапсами". Большинство синапсов имеют отнюдь не электрический, а химический механизм действия. При этом в передаче нервных сигналов участвуют нейромедиаторы – вещества, являющихся химическим передатчиком импульсов между нервными клетками человеческого мозга.

Серотонин ($N_2OC_{10}H_{12}$) – нейромедиатор. Отвечает за настроение человека. Повышение его активности создает в коре головного мозга ощущение подъема настроения. При недостатке серотонина наблюдается сниженное настроение и депрессия. Мелатонин ($C_{13}H_{16}N_2O_2$) – нейромедиатор. Отвечает за контроль над биологическими часами человека. Мелатонин вырабатывается из серотонина. Дофамин ($C_8H_{11}NO_2$). В одном из проводящих путей мозга роль переносчика нервного импульса играет дофамин – это мезолимбический путь, который считается ответственным за продуцирование чувств удовольствия. Адреналин – гормон, реализующий реакции типа «бей или беги». Его секреция резко повышается при стрессовых состояниях, опасности и страхе. Основная задача адреналина - адаптировать организм к стрессовой ситуации. Норадреналин – это гормон и нейромедиатор. Он вызывает в человеке ощущение злости, ярости, вседозволенности. Повышается при стрессе, шоке и страхе. Окситоцин – нейромедиатор, понижает уровень тревожности и напряжения человека при контакте с другими людьми. Способствует формированию связей между ними, в том числе связей между матерью и ребенком.

Таким образом, эмоции человека зависят от природы химических веществ и их взаимопревращений в организме человека.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Клиническая биохимия: учебное пособие. Бочков В.Н., Добровольский А.Б., Кушлинский Н.Е. и др. / Под ред. В.А. Ткачука. 3-е изд., испр. и доп. 2008. 264 с.
2. Биологическая химия: Учебник. Березов Т.Т., Коровкин Б.Ф. / 3-е изд., стереотипное. 2008. 704 с

П.О. Бабуркин

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЯ В ЦИСТЕИН СЕРЕБРЯНОМ РАСТВОРЕ

Руководитель П.В. Комаров

Тверской государственный университет
Кафедра теоретической физики

Изучение механизмов гелеобразования является актуальной задачей с точки зрения разработки новых и совершенствования известных гелеобразующих веществ. Наибольший интерес представляют низкомолекулярные вещества, способные вызывать структурообразование при низких концентрациях. Они являются удобными объектами для изучения процессов гелеобразования и управляемой самосборки. Примером такой системы является гидрогель, получаемый на основе растворов цистеина и нитрата серебра (ЦСР).

Для изучения формирования пространственной гель-сетки мы используем крупнозернистую модель ЦСР, разработанную на основе метода диссипативной динамики частиц. В результате выполненных расчетов была построена фазовая диаграмма поведения модели ЦСР при изменении двух главных параметров: концентрации циттернионов меркаптида серебра (С) (которые возникают в результате химической реакции цистеина и нитрата серебра) и силы взаимодействия полярных групп меркаптида серебра с молекулами воды, регулируемой посредством изменения их параметра растворимости δ (см. рис.). Анализ результатов производился по средствам визуального контроля ячеек моделирования и структурных факторов $S(q)$.

Показано, что гель сетка возникает в узком диапазоне значений силовых параметров, что соответствует экспериментальным данным.

Концентрация (С)	Параметр растворимости (δ)			
	34.5	35.5	36.5	37.5
0.030	MP	ГС	КД	КД
0.025	MP	ГС	КД	КД
0.020	MP	ГС	КД	КД
0.015	MP	ГС	КД	КД

Фазовая диаграмма. Обозначения: MP – макрофазное разделение, ГС – системы в которых наблюдается формирования гель сетки, КД – коллоидная дисперсия

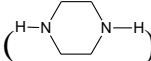
Автор выражает благодарность МСЦ РАН за предоставление вычислительных ресурсов кластера МВС-100k.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

ВЛИЯНИЕ СТРОЕНИЯ МОНОМЕРОВ НА СВОЙСТВА ЖИРНОАРОМАТИЧЕСКИХ ПОЛИАМИДОВ, ПОЛУЧАЕМЫХ ГАЗОЖИДКОСТНОЙ ПОЛИКОНДЕНСАЦИЕЙ

Руководитель В.А. Никифоров

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии полимерных материалов

Исследовано влияние строения ацилирующих и ацилируемых мономеров на показатели процесса и свойства получаемых полиамидов, такие как молекулярная масса, выраженная через приведённую вязкость ($\eta_{\text{прив}}$), степень помола (СП) и выход полиамида ($\epsilon_{\text{ха}}$), выявление условий фибридообразования и влияние состава мономеров газовой фазы на свойства получаемых сополиамидов. В качестве ацилируемых мономеров в работе использовались: этилендиамин ($\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{NH}_2$), пиперазин ()₂, гексаметилендиамин ($\text{H}_2\text{N}-(\text{CH}_2)_6-\text{NH}_2$). Выбор мономеров связан с различным числом метиленовых групп между функциональными группами. Ацилирующие мономеры представлены изофталойлхлоридом (ХАИК) и терефталойлхлоридом (ХАТК). Мономеры различаются положением функциональных групп – в *мета*-положении и *пара*-положении, что сказывается на морфологии полиамидов и способности к фибридообразованию.

Изучив влияние метиленового числа ацилируемых мономеров на $\eta_{\text{прив}}$, СП и $\epsilon_{\text{ха}}$, получили уравнения, выражающие их зависимость от метиленового числа: $\eta_{\text{прив}} = -0,74m^2 + 7,4m - 8,7$,

$$\begin{aligned}\epsilon_{\text{ха}} &= 10,9m^2 - 85,8m + 215,9, \\ \text{СП} &= 2m^2 - 18,5m + 124.\end{aligned}$$

Полиамиды на основе ХАИК не способны образовывать фибриды из-за несимметричности молекулы и внутримолекулярных водородных связей, вследствие чего макромолекула в процессе роста «закручивается», в результате полимер формируется в виде гранул. Молекула ПА-6Т имеет симметричное строение, в ней отсутствуют внутримолекулярные водородные связи, поэтому макромолекула способна образовывать фибриды (волоконисто-плёночные связующие).

Рассмотрено влияние состава мономерной смеси газовой фазы в процессе интербисополиконденсации на $\eta_{\text{прив}}$, СП, $\epsilon_{\text{ха}}$ и способность к фибридообразованию. Установлено, что при содержании ХАИК в пределах 0–25% получаемый сополиамид-6ИТ обладает высоким показателем СП, способен образовывать фибриды и обладает вдвое большей молекулярной массой, чем сополиамид-6ИТ с содержанием ХАИК свыше 25%. При этом выход остаётся стабильным.

ТЕХНОЛОГИИ ТЕРМИЧЕСКОЙ УТИЛИЗАЦИИ ПОЛИМЕРНЫХ ОТХОДОВ

Руководитель К.В. Чалов

Тверской государственной технической университет

Кафедра технологии полимерных материалов

В последнее время рост потребления товаров привел к накоплению объемов твердых бытовых отходов (ТБО). Количество отходов, образующихся во всем мире, составляет более 400 млн. тонн в год. Твердые бытовые отходы представляют собой механическую смесь самых разнообразных материалов, среди которых наиболее трудно перерабатываемыми являются отходами полимерных изделий.

Технологии вторичной переработки полимерных отходов постоянно совершенствуются, но, не смотря на это, проблема утилизации отходов приобретает в настоящее время все более острый характер. В структуре пластиковых отходов преобладают полиэтилен, полиэтилентерефталат (ПЭТФ), ламинированная бумага и поливинилхлорид (ПВХ). Только небольшая часть (менее 20%) пластиковых отходов подвергается переработке, а остальные складываются на полигонах ТБО.

Среди современных технологий утилизации полимерных отходов можно выделить следующие: захоронение на полигонах ТБО, термические способы (прямое сжигание, пиролиз и т.п.), химические способы и механическая переработка.

Наиболее рациональными и ресурсосберегающими способами переработки ТБО являются термические. По сравнению с другими методами переработки полимерных отходов, пиролиз является наиболее перспективным с точки зрения получения ценных газообразных и жидких продуктов. Данный способ дает возможность перерабатывать пластики различного химического состава без предварительной подготовки, что позволяет экологически чисто и относительно просто с технической стороны утилизировать полимерные отходы.

В данной работе были рассмотрены различные методы утилизации полимерных отходов, среди которых можно выделить пиролиз как наиболее эффективный и экологически безопасный способ. Использование в процессе катализаторов на основе природных алюмосиликатов, позволит снизить энергозатраты процесса и повысить выход газообразных и жидких горючих углеводородов. Таким образом, утилизация полимерных отходов методом пиролиза с использованием дешевых и доступных катализаторов является актуальным направлением научных исследований.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абдель-Бари Е.М.// Полимерные пленки. СПб., 2006. 352 с.
2. Твердые бытовые отходы // Research Techart. 2011. Т.55, № 1. С. 48–49.

К.Д. Бакланова

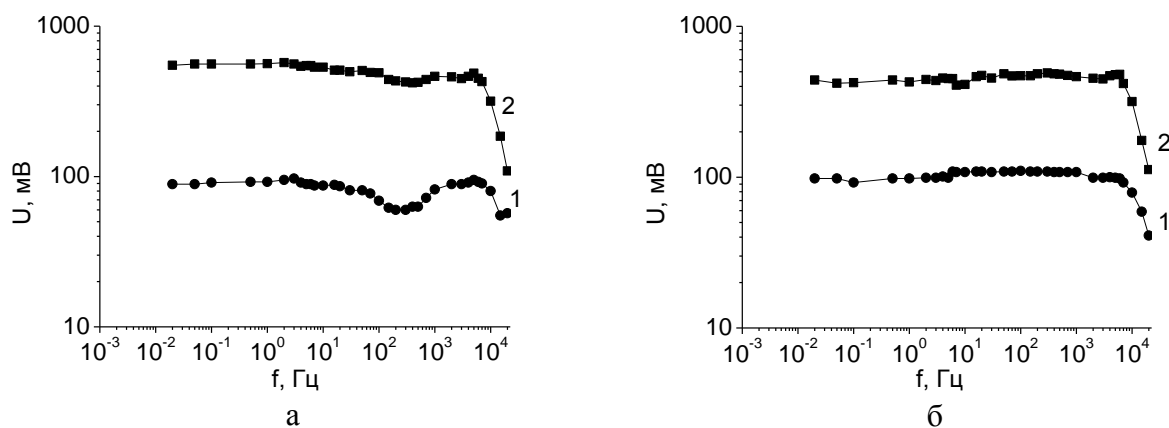
ЧАСТОТНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ПИРООТКЛИКОВ ТЕТРАГОНАЛЬНЫХ ТОНКИХ ПЛЕНОК ЦТС С РАЗЛИЧНЫМИ ВЕРХНИМИ ЭЛЕКТРОДАМИ

Руководители: А.А. Богомолов

А.В. Солнышкин

Тверской государственный университет
Кафедра физики сегнето-и пьезоэлектриков

В работе исследованы частотные зависимости пироэлектрических откликов тетрагональных пленок цирконата титаната свинца (ЦТС). Пленки ЦТС состава (25/75) были получены методом ВЧ-магнетронного распыления в университете г. Дрездена. В качестве подложек использовался платинированный монокристаллический кремний. В качестве верхних электродов в одном случае использовалась платина (Pt), в другом – Au/Pt/Ti. В этом случае титановый слой выполняет роль адгезионного. Таким образом, исследовались гетероструктуры с симметричными и асимметричными электродами. Пироэлектрические отклики исследовались динамическим методом с использованием прямоугольной модуляции тепловых импульсов, источником которых являлся лазерный модуль ($\lambda = 980$ нм, $W = 220$ мВт). Возникающие в результате нагрева/охлаждения импульсы исследованных пленок имели пиковый характер и отличались только величинами. Частотные зависимости величин пирооткликов при нагреве и при охлаждении для пленок с различными электродами представлены на рис.



Частотные зависимости пирооткликов при нагреве (а) и охлаждении (б) для пленок с асимметричными (1) и симметричными (2) электродами

Различие в величинах и поведении пирооткликов с частотой для пленок с разными электродами обсуждается в рамках модели деполяризующих полей.

О.В. Балибихина

МИКРОСТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕТАМАГНИТНОГО
ЗОННОГО ПЕРЕХОДА В СОЕДИНЕНИИ $\text{LaFe}_{11.6}\text{Si}_{1.4}$

Руководитель М.Б. Ляхова

Тверской государственный университет
Кафедра магнетизма

Соединения $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$, с кубической структурой типа NaZn_{13} , обладают магнитным упорядочением при температуре от 200 и 262 К. С понижением содержания Si в соединениях $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$ наблюдается изменение рода фазового перехода от второго к первому. Для образцов с $x \leq 1.5$ выше температуры Кюри наблюдается индуцированный магнитным полем зонный метамагнитный переход, который неизбежно влечет температурные и магнитные гистерезисы. Хотя ряд статей, посвященных исследованиям структуры соединений $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$ методами рентгенографии, нейтронографии и Мессбауэровской спектроскопии*, подтвердили сосуществование двух фаз в узком диапазоне температур $T_C \pm 2$ К, подробные эволюции фазы движимые температурой и магнитным полем при температурах около T_C , до сих хорошо не изучены.

В данной работе методом оптической микроскопии была исследована микроструктура образца соединения $\text{LaFe}_{11.6}\text{Si}_{1.4}$ в процессе индуцированного магнитным полем метамагнитного перехода. Для того чтобы проследить метамагнитный переход, который наблюдается в данном соединении вблизи, но выше температуры Кюри ($T_C = 198$ К), образец был охлажден от комнатной температуры до 198,5 К. В ходе исследования к образцу постепенно прикладывали постоянное поле.

В результате исследований установлено, что в соединении $\text{LaFe}_{11.6}\text{Si}_{1.4}$ имеет место индуцированный полем фазовый переход, идущий по пути зародышеобразования и роста ферромагнитной фазы, сопровождающийся прохождением по образцу волны деформаций, вызванной резким увеличением объема образца на 1%. Большие напряжения на границах раздела сосуществующих фаз могут вызвать разрушения образца в ходе работы охлаждающих машин. Помимо этого установлено, что в ходе первого намагничивания и размагничивания образца в нем сосуществуют ферромагнитная и парамагнитная фазы, что в свою очередь приводит к необратимостям, наблюдаемым на измерениях магнитных и магнитотепловых свойств.

* Shen B.G., Sun J.R., Hu F.X., Zhang H.W., Cheng Z.H. // Adv. Mater. 2009. V.21. Issue 45. P.4545–564.

Е.Д.Баранова

ПРОФИЛАКТИКА ЙОДОДЕФИЦИТА

Руководители: Н.П. Лопина, Г.Е. Бордина
Тверская государственная медицинская академия
Кафедра химии

О том, что на сегодняшний день проблема заболеваний щитовидной железы в Твери и области стоит очень остро, знают почти все. Известно также, что заболевания эти в основном связаны с йодной недостаточностью

По данным Эндокринологического Научного Центра Российской академии медицинских наук, более 100 млн. россиян, в том числе и население Тверской области, живут в состоянии йодной недостаточности. При этом ущерб здоровью от йодного дефицита трудно оценить, так как его следствием являются не только и не столько заболевания щитовидной железы, сколько снижение интеллекта, трудоспособности, возрастание врожденной патологии.

Из-за своеобразной водопроводной воды проблема йододефицита является актуальной для Тверской области. Ее усугубляют и низкие доходы населения, делающие морепродукты, основной природный источник йода, недоступными для большинства.

Результаты обследования 2736 детей Твери и области показали, что йодная недостаточность наблюдается у 79% детей Твери и у 61% по области. Результаты случайного обследования 200 жителей Твери показали, что у 68 (34%) была обнаружена патология щитовидной железы. Как свидетельствуют данные исследований, частота выявления патологии щитовидной железы и самого распространенного ее проявления – эндемического зоба – связаны с изменениями в экологии и качестве питания, прекращением йодной профилактики, а также с появлением новых возможностей в диагностике заболеваний щитовидной железы.

Улучшение состояния щитовидной железы и здоровья в целом тверские ученые связывают с применением продуктов с достаточным количеством йода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Генри М. Кроненберг, Мелмед Шломо, Кеннет С. Полонски, П. Рид Ларсен. Заболевания щитовидной железы; Рид Элсивер.-Москва, 2010. 392 с.
2. Иванова В. Заболевания щитовидной железы и диабет; Газетный мир. Москва, 2013. 128 с.

Е.Д. Баранова

НАШИ СООТЕЧЕСТВЕННИКИ – ЛАУРЕАТЫ НОБЕЛЕВСКОЙ ПРЕМИИ ПО ХИМИИ

Руководители: Н.П. Лопина, Г.Е. Бордина
Тверская государственная медицинская академия
Кафедра химии

Нобелевская премия по химии присуждается ежегодно с 1901 года и лишь восемь раз этого не происходило. Первым лауреатом в 1901 году стал Якоб Вант-Гофф. С тех пор 162 человека получили 163 премии по химии.

Николай Николаевич Семенов родился в Саратове 15 апреля 1896 года. Его отец был чиновником, к концу службы получившим чин статского советника и личное дворянство. В 1914 году Николай Николаевич стал заниматься наукой, под руководством приват-доцента Абрама Иоффе (впоследствии – академика), написав совместно с ним несколько статей. В 1956 году Николай Николаевич Семенов был удостоен Нобелевской премии по химии (вместе с английским химиком С. Хиншелвудом) за разработку теории цепных реакций. Цепные реакции – химические реакции, идущие путем последовательности одних и тех же элементарных стадий, на каждой из которых возникает одна или несколько активных частиц. По цепному механизму протекают реакции крекинга, горения, полимеризации и ряд других реакций.

Бельгийский химик Илья Пригожин родился в Москве в канун русской революции. В 1921 г. семья Пригожиных эмигрировала из России. Сначала они жили в Литве и Германии, а с 1929 г. поселились в Бельгии. Пригожин интересовался историей и философией. Будущее же свое он связывал с профессией концертирующего пианиста. В 60-е и 70-е гг. Пригожин развил созданную им теорию диссипативных структур и описал образование и развитие эмбрионов. В 1977 году Пригожин получил Нобелевскую премию по химии за свою теорию диссипативных структур. Диссипативная система – это устойчивое состояние, возникающее в неравновесной среде при условии диссипации (рассеивания) энергии, которая поступает извне.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Флейшман Лазарь Пастернак и Нобелевская премия; Азбуковник . Москва, 2013. 672 с.
2. Эшбах Андреас Нобелевская премия; Захаров - Москва, 2007. 464 с

М.С. Барсукова, А.В. Сергеева

БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ ВЕЩЕСТВА СЕМЯН ЛЬНА: ЛЕКТИНЫ И ЛИГНАНЫ

Руководитель Е.В. Ожимкова

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

В фитохимическом отношении семена льна содержат значительный арсенал биологически активных веществ, имеющих широкий спектр фармакологического действия. Основными нутриентами, определяющими биологическую ценность льняного семени являются белковые вещества, витамины, углеводы, жирное масло, а также лектины и лигнаны.

Лектины – это белки, способные распознавать и избирательно связывать углеводы, расположенные на поверхности клеток. В связи с этим они нашли широкое применение в различных отраслях биологии и медицины. Наибольшее количество этих белков находится в семенах, поэтому именно эта часть растения является наиболее перспективной для их получения. По общепринятым методам лектины из семян масличных культур выделяют путём экстракции солевыми растворами после обезжиривания.

Льняное семя – один из богатейших источников лигнанов, относящихся к классу фитоэстрогенов, т.е. веществ растительного происхождения, проявляющих эстрагеноподобную активность в организме человека. Установлено, что физиологическое действие фитоэстрогенов в растениях заключается в регуляции роста и размножения, защите растений от вредных воздействий ультрафиолетового излучения, от поражения растений грибами и другими паразитами, в контроле действия других биологически активных соединений.

Преобладающим среди лигнанов в льняном семени является дигликозид секоизоларицирезинола (СДГ). На его долю приходится от 1 до 5% от массы семени льна. Наряду с ним в состав семян льна входят лигнаны пинорезинол, изоларицирезинол и матаирезинол, а также другие фенольные соединения, обладающие высокой биологической активностью: кумаровая и феруловая кислоты. Лигнаны в льняном семени сосредоточены, в основном, в оболочке; в льняном масле они не найдены.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

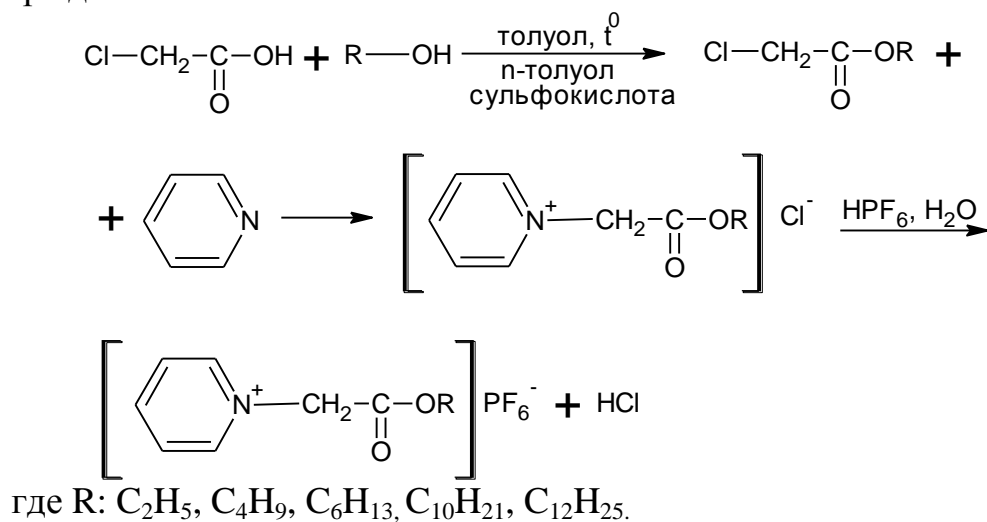
1. Цыганова Т.Б. Пищевая ценность семян льна и перспективные направления их переработки / Т.Б. Цыганова, И.Э. Миневич, В.А. Зубцов и др. // М.: Изд. «Эйдос».- 2010.-124 с.

СИНТЕЗ N-(2-АЛКОКСИ-2-ОКСОЭТИЛ)ПИРИДИНИЙ ХЛОРИДОВ И ГЕКСАФТОРФОСФАТОВ И ИХ АНТИМИКРОБНЫЕ СВОЙСТВА

Руководитель О.Е. Журавлев

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Четвертичные аммониевые соединения, содержащие в молекуле один или два высших радикала, уже много лет применяют в медицинской практике в качестве противомикробных средств. Несомненно, что на биологическую активность четвертичных солей аминов оказывает влияние как природа катиона, так и аниона, поэтому замена традиционных галогенид анионов в структуре соли на объемные типа $[PF_6]^-$, $[BF_4]^-$, $[FeCl_4]^-$ и другие анионы должна сказаться на изменении их биологической активности. Подобные соединения – четвертичные соли аммония, пиридиния, имидазолия содержащие объемные гидрофобные или гидрофильные анионы, называемые ионными жидкостями (ИЖ), в последнее время привлекают внимание исследователей в виду уникальности их свойств. В настоящей работе проведен синтез N-(2-алкокси-2-оксоэтил)пиридиний хлоридов и гексафторфосфатов и изучена их антимикробная активность. На рисунке представлена схема синтеза хлоридов и гексафторфосфатов N-(2-алкокси-2-оксоэтил)пиридиния. Все синтезированные соединения охарактеризованы по данным ИК-спектроскопии и элементного анализа. Чистота соединений подтверждена ТСХ.



Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

ПОЛУЧЕНИЕ УДОБРЕНИЙ ИЗ ОТРАБОТАННОГО ИНГИБИТОРА
КОРРОЗИИ

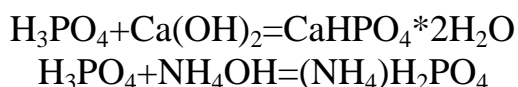
Руководитель В. М. Никольский
Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Для борьбы с коррозией чаще всего используются ингибиторы коррозии на основе фосфорной кислоты с комплексообразующими добавками в виде соли этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТА)[1].

Экологически безопасный комплексон этилендиаминдиантарная кислота (ЭДДЯК), входящий в состав предлагаемой нами рецептуры в условиях естественных сбросов быстро разлагается на составляющие усвояемые аминокислоты [2].

Существующая технология не предусматривает утилизацию отработанного раствора ингибитора коррозии. Нами предусматривается переработка отработанного антикора на удобрения, что обеспечивает экологическую пользу и экономическую эффективность.

Антикоррозионная обработка осуществляется в ванне заполненной ингибитором ржавчины [3]. Предложенная технология исключает поступление в окружающую среду отработанного раствора фосфатирования, т.к. этот раствор используется для получения удобрений (преципитат, аммофос) по реакциям:



Предлагаемый антикоррозионный состав имеет мировую новизну (подана заявка на изобретение). Утилизация отработанного раствора обеспечивает дополнительный экономический эффект (производство удобрений).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Патент РФ №2167176, Оpubл. 20.05.2001, ПРАЙМЕР-ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЬ КОРРОЗИИ/ Шайдурова Г.И., Ощепкова М.Ю., Шатров В.Б. и др.
2. L.N. Tolkacheva, V.M. Nikol'skii// Rus. Journal of Phys. Chem., 2013, Vol. 87, No. 9, P.1498-1501.
3. Заявка на изобретение № 2014153067 от 26.12.2014, Способ утилизации на аммофос отработанной фосфорной кислоты после антикоррозионной обработки черных металлов/ Логинова Е. С., Лукьянова Н. И., Никольский В. М., Толкачева Л. Н., Беляева Е. В.

ТЕРМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ АЦЕТИЛСАЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель Н.В. Баранова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Препараты ацетилсалициловой кислоты занимают значительное место в медикаментозной практике.

Цель работы: Экспериментально определить температуру плавления ацетилсалициловой кислот методом дифференциальной сканирующей калориметрии.

Методом ДСК были зарегистрированы термограммы ацетилсалициловой кислоты. Из приведенных в таблице данных следует, температуры плавления имеют более высокие значения по сравнению со стандартной температурой плавления[†], что говорит о наличии примесей, имеющих более высокие значения температуры плавления (табл.). Количество примесей колеблется от 0,8 до 3,8%. В связи с этим встает вопрос о дополнительной очистке исследуемых образцов.

Таблица. Температуры плавления, определенные методом ДСК

Исследуемое вещество	Температура плавления, °С	Температура плавления, °С (справочная величина)
Ацетилсалициловая кислоты (ЗАО «МЕДИСОРБ»)	137,6	135
Ацетилсалициловая кислота (ЗАО «УРАОБИОФАРМ»)	141,7	135

[†] 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.

Э.О. Бобков

150 ЛЕТ МОЛЕКУЛЕ ДНК

Руководители: Н.П. Лопина, Г.Е. Бордина
Тверской государственный университет
Кафедра химии

Под термином ДНК-компьютеры иногда понимают принципиально разные устройства, кто-то пытается при помощи биологических природных разработок добиться более совершенных вычислительных систем, а кто-то более совершенных систем памяти. ДНК-вычисления впервые были с успехом применены в 1994 году Леонардом Эдлеманом для решения задачи коммивояжера. Суть ее в том, чтобы найти маршрут движения с заданными точками старта и финиша между семью вершинами. В 2001 году Эхуд Шапиро реализовал модель биокомпьютера, который состоял из молекул ДНК, РНК и специальных ферментов. Исследователи из университета Нью-Йорка разработали устройство, способное стать основой для строительства сложных машин молекулярного масштаба. Это приведет к созданию нанороботов, которые будут строить новые молекулы, проводить операции на молекулярном уровне. В 2004 исследователи из Израиля разработали микроскопические устройства, которые можно внедрять в кровоток. Они будут диагностировать онкологические заболевания и выпускать в нужном месте лекарства. В 2013 году был применён метод конвертации информации в ДНК. Метод группы исследователей из Европейской молекулярно-биологической лаборатории в Гейдельберге позволяет записывать информацию в ДНК без участия живой клетки. С помощью этого метода исследователи превратили в ДНК 154 шекспировских сонета, аудиозапись речи Мартина Лютера Кинга «У меня есть мечта», классическую статью Уотсона и Крика, посвящённую структуре ДНК.

На сегодняшний день на основе ДНК создаются модели биокомпьютеров, которые находят патологические клетки и решают поставленные задачи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Александр Макаров, Сергей Аapresов. На что будут способны ДНК-компьютеры будущего? 2014.
2. Паун Г., Розенберг Г., Саломаа А. ДНК-компьютер. Новая парадигма вычислений. – М.: Мир, 2004. 528с.

ПОЛУЧЕНИЕ ОТЕЧЕСТВЕННОГО АНАЛОГА ЭНДОДОНТИЧЕСКОГО ПРЕПАРАТА НА ОСНОВЕ ГИДРОКСИДА МЕДИ-КАЛЬЦИЯ

Руководители: В.А. Румянцев, Г.Е. Бордина
Тверская государственная медицинская академия
Кафедра пародонтологии, химии

Физические методы лечения давно, но с разной степенью активности используются в эндодонтии. Как известно ионы движутся под действием электрического поля равномерно и с гораздо большей скоростью, чем вследствие диффузии, в том числе и в средах с большой вязкостью, например в пульпе. В большинстве случаев зуб, у которого на верхушке корня есть хронический очаг воспаления, к которому по тем или иным причинам невозможно было доставить лекарственное вещество, подавившее развитие инфекции, всегда был бесспорным кандидатом на удаление. Но не сейчас, когда существует метод депофореза, с помощью которого лекарственное вещество (гидроокись меди и кальция) доставляется в очаг воспаления под действием силы электрического тока. Но существуют два недостатка этого метода, которые нам удалось устранить, высокая стоимость препарата и быстрая высыхаемость, обусловленная активным образованием карбонатов, вследствие чего комплекс утрачивает свои лечебные свойства.

В ходе данной работы была разработана методика получения гидроксида меди-кальция. Методом химической конденсации нами был получен гидроксид меди, а затем диспергированием с помощью гидроксида кальция была приготовлена высококонцентрированная суспензия тетрагидросокупрата кальция. Седиментационная неустойчивость суспензий приводит к постепенному нарушению однородности состава лекарственного препарата вплоть до полного осаждения дисперсной фазы. Для повышения устойчивости применяют стабилизаторы, обладающие высокой поверхностной активностью и вязкостью. Во всех препаратах на основе гидроксида меди-кальция используется метилцеллюлоза. Мы в своей работе использовали иной стабилизатор, который пока не оглашаем ввиду проведения процедуры по регистрации патента.

В результате исследования установлено, что полученный нами препарат по органолептическим свойствам не отличается от зарубежного аналога. Он менее подвержен высыханию, что обеспечивает длительную сохранность препарата, а также более экономичное его использование.

О СТРУКТУРНОЙ СТАБИЛЬНОСТИ В НАНОКЛАСТЕРАХ ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ, БЛИЗКИХ К ТЕМПЕРАТУРЕ ПЛАВЛЕНИЯ

Руководитель В.М. Самсонов

Тверской государственный университет
Кафедра теоретической физики

В данной работе были проведены молекулярно-динамические компьютерные эксперименты, в ходе которых нанокластеры Au, содержащие 1000 атомов, выдерживались при температурах, близких к температуре плавления равной 900К. Стоит отметить, что в рассматриваемых случаях осуществлялись самопроизвольные переходы между жидкой и твердой фазами. Стоит особо отметить, что при температуре, равной температуре плавления, обе фазы являются равновероятными, а при больших и меньших температурах наиболее вероятными оказываются жидкая и твердая фазы соответственно.

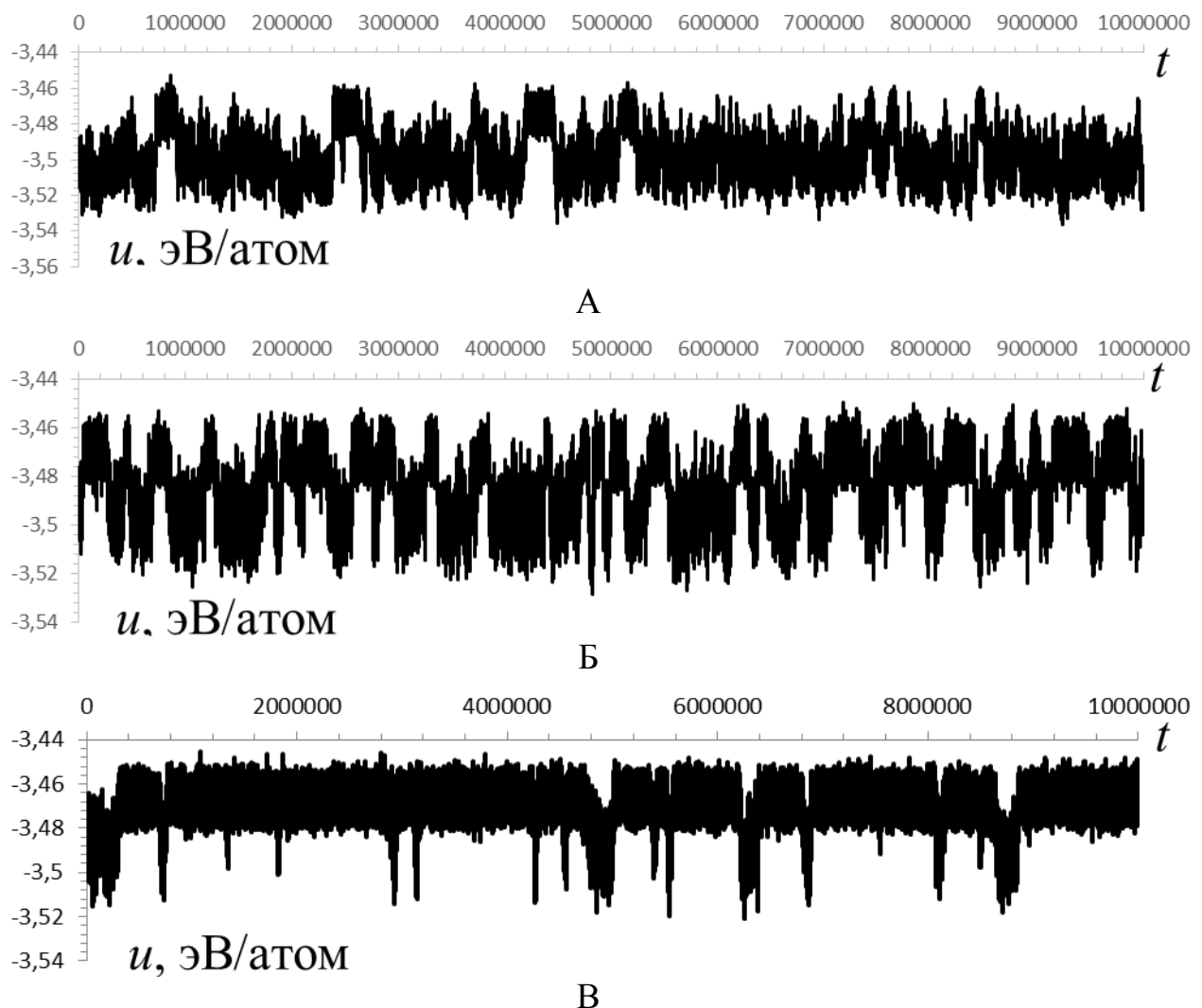


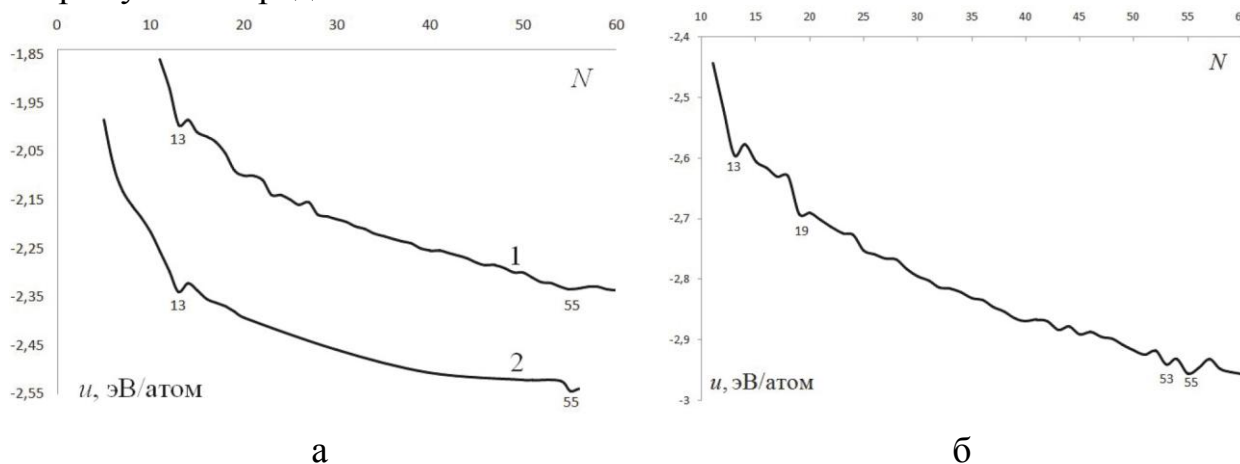
Рис. Изменение потенциальной части внутренней энергии u с увеличением шага для нанокластера золота содержащего $N=1000$ атомов при различных температурах: а) $T=875\text{K}$; б) $T=900\text{K}$; в) $T=925\text{K}$.

СТРУКТУРНЫЕ МАГИЧЕСКИЕ ЧИСЛА ДЛЯ НАНОКЛАСТЕРОВ ГЦК-МЕТАЛЛОВ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Руководитель В.М. Самсонов

Тверской государственной университет
Кафедра теоретической физики

В данной работе для изучения структурных магических чисел малых нанокластеров ГЦК-металлов использовались два варианта эволюции кластера, отличающиеся способом подготовки конечных конфигураций исследуемых нанокластеров. В первом случае исходная конфигурация в виде фрагмента ГЦК-структуры релаксирует при постоянной температуре 1К. Во втором случае, следуя[‡], нанокластер постепенно охлаждается от температуры порядка его температуры плавления до очень низкой температуры (1К), при которой он дополнительно выдерживается (релаксирует). После этого определяется значение удельной потенциальной части энергии. Как видно из рисунка, наши МД результаты, полученные обоими способами, отмеченными выше, и результаты А.Н. Сиренко*, демонстрируют локальный минимум при $N=13$, т. е. при значении, отвечающем первому МЧ из ряда Кини. При $N=55$ наши результаты, полученные при низкотемпературной релаксации нанокластера (способ 1), обнаруживают еще один минимум, который также соответствует теперь уже второму МЧ из ряда Кини.



Результаты для нанокластеров серебра а) Кривая 1 отвечает данным А.Н. Сиренко*, кривая 2 – нашим данным для случая релаксации начальной ГЦК структуры при $T=1\text{К}$; б) Результаты, отвечающие постепенному охлаждению до $T=1\text{К}$ с последующим отжигом при этой температуре

[‡] Сиренко А.Н. Молекулярно-динамическое исследование структурных превращений и свойств металлических кластеров // Автореф. канд. физ.-мат. наук – М.: МИСиС, 2013.

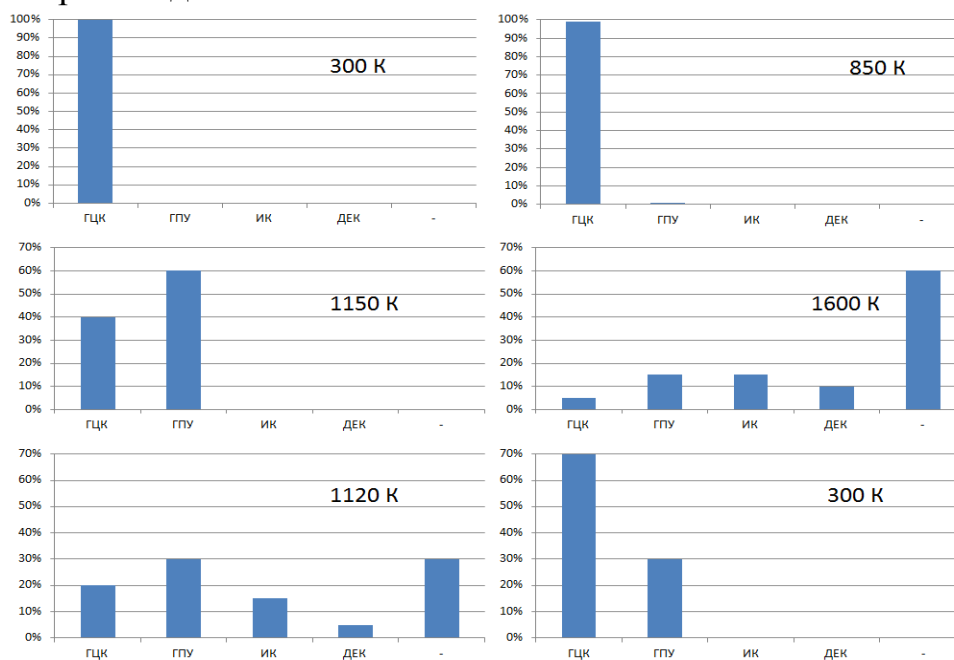
С.А. Васильев, А.А. Чернышова

О МЕХАНИЗМАХ ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ
НАНОКЛАСТЕРОВ

Руководитель В.М. Самсонов

Тверской государственный университет
Кафедра теоретической физики

В развитие наших предыдущих работ, посвященных молекулярно-динамическому исследованию гистерезиса плавления и кристаллизации металлических нанокластеров, в данной работе рассматривалась динамика изменения распределений многогранников Вороного-Делоне, характеризующих локальную структуру нанокластеров золота в процессе их плавления и кристаллизации. Представленные на рисунке диаграммы отвечают нанокластерам Au, содержащим 2000 атомов. Начальное состояние кластера соответствует идеальной ГЦК структуре при комнатной температуре. При постепенном приближении к температуре плавления появляются отдельные элементы ГПУ структуры, а при достижении температуры плавления их доля возрастает до 60%. В жидкой фазе невозможно определить какую-либо преобладающую структуру, а наблюдаемые отдельные элементы ГЦК, ГПУ, икосаэдрической (ИК) и декаэдрической (ДЕК) структур являются короткоживущими (менее 1 пс). При постепенном охлаждении и приближении к температуре кристаллизации отмечается появление стабильных элементов ГПУ, ГЦК и ИК структур, а при возвращении к комнатной температуре – только ГЦК и ГПУ, причем первая представлена в значительной степени, т.е. восстановление изначальной структуры происходит на 70%.



Изменение распределения локальной структуры в нанокластерах Au, содержащих 2000 атомов, в ходе процесса плавления-кристаллизации

ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕТАЛЛОВ ША-ПОДГРУППЫ С БИОРАЗЛАГАЕМЫМИ КОМПЛЕКСОНАМИ НА ОСНОВЕ ЯНТАРНОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

В настоящей работе были исследованы ИК спектры ИДЯК и ЭДДЯК в форме кислот, солей натрия, а также их комплексов с металлами. Характеристические частоты важнейших полос, полученные в результате расширения снятых спектров, представлены в табл.

Таблица. Важнейшие характеристические частоты ИК спектров ИДЯК (H_4X), ЭДДЯК (H_4Y) их натриевых солей и комплексонатов металлов ША-подгруппы (cm^{-1})

Соединение	$\nu^{C=O}$	$\nu^{C=O}$	ν_s^{C-O}	$\Delta\nu^{C-O}$ ($\nu_{as}-\nu_s$)	ν^{C-N}
H_4X	1734	1678	1396	268	1095, 1057
Na_4X		1615	1399	216	1093, 1059
$Na[AlX] \cdot 4H_2O$		1633	1398	235	1111
$Na[GaX] \cdot 0,5H_2O$		1630	1378	252	1089
$Na[InX] \cdot 0,5H_2O$		1630	1381	250	1070
H_4Y	1722	1633	1392	241	1066, 1038
Na_4Y		1608	1394	214	1066, 1039
$Na[AlY] \cdot 5H_2O$		1637	1385	252	1049

Характер связей COO^-Me оценивался по разности $\Delta\nu = \nu_{as}^{C-O} - \nu_s^{C-O}$: если $\Delta\nu > 225 \text{ cm}^{-1}$, то связи преимущественно ковалентные, если $\Delta\nu < 225 \text{ cm}^{-1}$, то связи преимущественно ионные*.

Кроме того, по значению $\nu_{as}^{C-O} > 1625 \text{ cm}^{-1}$ определяем ковалентный характер связи $Me-O$ для комплексов алюминия, галлия и индия. По разности $\Delta\nu = \nu_{as}^{C-O} - \nu_s^{C-O}$ видно, что в комплексах галлия и индия связь $Me-O$ носит более ковалентный характер, чем в комплексах алюминия. По значению $\Delta\nu = 200, 210$ для комплексов никеля определяем преимущественно ионный характер связи.

* Толкачева Л.Н., Никольский В.М. // Вестник ТвГУ. Серия «Химия». 2012. Вып.14. С.10-16.

ОЗЕРНЫЕ МЕСТОРОЖДЕНИЯ САПРОПЕЛЕЙ ТВЕРСКОЙ ОБЛАСТИ

Руководитель И.А. Дроздов

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Озерные месторождения сапропелей на территории Тверской области известны издавна – донные озерные и биохимические отложения активно использовались в некоторых районах как для удобрения земель так и для медицинских целей. Но комплексное их изучение на научной основе началось только в начале нашего века, с развитием географо-геологических исследований в России, и проявлением интереса к необычным свойствам этого вида минерального сырья.

По состоянию на 1.01.1994 г. в Тверской области освоение залежей на промышленной основе наметилось только на 4-х озерах – оз. Кудинское (Торопецкий р-н); оз. Селигер (Осташковский р-н); оз. Наволок (Удомельский р-н); оз. Скорбеж (Кашинский р-н).

На территории Тверской области имеется около 800 озер с площадью зеркала воды 1 га и более. Из них 87,5% расположены в западной и северо-западной частях области, в краевой зоне валдайского оледенения. По величине 70% озер имеют площадь до 50 га, 5% - более 500 га.

Предполагаемые ресурсы сапропелей в Тверских озерах составляет 3 млрд.м³, или 1,16 млрд.т., при 60% влажности, в т.ч. 1,08 млрд.т. поставленных на государственный баланс, но по категории “Р” т.е. – прогнозируемые запасы. Детально разведано лишь 10% общих запасов сапропелей.

Качественный и количественный состав сапропелей в основном находится прямой зависимости от типа озера. В проточных озерах залежи сапропелей и их мощность меньше, что обусловлено интенсивной переработкой органики в водоеме и частичным выносом сапропеля в период половодья.

Сапропели проточных озер имеют и меньшую кислотность. В них наиболее часто встречаются органо-силикатные, силикатные и силикатного классов – органо-песчанистые или органо-глинистые, расположены в придонной части водоемов. При поступлении в водоем большого количества Са в придонной части скапливается известковый сапропель.

В озерах имеющих слабый водообмен, отлагаются сапропели органических и органо-минеральных классов. В бессточных озерах образуется сапропель только органического класса. В донной части водоемов отлагаются в этом случае органо-песчанистые виды сапропелей. Сапропелевые залежи в любых водоемах неоднородны.

В озерах Тверской области наиболее распространен сапропель органо-силикатного класса, характерный для проточных озер. Их запасы составляют около 50% всех ресурсов области.

МОДЕЛЬ РАСЧЕТА СВОЙСТВ КОНФОРМЕРОВ X-ЗАМЕЩЕННЫХ ЭТАНА

Руководители: В.М. Смоляков,
Д.Ю. Нилов

Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

На основе подобия «пространственных» подграфов в молекулярных графах (МГ) ряда поворотных изомеров X-замещенных этана D_3 (с «шахматным» расположением X-заместителей) с общей формулой $CH_{3k}X_k-CH_{3l}X_l$ (где $X = CH_3, F, Cl, \dots$, а k, l – их числа) и разложения многоугольных чисел (треугольных, тетраэдрических и т.д.) треугольника Паскаля (биномиальных коэффициентов) получена 16-константная схема расчета их свойств. Используя строки треугольника Паскаля, получим исходную 7 константную схему оценки свойства P X-замещенных «шахматных» конформеров этана D_3 :

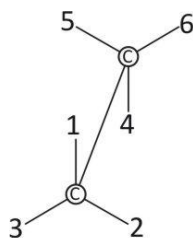
$$P = C_n^0 p_0 + C_n^1 p_1 + \dots + C_n^{n-1} p_{n-1} + C_n^n p_n \quad (1)$$

где p_0, p_1, p_2, \dots – параметры, а $C_n^0 = 1, C_n^1 = nX, C_n^2, C_n^3, C_n^4, \dots$ – треугольные (K_3), тетраэдрические ($K_{TЭ}$), арифметических рядов 5, 6 и 7 порядков. Разлагая числа схемы (1) для X-замещенных «шахматных» конформеров получим (табл. 1):

$$P = n_0 \rho_0 + n_1 \rho_1 + n_2 \rho_2 + \dots + n_{14} \rho_{14} + n_{15} \rho_{15}, \quad (2)$$

где $n_0 = 1, n_1, n_2, \dots, n_{15}$ – коэффициенты схемы; $p_0, p_1, p_2, \dots, p_{15}$ – параметры, определяемые МНК по экспериментальным данным для свойства P ряда X-замещенных конформеров этана D_3 .

Рис. Этан D_3



В таблице 1 приведены коэффициенты схемы оценки свойств конформеров D_3 X-замещенных этана ($X = CH_3$) с учетом энантиомерии.

Таблица 1. Расчетная схема оценки свойств конформеров D_3 X-замещенных этана ($X = CH_3$) с учетом энантиомерии*

X зам. этана	Гр.	n	K_3					$K_{TЭ}$				K_5				K_6	K_7	2^n
			n_1	n_2	n_3	n_4	n_5	n_6	n_7	n_8	n_9	n_{10}	n_{11}	n_{12}	n_{13}			
CH_3CH_3	D_3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1-X	C_s	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2
1,2-X ₂	C_s	1	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4
1,4-X ₂	C_{2h}	1	2	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4
1,5-X ₂ (-)	C_2	1	2	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4
1,6-X ₂ (+)	C_2	1	2	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4
1,2,3-X ₃	C_{3v}	1	3	3	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	8
1,2,4-X ₃ (-)	C_1	1	3	1	1	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	8
1,2,5-X ₃ (+)	C_1	1	3	1	1	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	8
1,2,6-X ₃	C_s	1	3	1	0	1	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	8
1,2,3,4-X ₄	C_s	1	4	3	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	16
1,2,4,5-X ₄	C_{2h}	1	4	2	2	1	1	0	2	2	0	0	1	0	0	0	0	16
1,2,4,6-X ₄ (-)	C_1	1	4	2	1	1	2	0	2	0	2	0	0	1	0	0	0	16
1,2,5,6-X ₄ (+)	C_1	1	4	2	1	2	1	0	0	2	2	0	0	0	1	0	0	16
1,2,3,4,5-X ₅	C_s	1	5	4	2	2	2	1	3	3	3	2	1	1	1	1	0	32
CX_3CX_3	D_3	1	6	6	3	3	3	2	6	6	6	6	3	3	3	6	1	64

*Три хиральные пары.

ТВЕРДОКОНТАКТНЫЕ ИОНОСЕЛЕКТИВНЫЕ ЭЛЕКТРОДЫ
ТРЕХЗАРЯДНЫЕ КАТИОНЫ

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Известно, что ионометрический контроль катионов Cr^{3+} и Al^{3+} затруднён из-за отсутствия надёжного ионоселективного электрода (ИСЭ). В литературе встречаются отдельные работы, связанные с изготовлением мембранного ИСЭ с жидкостным внутренним электродом сравнения. Известно, что использование вместо внутреннего электрода сравнения электронно-ионного трансдюзера на основе электропроводных полимеров позволяет значительно улучшить метрологические характеристики электрода. Поэтому целью настоящей работы было создание твердоконтактных ИСЭ на хром (III) и алюминий (III) с полианилиновым трансдюзером.

Для ИСЭ мы использовали ионообменную мембрану, приготовленную по классической схеме. Мембрана содержала диоктилфталат 55%, поливинилхлорид 40% и электродактивное вещество 5% - 8-хинолиндитиокарбоксилат хрома (III) и комплекс алюминия с ализарином. Для стабилизации потенциала на границе ионоселективная мембрана-токоотвод мы использовали трансдюсер на основе полианилина (ПАНи). Плёнка трансдюзера была получена электрохимическим методом циклической вольтамперометрии (ЦВА). Изготовленный электрод имел широкий диапазон линейности электродной функции в интервале: 1–6 pC. Крутизна электродной функции составила 19 мВ/pC для ИСЭ на Al^{3+} , 18,3 мВ/pC для ИСЭ на Cr^{3+} . Время отклика не превышало 30 секунд, при этом значения потенциала были стабильными. Электрод сохранял работоспособность в интервале температур 15–70⁰C. Изменение температуры в указанном интервале влияло на крутизну электродной функции в соответствии с теоретическими значениями. Рабочий диапазон pH ионоселективного электрода на хром (III) 3,5–5,5, на алюминий (III) 2–4. Ионометрическому анализу практически не мешают ионы цинка, кальция, магния и калия. Изготовленные электроды были использованы при анализе модельных смесей, содержащих Cr^{3+} и Al^{3+} , при этом взятые и найденные значения находились в хорошем соответствии. Относительная погрешность не превышала 10%.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

АГРОЭКОЛОГИЧЕСКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ПОЧВ ОХОТХОЗЯЙСТВ ТВЕРСКОЙ ОБЛАСТИ И ИХ ПАХОТНЫХ АНАЛОГОВ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

В настоящее время охотхозяйства Тверской области осуществляют свою профессиональную деятельность на площади около 8 млн.га, что составляет примерно 95% общей земельной площади области. С учетом снижения численности скота в аграрном секторе, с каждым годом возрастает количество травоядных диких животных и боровой птицы, обитающих в лесах и на выведенных из оборота сельскохозяйственных угодьях. Плановое использование их осуществляется через охотничьи хозяйства. Поскольку охотничьи трофеи потребляются в пищу человека, то для нас небезразлично, что собой представляет по качеству мясо диких животных и боровой птицы, а это напрямую зависит от биохимического состава потребляемого растительного корма, который в свою очередь определяется агроэкологическим составом почв.

Мы исследовали агроэкологическую характеристику почв, находящихся в пределах охотхозяйства «Дон», расположенного в Калининском районе, а также их пахотных аналогов, используемых в качестве пашни.

Изначально почвы по архивным данным имели одинаковый генезис, т.е. происхождение. Можно с достаточной уверенностью предполагать, что обладали и примерно одинаковыми агроэкологическими показателями. В последующем, часть их была освобождена от леса и в течение уже многих десятилетий используется в полевых севооборотах.

На исследуемых объектах были заложены почвенные разрезы и по генетическим горизонтам отобраны почвенные образцы, в которых определили агроэкологические показатели. Полученные данные представлены в таблице.

Таблица. Агроэкологическая характеристика дерново-подзолистой супесчаной почвы, находящейся в пределах охотхозяйства «Дон» и ее пахотного аналога

Генетический горизонт; глубина взятия образца, см	Гумус (по Тюрину), %	N _{общ.} , %	мг/кг почвы				pH
			P ₂ O ₅	K ₂ O	Pb	Zn	
Разрез 1, лес							
A ₁ 3 – 26	1,04	0,09	29,1	36,5	4,64	14,15	4,2
A ₂ 26 – 39	0,51	0,06	67,2	6,8	3,12	4,21	3,9
A ₂ B 39 – 54	0,25	0,05	88,1	72,8	4,96	3,06	5,1
B ₁ 54 – 80	0,28	0,02	240,6	75,4	3,48	3,15	5,9
B ₂ 80 – 105	0,22	-	170,9	65,4	-	-	6,8
BC 105 – 137	0,14	-	162,0	62,1	-	-	7,0
C 137 – 150	0,13	-	161,3	61,8	-	-	7,1
Разрез 2, пашня							
A _{Пах} 0 – 26	1,24	0,13	221,8	77,6	3,18	27,9	5,4
A ₂ 26 – 38	0,52	0,05	163,5	25,1	2,98	5,12	4,8
A ₂ B 38 – 57	0,26	0,06	35,6	74,5	4,32	4,31	4,3
B ₁ 57 – 82	0,18	0,028	63,5	89,3	4,48	3,62	5,6
B ₂ 82 – 114	0,23	-	160,2	110,8	-	-	6,4
BC 114 – 134	0,12	-	155,9	71,0	-	-	6,8
C 134 – 150	0,12	-	156,2	60,0	-	-	7,2

НОВЫЙ КОМПЛЕКСНЫЙ УЛУЧШИТЕЛЬ ДЛЯ МУКИ С НИЗКИМИ ХЛЕБОПЕКАРНЫМИ СВОЙСТВАМИ

Руководитель Г.П. Лапина

Тверской государственной университет

Кафедра физико-химической экспертизы биоорганических соединений

Хлебопекарные свойства муки зависят от состояния таких основных структурных комплексов муки, как белково-протеиназный и углеводно-амилазный. Степень и скорость изменения этих комплексов и обуславливают качество конечного продукта – хлеба.

Существенную роль в технологии хлеба играют ферменты, главным образом амилазы и протеазы, влияющие на протекание биохимических и микробиологических процессов при брожении теста. Нами показано, что дополнительное введение амилаз в количестве 0,02–0,04 % к массе муки способствует накоплению в тесте сбраживаемых углеводов вследствие гидролиза крахмала, что в конечном итоге обуславливает получение изделий с более ярко окрашенной коркой и более ароматных. Под действием амилаз накапливаются декстрины, что положительно сказывается на сохранении свежести изделий, повышается скорость брожения и увеличивается количество сахара в выпекаемом хлебе.

В связи с тем, что на хлебопекарные предприятия г. Твери поступает мука с низкими хлебопекарными свойствами («крепкой клейковиной»), предлагаем использование комплексного улучшителя для хлебобулочных изделий на основе ферментного препарата глюкоамилазы и амфолитного ПАВ (улучшитель окислительного действия) из муки семян льна.

Предварительные исследования показали, что использование комплексного хлебопекарного улучшителя может значительно повысить хлебопекарные характеристики муки (в этом проблема всей хлебопекарной отрасли).

Необходимый ферментативный компонент и амфолитный ПАВ в составе способен обеспечить улучшение реологических свойств теста, особенно при переработке муки с низкой эластичностью, увеличение объема хлеба, улучшение структуры пористости мякиша, замедление процесса черствения готовых изделий. Кроме того, хлеб, приготовленный с новым компонентным составом по муке, отличается большей устойчивостью крахмала к действию пищеварительных ферментов, пониженным содержанием усваиваемых углеводов в результате изменения наноструктуры крахмала хлеба. Способствует снижению уровня холестерина крови, может использоваться в диетотерапии больных ожирением, не повышает содержание сахара в крови и поэтому, должен быть рекомендован в составе диетотерапии даже больным сахарным диабетом.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДИК ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ПЕТЕЛЬ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ГИСТЕРЕЗИСА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ

Руководитель Р. М. Гречишкин

Тверской государственный университет
Кафедра прикладной физики

Физика сегнетоэлектриков является одним из основных разделов современной физики твердого тела. Одно из обстоятельств, определяющих постоянный интерес к сегнетоэлектрикам связано с богатейшими возможностями их технического использования. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы находят широкое применение в радиотехнических конденсаторах, гидроакустике, в устройствах управления лазерным излучением и генераторах оптических гармоник, в устройствах акустоэлектроники и оптической обработке информации, пиро- и пьезоприемниках и т.д. Для создания всех вышеперечисленных устройств необходимо измерить множество параметров сегнетоэлектриков. Эти параметры можно определить, изучив петлю гистерезиса. Существует несколько методов построения петель диэлектрического гистерезиса сегнетоэлектриков, такие как метод Сойлера-Тауэра, метод шунта и метод виртуальной земли. Каждый из этих методов имеет свои достоинства и недостатки.

В настоящей работе была поставлена цель: провести сравнительный анализ трех методов построения петель диэлектрического гистерезиса.

В данной работе были собраны измерительные установки трех методов определения параметров петель диэлектрического гистерезиса сегнетоэлектриков: метод Сойлера-Тауэра, метод шунта и метод виртуальной земли. Схемы методов шунта и виртуальной земли были собраны с аппаратным интегратором, также было проведено программное интегрирование выходного сигнала. Были выполнены измерения с различным количеством усреднений выходного сигнала, результаты которых были подвергнуты сравнительному анализу. Также проверяется применимость данных методов для частотных и высоковольтных измерений. В работе наглядно показаны достоинства и недостатки приведенных методов определения параметров петель гистерезиса сегнетоэлектриков.

ДИБЕНЗОЛХРОМ D_{6d} : ПЕРЕЧИСЛЕНИЕ ХИРАЛЬНЫХ И АХИРАЛЬНЫХ ИЗОМЕРОВ ЗАМЕЩЕНИЯ

Руководители: В.М. Смоляков, Д.Ю. Нилов
Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

Дан вывод хиральных и ахиральных изомеров замещения π -комплексного соединения $(C_6H_6)_2Cr$ с симметрией D_{6d} . Получены формулы симметрии Z и функции Φ числа изомеров на основе теоремы Пойа; найдены распределения изомеров в семействах $\rho(m)$ и в зависимости от числа $m = 12$ мест замещения.

Дибензолхром D_{6d} . Операции симметрии группы D_{6d} ($E, 2C_6, 2C_3, C^2, 6C_2, 2S_{12}, 2S^6_{12}, 2S^4_4, 6\sigma_d$), обменивая места возможного замещения, образуют циклы, записываемые в виде символов вида f^a_l, f^b_m , где a, β – число циклов, а l, m – их длина. Сумма всех f^a_l, f^b_m дает цикловой индекс группы для подсчета изомеров замещения $(C_6H_kX_lY_m)_2Cr$ без учета свойств хиральности

$$Z(D_{6d}) = 1/24\{f_1^{12} + 2f_6^2 + 2f_3^4 + 7f_2^6 + 4f_{12}^1 + 2f_4^3 + 6f_2^5 f_1^2\}. \quad (1)$$

Выделяя из группового множества D_{6d} только операции второго рода, получим формулу симметрии для подсчета ахиральных изомеров

$$Z^{Achir}(D_{6d}) = 1/12\{4f_1^{12} + 2f_4^3 + 6f_2^5 f_1^2\}. \quad (2)$$

Если из D_{6d} молекулы $(C_6H_6)_2Cr$ выделить группу поворотов, то получим цикловой индекс, учитывающий и зеркальные изомеры

$$Z(D_6) = 1/12\{f_1^{12} + 2f_6^2 + 2f_3^4 + 7f_2^6\}, \quad (3)$$

а для определения числа изомеров замещения, имеющих антипод, получим

$$Z^{Chir.par}(D_{6d}) = 1/24\{f_1^{12} + 2f_6^2 + 2f_3^4 + 7f_2^6 - 4f_{12}^1 - 2f_4^3 - 6f_2^5 f_1^2\}. \quad (4)$$

Используя, например, в (2) согласно Пойа подстановки вида $f_l^\alpha = (h^l + x^l + y^l + \dots)^\alpha$, получим производящую функцию: $\Phi^{Achir}(D_{6d}) = \frac{1}{12} \left\{ 4(h+x+\dots)^{12} + 2(h^4+x^4+\dots)^3 + 6(h^2+x^2+\dots)^5 (h+x+\dots)^2 \right\}. \quad (5)$

Коэффициент при $h^k x^l y^m \dots$ (после приведения подобных) в (2) равен числу ахиральных изомеров замещенного дибензолхрома вида $(C_6H_kX_lY_m)_2Cr \dots$. Замещенные распадаются на 77 семейств (см. таблицу).

Результаты перечисления изомеров важны при формировании файлов гомологических рядов и кристаллических структур и построении математических моделей* прогнозирования их свойств.

Табл. Число XY-замещенных изомеров π -комплекса $(C_6H_6)_2Cr D_{6d}$ по (2) и (4).

Семейство	$Z^{Achir.}$	$Z^{Хир.пар}$	Семейство	$Z^{Achir.}$	$Z^{Хир.пар}$
$h^{10}xy$	1	5	$h^6x^4y^2$	30	580
h^9x^2y	5	25	$h^6x^3y^3$	20	761
h^8x^3y	5	80	$h^5x^5y^2$	30	678
$h^8x^2y^2$	15	125	$h^5x^4y^3$	30	1140
h^7x^4y	10	160	$h^4x^4y^4$	46	1447
$h^7x^3y^2$	20	320
h^6x^5y	10	226	hxyzuvwfgqrt	0	19958400

* V. Smolyakov, D. Sokolov, D. Nilov, M. Polyakov, Proceedings III Intern. Conf. FMN2009, Moscow, 2009, vol. II, p. 388-389.

РАСЧЕТ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ И ПАРАХОРА ПО АДДИТИВНОЙ СХЕМЕ С ТИ НОНАНОВ

Руководители: В.М. Смоляков, Д.Ю. Нилов
Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

В работе проведен расчет поверхностного натяжения и парахора нонанов по схеме [1] и ТИ ${}^3\chi'_{ijmk}$ [2, 3] с учетом невалентных взаимодействий не далее чем через четыре атома по цепи молекулы:

$$P_{C_nH_{2n+2}} = n_1 p_{C-C} + n_2 p_{C..C}^C + n_3 p_{C..CC}^C + n_4 p_{C..CCC}^C + n_5 p_{C..CC}^{CC} + n_6 p_{C..CC}^{CC} + n_7 p_{C..CCC}^{CC} + n_8 p_{C..C}^{CCC} +$$

$$+ n_9 p_{C..CC}^{CCC} + n_{10} p_{C..CCC}^{CCC} + n_{11} p_{CC..CC}^{CCC} + n_{12} p_{CC..CCC}^{CCC} + n_{13} p_{CCC..CCC}^{CCC} + \sum_{j,m=2}^4 \sum_{i,k=2}^{j \leq k} (ijmk)^{\frac{1}{2}} p'_{ijmk} \quad (1)$$

где p_{C-C} – эффективные вклады (в свойство P) связей С-С; $p_{C..C}^C, p_{C..CC}^C, p_{C..CCC}^C$ – вклады пары, тройки и четверки атомов С около одного и того же скелетного атома; $p_{C..C}^{CC}, p_{C..CC}^{CC}, p_{C..CCC}^{CC}$ – вклады пары, тройки и четверки, атомов С через два скелетных атома по цепи молекулы; $p_{C..C}^{CCC}, p_{C..CC}^{CCC}, p_{C..CCC}^{CCC}, p_{CC..CC}^{CCC}, p_{CC..CCC}^{CCC}, p_{CCC..CCC}^{CCC}$ – вклады пары, тройки, четверки, пятерки и шестерки атомов С через три скелетных атома; p'_{ijmk} – суммарный вклад (в неявном виде) попарных и кратных взаимодействий не далее чем через четыре скелетных атома по цепи молекулы; $n_1, n_2, n_3, \dots, n_{13}, {}^3\chi'$ – их числа, определяемые как число способов наложения данного подграфа на МГ алкана. Расчетная формула (1) содержит 14 постоянных и учитывает в явном виде валентные, парные и кратные взаимодействия не связанных атомов не далее чем через четыре атома по цепи молекулы. Неизвестные параметры уравнения (1) для расчета σ, P_{ch} алканов, найдены методом наименьших квадратов (мнк) из опытных данных. С использованием предложенной модели проведены численные расчеты поверхностного натяжения σ и парахора P_{ch} , углеводородов C_9H_{20} , не изученных экспериментально.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Смоляков В.М., Нилов Д.Ю. // Ж. «Перспективные материалы». РАН, Мин. Обр. и Науки РФ. Спец. вып. (6), ч. I, 2008. С. 181 – 185.
2. Смоляков В.М., Нилов Д.Ю., Гребешков В.В. // Структура и динамика молекулярных систем: Сб. статей. Вып. XVII, Ч.2 – Уфа: ИФМК УНЦ РАН, 2010, С. 95 – 98.

СИНТЕЗ САМООТВЕРЖДАЮЩИХСЯ ЭПОКСИДНЫХ СМОЛ

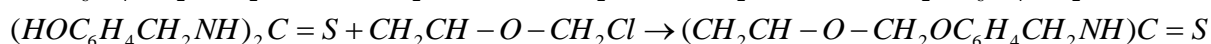
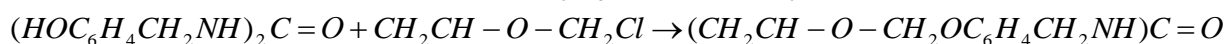
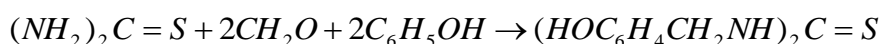
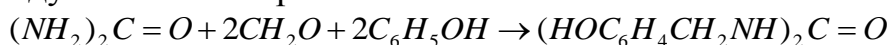
Руководитель Б.К. Крупцов

Тверской государственный технический университет
Кафедра технологии полимерных материалов

Эпоксидные смолы, полученные при поликонденсации эпихлоргидрина с бисфенолами, имеют ряд ценных свойств, таких как высокая адгезионная способность, высокие механические и электроизоляционные свойства, хорошая химостойкость и универсальность. Благодаря этому эпоксидные смолы нашли широкое применение для изготовления клеев, лакокрасочных покрытий, в текстильной промышленности, как материалы медицинского назначения, как высокопрочные конструкционные материалы в ракетной технике, авиации, судостроении, машиностроении.

Синтез самоотверждающихся эпоксидных смол представляет большой интерес, так как это значительно упрощает технологию их применения. В данной работе исследуются самоотверждающиеся эпоксидные смолы, содержащие в цепи амидогруппы. Амидогруппы в продукте повышают эластичность, адгезию и механические свойства. Введение в молекулу эпоксидной смолы серы (например, продукты на основе тиомочевины, тиогидротриазинов или этилентиомочевины), позволяют повысить адгезию и термоокислительные свойства [1].

На основе ранее проведенных работ [2], в лабораторных условиях получен бисфенол на основе мочевины, формальдегида и фенола (N,N'-(оксиметилбензил)-мочевина) и бисфенол на основе тиомочевины, формальдегида и фенола (N,N'-(оксиметилбензил)-тиомочевина. Далее на основе данных бисфенолов были проведены синтезы по получению эпоксидных смол, так же был осуществлен качественный и количественный анализ полученных смол, определены некоторые физические и химические свойства продукта и мономеров.



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пакен, А.М. Эпоксидные смолы и эпоксидные соединения / А.М. Пакен. Л., Ленинградское отделение госхимиздата, 1962. 964 с.
2. Крупцов, Б.К. Физика и химия полимеров / Б.К. Крупцов. Тверь, 2000. Вып. 6.С. 168–169.

ИК – СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ, ОБЛАДАЮЩИХ ПРОТИВОВОСПОЛИТЕЛЬНОЙ АКТИВНОСТЬЮ

Руководитель Н.В.Баранова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

В настоящее время проблема фальсифицированных лекарственных средств во всем мире становится все более серьезной. В нашей стране она представляет растущую угрозу здоровью российских граждан, затрагивает экономические интересы производителей и государства.

Объектами настоящего исследования выбраны нестероидные противовоспалительные лекарственные средства, фенилпропионовой кислоты (ибупрофен, «Татхимфармпрепарат»).

Метод ИК спектроскопии не является экспрессным и не позволяет проводить анализ в походных условиях, однако с его помощью можно практически однозначно установить подлинность лекарственного средства. Причем анализировать можно не только субстанции, как это принято в фармакопейном анализе, но и лекарственные препараты*.

Более широкому использованию данного метода для анализа субстанций препятствует отсутствие образцов сравнения. В связи с этим оптимизация спектроскопического определения объектов исследования с использованием внешних образцов сравнения – является актуальной проблемой.

Для анализа исследуемых таблеток ибупрофена использовали метод получения спектров пропускания в средней ИК – области. Для этой цели готовили образцы лекарственных веществ в виде таблеток в бромиде калия. Около 1 мг вещества перетирали с 100 мг бромида калия. Полученная смесь помещалась в пресс-форму, удалялся воздух при помощи вакуум – насоса и прессовалась под давлением. В результате получалась прозрачная таблетка толщиной 1 мм. ИК–спектры регистрировались на ИК–Фурье спектрофотометре EQUINOX 55 (Bruker) в области 400 – 4000 см⁻¹.

Показано, что исследуемые образцы соответствуют составу, указанному на упаковке.

* Арзамасцев А. П., Степанова Е. В., Титова А. Б. Анализ ранитидина гидрохлорида методом ближней ИК – спектроскопии. // Химико–фармацевтический журнал. 2009. № 7 С. 51–53.

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРОЦЕССОВ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ
НА РАСТВОРИМОСТЬ КАЛЦИЕВЫХ СОЛЕЙ

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

В представленной работе рассматривается процесс получения минерального комплекса из яичной скорлупы с повышенной биологической ценностью и биодоступностью путем комплексообразования с этилендиаминдиглантарной кислотой, которая при поступлении в биологический организм разлагается на составляющие аминокислоты*.

Получение минерального комплекса осуществляется взаимодействием порошка яичной скорлупы дисперсностью не более 0,09 мм с этилендиаминдиглантарной кислотой при их соотношении 3,6:1 соответственно в водной среде при 90⁰С в течение 20 минут с последующим фильтрованием, выпариванием раствора и сушкой до постоянной массы при 100⁰С.

Промытую водой, высушенную и измельченную яичную скорлупу (размер частиц не более 0,09 мм, влажность не более 0,5%) смешивают в течение 20 минут с водой (9-10-кратный избыток по отношению к массе скорлупы), нагретой до 90⁰С. Необходимо строго соблюдать последовательность добавления реагентов. Для проведения реакции используется емкость вместимостью в 6–7 раз больше объема реакционной смеси. Далее к раствору добавляют избыток воды температурой 20⁰С, необходимый для растворения образовавшихся комплексонов микроэлементов. После растворения смесь очищают фильтрованием, фильтрат выпаривают. Полученный сухой остаток высушивают до постоянной массы при 100⁰С и измельчают. Получают целевой продукт в виде белого порошка.

* Hyvonen H., Aksela R. «Complexation of some environmentally friendly carboxylic acid ligands with La³⁺ ion in aqueous solution», Journal of Coordination Chemistry, V. 65, No. 19, P. 3352–3362.

ИЗУЧЕНИЕ МИНЕРАЛЬНОГО СОСТАВА ОЗЕР УДОМЕЛЬСКОГО РАЙОНА

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

В ходе изучения состава вод в трех озерах Удомельского района Тверской области (озеро Песьво, озеро Кубыча и озеро Еремково) нами были получены данные по кислотности среды, присутствию солей жесткости (кальция и магния), а также определено содержания калия и натрия.

Особое внимание было уделено отношению кальция и натрия в воде. В естественных условиях этот показатель приближается в 10, т.е. содержание калия в воде должно быть на порядок меньше, чем натрия. Медики утверждают, что вода с низким соотношением натрия и калия способствует увеличению риска сердечно-сосудистых заболеваний.

Результаты исследования сведены в таблицу, где дано сравнение содержания изученных металлов не только в разных озерах, но и в разные сезоны (зима/лето).

Макрокомпонентный состав водных источников (мг/л)

Озера Удомельского района	РН		Натрий		Калий		Натрий/Калий		Кальций		Магний	
	лето	зима	лето	зима	лето	зима	лето	зима	лето	зима	лето	зима
Озеро Песьво	8,06	8,39	1,8	1,8	1,5	1,3	2	2	0,4	0,4	0,5	0,1
Озеро Кубыча	7,79	7,44	1,7	1,8	1,6	0,2	1	8	0,2	0,3	0,2	0,3
Озеро Еремково	6,89	6,36	0,9	1,5	0,2	0,2	4	7	0,3	0,1	0,2	0,1
ПДК по СанПиН 2.1.4.1074-01	6,50 -	6,50 -	—	—	12,0	12,0	—	—	—	—	—	—

В озерах Удомельского района вода мягкая и в зимнее время (когда почва мерзлая и прибрежные загрязнения не поступают в озера) соотношение Na/K составляет 7–8, т.е. в озерах Кубыча и Еремково отсутствуют антропогенные загрязнения. В незамерзающем озере Песьво соотношение Na/K равно 2, что характеризует неблагоприятное состояние воды в озере т.е. загрязнение антропогенными веществами.

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ В ИЗУЧЕНИИ ЭНТРОПИИ АМИНОВ

Руководитель М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Целью настоящей работы является теоретико-графовое изучение корреляций “структура – энтропия” аминов.

В работе был проведен отбор топологических индексов (ТИ) с учётом их дискриминирующей способности, построены графические зависимости вида “ $S^0_{298(r)}$ – ТИ”, “ $S^0_{298(r)}$ – номер изомера” и “ТИ – номер изомера”. Найдено, что в одних случаях наблюдается симбатное изменение энтропии и топологического индекса, например, энтропии и числа Винера W для изомеров C_3H_9N и $C_4H_{12}N$, это свидетельствует о хорошей корреляции между $S^0_{298(r)}$ и ТИ. В других случаях (как $S^0_{298(r)}$ и H) такой корреляции нет. С увеличением числа изомеров корреляции между $S^0_{298(r)}$ и ТИ усложняются. Эти соображения нужно принимать во внимание при аналитическом представлении зависимостей “ $S^0_{298(r)}$ – ТИ графа молекулы”. Данный графический метод позволяет просто и наглядно оценить корреляционную способность ТИ со свойствами.

Также в работе обсуждены возможности теоретико-графового подхода в построении и интерпретации аддитивных схем расчёта и прогнозирования аминов (отмечено, что многие известные ТИ участвуют как числа параметров в конструировании таких схем).

Так для аминов получена следующая формула

$$P = p_1 b_{cc} + p_1^* b_{cN} + p_2 \Gamma_{cc} + p_2^* \Gamma_{cN} + R \Delta_{ccc} + R^* \Delta_{ccN} + p_3 \tau_{cc} + p_3^* \tau_{cN} + p_4 \omega_{cc} + p_4^* \omega_{cN}$$

Здесь p_1, p_2, p_3, p_4 – соответственно число путей (рёбер) длины один, два, три и четыре; R – число троек смежных рёбер; $\Gamma^*_{cc}, \tau^*_{cc}, \omega^*_{cc}$, – эффективные взаимодействия пар атомов С соответственно через один атом, два, три и четыре атома и т.д.

Также была установлена аналитическая зависимость $S^0_{298(r)} = f(\text{ТИ})$ отвечающая наиболее тесной корреляционной связи между теплоёмкостью и ТИ.

По полученным уравнениям проведены численные расчеты энтропии аминов. Рассчитанные величины согласуются с экспериментальными и позволяют предсказать недостающие значения свойств членов исследуемого ряда.

АБСОРБЦИЯ ИОНОВ Cu^{2+} НА ПОЛИАНИЛИНЕ

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Электропроводный полимер-полианилин имеет в своей структуре донорные группы иминохиноидного типа и фенилдиаминного. Обе эти группы потенциально способны координироваться с ионами многих металлов. Это может привести к хемосорбции соответствующих ионов. Целью настоящей работы было изучение абсорбционной способности полианилина по отношению к ионам Cu^{2+} .

Полианилин был синтезирован нами по традиционной методике, методом окислительной полимеризации анилина в кислой среде под действием персульфата аммония. В реакционную смесь был добавлен силикагель “СНЕМАРОЛ” с целью осаждения полианилина на последний. Полианилин был получен в виде соли эмиральдина. Полученный таким образом полианилин на силикагеле и был использован для экспериментов.

Абсорбцию измеряли статическим методом при 20°C и $\text{pH}=5,5$. Контроль за равновесной концентрацией ионов Cu^{2+} в растворе осуществляли комплексометрическим титрованием, используя в качестве титранта-трилон-Б и индикатора-мурексида.

Эксперименты показали, что максимальная абсорбция наблюдается через 20 минут, при этом соотношение “полианилин: абсорбированные ионы Cu^{2+} ” рассчитывается как 1:1. Из чего следует, что, вероятно, ион меди координирует один атом азота. Остальные координационные места меди, вероятно, дополняются хлорид-ионами.

Найденные закономерности можно считать начальным этапом комплексного исследования абсорбционных свойств полианилина, что имеет большое теоретическое и практическое значение.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТА ХОЛЛА В СОЕДИНЕНИЯХ $\text{La}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si})_{13}$

Руководитель Ю.Г. Пастушенков

Тверской государственной университет
Кафедра магнетизма

Сплавы $\text{La}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si})_{13}$ образуют особый класс материалов, которые используются в прототипах магнитных холодильников. Будучи гораздо дешевле, чем Gd-металла, этот класс материалов проявляют схожие магнитокалорические свойства: $\Delta S_m = 7,4$ Дж/кгК/Т и $\Delta T_{ад} = 2,5$ К/Т.

Гигантский магнитокалорический эффект в данных соединениях обусловлен термически и магнитно индуцированным метамагнитным фазовым переходом первого рода из пара- в ферромагнитное состояние [1; 2]. Наряду с большим изменением энтропии ΔS высокая хладоемкость материалов объясняется особенными деталями фазового перехода: благодаря наличию плоской поверхности на зависимости свободной энергии от магнитного момента с несколькими минимумами этой системе присущ низкий гистерезис [3]. Однако в сплавах типа $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$ экспериментально наблюдается гистерезис [1; 4] и недавно он был объяснен влиянием изменения микроструктуры [5]. Замещение атомов железа атомами кобальта приводит к смене рода фазового перехода, и как следствие к исчезновению гистерезиса. Таким образом, некоторые аспекты механизма переноса электронов и деталей электронной структуры этой системы остаются невыясненными.

В данной работе электронная система была изучена методом исследования аномального и нормального эффекта Холла в широком интервале полей и температур. Установлено, что для сплавов, характеризующимся переходом первого рода, основным механизмом проводимости является дырочный. При приближении к точке Кюри наблюдается тенденция к смене знака нормального эффекта Холла. При замещении атомов Fe на Co происходит смена проводимости на электронную.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Fujita A., и др. // Phys. Rev. B. 2003. 67. С.104416.
2. Lyubina J., и др. // Phys. Rev. Lett. 2008. 101. С.177203.
3. Kuz'min M. D. and Richter M. // Phys. Rev. B. 2007. 76. С.092401.
4. Katter M. и др. // IEEE Trans. Magn. 2008. 44. С.3044.
5. Moore J. D., и др. // Appl. Phys. Lett. 2009. 95. С.252504.

Д. Долотин, А. Касаткина, М. Исханов

ВЛИЯНИЕ УДОБРЕНИЙ И ГЕРБИЦИДОВ НА ПРОДУКТИВНОСТЬ
КУЛЬТУР СЕВООБОРОТА

Руководитель В.П. Сутягин

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Удобрения и гербициды считаются основными факторами стабилизации функционирования системы севооборотов. Однако в последние годы в хозяйствах вносят небольшие дозы удобрений, чаще всего не по расчётам, а по финансовой возможности. В наших исследованиях предусматривалось изучение севооборота на трёх фонах минерального питания (таб. 1) и двух вариантах защиты посевов от сорняков (табл. 2).

Данные табл. 1 свидетельствуют о том, что внесение удобрений в дозе 15 кг/га азота, 15 кг/га фосфора и 15 кг/га калия способствовали увеличению продуктивности севооборота на 1,1 ц/га кормовых единиц, а удвоение нормы внесения – на 1,23 ц/га кормовых единиц.

Таблица 1. Продуктивность культур севооборота

Фон питания	Викоовёс	Овёс+ клевер	Клевер	Ячмень	среднее
О	3,33	1,33		1,24	1,97
НРК15	5,82	1,87	5,42	1,80	3,73
НРК30	6,12	2,04	5,45	1,82	3,86
среднее	5,09	1,75	5,17	1,62	3,41
Прибавка от НРК15	2,49	0,54	0,80	0,57	1,10
Прибавка от НРК30	2,80	0,71	0,83	0,58	1,23

Гербициды оказали неоднозначное влияние на продуктивность севооборота. Наибольшая прибавка отмечается в посевах овса и ячменя. В целом по севообороту применение гербицидов не эффективно.

Таблица 2. Влияние гербицидов на продуктивность культур севооборота

Гербициды	Викоовёс	Овёс+клевер(зерно)	Клевер	Ячмень	среднее
Без гербицидов	5,05	1,57	5,77	1,39	3,44
Гербициды	5,13	1,93	4,57	1,85	3,37
среднее	5,09	1,75	5,17	1,63	3,41
± Прибавка	0,08	0,36	-1,20	0,46	-0,07

Данные результаты необходимо иметь в виду в кормовых севооборотах, где получение экологически чистых кормов предпочтительно.

ИЗУЧЕНИЕ ФРАКТАЛЬНОЙ РАЗМЕРНОСТИ АГРЕГАТОВ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОКЛАСТЕРОВ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Руководитель В.М. Самсонов
Консультант Ю.В. Кузнецова

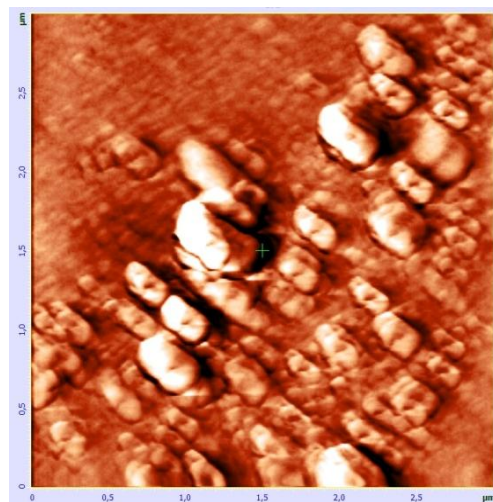
Тверской государственный университет
Кафедра теоретической физики

Рельеф поверхности твердого тела может рассматриваться как важный частный случай микро- и наногетерогенных систем, когда микро- и наноразмерные частицы являются частями соответствующей объемной фазы или тонкой пленки. В большинстве случаев гладкие, в той или иной степени, твердые поверхности, являются предпочтительными для практического применения, например в оптике. Тем не менее, существуют некоторые явления, интересные как с фундаментальной так и с прикладной точек зрения, для которых шероховатость поверхности является главным фактором. В качестве примера можно привести гигантское явление комбинационного рассеяния света, наблюдающееся при наличии фрактальной нанокластеров благородных металлов. Фрактальная структура твердых поверхностей, в том числе внешней поверхности твердых пленок, изучена значительно меньше, чем фрактальная структура коллоидных и аэрозольных агрегатов. Фрактальность размерность кластера D определяется уравнением

$$N = \rho^* (d/a)^D \quad (1)$$

где d – диаметр кластера, а ρ^* – приведенная плотности, a – характерный диаметр мономера.

Одно из АСМ-изображений пленки Au на слюде с агрегатами нанокластеров (мономеров) представлено на рисунке 1. Видно, что сам мономер также имеет кластерную структуру, т.е. состоит из мономеров меньшего размера. Это является индикатором того, что кластеры, находящиеся на рассмотрении имеют фрактальную структуру. Вывод подтверждается линейной зависимостью $\log N$ от $\log(d/a)$. Наклон прямой соответствует фрактальной размерности интервале от 1,4 до 1,6. Результаты были интерпретированы в терминах моделей ассоциации кластера и по сравнению с предыдущими экспериментальными результатами других авторов.



АСМ-изображение нанокластера
Au на пленке Au.

Н.А. Епифанова, Н.И. Кротова, И.А. Пресняков

КОМПЛЕКСНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ЭТИЛЕНДИАМИНА

Руководители: Л.И. Ворончихина, О.Е. Журавлев

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Внутрикомплексные соединения металлов, содержащие длинноцепочечную алкильную группировку и гидрофильные ионы металлов, связанных внутрикомплексной связью, в отличие от обычных комплексных соединений, должны обладать поверхностной активностью, поскольку по своим структурным признакам они принадлежат к числу поверхностно-активных веществ (ПАВ). Нетрадиционное построение таких молекул не позволяет отнести эти соединения к какому-либо определенному классу ПАВ, однако подобные ПАВ - хелатные комплексы моноалкиловых эфиров ЭДТА и различных металлов известны как эффективные диспергаторы и эмульгаторы.

В настоящей работе синтезированы внутрикомплексные соединения меди и железа на основе производных этилендиамина, содержащие длинноцепочечные радикалы $C_{10}H_{21}$, $C_{12}H_{25}$, $C_{16}H_{33}$ и используемые в качестве гидрофобных внутрикомплексных лигандов. N-алкил- и N-ацилэтилендиамины были получены алкилированием или ацилированием этилендиамина с соотношении 1:1. Монопроизводные были выделены перегонкой в вакууме.

Внутрикомплексные соли железа и меди получены в водно-этанольном растворе при соотношении лиганд : соль 2:1 при 20°C.

Для синтезированных соединений были изучены их коллоидно-химические свойства, смачивающая и пенообразующая способности. В виду низкой растворимости комплексов максимально возможная рабочая концентрация растворов составляла $(0,5-1,0) \cdot 10^{-3}$ моль/л. Исследованные соединения обладают хорошей смачивающей способностью как гидрофильных, так и гидрофобных поверхностей и снижают поверхностное натяжения воды в пределах 40–50 мН/м.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

Н.А. Епифанова, Н.И. Кротова, И.А. Пресняков

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА КАТИОННЫХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ НА ОСНОВЕ СТИРОМАЛЯ

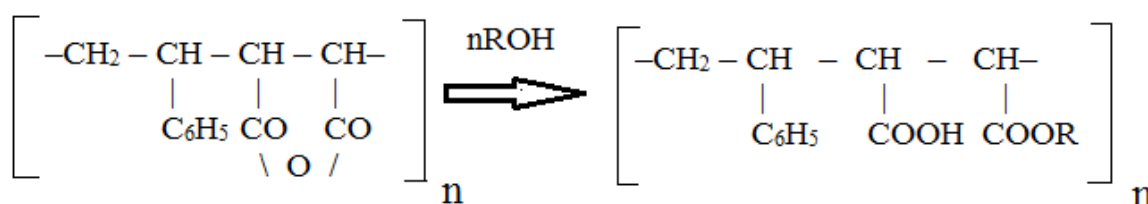
Руководители: Л.И. Ворончихина, О.Е. Журавлёв

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Высокомолекулярные катионные поверхностно-активные вещества (КПАВ) в последнее время привлекают внимание исследователей в связи с их использованием в системах водоочистки, осветления и фильтрации суспензий в качестве коагуляторов и флокулянтов.

В настоящей работе представлены результаты целенаправленного синтеза высокомолекулярных катионных ПАВ, на основе стироля; изучены их физико-химические и коллоидные свойства, и возможность применения их для регулирования свойств дисперсных систем.

Исходный сополимер стиромаль был получен взаимодействием малеинового ангидрида и стирола в соотношении 40:60. Последующий этерификацией стиромалья диалкиламиноэтанолам были получены сложные эфиры. Реакция протекает по схеме:



Где R= (CH₃)₂NCH₂CH₂; (C₂H₅)₂NCH₂CH₂.

Катионные ПАВ получены кватернизацией сложных эфиров, в качестве субстратов были использованы октил-, додецил-, цетилбромиды. Строение полученных соединений подтверждено данными по определению кислотного числа, степени этерификации и данными ИК - спектроскопии. Сложные эфиры стиромалья представляет собой типичные маслорастворимые ПАВ и представляют интерес как полупродукты для синтеза водорастворимых высокомолекулярных ПАВ. Кватернизованные производные сложных эфиров стиромалья являются типичными представителями высокомолекулярных катионных ПАВ.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

ДИНАМИКА ИЗМЕНЕНИЯ АГРОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПАХОТНЫХ ПОЧВ ТВЕРСКОЙ ОБЛАСТИ ЗА ПОСЛЕДНИЕ ГОДЫ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Проводимое в Тверской области агрохимическое обследование пахотных почв позволяет выявить динамику изменения их эффективного плодородия. Именно эффективное плодородие оказывает решающее влияние на обеспечение возделываемых сельскохозяйственных культур питательными веществами. Мы приводим мониторинговые данные по изменению показателей кислотности и содержания подвижных форм калия, за период с 1988 по 2006г, или за последних 3 тура агрохимического обследования. Полученные при этом данные представлены в табл. 1 и 2. Они свидетельствуют, что в земледелии области наметилась тенденция в подкислении

Таблица 1. Динамика изменения обменной кислотности

Туры обследован ия	Всего обслед., га	Группировка почв по степени кислотности								Средн е взвеше нное значен ие
		I сильно Кислые 4,1-4,5		II средне Кислые 4,6-5,0		III-V слабо кислые и близкие к нейтральным, 5,1-6,0		IV нейтральные Более 6,0		
		га	%	га	%	га	%	га	%	
5 тур 1988- 93	1442139	10673 4	7,4	24652 6	17,1	79725 3	55,3	29162 6	20,2	5,5
6 тур 1991- 2001	1294828	77539	6,0	16454 6	12,7	70760 1	54,7	34497 4	26,6	5,65
7 тур 1996- 2006	1193130	63156	5,4	17355 5	14,5	69839 6	58,5	25774 8	21,6	5,5

Таблица 2. Динамика изменения обменного калия

Туры обследовани я	Всего обслед., га	Группировка почв по степени кислотности								Средне взвеше нное значени е
		I оч. низкое менее 40		II низкое 41-80		III Среднее и повышенное, 81-170		IV Высокое 171-250		
		га	%	га	%	га	%	га	%	
5 тур 1988- 93	144213 9	23074	1,6	40812 6	28,3	79606 0	55,2	21487 9	14,9	113
6 тур 1991- 2001	129482 8	30314	2,3	46615 7	36,0	68152 9	52,7	93632	7,2	103
7 тур 1996- 2006	119313 0	38328	3,2	47023 7	39,4	61454 7	51,5	59315	5,0	96

почв, и особенно заметно произошло снижение содержания обменного калия. Поэтому важно в первую очередь предусмотреть пополнение в почвах области именно данного элемента.

А.М. Жерихова

ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ АЛКИНОВ

Руководитель М.Г. Виноградова
Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Экспериментальные сведения по энтальпии образования в различных классах органических и иных соединений скудны и порой разноречивы. Поэтому важное значение имеет развитие расчетных методов их определения.

Цель настоящей работы – установление количественных корреляций «структура – энтальпия образования» в алкинах.

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи:

1. Оценка составления численных данных по энтальпии образования алкинов.
2. Анализ экспериментальных данных.
3. Проведение численных расчетов,
4. Построение и анализ графических зависимостей “энтальпия образования – число углеродных атомов”, “энтальпия образования – степень замещения”.

В результате проделанной работы были проанализированы графические зависимости свойства вещества – степень замещения l . Найдено, что эти они в общем случае нелинейны, однако линии замещения на одну и ту же группу симбатны между собой.

Данные зависимости служат ценным дополнением к расчетно-аналитическому исследованию. Они наглядно позволяют оценить влияние вида и числа разных заместителей, а также графическим путем получить недостающие значения свойств.

В работе также проведены численные расчеты по энтальпии образования алкинов.

Рассчитанные величины вполне согласуются с экспериментальными, и позволяют предсказать в пределах ошибок опыта недостающие значения.

АГРОЭКОЛОГИЧЕСКАЯ ОДНОРОДНОСТЬ ОСАДКОВ СТОЧНЫХ ВОД

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Поступающие на станции очистки сточные канализационные воды городов и поселков городского типа заметно отличаются по своему химическому составу в зависимости от соотношения бытовых и промышленных сбросов. Наиболее концентрированными по содержанию тяжелых металлов (ТМ) являются сбросы от промышленных предприятий, что обуславливает и более высокое количество в получаемом осадке сточных вод (ОСВ) таких элементов. Одновременно количественное содержание ТМ существенно колеблется и по годам.

Мы исследовали агроэкологический состав ОСВ г. Ржева и торфопометного компоста в течение двух сезонов (табл. 1). Полученные данные свидетельствуют, что ОСВ имели более высокую влажность, зольность, содержали больше общих форм фосфора, меди, цинка, никеля, хрома и кадмия. ТПК оказался богаче ОСВ лишь по количеству органического вещества и калия. Что касается наличия в ОСВТМ, то их можно оценить как среднезагрязненные. При относительно невысоких разовых дозах внесения ОСВ в почву (20-30 т/га) и мониторинге накопления,

Таблица. Агроэкологическая характеристика ОСВ и компоста на основе помета, данные на сухую массу

Показатели	Полевой опыт			
	2009 г.		2011 г.	
	ОСВ	ТПК	ОСВ	ТПК
Влажность, %	80	66	72	68
Органическое вещество, %	44	82	47	73
Зола, %	36	11	43	17
Азот, %	1,92	1,48	1,78	1,55
Фосфор, %	3,46	0,97	2,78	1,12
Калий, %	0,63	1,21	0,46	1,54
Медь, мг/кг	673	16	564	19
Цинк, мг/кг	782	34	827	39
Свинец, мг/кг	31	сл.	25	сл.
Никель, мг/кг	328	12	274	16
Хром, мг/кг	87	26	54	29
Кадмий, мг/кг	19	6	11	7

их вполне можно использовать в полевых и кормовых севооборотах. Это согласуется с требованиями ГОСТ на данный продукт. Следует отметить годовую неоднородность состава осадков. Образцы 2009 г. содержали больше практически всех исследуемых показателей, за исключением цинка и органического вещества.

ВЛИЯНИЕ КОМПЛЕКСОНАТА И МИНЕРАЛЬНЫХ УДОБРЕНИЙ НА ПРОДУКТИВНОСТЬ СТОЛОВОЙ МОРКОВИ

Руководители: И.Н. Барановский, Т.И. Смирнова
Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

В настоящее время в овощеводстве широко применяются экологически безопасные, быстро разлагающиеся в естественных условиях микроудобрения и физиологически активные препараты. Они призваны максимально реализовать физиологические возможности овощных культур. Одним из таких соединений является комплексон ЭДДЯК. На его основе, на кафедре агрохимии, почвоведения и агроэкологии ТГСХА разработана композиция Zn,Cu,Co,B-ЭДДЯК. Состав вводимых микроэлементов выявлен по результатам проводимых агрохимических анализов почв региона Верхней Волги. Одновременно учитывали биологические особенности корнеплодов и их нуждаемость именно в представленных элементах, с учетом оказываемого влияния как на урожайность, так и на сохранность готовой продукции.,

Схема полевого мелкоделяночного опыта включала варианты: 1-контроль (без удобрений), 2,3,4-й - три варианта с NPK в расчетных дозах на получение соответственно 400, 450 и 500 ц/га, следующие варианты (5, 6, 7) с обработкой семян комплексонатом, 8, 9, 10 – аналогично 2,3 и 4, но с внекорневым использованием препарата.

Некорневая подкормка проводилась дважды: в фазе пучковой зрелости и, спустя 2 недели, в период активного формирования корнеплодов. Для посева использовали семена гибрида F1 «Нирим» фирмы Бейо. Посев провели 12 мая 2014 г. Следует отметить, что первая половина вегетационного периода этого года оказалась засушливой и жаркой, количество выпавших осадков составило лишь 71% от среднегодовой нормы, что привело к резкому недостатку в почве продуктивной влаги. Это негативно сказалось как на появлении всходов, так и на их последующем развитии. Тем не менее, обработка растений комплексонатом с микроудобрениями позволила увеличить урожайность столовой моркови на 1,7–3,9% (см. диаграмму).

На диаграмме мы можем проследить динамику значений продуктивности культуры, согласно схеме опыта.

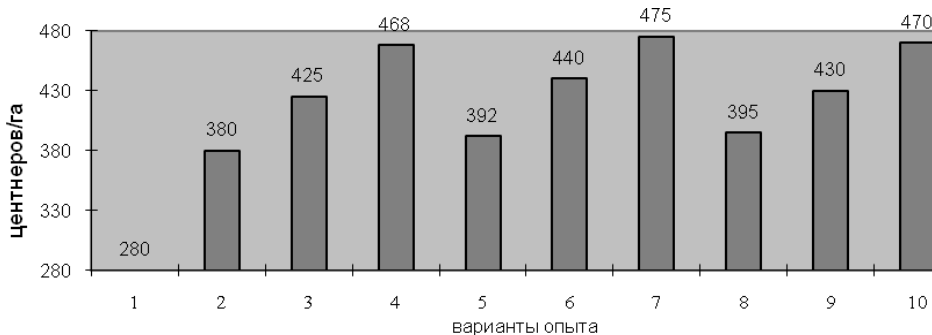


Диаграмма - Влияние комплексоната B, Zn, Cu, Co - ЭДДЯК на продуктивность столовой моркови

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ ИОНОВ МЕДИ С БЕТА-ЛАКТАМНЫМИ АНТИБИОТИКАМИ НА ПРИМЕРЕ АМПИЦИЛЛИНА

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Постоянно возрастающее число применяемых в медицине антибиотиков делает актуальным изучение их взаимодействия с катионами металлов, прежде всего входящих в состав живых организмов. Анализ литературы показывает, что антибиотики могут образовывать с катионами металлов комплексные соединения, вследствие чего меняются их химические свойства и биологическая активность. Целью работы является исследование ионных равновесий с участием антибиотика пенициллинового ряда – ампициллина и ионов меди.

Методами рН-метрии и математического моделирования исследовано взаимодействие ионов меди с ампициллином в водном растворе при 37 °С на фоне 0.15 М NaCl. Предварительно исследованы химические свойства равновесия в подсистеме: NaAmp-NaCl-H₂O. Обнаружено образование комплексных форм различного состава и устойчивости. Определены константы устойчивости комплексов.

Все расчеты моделей равновесий производились по разработанным алгоритмам, реализованным в универсальной компьютерной программе New DALSFЕК (КСМ Soft, 2000 г.). После обработки кривых титрования NaAmp – NaCl – H₂O и NaAmp – Cu²⁺ – NaCl – H₂O в первом случае получена модель, включающая две формы: HAmp, H₂Amp⁺, во втором – также две формы: CuAmp⁺, Cu(OH)Amp. Полученные значения логарифмов констант устойчивости, включая доверительные интервалы, представлены в таблице.

Таблица. Логарифмы констант образования комплексных форм

lgK(HAmp)	6.70736 ± 8.47E-0003
lgK(H ₂ Amp)	9.48741 ± 1.66E-0002
lgK(CuAmp)	5.50624 ± 1.09E-0001
lgK(Cu(OH)Amp)	1.56883 ± 7.74E-0002

Рассчитанные оценки соответствующих констант совпадают с литературными данными.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

КАТАЛИТИЧЕСКОЕ ГИДРИРОВАНИЕ ЛЕВУЛИНОВОЙ КИСЛОТЫ,
КАК ОСНОВА ПОЛУЧЕНИЯ НОВЫХ ВИДОВ БИОТОПЛИВ

Руководитель Л.Ж. Никошвили

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Левулиновая кислота (ЛК) является одним из веществ, которое может быть получено из древесины путем кислотного гидролиза. На сегодняшний день процесс производства биотоплива на основе ЛК вызывает огромный интерес. ЛК может служить предшественником в синтезе гамма-валеролактона (ГВЛ) [1]. Кроме того, ЛК может быть трансформирована в 2-метилтетрагидрофуран (2-МТГФ), топливную добавку. 2-МТГФ допустимо смешивать до 70% с бензином без нанесения вреда двигателям внутреннего сгорания, и при этом достигается аналогичный пробег. Существует возможность прямого преобразования ЛК в 2-МТГФ, однако улучшенные выходы продукта могут быть достигнуты путем косвенных маршрутов, которые протекают через производство ГВЛ в качестве промежуточного вещества [2].

Гидрирование ЛК до ГВЛ – процесс каталитический. При гидрировании ЛК применяются гомогенные и гетерогенные катализаторы [3]. В настоящее время наиболее перспективным катализатором гидрирования ЛК до ГВЛ является 5%-Ru/C. Однако, в случае использования рутений-содержащих катализаторов, если требуется проводить реакцию в мягких условиях и в экологически чистых растворителях (воде), то для увеличения производительности требуется добавление со-катализаторов либо повышение температуры. При этом далеко не последнюю роль в повышении выхода ГВЛ играет размер частиц и степень дисперсности каталитически активной фазы. Таким образом, разрабатываемые системы на основе Ru-содержащих наночастиц, стабилизированных полимерной матрицей сверхсшитого полистирола, являются перспективными катализаторами гидрирования ЛК до ГВЛ и могут составить конкуренцию традиционному Ru/C.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 15-08-01469).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Carvalheiro F., Duarte L.C., Girio F.M. // J. Sci. Ind. Res. 2008. Vol. 67. P. 849.
2. Huber G.W., Corma A. // Angew. Chem. Int. Ed. 2007. Vol. 46. P. 7184.
3. Mehdi H. [et al.] // Topics in Catalysis. 2008. Vol. 48. P. 49.

О.А. Землянушина, Г.М. Хоменко

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МАССЫ ПОЛИАМИДОВ

Руководитель Е.И. Лагусева

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии полимерных материалов

Молекулярная масса – одна из основных характеристик полимеров. Значение этой величины, возможность ее надежного определения и варьирования важны, как для разнообразных технологических процессов, так и для интерпретации иных фундаментальных характеристик полимеров.

Вискозиметрия – гидродинамический метод, основанный на измерении вязкости жидкостей и растворов. Метод позволяет определить относительную молекулярную массу растворенного полимера, а также получить данные о размерах и форме его молекул. Вязкость можно определять различными способами, например методом истечения жидкости через капилляр, методом падающего шарика и др.

Определение вязкости методом истечения жидкости основано на измерении времени истечения одинаковых объемов раствора и растворителя через один и тот же капилляр и при одной и той же температуре, что позволяет рассчитать относительную вязкость.

Существуют несколько уравнений, связывающих вязкость растворов полимеров с их концентрацией. В данной работе для расчета молекулярной массы гомополигексаметиленизофталамида (ПА 6И), полученного газожидкостной поликонденсацией [1], проводили, используя эмпирическое уравнение Марка-Хувинка [2]

$$[\eta] = 3,24 \cdot 10^{-2} \cdot \bar{M}^{0,78}$$

где $[\eta]$ – характеристическая вязкость (характеризует гидродинамическое сопротивление потоку молекул данного полимера), $\text{см}^3/\text{г}$; $3,24 \cdot 10^{-2}$ – коэффициент пропорциональности; \bar{M} – молекулярная масса ПА-6И; 0,78 – показатель, отражающий влияние формы макромолекулы на пропорциональность между характеристической вязкостью раствора и молекулярной массой полимера, позволяющий судить о степени гибкости макромолекул в данном растворителе (серной кислоте).

Рассчитанная молекулярная масса ПА-6И по уравнению Марка-Хувинка составляет 18 200, что согласуется с литературными данными [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Никифоров, В.А. Газожидкостная поликонденсация / В.А. Никифоров, Е.А. Панкратов, Е.И. Лагусева, А.В. Березкин. Тверь: ТГТУ, 2004. 268 с.
2. Nielinger, W. Amorphe Poliamide auf Basis Isophthalsäure und Hexamethyldiamin / W. Nielinger, B. Brassat, D. Neuray, H. Grunewald // Die Angewante Makromolekulare Chemie. № 98, 1981. P. 225-236.

С.Ю. Золотухина

ВЛИЯНИЕ РАДИУСА ИОНА НА РАЗМЕРЫ ОБРАЗУЮЩИХСЯ
КЛАСТЕРОВ

Руководители: П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Гидрогели система на основе аминокислоты (L-цистеин) и нитрата серебра является примером супрамолекулярной структуры. Образование гидрогеля может быть инициировано путем введения в цистеин-серебряный раствор (ЦСР) разнообразных электролитов. Непосредственно сам ЦСР с солями биологически активных металлов образуют комплексные соединения, образование которых зависит от радиуса вводимого иона. Целью настоящей работы являлось изучение с помощью метода динамического светорассеяния (ДСР) зависимости размера образующихся агрегатов в ЦСР от размера катиона.

В результате проделанной работы установлено, что размер рассеивающих частиц в гелях по сравнению с размерами частиц в ЦСР увеличивается, вследствие того, что в системе происходит сшивание агрегатов в гель-сетку, тем самым размер кластеров увеличивается; интенсивность с увеличением концентрации вводимого электролита уменьшается, так как раствор приобретает мутный оттенок.

В зависимости от расположения металла в таблице Менделеева, радиус металла увеличивается слева направо. Установлено, что в ряду Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, размер частиц так же растет (98.4 nm, 99.4 nm, 107.9 nm, 135.8 nm, 164.2 nm, 219.3 nm). В ряду Na₂SO₄, NaCl и Mg так же наблюдается зависимость роста размера частиц от увеличения радиуса (163.4 nm, 187.5 nm, 191.8 nm). При взаимодействии ЦСР и сульфата свинца (II) PbSO₄, так же происходит образование кластеров, но по сравнению с другими, диаметр частиц меньше (78,2 nm), так как свинец сам по себе металл очень тяжелый, валентные электроны находятся достаточно далеко от ядра и вследствие этого происходит наименьшее связывание частиц в кластеры.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

МИКРОСТРУКТУРА, ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И МАГНИТНАЯ ДОМЕННАЯ СТРУКТУРА ФЕРРОМАГНИТНЫХ СПЛАВОВ $\text{NdFe}_{11-x}\text{Co}_x\text{Ti}$

Руководитель Е.М. Семенова

Тверской государственный университет
Кафедра магнетизма

В работе приведены результаты исследования микро- и магнитной доменной структуры (ДС) сплавов редкоземельных (РЗ) интерметаллидов $\text{Nd}(\text{Fe},\text{Co})_{11}\text{Ti}$ с кристаллической структурой ThMn_{12} [1]. В материалах данного типа подрешетки РЗ металла и 3d-переходного металла связаны между собой сильным обменным взаимодействием. Конкуренция магнитной анизотропии 3d- и РЗ-подрешеток приводит к возникновению спин-переориентационных фазовых переходов. Замещение железа на кобальт в 3d-подрешетке существенно влияет на структуру 3d-зоны, поэтому данные материалы представляют значительный интерес для исследования влияния электронной структуры на магнитные свойства, фазовые переходы и обменные взаимодействия [2].

Образцы $\text{NdFe}_{11-x}\text{Co}_x\text{Ti}$ ($x = 1; 3; 5; 7; 9; 10$) были получены методом индукционной плавки. После выплавки все образцы имели гетерогенную микроструктуру. Для устранения химических неоднородностей, образовавшихся при кристаллизации металла применялся гомогенизирующий (диффузионный) отжиг при температуре 1100°C в течение 100 часов. Режим и длительность отжига подбирались экспериментально. Исследования образцов проводились методами оптической (Axiovert 200MAT (Zeiss)) и электронной микроскопии (JSM-6610LV (JEOL)), а также методами рентгенофазового анализа (ДРОН).

Методами стереометрической металлографии проведен анализ относительного содержания фаз в сплавах $\text{NdFe}_{11-x}\text{Co}_x\text{Ti}$. Установлено, что увеличение концентрации кобальта приводит к незначительному росту второй фазы, максимальное содержание которой обнаружено в составе $\text{NdFe}_2\text{Co}_9\text{Ti}$ (порядка 29%).

Получены микрофотографии магнитной доменной структуры образцов. Выполнена оценка параметров ДС. Сопоставительный анализ микро- и доменной структуры позволяет сделать вывод о том, что основной объем образца занимает фаза, стехиометрический состав которой близок к 1:11:1.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tereshina I.S., Nikitin S.A., Telegina L.V., Zubenko V.V., Pastushenkov Yu.G., Skokov K.P. // J. Alloys Comp. 1999. 283, 45.
2. Никитин С.А., Иванова Т.И., Панкратов Н.Ю., Пастушенков Ю.Г., Скоков К.П. // ФТТ. 2005. Т.47. Вып.3, С.501 – 505.

ОЦЕНКА ТОКСИЧНОСТИ ВОДЫ ИССЛЕДУЕМЫХ РЕК И ОЗЕР САНКТ- ПЕТЕРБУРГА ЛЕНИНГРАДСКОЙ ОБЛАСТИ ХЕМОТАКСИЧЕСКИМ МЕТОДОМ ЗА ЛЕТНИЙ ПЕРИОД 2014 ГОДА

Руководитель А.И. Шишкин

Санкт-Петербургский государственный технологический университет растительных
полимеров
Кафедра ООС и РИПР

В работе дается оценка качества рек и озер г. Санкт-Петербурга и Ленинградской области с помощью определения токсичности воды хемотаксическим и морфологическим методами.

Исследования проводились в следующих точках на объектах: р. Малая Сестра (64, 63, 61), р. Рощинка (10), р. Гладышевка (8, 9), р. Авлога (53, 54, 55/1, 56), р.Сестра (129, 128), а также озера: Голубые (0, 1, 1/1), Серебряное (3, 4, 3/1), Придорожное (5), Щучье (91, 92), Гладышевское (8, 9).

По результатам отбора проб и дальнейшего анализ воды по двум методам были построены диаграммы (рис. 1).

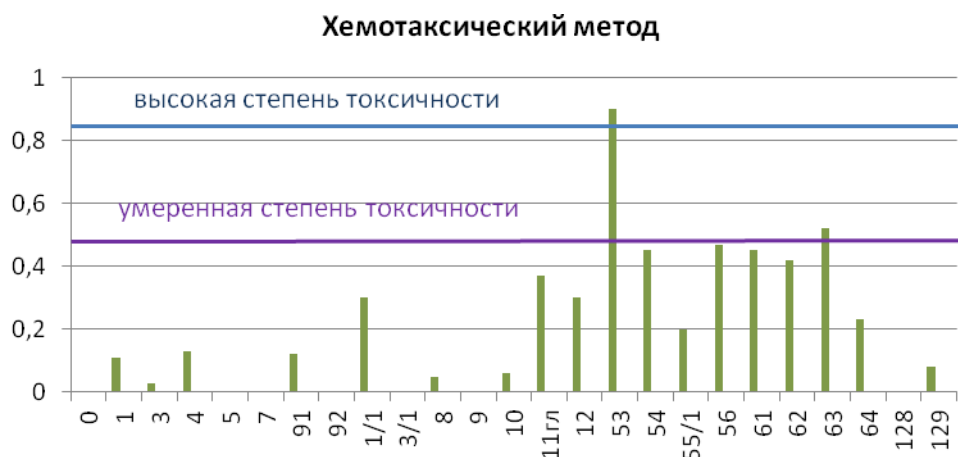


Рис. Значения токсичности в исследуемых пробах воды

По результатам исследований были выявлены следующие закономерности: наибольшей токсичностью обладает вода в пробах, отобранных в реках Авлога и Малая Сестра. Высокая степень токсичности воды в р. Авлога у дороги (точка 54), что может быть связано с поступлением ливневых стоков с полотна дороги. Токсичность проб из реки Малая Сестра (точки 63, 61) обусловлена наличием застойных зон и накоплением загрязняющих веществ в донных отложениях.

ВЛИЯНИЕ pH НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИАНИЛИНОВОЙ ПЛЕНКИ

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственной университет

Кафедра аналитической химии

Известно, что полианилин под действием изменяющегося pH среды может изменять свою структуру, что сказывается на ряде его физико-химических свойств. Величина pH оказывает особенно сильное влияние на оптические свойства полианилина. Поэтому целью настоящей работы было изучение влияния pH среды на оптические свойства полианилиновой пленки.

Полианилин – полимер, который практически не растворяется в обычных органических растворителях и не плавится, поэтому получить пленку полианилина пригодную для оптических исследований традиционными способами невозможно. Наиболее хорошие результаты получаются, если использовать метод электрохимического синтеза, но в этом случае необходимо, чтобы подложка была прозрачна, в исследуемом диапазоне длин волн. Для нашей работы в качестве подложки мы использовали пленку ПЭТФ с нанесенным на его поверхность слоем электропроводного оксида олова. Электрохимический синтез осуществляли по традиционной методике, из раствора содержащего 1М HCl и 0,2 М анилина гидрохлорида в гальваностатическом режиме с потенциалом 1100 мВ и током 50 мА. В результате была получена равномерная пленка полианилина. Изготовленный таким образом образец использовался для оптических исследований. Предварительные эксперименты показали, что наибольшее изменение происходит при $\lambda = 640$.

Исследования показали, что оптическая плотность линейно зависит от величины pH. Интересно отметить, что пленка полианилина обратимо изменяет оптические свойства в зависимости от pH среды. Однако, было обнаружено явление своеобразного гистерезиса, заключающегося в том, что при увеличении pH скорость изменения оптической плотности значительна и наоборот, поэтому этот эффект следует учитывать при создании оптического сенсора на pH.

Преимущества изготовленного нами сенсора заключается в том, что электропроводная подложка позволяет управлять начальной степенью окисления полианилиновой пленки, следовательно, и ее оптическими свойствами. Найденные закономерности позволяют разрабатывать универсальные pH сенсоры пригодные для анализа водных сред.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

С.Б. Иванов

СХЕМА РАСЧЕТА ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ ИЗОМЕРОВ ЗАМЕЩЕНИЯ ЦИКЛОПРОПАНА

Руководитель В.М. Смоляков

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

В работе анализируются расчетные методы, основанные на феноменологической модели: молекула – система взаимодействующих атомов, на примере X-замещенных циклопропана D_{3h} .

Проведен анализ валентных взаимодействий, попарных невалентных взаимодействий через один атом углерода, попарных и кратных через два атома углерода в молекулах X-замещенных циклопропана соответственно. На основе подобия подграфов в молекулах X-замещенных циклопропана D_{3h} и разложения многоугольных чисел треугольника Паскаля получены 5- и 7-константные схемы оценки физико-химических свойств X-замещенных циклопропана. Коэффициенты схем имеют ясный структурный смысл.

Проведен отбор экспериментальных данных по энтальпиям образования газообразных метилзамещенных циклопропана.

Неизвестные параметры 5- и 7-константной схем для расчета энтальпии образования $\Delta_f H^0_{298\text{K, газ}}$ X-замещенных циклопропана ($X = \text{CH}_3$) найдены методом наименьших квадратов, кДж/моль.

По схемам, содержащим 5 и 7 параметров проведены численные расчеты энтальпии образования $\Delta_f H^0_{298\text{K, газ}}$ метилзамещенных циклопропана, не изученных экспериментально.

Дан прогноз $\Delta_f H^0_{298\text{K, газ}}$ для шести метилзамещенных циклопропана.

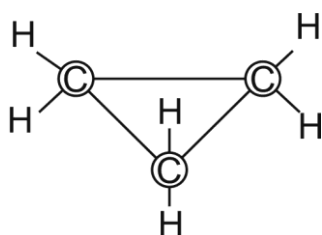


Рис. Взаимодействия атомов в молекуле X-замещенных циклопропана

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ
МОРФОЛОГИИ РАСПЛАВОВ ДИБЛОК- И ТРИБЛОК-СОПОЛИМЕРОВ

Руководитель А.С.Павлов

Тверской государственный университет
Кафедра физическом химии

Фазовое поведение блок-сополимеров, образованных гибкоцепными макромолекулами, к настоящему времени подробно изучено. Однако, поведение блок-сополимеров с жесткими цепями оказывается заметно сложнее; наличие микрофазного расслоения и ориентационной упорядоченности приводит к появлению новых самоорганизующихся структур. Так, в работе* с помощью компьютерного моделирования методом самосогласованного среднего поля была обнаружена морфология гексагонально расположенных хиральных цилиндров.

Присутствие в системе жесткоцепных блоков и ориентационное взаимодействие между ними приводит к возникновению хиральности. Добиться образования винтовой закрутки в цилиндрах можно с помощью понижения температуры, причем первоначально происходит микрофазное разделение, а затем закрутка цилиндрических доменов и образование спиральной структуры*.

Нами использовался иной метод моделирования, основанный на взаимодействиях частица-частица – метод диссипативной динамики частиц. Было проведено моделирование поведения расплавов диблок- и триблок-сополимеров с блоками разной жесткости. В ходе расчетов определены минимальные значения параметров несовместимости, позволяющие наблюдать образование гексагональной фазы. Образующаяся фаза построена из жестких блоков и имеет нематический тип упорядочения. Образование жидкокристаллических структур из жестких блоков встречается довольно часто, но в ряде структур гибкоцепные блоки также образуют упорядоченные области. Расчет параметра порядка (по Френкелю) для всей ячейки оказывается неэффективным, т.к. образуются домены, имеющие различную ориентацию. Расчет параметра порядка проведен для отдельных доменов. Хиральность образующихся цилиндров "на глаз" незаметна. Построены графики парной корреляционной функции и структурного фактора.

* Криксин Ю.А., TungS.-H., Халатур П.Г., Хохлов А.Р. // Высокомолекулярные соединения. Серия С. 2013. Т.55, № 7. С. 880–892.

А.Л. Исоян

ИНВЕРСИЯ НАСЕЛЕННОСТЕЙ В ТЕРХКОМПОНЕНТНОЙ СМЕСИ
ЛЕННАРД-ДЖОНСОВСКИХ ФЛЮИДОВ,
НАХОДЯЩИХСЯ В ЩЕЛЕВИДНОЙ ПОРЕ

Руководитель В.В.Зубков

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

На основе классического метода функционала плотности (МФП) [1] с использованием модифицированного метода Розенфельда [2] и приближения среднего поля в рамках однофлюидной аппроксимации рассчитаны профили локальной плотности смеси леннард-джонсовских флюидов в узких порах в зависимости от параметров потенциалов взаимодействия, ширины поры, температуры, давления и процентного содержания компонентов.

Пора моделировалась выжженной в некотором слоистом материале областью заданной толщины H , соответствующей нескольким атомным слоям. В качестве адсорбционного потенциала, создаваемого каждой поверхностью поры, был выбран хорошо зарекомендовавший себя потенциал Стила [3].

Подробно изучена инверсия населенностей в трехкомпонентной смеси, ранее наблюдавшаяся рядом исследователей в бинарной смеси [4,5]. Проанализировано влияние третьего компонента на инверсию населенностей для остальных двух. Показано, что изменение выше указанных параметров может привести к предпочтительной адсорбции того или иного компонента смеси в зависимости от плотности ее объемной фазы. Причем кардинальное изменение структуры локальной плотности в щелевидной поре может происходить по нескольким сценариям, каждое из которых соответствует внезапной конденсации компонента, процентное содержание которого в объемной фазе смеси меньше.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wu J., Li Z. // Annu. Rev. Phys. Chem. 2007. V. 58. P. 85.
2. Yu Y.-X., Wu J. // J. Chem. Phys. 2002. V. 117. P. 10156.
3. Steele W. A. The Interaction of Gases with Solid Surfaces. Oxford: Pergamon Press. 1974. 349 p.
4. Jimenez-Angeles F., Duda Y., Odriozola G., Lozada-Cassou M. // J. Phys. Chem. 2008. V. 112. P. 18028.
5. Taghizadeh A. and Keshavarzi E. // J. Phys. Chem. 2011. V. 115. P. 3551.

А.В. Коренева, А.Н. Голосова

ИССЛЕДОВАНИЯ БОРСОДЕРЖАЩИХ КОМПЛЕКСОВ НА СТОЛОВОЙ СВЕКЛЕ

Руководители: О.В. Смирнова, Т.И. Смирнова
Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

В сельском хозяйстве комплексоны используют в форме комплексов с биометаллами как микроудобрения для растений и микроэлементные добавки к кормам животных. Однако о действии экологически безопасных комплексонов на почвенные и растительные показатели имеется ряд немногочисленных научных публикаций.

Поэтому с целью исследования борсодержащих хелатов на столовой свекле был заложен мелкоделяночный опыт на экспериментальном участке кафедры агрохимии, почвоведения и агроэкологии Тверской ГСХА.

Почва опытного участка: дерново-подзолистая легкосуглинистая с содержанием гумуса – 2,2%, $pH_{ксл}$ – 6,0; P_2O_5 – 230 мг/кг, K_2O – 110 мг/кг почвы. Схема опыта включала варианты без применения удобрений и без обработки растворами; варианты с применением агрогумата калия (300 кг/га) с обработкой семян и растений раствором H_3BO_3 , комплексоны (ЭДТУК, ЭДДЯК, ИДЯК) или комплексононаты (В-ЭДТУК, В-ЭДДЯК, В-ИДЯК).

Лабораторный анализ показал, что максимальным содержанием хлорофиллов а и b, а также каротиноидов отличались листья растений, обработанных В-ЭДДЯК (70,9 мг/100 г, 44 мг/100 г листьев и 33 мг/100 г листьев соответственно), а наименьшим – листья контрольного варианта.

Применение исследуемых растворов привело к увеличению урожайности столовой свеклы. Наибольшая прибавка корнеплодов по отношению к контролю (1,7 кг/м²) получена при использовании боратного комплекса, а наименьшая – при использовании ЭДДЯК (0,9 кг/м²).

Наряду с изменениями величины урожая столовой свеклы, заметно увеличилось количество аскорбиновой кислоты в корнеплодах по сравнению с контролем. Максимальное содержание витамина С (24,0 мг/100 г корнеплодов) выявлено на варианте с борной кислотой, а наименьшее (20,1 мг/100 г корнеплодов) – на фоне ИДЯК. Применение В-ЭДДЯК позволило повысить количество аскорбиновой кислоты на 1,8-7,5% по отношению к остальным боратым комплексам.

В целом, использование комплексонов и особенно комплексонов этилендиаминдиантарной кислоты на фоне агрогумата калия приводит к увеличению количества фотосинтетических пигментов и урожайности корнеплодов столовой свеклы с высоким содержанием витамина С.

К. М. Корогод

ИК-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ИНДОМЕТАЦИНА

Руководитель Н.В. Баранова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Обеспечение качества лекарственных средств является одной из важнейших и актуальнейших проблем здравоохранения России. Особенно неблагоприятное воздействие на человека имеет лечение биохимически неэффективными противовоспалительными препаратами.

Целью данной работы является исследование строения индометацина методом ИК-спектроскопии.

Получены спектры индометацина в инфракрасной области 4500 – 400 см⁻¹ методом таблетирования с бромидом калия. В силу того, что индометацин под действием электромагнитного излучения инфракрасной области спектра и механического воздействия нестабилен, возможно наблюдать три его различные структурные модификации – α , β и γ . Как известно*, при нормальных условиях стабильной является γ -форма. Согласно структурным данным в элементарной ячейке кристалла γ -формы находится 2 молекулы индометацина, которые образуют циклические димеры посредством водородных связей. Предполагается, что при изменении характера упорядоченности молекул будет изменяться и эффективность действия медицинского препарата, вследствие перехода вещества в аморфную фазу или вследствие его полиморфных превращений.

В качестве эксипиента был выбран полиэтиленгликоль с молекулярной массой 2000 и 6000 а.е.м. ИК-спектроскопически изучены смеси индометацина и полиэтиленгликоля в соотношении 1:1 и 1:3.

Показано, что присутствие полиэтиленгликоля в смеси с индометацином стабилизирует поведение системы.

* Федотов А. П., Шахтшнейдер Т. П., Чесалов Ю. А., Суров Е. В. О влиянии таблетирования с бромидом калия на ИК – спектры поглощения индометацина. // Химико – фармацевтический журнал. – 2009. - № 1 – С. 50–52.

ПОЛИНЕНАСЫЩЕННЫЕ ЖИРНЫЕ КИСЛОТЫ И ЗДОРОВЬЕ ЧЕЛОВЕКА

Руководители: Г.Е. Бордина, Н.П. Лопина
ГБОУ ВПО Тверская ГМА Минздрава России
Кафедра химии

Частота заболеваний сердечно-сосудистой системы в наши дни чрезвычайно велика. Количество смертей от заболеваний уже начинает превышать смертность от онкологии. Одна из причин сложившейся ситуации – неправильное питание. В рационе современного человека непременно содержатся липиды, всевозможные масла и в том числе растительные. Врачи рекомендуют к использованию льняное масло, так как оно богато полиненасыщенными жирными кислотами, полезными для организма. Но большинство пациентов не склонны употреблять данное масло из-за его органолептических свойств, таких как неприятный привкус, запах, и предпочитают масло, изготовленное из семян других растений. Жирные кислоты – это одноосновные алифатические кислоты, содержащиеся, как правило, в этерифицированном виде в жирах, маслах и восках растительного происхождения. Кислоты могут быть насыщенными (не содержащие кратных связей между атомами углерода), мононенасыщенными или моноеновыми (содержащие одну одвойную или тройную связь) и полиненасыщенными или полиеновыми (содержащие более одной кратной связи). Для человека необходимы жирные кислоты, поскольку они выполняют энергетическую и пластическую функции, но наиболее полезны именно полиненасыщенные кислоты, благодаря их более легкому усвоению организмом по сравнению с насыщенными кислотами. Также полиненасыщенные жирные кислоты уменьшают воспалительные процессы в организме, улучшают питание тканей. Для определения степени ненасыщенности жирных кислот, входящих в состав растительных масел, рассчитывали иодное число.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Технохимический контроль жиров и жирозаменителей: Учебное пособие/Под ред. проф. *О.Б. Рудакова*. – СПб.: Издательство «Лань», 2011. – 576 с.
2. Зубарева Г.М. Кафедре химии тверской государственной медицинской академии – 60 лет [Текст]/ Г. Е. Бордина, Н.П. Лопина, Я.М. Халяпина // Вестник ТвГУ.- 2014- №3.- С.122-127.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ ВО ФТОРАЛКАНАХ И ИХ РАДИКАЛАХ

Руководители: Ю.Д. Орлов,
В.В. Туровцев, Н.П. Русакова

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

Знание внутренних вращений соединений позволяет более точно оценивать их физико-химические свойства. Важнейшей характеристикой внутреннего вращения является потенциальная функция ($V(\varphi)$), описывающая зависимость полной энергии соединения (E_{total}) от торсионного угла (φ).

Целью данного исследования является построение $V(\varphi)$ вокруг С-С связей для молекул 1-монофторалканов и их радикалов и выявление всех основных состояний данных соединений.

Потенциальные функции в молекулах $C_nH_{2n+1}F$, где $3 \leq n \leq 6$, радикалах $C^\bullet H_2(CH_2)_n F$ и $C_n H_{2n+1} C^\bullet H F$, где $2 \leq n \leq 5$, были получены с помощью программы GAUSSIAN 03 с методом B3LYP/6-311++G(3df,3pd). Вращение соединений осуществлялось вокруг всех связей С-С с шагом 10° . Дополнительно были оптимизированы минимумы потенциальных функций, а также максимумы, соответствующие переходным состояниям. Таким образом, были найдены все конформеры и барьеры их активации. Была проведена аппроксимация найденных $V(\varphi)$ рядом Фурье методом наименьших квадратов.

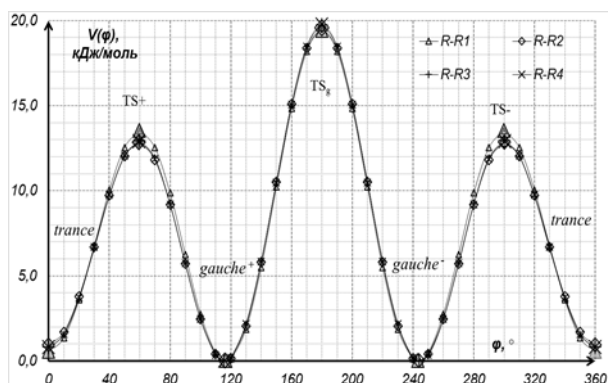


Рис. 1. Потенциальная функция внутреннего вращения $V(\varphi)$ волчка FCH₂–(C) в молекулах FCH₂-R, где: R1= C₂H₅, R2= C₃H₇, R3= C₄H₉, R4= C₅H₁₁

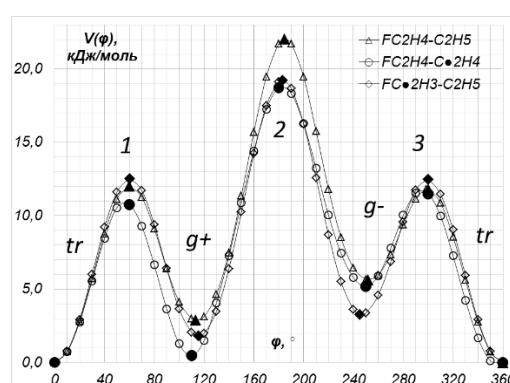


Рис. 2. Потенциальные кривые внутреннего вращения $V(\varphi)$ волчка вокруг второй от F связи С-С во

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H. B., et al. // *Gaussian 03 (Revision E0.1)*, Gaussian Inc., Pittsburgh PA. 2007.

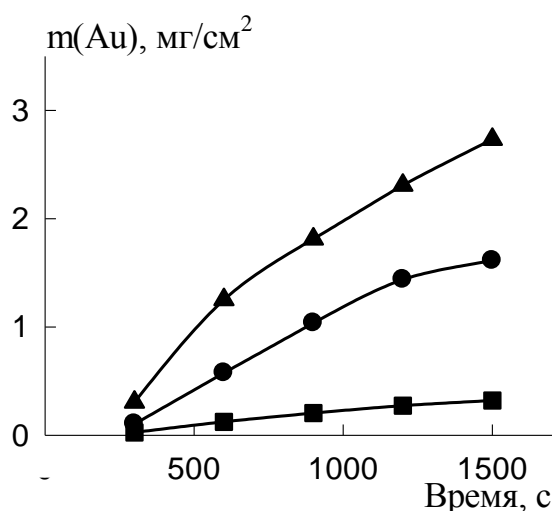
КИНЕТИКА РЕАКЦИЙ РАСТВОРЕНИЯ ЗОЛОТА В СИСТЕМАХ ТИОЦИАНАТ-ТИОМОЧЕВИНА, ТИОЦИАНАТ-ТИОСУЛЬФАТ

Руководитель Ю.В. Чурсанов

Тверской государственной технической университет
Кафедра химии

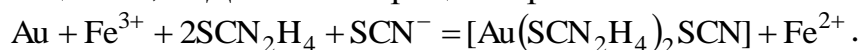
Одним из актуальных направлений исследований в гидрометаллургии золота является поиск относительно дешевых и менее токсичных по сравнению с цианидами растворителей. Целью данной работы является изучение возможности растворения золота в комбинированных системах (тиоцианат-тиомочевина, тиоцианат-тиосульфат) и определение основных кинетических параметров процесса.

Для измерения скорости гетерофазной реакции растворения золота использовали методику вращающегося диска. Концентрацию металла, переходящего в раствор измеряли методом атомно-абсорбционной спектроскопии («Спираль 17» с электротермической атомизацией)*.



Зависимость массы золота, перешедшего в раствор от продолжительности опыта. Концентрации лигандов составляют 0,25 М, окислителей $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ и CuSO_4 – 0,01 М. 1 – тиоцианат-тиомочевина с железом(III) в качестве окислителя; 2 – тиоцианат-тиомочевина и 3 – тиоцианат-тиосульфат с медью(II) в качестве окислителя. Соответствующие скорости реакций составляют: 1.11×10^{-6} , 7.55×10^{-7} , 1.39×10^{-7} моль \times дм $^{-2}\times$ с $^{-1}$.

Для системы тиоцианат-тиомочевина с железом(III) в качестве окислителя определены константа скорости 9.64×10^{-6} моль $^{-0.6}\times$ дм $^{2.8}\times$ с $^{-0.8}$, энергия активации 21,6 кДж/моль. Процесс протекает по схеме:



Кинетические характеристики свидетельствуют о протекании процесса в смешанном режиме, при котором на скорость оказывает тормозящее действие образование твердых продуктов реакции.

* Ю.В. Чурсанов, А.В. Старовойтов // Вестник Твер. гос. университета. Серия: Химия. 2013. № 15. С. 18 – 24.

АДДИТИВНАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЕТА ЭНТАЛЬПИЙ ОБРАЗОВАНИЯ МЕРКАПТАНОВ НА ОСНОВЕ РАЗБИЕНИЯ ТРЕУГОЛЬНЫХ ЧИСЕЛ ПАСКАЛЯ

Руководители: Смоляков В.М., Нилов Д.Ю.

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

На основе подобия подграфов в молекулярных графах (МГ) и разложения простых и треугольных чисел получена 6 - константная аддитивная схема для расчета физико-химических свойств меркаптанов [1]. На примере ряда X-замещенных (где X=CH₃) молекулы этантиола X_kH_{2-k}[C'(SH)]-CH_{3-k}X_k показано, что (в парном приближении) каждый коэффициент схемы (иначе говоря, число способов наложения гетероцепей длины i₁, i₂, i₃ на МГ) есть результат разложения простых и треугольных чисел треугольника Паскаля. Свойство (P) X-замещенного X_kH_{2-k}[C'(SH)]-CH_{3-k}X_k есть сумма вкладов, вносимых элементами структуры, представленными в виде подграфов различной сложности. Коэффициенты аддитивной схемы C_n¹, C_n², ..., C_n^m (m ≤ n, n – число заместителей X) это биномиальные коэффициенты, записываемые в виде числовой таблицы – арифметического треугольника Паскаля (т.е. структурные инварианты МГ). Свойство (P) X-замещенного (X=CH₃) этантиола X_kH_{2-k}[C'(SH)]-CH_{3-k}X_k представим суммой вкладов гетероцепей длины i₁, i₂ и i₃:

$$P(X_kH_{2-k}[C(SH)]-CH_{3-k}X_k) = a_0p_0 + a_1p_1 + a_2p_2 + a_3p_3 + a_4p_4 + a_5p_5, \quad (1)$$

где a₀ = 1, a₁, a₂, ... – коэффициенты схемы, из которых a₁, a₂ – результат разбиения натурального числа; a₃, a₄, a₅ – результат разбиения треугольного числа K₃ = n(n-1)/2, где n = 1, 2, 3, ...; p₀, p₁, p₂, ... – параметры, определяемые мнк для свойства P ряда X-замещенных молекулы этантиола. Проведены численные расчеты Δ_fH⁰_{298,16,газ} меркаптанов (как X-замещенных молекулы этантиола), не изученных экспериментально. Числовые значения параметров схемы (1) для расчета Δ_fH⁰_{298,16,газ} X-замещенных (где X=CH₃) молекулы этантиола X_kH_{2-k}[C'(SH)]-CH_{3-k}X_k найдены мнк следующими, (в кДж/моль): p₀= 46,32; p₁= 29,69; p₂= 23,56; статистические характеристики (в кДж/моль): максимальное отклонение – 3,8; среднее абсолютное – 2,23.

Таблица. Расчет энтальпии образования Δ_fH⁰_{298,16,газ} X-замещенных (где X=CH₃) молекулы этантиола X_kH_{2-k}[C'(SH)]-CH_{3-k}X_k по схеме (1).

Молекула X-зам. этантiola	a ₀	a ₁	a ₂	Δ _f H ⁰ _{298,16,газ}		
				Опыт	Расчет	Откл.
C*(SH)H ₂ -CH ₃	1	0	0	-46,11	-46,32	0,21
C*(SH)XH-CH ₃	1	1	0	-76,23	-76,01	-0,22
C*(SH)H ₂ -CXH ₂	1	0	1	-67,86	-69,88	2,02
C*(SH)X ₂ -CH ₃	1	2	0	-109,50	-105,70	-3,80
C*(SH)XH-CXH ₂	1	1	1	-96,23	-99,57	3,34
C*(SH)H ₂ -CX ₂ H	1	0	2	-97,24	-93,44	-3,80
C*(SH)X ₂ -CXH ₂	1	2	1	-127,03	-129,26	2,23
C*(SH)XH-CX ₂ H	1	1	2		-123,13	-
C*(SH)H ₂ -CX ₃	1	0	3		-117,00	-
C*(SH)X ₂ -CX ₂ H	1	2	2		-152,82	-
C*(SH)XH-CX ₃	1	1	3		-146,69	-
C*(SH)X ₂ -CX ₃	1	2	3		-176,38	-

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ КАК ПАРАМЕТРЫ АДДИТИВНОЙ
СХЕМЫ РАСЧЕТА СВОЙСТВ АЛКАНОВ

Руководитель В.М. Смоляков

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Методы теории графов нашли широкое применение в структурной химии, химической кинетике, химической физике полимеров. В работе рассмотрены возможности применения топологических индексов (ТИ) молекулярных графов (МГ) разветвленных алканов C_9H_{20} для оценки их термодинамических свойств.

На основе матриц смежности (в терминах степеней вершин графа) проведено топологическое описание МГ алканов $C_2H_6 - C_9H_{20}$ и вычислены три ТИ: модифицированный ТИ Рандича ${}^1\chi_{ij}$, учитывающих (в неявном виде) первое окружения по С-С-связям алканов, ТИ ${}^2\chi_{ijm}$, учитывающий взаимодействия не далее чем через три атома углерода и ${}^3\chi_{ijmk}$, учитывающий взаимодействия не далее чем через четыре атома углерода. Отмечена высокая дискриминирующая способность этих ТИ.

Для аппроксимации термодинамических P свойств алканов построена расчетная схема, содержащая семь параметров, среди которых p_{CH_4} , p_{C_1} , p_{C_2} , p_{C_3} , p_{C_4} , учитывающие взаимодействия связей С-Н, С-С, невалентных взаимодействий С-С-С, С(С)С, С(С)₂С и топологические индексы: ${}^1\chi_{ij}$, ${}^2\chi_{ijm}$, ${}^3\chi_{ijmk}$, учитывающие в неявном виде взаимодействия не далее чем через два атома, через три и через четыре атома соответственно по цепи молекулы. Для нонанов неизвестные параметры схемы определены МНК по имеющимся опытным величинам энтальпий образования $\Delta_f H_{298K, газ}^0$. Числовые значения параметров схем использованы для расчета $\Delta_f H_{298K, газ}^0$ нонанов, не изученных экспериментально.

С целью оценки прогностической способности полученных уравнений Шрайнер А.А. проведено сопоставление расчетных величин $\Delta_f H_{298K, газ}^0$ нонанов с опытными величинами. Показана удовлетворительная сходимость расчетных значений $\Delta_f H_{298K, газ}^0$ с опытными величинами. Показано, что сконструированные в работе топологические индексы (ТИ) можно использовать при построении схем оценки свойств разветвленных алканов во втором приближении и в третьем приближениях.

А.А. Крылов

ЗАВИСИМОСТЬ АКУАТОРНЫХ СВОЙСТВ ПОЛИАНИЛИНА ОТ ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА СРЕДЫ

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственной университет
Кафедра аналитической химии

Изменение геометрических размеров полианилиновой пленки под воздействием электрического тока описано в ряде публикаций. Целью настоящей работы являлось изучение влияния окислительно-восстановительного потенциала среды на актуаторные свойства ПАНи.

Для проведения исследований мы использовали тонкую платиновую фольгу с нанесенным на её поверхности с одной стороны пленки ПАНи(ОВ актуатор) по классической методике. Для создания необходимого окислительно-восстановительного потенциала системы использовался ОВ буферный раствор на основе Fe^{2+}/Fe^{3+} . Все эксперименты проводились в кислой среде. Эксперименты показали, что степень искривления актуатора в зависимости от ОВ потенциала имеет линейную зависимость в диапазоне от 300 до 500 мВ. При этом было обнаружено, что величина рН существенным образом сказывается на величину отклика актуатора. С увеличением рН от 0 до 3,5 отклик закономерно уменьшается, а при более высоких значениях фактически полностью исчезает. Также замечен своеобразный гистерезис. Величина этого гистерезиса зависит от кислотности среды. В сильноокислой среде величина гистерезиса минимальна, при рН 3, 5 имеет максимальную величину. Отклик актуатора сохраняется при многократном изменении ОВ потенциала среды, устойчив к небольшим механическим воздействиям, а также не теряет своих свойств при высыхании. На основе полученных закономерностей был разработан ОВ индикатор с непосредственным отсчетом. Этот индикатор представляет собой длинную платиновую фольгу, свернутую в спираль, одна из поверхностей которой покрыта слоем ПАНи. Данный датчик был использован для определения ОВ потенциала модельных смесей и показал хорошие результаты.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ КРЕМНИЙОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Руководитель Ю.Г. Папулов

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Разработка теории и методов расчета свойств веществ на основе сведений о строении молекул – фундаментальная научная задача химии.

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций “структура – энтальпия образования” в кремнийорганических соединениях.

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи:

6. Оценка составления и анализ экспериментальных данных по энтальпии образования в исследуемых соединениях.
7. Построение расчётных схем и проведение численных расчетов,
8. Построение и анализ графических зависимостей “энтальпия образования – число углеродных атомов” и “энтальпия образования – степень замещения”.

В работе применялись – феноменологические методы, основывающиеся на концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов в молекуле.

В результате проделанной работы были проанализированы графические зависимости “энтальпия образования – степень замещения l ” кремнийорганических соединений. Найдено, что они в общем случае нелинейны, однако линии замещения на одну и ту же группу симбатны между собой.

Данные зависимости также позволяют графическим путем получить недостающие значения свойств.

Также в работе были выявлены отдельные закономерности, связывающие энтальпию образования со строением кремнийорганических соединений.

В результате проделанной работы проведена оценка состояния численных данных по энтальпии образования ($\Delta_f H_{298}^0$ (г)) кремнийорганических соединений, разобраны расчётные схемы и выведены рабочие формулы по которым проведены численные расчёты, согласующиеся с экспериментом, получены новые данные.

ЭНТРОПИЯ АМИНОВ

Руководитель М.Г. Виноградова
Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Целью настоящей работы является – установление через аналитические выражения и/или графические зависимости количественных корреляций “структура – энтропия” в аминах.

Для достижения поставленной задачи в работе применялись – феноменологические методы, непосредственно основывающиеся на концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов в молекуле. Использовались также методы статистического анализа и линейной алгебры.

В работе проведена оценка состояния численных данных по энтропии аминов, выявлены отдельные закономерности:

- энтропия аминов зависит от длины цепи молекулы, причем для гомологов аналогичного строения (*n*-амины и т.п.) эта зависимость носит линейный характер, что свидетельствует о постоянном энергетическом вкладе CH_2 -группы;

- при увеличении длины цепи молекулы значение $S_{298(\text{r})}^0$ увеличивается;
- разности энергий между структурными изомерами аминов достигают 28 Дж/моль·К, причем наименьшие значения $S_{298(\text{r})}^0$ имеют амины с третичным атомом азота.

В работе также получены расчётные схемы. Так в третьем приближении имеем:

$$P_{\text{C}_n\text{H}_{2n+2-m}\text{X}_m} = h_{\text{CH}}p_{\text{C-H}} + h_{\text{NH}}p_{\text{N-H}} + h_{\text{CC}}p_{\text{C-C}} + h_{\text{CX}}p_{\text{C-X}} + x_{\text{CC1}}\Gamma_{\text{CC}} + x_{\text{CX1}}\Gamma_{\text{CX}} + \\ + x_{\text{XX1}}\Gamma_{\text{XX}} + x_{\text{CCC1}}\Delta_{\text{CCC}} + x_{\text{CCX1}}\Delta_{\text{CCX}} + x_{\text{CXX1}}\Delta_{\text{CXX}} + x_{\text{XXX1}}\Delta_{\text{XXX}} + \\ + x_{\text{CC2}}\tau_{\text{CC}} + x_{\text{CX2}}\tau_{\text{CX}} + x_{\text{XX2}}\tau_{\text{XX}} + x_{\text{CC3}}\omega_{\text{CC}} + x_{\text{CX3}}\omega_{\text{CX}} + x_{\text{XX3}}\omega_{\text{XX}}$$

где $\text{X} = \text{NH}_2$, $h_{\text{CC}} = (n-1)$, $h_{\text{CH}} = (2n+2-m)$, $h_{\text{CX}} = m$.

По приведенной формуле проведён численный расчёт энтропии ряда аминов с $\text{C}_1 - \text{C}_6$. Рассчитанные величины, в общем, вполне согласуются с экспериментальными. Так как в результате нехватки экспериментальных данных получилась система с линейнозависимыми столбцами, то параметры ω_{CC} , ω_{CX} выпадают, а параметры $p_{\text{C-H}}$ и $p_{\text{N-H}}$ были заменены на параметр a , где $a = h_{\text{CH}}p_{\text{C-H}} + h_{\text{NH}}p_{\text{N-H}}$.

Г.Ф. Куракин

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОСВЯЗИ МЕЖДУ ПОТЕНЦИАЛОМ
ПОЛУВОЛНЫ НИТРОСОЕДИНЕНИЙ И ИХ БАКТЕРИЦИДНОЙ
И ФУНГИЦИДНОЙ АКТИВНОСТЬЮ

Руководители: Н.П. Лопина,
Г. Е. Бордина, А. М. Самоукина

Тверская государственная медицинская академия

Кафедра химии

Кафедра микробиологии и вирусологии с курсом иммунологии

В настоящее время многие органические вещества, содержащие нитрогруппу, используются в медицине в качестве антибактериальных и фунгицидных препаратов. Их действие связано с метаболическим восстановлением в микроорганизме [1; 2].

Соответственно актуальным является вопрос о корреляции их окислительно-восстановительного потенциала с их антибактериальными и фунгицидными свойствами.

В настоящей работе исследуется взаимосвязь между окислительной способностью нитросоединений и их бактерицидной активностью.

В качестве меры окислительной способности используется потенциал полуволны полярографического восстановления. Бактерицидная активность определяется методом серийных разведений для веществ, содержащих нитрогруппу и их аналогов, не содержащих её, с целью изучения вклада нитрогруппы в антибактериальную активность. Исследуется корреляция данного вклада с потенциалом полярографического восстановления.

Данные такого рода могут быть использованы при предсказании антибактериальной и фунгицидной активности новых соединений, содержащих нитрогруппу, что актуально при создании новых лекарственных препаратов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Метронидазол 20 % БТ – [Электронный ресурс] – Режим доступа. – URL: <http://sv-at.ru/metronidazoli> (дата обращения 24.02.2015)
2. Vogt R. A., Rahman S., Crespo-Hernández C. E. Structure-Activity Relationship in Nitro-Aromatic Compounds// Practical Aspects of Computational Chemistry: Methods, Concepts and Applications – Springer Science & Business Media.

Д.С. Кутузов, К.А. Морозова, А.В. Шмелева, С.С. Рыбина,
И.В. Калугин, Н.Е. Самохвалов

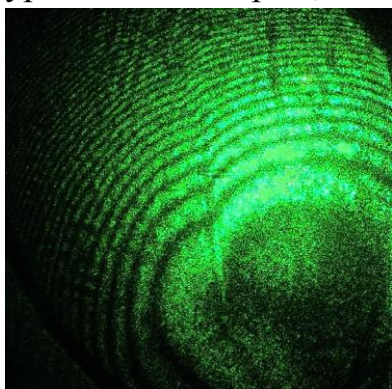
ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ АНОМАЛИЙ В ОДНООСНЫХ КРИСТАЛЛАХ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ КОНОСКОПИИ

Руководитель А.И. Колесников

Тверской государственный университет
Кафедра прикладной физики

С помощью схемы наблюдения коноскопических картин в лучах лазерного света изучены искажения оптической индикатрисы теоретически одноосных кристаллов парателлурита и ниобата лития, проявляющиеся в виде аномальной двуосности и изломов линий изохром.

Численные оценки вариаций показателей преломления обыкновенных и необыкновенных волн, обусловленных пьезооптическим эффектом в объемах кристаллов с аномалиями, произведены на основании сравнения экспериментальных изображений изохром с их теоретическими изображениями, полученными в результате компьютерного решения уравнения изохром, выведенного без обычно применяемых упрощений.



Серия изломов на соседних изохромах вдоль оптической аномалии – свили в коноскопической картине монокристалла парателлурита, полученной на полупрозрачном экране в направлении оптической оси.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shim Ya, Mamedov N., Yamamoto N. Numerical and experimental approbation of extended application of light figures. // Journal of Applied physics. 2002. V.91, №7. P.4110-4113.
2. Demyanyshyn N.M., Mytsyk B.G., Sakharuk O.M. Elasto optic effect anisotropy in strontium borate crystals // Appl. Opt. 2014. V.53. P.1620-1628.
3. Born Max, Wolf Emil. Principles of optics. New York: Pergamon press. 1985. P.640-648.
4. Kolesnikov A.I., Kaplunov I.A., Ivanova A.I., Tretyakov S.A., Taluzin I.V., Malyshkin Yu. A., Grechishkin R.M., Voronsova E.Yu. Isochrome shapes in the conoscopic patterns of uniaxial crystals // Ferroelectrics. 2012. V.441. P.75-83.

О.А. Кутузова, М.Н. Маякова, Е.М. Соколова

ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ Cd(II) С БЕТА-ЛАКТАМНЫМИ
АНТИБИОТИКАМИ

Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Путем взаимодействия водных растворов хлорида кадмия и натриевых солей бета-лактамов антибиотиков ампициллина (NAmp), оксациллина (NOxa), цефазолина (NCzl), цефотаксима (NCxm) и цефтриаксона (N₂Ctx) и получены в виде белых осадков и исследованы их внутрикомплексные соли с Cd(II). После промывания холодной водой на фильтре, осадки высушены на воздухе сначала при комнатной температуре, затем в течение 3 часов при 80 °С. Состав образцов определен методом элементного анализа на CHNS-анализаторе «Perkin Elmer 2400 Series II» и методом электронно-зондового анализа с помощью энергодисперсионного спектрометра «INCA Energy 350», используемого в качестве аналитической приставки к растровому электронному микроскопу «JEOL JSM-6610LV». Исследование методом ИК спектроскопии на приборе «Equinox 55» фирмы «Bruker» показало смещение полос валентных колебаний $\nu(\text{C}=\text{O})$ амидной и бета-лактамовой групп и $\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)_{\text{as}}$ карбоксилатной группы в сторону более высоких частот по сравнению со спектром соответствующей натриевой соли антибиотика, что можно расценивать как координацию этих групп с Cd(II).

Образец	$\nu(\text{C}=\text{O})$ β -лактам	$\nu(\text{C}=\text{O})$ амид	$\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)_{\text{as}}$
NAmp	1768	1672	1606
Cd(Amp) ₂	1776	1672	1600
NOxa	1759	1649	1604
Cd(Oxa) ₂	1780	1672	1600
NCzl	1761	1680	1604
Cd(Czl) ₂	1766	1685	1624
NCxm	1758	1647	1612
Cd(Cxm) ₂	1768	1680	1618
N ₂ Ctx	1741	1650	1604
Na ₂ Cd(Ctx) ₂	1766	1676	1616

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

ОЦЕНКА ФАКТИЧЕСКОЙ НАГРУЗКИ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ НА БАССЕЙН РЕК КОЛЬСКОГО ПОЛУОСТРОВА

Руководитель А.И. Шишкин

СПбГ технологический университет растительных полимеров
Кафедра ООС и РИПР

Химическое загрязнение является одним из основных видов воздействия на водные объекты. Для снижения антропогенной нагрузки на водные бассейны в РФ по действующему законодательству предусмотрена разработка проектов «Нормативы допустимого воздействия» (НДВ) согласно «Методическим указаниям...»*. Объектом исследования является бассейн рек Кольского полуострова впадающих в Белое море, который содержит 19 расчетных водохозяйственных участков (ВХУ).

В рамках проекта НДВ был проведен расчет нормативов допустимого воздействия химических веществ ($\text{НДВ}_{\text{хим}}$) и по данным форм 2ТП(водхоз) определена фактическая нагрузка для каждого расчетного ВХУ и всего бассейна в целом. Например, по БПК₅ $\text{НДВ}_{\text{хим}}$ составляет 5970 тонн/год, а фактическая нагрузка 587 тонн/год (по всему бассейну), что составляет 10 % от $\text{НДВ}_{\text{хим}}$ (рис. 1). В целом по бассейну фактическая нагрузка не превышает $\text{НДВ}_{\text{хим}}$, но при рассмотрении отдельных расчетных ВХУ превышение наблюдается на четырех участках по взвешенным веществам, NO_2^- , F^- , БПК₅, SO_4^{2-} и др. При этом на участках где нормативы превышены класс качества воды по УКИЗВ – 4 «грязная». Таким образом, необходимо снизить фактическую нагрузку на данных ВХУ до $\text{НДВ}_{\text{хим}}$.

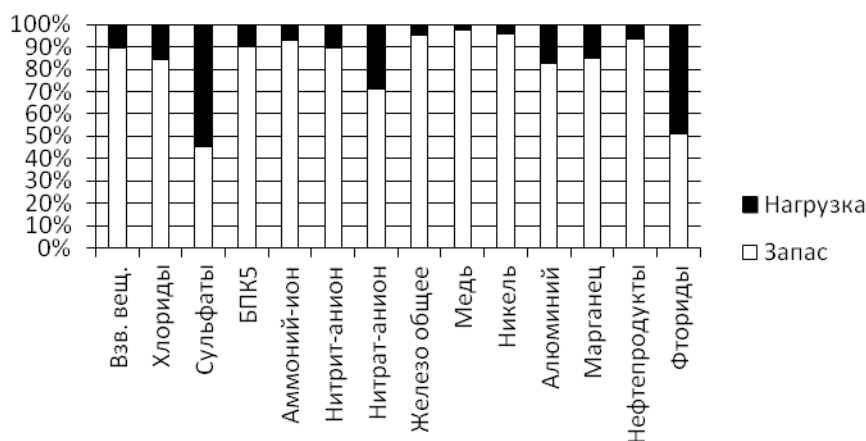


Рис. Диаграмма нагрузки загрязняющих веществ и запаса по $\text{НДВ}_{\text{хим}}$ для бассейна рек Кольского полуострова за 2007 г.

* Методические указания по разработке нормативов допустимого воздействия на водные объекты: Утверждено МПР РФ 12.12.2007 №328.

ПОЛУЧЕНИЕ НИКЕЛЬ-ПОЛИМЕРНЫХ ПОКРЫТИЙ МЕТОДОМ
ЭЛЕКТРООСАЖДЕНИЯ НА КАТОДЕ

Руководитель М.Ю. Квасников

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева
Кафедра химической технологии полимерных композиционных
лакокрасочных материалов и покрытий

Метод окраски электроосаждением для получения лакокрасочных покрытий в последние годы получил широкое распространение в промышленности [1]. Технологически метод похож на гальванический процесс осаждения металлов, но имеет принципиальные отличия. Он основан на способности полимерных электролитов изменять свою растворимость в воде в зависимости от рН среды. Для электроосаждения на катоде в качестве полимерного пленкообразователя (ПО) используют аминоксодержащие олигомеры. В водорастворимое состояние олигомер переводится за счет взаимодействия с уксусной кислотой с образованием водорастворимых четвертичных аммониевых солей. Основной электрохимический процесс при электроосаждении полимерных электролитов – электролиз воды, в результате которого прикатодное пространство подщелачивается (рН стремится к 14). При таком значении рН аммониевые основания переходят в аминоксодержащие группы, при этом олигомер теряет растворимость и осаждается на катоде. Последующее термоотверждение при 180 °С приводит к формированию сшитого полимерного покрытия (Пк) [1; 2].

Цель данной работы – получение никель-полимерных покрытий сочетанием в одном технологическом процессе электроосаждения на катоде аминоксодержащего олигомерного ПО и никеля из их общего электролита и изучение свойств получающихся Пк. В качестве олигомерного компонента использовали промышленно выпускаемый ПО лакокрасочного материала для катодного электроосаждения. В качестве металла для получения металлополимерного Пк – никель, т. к. он отличается устойчивостью в кислых и щелочных средах.

В результате проведенной работы выбраны: оптимальный режим окраски (напряжение 200 В, время осаждения 60 с, температура ванны 35 °С), оптимальный режим отверждения (при 180 °С в течение 20 мин), при которых свойства полученного Пк превышает промышленные образцы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Квасников, М.Ю. и др. // Лакокрасочные материалы и их применение. 2001. № 4, С. 10–15; №5, С. 24–39; №6 С. 26–31.
2. Квасников, М.Ю. и др. // Хим. пром-ть сегодня. 2014. №2. С. 51–56.

СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ МИНЕРАЛЬНОГО КОМПЛЕКСА С ПОМОЩЬЮ ЭТИЛЕНДИАМИНДИАНТАРНОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель М.В. Никольский
Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

На кафедре неорганической и аналитической химии создан способ получения минерального комплекса из яичной скорлупы с повышенной биологической ценностью и биодоступностью*.

Получение минерального комплекса заключается в том, что высушенную и измельченную яичную скорлупу смешивают с раствором этилендиаминдиантарной кислоты, фильтруют и выпаривают. Полученный сухой остаток высушивают и измельчают.

Преимуществами такого способа получения минерального комплекса являются:

- образование прочных комплексов микроэлементов, содержащихся в яичной скорлупе, с этилендиаминдиантарной кислотой благодаря присутствию в молекуле этого комплексона двух аминных и четырех карбоксильных групп;

- использование этилендиаминдиантарной кислоты, которая относится к экологически безопасным комплексонам и в желудке распадается на усвояемые аминокислоты;

- соотношение порошка яичной скорлупы с этилендиаминдиантарной кислотой (3,6:1) достигается за счет присутствия в комплексоне четырех карбоксильных групп янтарной кислоты и двух аминогрупп.

Предложенный способ позволяет меньшим количеством действующего вещества обеспечить перевод микроэлементов яичной скорлупы в усвояемое живым организмом комплексное соединение.

* Патент РФ № 2543352, опубл. 27.02.2015, бюл. №6 «Способ получения минерального комплекса с помощью этилендиаминдиантарной кислоты» / Копич Н.И., Никольский В.М., Логинова Е.С., Толкачева Л.Н.

Н.С. Лой

СТВОЛОВЫЕ КЛЕТКИ В ЛЕЧЕНИИ ЛЕЙКОЗЫ

Руководители: Г.Е. Бордина, Н.П. Лопина
Тверская государственная медицинская академия
Кафедра химии

В настоящее время с ростом числа онкологических заболеваний, в том числе и детской онкологии, актуальным является получение стволовых клеток из пуповинной крови с целью их дальнейшей трансплантологии. Термин «стволовая клетка» А.А. Максимов предложил еще в 1908 году, чтобы объяснить механизм быстрого самообновления клеток крови. Стволовые клетки пуповинной крови очень важны, поскольку обладая уникальным генетическим кодом, они неповторимы и единственны в своем роде на всей планете. В пуповинной крови на начальном этапе находятся стволовые клетки двух типов: гемопоэтические клетки – клетки-предшественники клеток крови и мезенхимальные клетки – клетки-предшественники твердых тканей. Известны более ста заболеваний крови, при лечении которых применяются ГСК. И потенциал применения ГСК с каждым днем растет. Актуальна технология сохранения стволовых клеток пуповинной крови. Сегодня в мире насчитывается более 200 криобанков. Большинство из них находится в США и Канаде. В России сейчас насчитывается только шесть учреждений: в Москве, Санкт-Петербурге, Самаре. Заключив договор с одним из них, родители могут заготовить "впрок" стволовые клетки для своего ребенка. Клетки хранятся в жидком азоте при низкой температуре и могут быть использованы для лечения самого ребенка, для родственных трансплантаций, а также в качестве донорского материала. Европейская ассоциация по трансплантации костного мозга признала пуповинную кровь лучшей альтернативой костному мозгу в качестве источника стволовых клеток.

Создание банка пуповинной крови является альтернативой пересадки костного мозга. В ближайшие несколько лет новое направление медицины грозит перевернуть традиционные представления о возможностях лечения многих болезней: от инфаркта и инсульта до рака крови и переломов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Репин В.С. Медицинская клеточная биология / В.С. Репин, Г.Т. Сухих. М., 1998. 280 с.
2. Глик Б. Молекулярная биотехнология/ Б. Глик, Дж. Пастернак. М., 2001. 255 с.

КВАЗИТЕРМОДИНАМИКА СМАЧИВАЮЩИХ СЛОЕВ
АССОЦИИРОВАННОГО ФЛЮИДА

Руководитель В.В.Зубков

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

В работе распространен квазитермодинамический подход к термодинамике смачивающих слоев, ранее предложенный в работе [1]. Отличительная особенность данного подхода, основывающегося на классическом методе функционала плотности [2], связана с введением в рассмотрение средней плотности пленки, что позволяет избежать необходимости решения интегрального уравнения для плотности. На примере модели ассоциированного флюида, изучена зависимость средней плотности от толщины смачивающего слоя, включая пленки наноразмерной толщины. Кроме того, рассчитаны изотермы расклинивающего давления для смачивающих слоев ассоциированного флюида. С учетом полученных результатов, проанализированы условия стабильности пленок на высоко- и низкоэнергетических поверхностях.

Ван-дер-Ваальсовое взаимодействие описывались с помощью потенциала Леннард-Джонса, а в качестве модели химической связи было выбрано короткодействующее сильно анизотропное притяжение, описываемое в рамках теории ассоциации Вертхейма [3; 4]. В качестве объекта исследования был выбран флюид с водоподобными (water-like) молекулами, моделируемыми твердыми сферами с четырьмя центрами ассоциации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Самсонов В.М., Зубков В.В. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2007. №. 5. С. 103.
2. Yu Y.-X., Wu J. // J. Chem. Phys. 2002. V. 117, P. 10156.
3. Jackson G., Chapman W. G., Gubbins K. E // Mol. Phys. 1988. V.65, No. 1. P. 1.
4. Yang-Xin Yu, Jianzhong Wu // J. Chem. Phys. 2002. V.116, No. 16, P. 7094.

СПОСОБЫ ПОЛУЧЕНИЯ КСИЛИТА

Руководитель М.Е. Григорьев

Тверской государственной технической университет

Кафедра Биотехнологии и химии

Значение промышленного производства ксилита из непищевого растительного сырья в химической промышленности, медицине и производстве медицинских продуктов неуклонно возрастает. Ксилит разрешен к употреблению для специального диабетического питания. Пищевая промышленность выпускает большой ассортимент изделий с применением ксилита – джемы, мармелады, шоколады, жевательные резинки и др. В связи с этим, повышение объемов производства ксилита чрезвычайно актуально.

Необходимость в экологически эффективных процессах мотивирует обширные исследования, направленные на преобразования промышленных и сельскохозяйственных отходов в ценные продукты. Таким образом, в качестве источников для получения ксилита используют солому, отруби, дерево, овсяную шелуху, выжимки сахарного тростника, скорлупу кокоса, кукурузные початки и т.д.

Ксилит можно получить различными способами. Выбор способа зависит в первую очередь от исходного сырья и необходимого качества получаемого продукта. Например, если сырьем служит биомасса, то лучше использовать биотехнологический способ, если чистая ксилоза – каталитический способ.

Биотехнологические процессы основываются на функционировании либо клеток, либо изолированных из них биологических структур, чаще всего ферментов. Главными преимуществами биотехнологического способа являются экономичное использование сырья и его доступность. Но у такого метода высокая себестоимость и сложное аппаратное оформление.

В промышленности ксилит в основном получают каталитическим способом. Благодаря данному методу достигается высокая степень конверсии исходного сырья и высокий выход продукта, отсутствует необходимость регулирования рН. Небольшая себестоимость и возможность повторного использования катализатора значительно снижают экономические затраты на процесс. Обычно для производства ксилита из ксилозы применяют никелевый катализатор, процесс проводят в реакторе под давлением.

Н.А. Любимова

ПРИМЕНЕНИЕ ПАЛЛАДИЕВЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ СВЕРХСШИТОГО ПОЛИСТИРОЛА ДЛЯ РЕАКЦИИ КРОСС-СОЧЕТАНИЯ СУЗУКИ

Руководитель Э.М. Сульман

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Катализируемые палладием реакции формирования углерод-углеродной связи – это универсальные инструменты тонкого органического синтеза. Среди них особое место занимает реакция кросс-сочетания Сузуки арил-галидов и арил-бороновых кислот для получения несимметричных биариллов. Реакция уникальна, требует умеренных условий и проявляет высокую степень толерантности к присутствию различных функциональных групп [1].

Традиционно реакция Сузуки проводится с использованием палладиевых комплексов, содержащих лиганды на основе соединений фосфора и азота, в качестве катализаторов [2]. Однако, использовать гомогенные катализаторы нецелесообразно из-за высокой стоимости лигандов и трудности их отделения от продуктов реакции для повторного использования [3]. Избежать указанных недостатков можно посредством использования гетерогенных или квази-гомогенных палладиевых катализаторов, так как они могут быть легко отделены от реакционной смеси [4]. Необходимо отметить, что в настоящее время перспективными носителями для создания гетерогенных каталитических систем считаются наноструктурированные полимеры, позволяющие контролировать формирование и рост наночастиц и предотвращать их агрегацию.

Данная работа посвящена изучению палладиевых катализаторов на основе сверхсшитого полистирола в реакции кросс-сочетания Сузуки 4-броманизола и фенилбороновой кислоты. Показано, что использование данных катализаторов позволяет обеспечить высокую конверсию 4-броманизола (более 95%), при этом время реакции не превышает 1 час.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (Проект: RFMEFI57414X0121).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Köhler K. // Adv. Synth. Catal. 2008. Vol. 350. P. 2930
2. Pan C. // Catalysis communication. 2008. Vol. 9. P. 321.
3. Sołoducho J. // Advances in Chemical Engineering and Science. 2013. Vol. 3. P. 19.
4. Pagliaro M. // ChemCatChem. 2012. Vol. 4. P. 432.

Г.И. Маркин

ПРОЦЕССЫ КОМПАКТИЗАЦИИ И МОНОЛИТИЗАЦИИ ПЛЕНОК,
ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ РЕАКТОРНЫХ ПОРОШКОВ
СВЕРХВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛИЭТИЛЕНА БЕЗРАСТВОРНЫМ
МЕТОДОМ

Руководители: П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк
Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

Материалы из сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) находят широкое применение в различных сферах науки и техники за счет своих высоких прочностных свойств, хемостойкости и биосовместимости, позволяющих, в частности, использовать материалы из СВМПЭ для производства имплантов.

Однако при производстве материалов из СВМПЭ, например, высокопрочных волокон, получаемых методом гель-формования используются различные растворители, вредные для здоровья и окружающей среды, поэтому в настоящее время остро стоит задача создания производства таких материалов с помощью альтернативного безрастворного метода.

Целью настоящей работы является разработка безрастворного способа получения высокопрочных пленочных нитей из реакторных порошков (РП) СВМПЭ. В частности изучение таких основных стадий этого способа, как компактизация и монолитизация РП СВМПЭ в широком интервале давлений и температур, и установление оптимальных условий для проведения этих стадий.

Объектом исследования являлись РП СВМПЭ со средневязкостной молекулярной массой $M_n = 4,3 \times 10^6$ г/моль (партия № 399), и $M_n = 3,7 \times 10^6$ г/моль (партия № 24), синтезированные с помощью титаномагниевого катализатора. Методами ИК спектроскопии и сканирующей электронной микроскопии исследовано влияние приложенного давления на процессы компактизации РП СВМПЭ и температуры на процесс монолитизации.

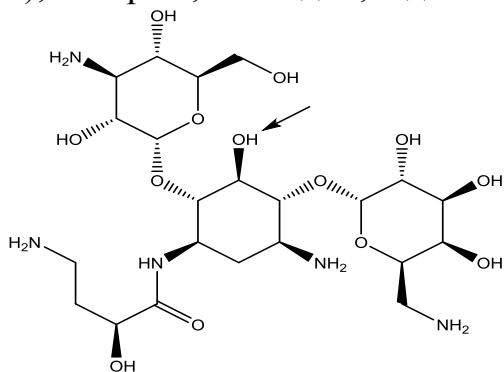
В результате выполненных исследований установлено, что при температуре, равной комнатной, и давлении 137 МПа приложенном в течение 15 мин образуются устойчивые таблетки из РП с завершённым процессом компактизации. Оптимальная температура монолитизации компактизованных таблеток из РП СВМПЭ (превращение их в прозрачные однородные пленки) находится в интервале 135–140 °С.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

ИССЛЕДОВАНИЕ КИСЛОТНО-ОСНОВНЫХ СВОЙСТВ АМИКАЦИНА

Научный руководитель В.Г. Алексеев
Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Методом рН-метрического титрования определены константы кислотной диссоциации катионной формы антибиотика амикацина: $pK_1 = 7.34 \pm 0.01$, $pK_2 = 7.84 \pm 0.01$, $pK_3 = 8.77 \pm 0.01$, $pK_4 = 9.49 \pm 0.01$, $pK_5 = 10.70 \pm 0.02$ при 25°C на фоне 0.1 моль/л KNO_3 . K_1 , K_2 , K_3 , K_4 соответствуют диссоциации протонов, координированных аминогруппами, K_5 – диссоциации атома водорода гидроксильной группы, что доказывает амфотерный характер молекулы амикацина. Полученные нами значения pK_a протонов, координированных аминогруппами, хорошо согласуются с литературными значениями. Значение pK_5 определено впервые. Константы равновесий рассчитывали с помощью программы «Hyperquad» («Protonic Software») из кривой рН-метрического титрования, полученной усреднением 5 экспериментальных кривых. Вывод о том, какой из атомов водорода диссоциирует при образовании аниона, был сделан на основе результатов квантово-химического расчета парциальных зарядов атомов в молекуле амикацина в энергетически выгодной конформации, проведенного в приближении находящейся в вакууме изолированной молекулы. Для создания компьютерной модели молекулы амикацина и расчета парциальных зарядов атомов использовали программы Maestro и Jaguar фирмы «Schrödinger LLC». Предварительная оптимизация конформации молекулы амикацина проведена в программе MOPAC 2012 («Stewart Computational Chemistry») полуэмпирическим методом PM7. Окончательная оптимизация и расчет парциальных зарядов выполнен методом DFT с использованием гибридного функционала B3LYP и набора базисных функций 6-311G**++ в программе Jaguar. Из атомов водорода наибольший парциальный заряд +0.53631 имеет H(55), который, очевидно, и диссоциирует в щелочной среде.



Структурная формула амикацина. Стрелкой указан атом водорода H(55), диссоциирующий в щелочной среде.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

ЦЕЛЕВЫЕ ПОКАЗАТЕЛИ ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ЗАДАННОГО КАЧЕСТВА РЕКИ ВОЛХОВ

Руководитель А.И. Шишкин

СПбГ технологический университет растительных полимеров

Кафедра охраны окружающей среды и рациональное использование природных ресурсов

Целевые показатели качества воды в водных объектах (ЦП) – значения физических, химических, радиационных и микробиологических характеристик воды в водных объектах, а также характеристик состояния водной экосистемы, которые должны быть достигнуты в установленные сроки. Целевые показатели разрабатываются для реализации водохозяйственных и водоохраных мероприятий, мероприятий по предотвращению негативного воздействия вод.

В поверхностных водах бассейна (в пределах Новгородской, Псковской и Тверской областей) региональное загрязнение обуславливает высокое содержание таких веществ, как железо, медь, содержание лабильных органических веществ (по БПК5) и трудноокисляемых органических веществ (по ХПК), нефтепродуктов и взвешенных веществ. В местах крупных сбросов сточных вод наблюдается локальное антропогенное ухудшение качества поверхностных вод по целевым показателям.

В проделанной работе выполнена сравнительная характеристика расчета норм допустимого воздействия (НДВхим) с массой фактической (Мф). Результатом этого было обоснование наблюдаемого снижения целевых показателей до допустимых норм для группы предприятий, которые вносят основную нагрузку на бассейн (~ 80%).

$$\text{НДВхим} = \text{СнрWуч} - \Sigma(\text{СнрWст} + \text{СнвхWвх} + \text{СнобрWобр})$$

Сравнительные характеристики НДВ/Мф	Нефть т/г		ВЗВ т/г		БПК т/г	
	НДВ	Мф	НДВ	Мф	НДВ	Мф
Предприятия-водопользователи филиал ООО "МП ЖКХ НЖКС" "Водоканал г. Боровичи"	36	40,15	5950	8217,7	2505	1711,42
Филиал ООО "МП ЖКХ НЖКС" Старорусский филиал	0,84	64,58	267	5809,9	50	1554,26
ОАО "Акрон"	137	21,82	57025	1230,63	7467	147,73

Для обеспечения заданного уровня целевых показателей в исследуемом водном объекте, был разработан ряд мероприятий. По достижению норм допустимого сброса (НДС) в пределах бассейнового НДВ, они включают в себя – химическую доочистку, переход отдельного предприятия на новые существующие технологии (НСТ), установка новой системы фильтрации при выпуске воды непосредственно из озера Ильмень в реку Волхов.

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕПОЛЯРИЗАЦИИ КЕРАМИКИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА PFN-РТ В ИНТЕРВАЛЕ ЧАСТОТ 20-2000 Гц

Руководитель А. А. Богомолов

Тверской государственный университет
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Сегнетоэлектрик феррониобат свинца $\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ с добавлением титана свинца (PFN - РТ) является перспективной основой для создания конденсаторных, пироэлектрических, пьезоэлектрических, позисторных и других функциональных материалов.

Целью данной работы являлось экспериментальное исследование зависимости поляризации (P) высокоомной ($\rho \approx 10^{10}$ Ом·см) керамики PFN-РТ с добавками лития от частоты (f) при $E=1,6$ кВсм⁻¹. Измерения поляризации проводились с использованием метода Сойлера – Тауэра по частным петлям диэлектрического гистерезиса. В ходе эксперимента получено гистерезисная зависимость $P(f)$, т.е. не совпадение прямого и обратного хода (рисунок).

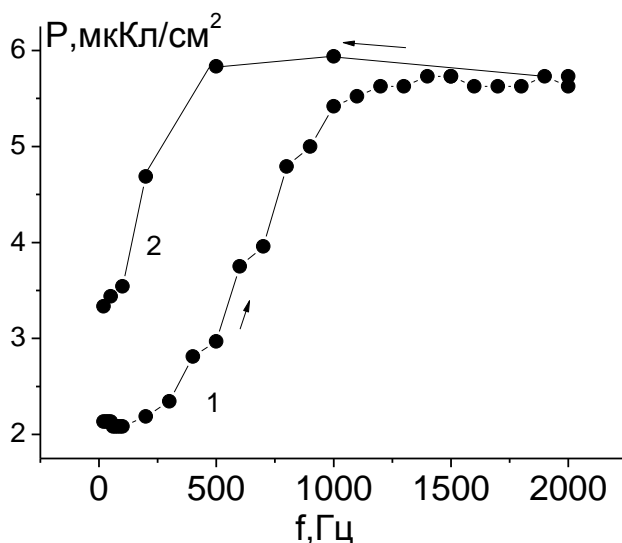


Рис. Частотные зависимости максимальной поляризации керамики PFN–РТ:
1 – прямой ход; 2 – обратный.

Кроме того, обращает на себя внимание увеличение поляризации с ростом частоты, в то время как для монокристаллов сегнетоэлектриков наблюдается обратная зависимость. Можно предположить, что рост поляризации в образцах исследуемой керамики обусловлен вкладом максвелл – вагнеровской поляризации.

ТЕРМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ КОМПЛЕКСОНАТОВ АЛЮМИНИЯ С ИМИНОДИАНТАРНОЙ И ЭТИЛЕНДИАМИНДИАНТАРНОЙ КИСЛОТАМИ

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Иминодиянтарная (ИДЯК, X) и этилендиамин-N,N'-диянтарная (ЭДДЯК, Y) кислоты являются экологически безопасными и биологически активными комплексонами, что вызывает интерес к их всестороннему исследованию. Ранее было выявлено, что они образуют устойчивые комплексы с алюминием и вычислены их константы устойчивости*. Для получения информации о строении комплексов, характере химических связей в них, их термической устойчивости были выделены средние комплексы алюминия с исследуемыми комплексонами в твердом виде и проведен их термический анализ.

Исследование термической устойчивости проводили на дифференциальном сканирующем калориметре STA 449F (производитель NETZSCH). Нагрев во всех случаях происходил в атмосфере воздуха.

Комплексопат	Стадии дегидратации, °С		Убыль массы, моль H ₂ O	Температура разложения °С
	1	2		
Na[AlY]·4H ₂ O	103	300	3+2	>370
Na[AlX]·4H ₂ O	100	-	4	>350

При нагревании комплексоната Al(III) с ЭДДЯК дегидратация протекает в 2 этапа. Две молекулы воды находятся во внутренней сфере комплекса и связаны с металлом координационно (испаряются позже). Координационное число алюминия равно шести, с учетом количества внутрисферной воды, определяем дентатность ЭДДЯК в этом комплексе равную четырем. Комплексопат Al(III) с ИДЯК имеет один широкий скачок на кривой ТГ, что не позволяет четко идентифицировать внутри- и внешнесферную воду.

Учитывая равенство констант устойчивости комплексов ЭДДЯК и ИДЯК с алюминием (16,27 и 16,48 соответственно) можно предположить одинаковую дентатность лигандов в этих комплексах.

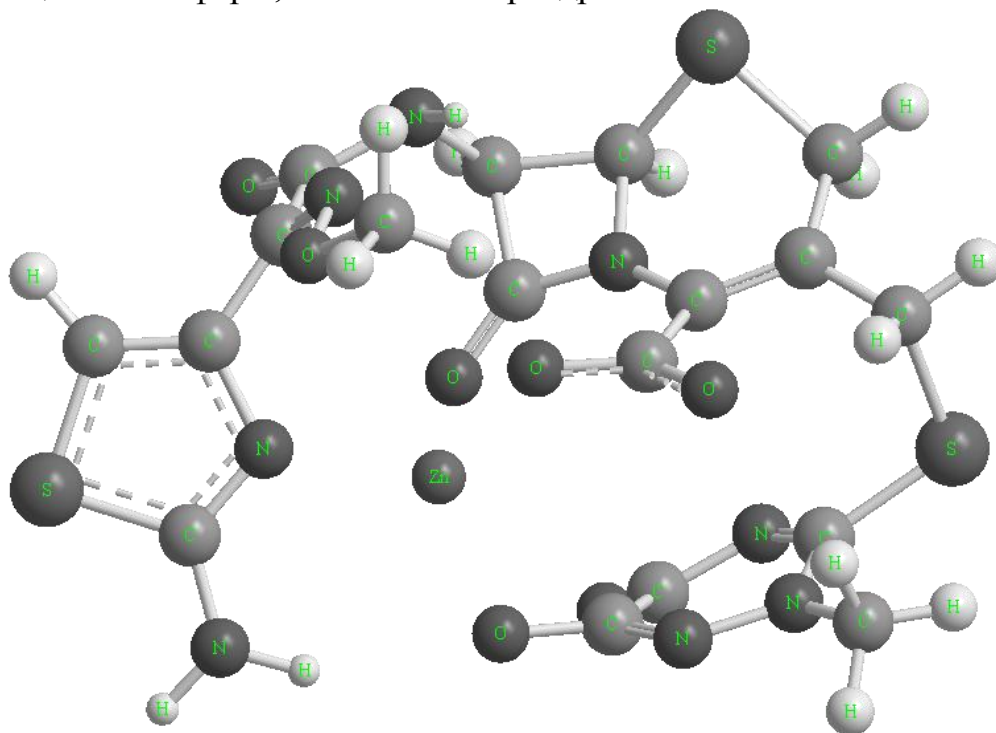
* Толкачева Л.Н, Никольский В.М. Термодинамические характеристики образования комплексов иона Al³⁺ с иминодиянтарной кислотой в водных растворах. *Журн. физической химии*. 2012, 3, 466 – 469.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЦИНКОВОГО КОМПЛЕКСА
ЦЕФТРИАКСОНА

Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Методом DFT с использованием гибридного функционала B3LYP и набора базисных функций LACV3P**+ рассчитана компьютерная модель комплекса Zn(II) с анионами антибиотика цефтриаксона (Ctx^{2-}). Минимизация энергии системы $\text{Zn}^{2+}-\text{Ctx}^{2-}$ в приближении находящейся в вакууме одиночной молекулы приводит к структуре, изображенной на рисунке. Межъядерные расстояния равны: Zn–O для карбоксилатной группы 1.962 Å, Zn–O для бета-лактамной группы 2.083 Å, Zn–O для енолятной группы 1.967 Å, Zn–N для тиазольной группы 2.074 Å. Расстояния около 2 Å могут быть интерпретированы как образование ковалентных связей. Таким образом, можно предполагать, что Zn(II) координирует анион цефтриаксона через атомы кислорода карбоксилатной, амидной и енолятной групп и атом азота тиазольного цикла с образованием характерной для Zn(II) структуры координационной сферы, близкой к тетраэдрической.



Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

СИНТЕЗ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
[Co(NH₃)₄(NO₂)₂][Co(NH₃)₂(NO₂)₄]

Руководитель Е. В. Черкасова

Кузбасский государственный технический университет им. Т. Ф. Горбачева
Кафедра химии, технологии неорганических веществ и наноматериалов

Целью данной работы являлось изучение продуктов взаимодействия аммиаката никеля (II) с гексанитрокобальтатом(III) натрия.

В качестве исходных соединений были использованы [Ni(NH₃)₆]Cl₂, полученный по методике [1] и Na₃[Co(NO₂)₆], синтезированный по [2]. Синтез соединения осуществлялся при смешивании водных растворов [Ni(NH₃)₆]Cl₂ и Na₃[Co(NO₂)₆] в мольном соотношении 1,5:1. Масса образовавшегося осадка темно-желтого цвета равна 1,3348 г. По результатам РСА установлено, что соединение имеет состав [Co(NH₃)₄(NO₂)₂][Co(NH₃)₂(NO₂)₄] (I).

Термический анализ осадка I проводили на воздухе и в атмосфере аргона (NETZSCH STA 449 C). Наблюдаемый экзоэффект при 118–180°С сопровождается взрывообразным разложением с образованием бурого газа (NO₂) и черного оксида (Co₃O₄). Найденное значение массовой доли Co(III) в осадке I составляет 23,77%, а вычисленное – 23,50%.

ИК спектр снятый на инфракрасном Фурье-спектрометре System-2800 подтверждает индивидуальность полученного соединения и сопоставимым с результатами спектроскопических исследований нитрокомплексов [3]. Характеристические полосы в интервале частот 1470–1370 (1385 – в I) и 1340–1320 см⁻¹ (1321 – в I) принадлежащие антисимметричному и симметричному валентным колебаниям N–O позволяют отнести к нитросоединениям.

Таким образом, из водного раствора [Ni(NH₃)₆]Cl₂ и Na₃[Co(NO₂)₆] получено соединение I устойчиво на воздухе, слабо растворимо в воде, нерастворимо в большинстве органических растворителей, неустойчиво в растворах концентрированных кислот, термически неустойчиво. Методом ИК спектроскопии установлено, что амбидентатный лиганд NO₂⁻ связан с Co (III) через атом азота, образуя нитросоединение.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Руководство по неорганическому синтезу/ в 6 т. т 5 под ред. Г. М. Брауэра. – М.: Мир, 1985. – 1768 с.
2. Гринберг А. А. Введение в химию комплексных соединений / А. А. Гринберг – М. – Л.: Химия, 1986. – 632 с.
3. Накомото К. Инфракрасные спектры неорганических и координационных соединений/К. Накомото. М.: Мир, 1966. 441 с.

Р.Р. Минажетдинов, Д. Бродин

СОВРЕМЕННЫЕ ПОЛИМЕРНЫЕ МАТЕРИАЛЫ В ХИРУРГИЧЕСКОЙ ПРАКТИКЕ

Руководители: Н.П. Лопина, Г.Е. Бордина
Тверская государственная медицинская академия
Кафедра химии

Актуальным вопросом современной хирургии является поиск биосовместимых материалов для хирургического дренажа. Нами проведен анализ доступных современных источников, содержащих сведения о полимерных материалах. Изучена научная литература (статьи в различных журналах ВМС), сборники, монографии, интернет ресурсы.

В современных дренажах используют два вида полимерных материалов – целлюлозные и нецеллюлозные (синтетические). Основным источником полимерных материалов, используемых в хирургическом дренаже, является регенерированная целлюлоза, получаемая по медно-аммиачному («Купрофан») и вискозному («Диацилл») методам, и ацетатцеллюлозная мембрана, сформированная путем введения порообразователей («Влацефан»). Диализные мембраны различают по рабочим характеристикам (толщина, прочность при растяжении сухой мембраны и набухшей в воде, клиренс низкомолекулярных веществ и средних молекул, проницаемость для воды) и степени биосовместимости.

В ходе анализа технических характеристик используемых мембран мы остановились на мембране, изготовленной из синтетически модифицированной целлюлозы с введением порообразователей. Предложенный полимерный материал послужил основой для разработки конструкций хирургического нанодренажа, выполненных учеными Тверской государственной медицинской академии (ТГМА) совместно с учеными Российского химико-технологического университета имени Д. И. Менделеева (РХТУ им. Д. И. Менделеева). В настоящее время в целях усиления дренажного эффекта и оказания, выраженного лечебного действия мы разрабатываем идею о введении в структуру основного материала дополнительных компонентов. Этими компонентами могут являться углеродные нанотрубки, заполненные антибактериальным, антипротеазными и другими молекулами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Брик М. Е Энциклопедия мембран: В 2-х т. М.: Изд. дом “Киево-Могилянская академия”, 2005, 660 с.
2. Свитцов А. А. Введение в мембранные технологии. М.: ДеЛи принт, 2007. 280 с.

М. В. Минина

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА (III) С АМПИЦИЛЛИНОМ И ЦЕФТАЗИДИМОМ В ВИДИМОЙ ОБЛАСТИ

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Исследованы спектральные характеристики водных растворов комплексных соединений железа(III) с бета-лактамами антибиотиками ампициллином и цефтазидимом в видимой области. В отличие от других антибиотиков бета-лактаманной группы при взаимодействии слабых кислотных растворов ампициллина (Amp) и цефтазидима (Ctzd) с хлоридом железа(III) образуются хорошо растворимые, интенсивно окрашенные в желто-коричневый цвет комплексы. Хорошая растворимость комплексов железа(III) с ампициллином и цефтазидимом может быть обусловлена тем, что в слабых кислотных средах оба эти антибиотика существуют в цвиттер-ионной форме.

Полосы поглощения комплексов смещены в область более высоких частот по сравнению с полосой поглощения незакомплексованного железа(III). Спектральные характеристики комплексов: λ_{\max} и ϵ_{\max} – были определены линейной экстраполяцией оптической плотности от концентрации для серии растворов с различной концентрацией. Получены следующие результаты: комплекс Fe(III) с ампициллином – $\lambda_{\max} = 427$ нм, $\epsilon_{\max} = 161$ л/(моль·см), комплекс Fe(III) с цефтазидимом – $\lambda_{\max} = 427$ нм, $\epsilon_{\max} = 511$ л/(моль·см). Большее смещение полос поглощения и увеличение молярного коэффициента поглощения комплексов по сравнению с $\text{Fe}(\text{CH}_3\text{COO})_3$ позволяет предполагать, что цвиттер-ионы антибиотиков координированы железом(III) не только через карбоксилатные, но и через бета-лактаманские группы.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности.

СТЕРЕОИЗОМЕРНЫЙ СОСТАВ КОМПЛЕКСОВ Cu(II)
С DL-ТРЕОНИНОМ

Руководитель Т.В. Берестова

Башкирский государственный университет
Кафедра неорганической химии

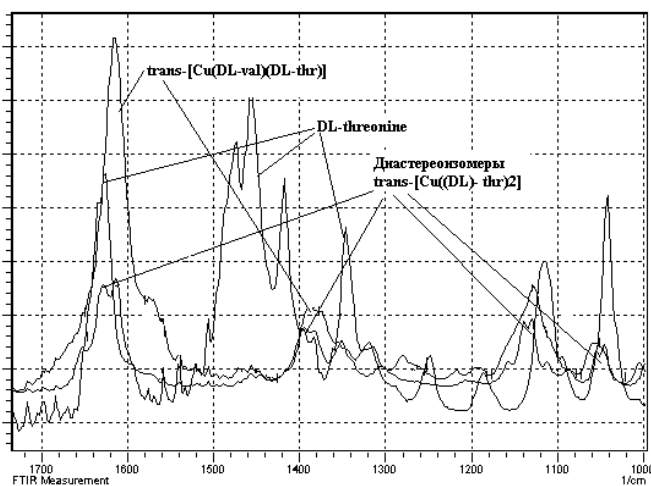
Известно, что хелатные комплексы Cu(II) являются перспективными в качестве биологически активных веществ*.

С целью изучения состава стереоизомерных комплексов Cu(II) с DL-треонином нами были синтезированы и исследованы методом ИК-спектроскопии соединения **1-3**.

Таблица. Данные ИК-спектров DL-треонина и комплексов **1-3** (см⁻¹)

Комплекс	Выход %	Полосы поглощения функциональных групп				
		$\nu_{as}(\text{COO}^-)$	$\nu_s(\text{COO}^-)$	$\Delta\nu(\text{COO}^-)$	$\nu(-\text{CH}, \text{CH}_3)$	$\nu_{as, s}(-\text{NH}_2)$
треонин- ((DL)-thrH)	-	1626	1418	208	2780	3310
<i>цис</i> -[Cu((DL)-thr) ₂] (1a)		1576	1393	181	-	3111, 3119, 3285
<i>транс</i> -[Cu((DL)-thr) ₂] (1b')	66	1628	1394	234	2924, 2941, 2962,	3204, 3229
<i>транс</i> -[Cu((DL)-thr) ₂] (1b'')		1614	1383	231	2982, 2987	3292, 3306
<i>транс</i> -[Cu(DL)-thr](gly) (2b)	75	1617	1386	231	2928, 2860	3267, 3281
<i>транс</i> -[Cu(DL)-val](DL-thr) (3b)	69	1614	1387	227	2976, 2885	3253, 3309

В результате исследования обнаружено, что разнолигандные комплексы Cu(II) с (DL)-треонином представляют собой исключительно *транс*-изомеры. *Транс*-бис-(DL)-треонинат Cu(II) (**1b**) проявляется в ИК-спектрах в виде диастереомеров *транс*-(*R,S*-[Cu((DL)-thr)₂]) (**1b'**) и *транс*-(*S,S*-[Cu((DL)-thr)₂]) (**1b''**) в соотношении 1:1. Разница валентных колебаний $\Delta\nu_{as,s}(\text{COO}^-)$ отлична для *цис*- и *транс*- изомеров.



* Т.В. Берестова, Г.Ю. Амантаева, Л.Г. Кузина, Н.А. Аминева, И.А. Массалимов // Вестник Башк. ун-та, 2014, т.19, с.1182.

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ ТГС
С ПРИМЕСЬЮ Ti^{3+} И АТГС С ПРИМЕСЬЮ Mn^{2+}

Руководитель Н. Н. Большакова

Тверской государственной университет
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Настоящая работа поставлена с целью получения дополнительной информации о влиянии легирования кристаллов ТГС ионами титана (Ti^{3+}), а так же L- α - аланином и марганцем (Mn^{2+}) на их диэлектрические свойства и процессы переполяризации.

Исследования проведены на образцах монокристаллов ТГС, легированных ионами титана различных концентраций от 10^{-5} до $0,3 \cdot 10^{-3}$ вес.%, а так же АТГС: Mn^{2+} , содержащих 10 мол.% L- α - аланина и марганец. Образцы представляли собой плоскопараллельные пластины полярного (перпендикулярно вектору спонтанной поляризации) среза.

В таблицах 1 и 2 приведены результаты расчетов диэлектрической проницаемости и элементов петли гистерезиса для исследуемых кристаллов ТГС: Ti^{3+} , АТГС: Mn^{2+} при комнатной температуре ($T=25$ °C). Видно, что величины диэлектрической проницаемости для большинства образцов ТГС: Ti^{3+} порядка 50, а АТГС: Mn^{2+} колеблются от 30 до 60.

Таблица 1

Концентрация примеси Ti^{3+} , вес.%, 10^{-3}	ϵ	P_s 10^{-2} -2	η	10^2 $B \cdot s$ -1
$C < 10^{-2}$	90	2,3	0	770
$C = 0,16$	50	2,5	0,1	360
$C = 0,22$	50	2,5	0	605
$C = 0,26$	40	2,8	0	490
$C = 0,30$	50	2,8	0,15	510

Таблица 2

АТГС: Mn^{2+} , содержащих 10 мол.% L- α - аланина	ϵ	P_s 10^{-2} $Kл \cdot м$ -2	η	E_c , 10^2 $B \cdot м^{-1}$
Обр. №1	40	1,7	0,6	230
Обр. №2	40	1,8	0,7	230
Обр. №3	40	0,8	0,9	460
Обр. №4	30	1,8	0,6	250
Обр. №5	60	2,1	0,7	380

Для большинства исследованных составов ТГС: Ti^{3+} петли диэлектрического гистерезиса прямоугольны, а для АТГС: Mn^{2+} – искажены и униполярны, что может быть связано с неравномерностью вхождения ионов марганца в кристаллическую решетку. Искажение формы петли диэлектрического гистерезиса может быть вызвано увеличением дефектности кристалла.

ИМПЛАНТОЛОГИЯ И ЗАБОЛЕВАНИЯ ЭНДОКРИННОЙ СИСТЕМЫ

Руководители: Г.Е. Бордина, Н.П. Лопина
ГБОУ ВПО Тверская ГМА Минздрава России
Кафедра химии

В последнее время все очевиднее видна связь качества жизни человека с одной из важнейших составляющих его организма – состоянием зубочелюстной системы. Наиболее востребованным направлением в ортопедической стоматологии является имплантология. В настоящее время увеличивается число пациентов с отторжением дентальных имплантатов.

Основным фактором, влияющим на его приживление, является биосовместимость. Использование для дентальной имплантации бионесовместимых материалов приводит к отторжению имплантата вследствие тканевого ответа пациента.

При планировании операции пациенту необходимо провести полный биохимический анализ крови на количество общего и ионизированного кальция, на количество неорганического фосфора, на активность щелочной фосфатазы, на уровень тестостерона и тиреотропного гормона.

При сопоставлении данных биохимического анализа крови людей, у которых произошло отторжение имплантата, были выявлены следующие закономерности, которые и являются факторами отторжения дентальных имплантатов:

1. Уровень Ca^{2+} выше 1,25ммоль/л
2. Тиреотропный гормон выше 0,4-4,0 мкМЕ/л
3. Тестостерон у женщин ниже 0,45 нмоль/л
4. Высокое содержание водорастворимых белков (выше 6,24мг/мл)

При планировании дентальной имплантации пациент должен обследоваться для того, чтобы выявить возможные факторы отторжения имплантатов, связанные с нарушением в работе эндокринной системы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Китаев В. А. Клинико-биохимическая оценка результатов дентальной имплантации: диссертация к.м.н., Москва, 2007.
2. Вавилова Т.П. Биохимия тканей и жидкостей полости рта: учебное пособие. 2-е изд., испр. и доп. 2011. 208 с.

ПЕРЕРАБОТКА МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ШЛАКОВ И ИЗВЛЕЧЕНИЕ ИЗ НИХ МЕТАЛЛА

Руководитель Н.А. Золотухина

Кузбасский государственный технический университет им. Т.Ф. Горбачева

Проблема переработки шлаков и извлечения из них металлических компонентов с последующим использованием их в качестве вторичного сырья является одной из актуальных в металлургии.

Целью работы является получение металлического концентрата содержащего железо и цветные металлы из металлургического шлака.

Анализ современных методов переработки металлургических шлаков показывает, что наиболее эффективным является использование комбинированных способов (флотационных, магнитных и гравитационных).

Согласно данным элементного анализа химический состав шлака, %: Ca-14,85; Cu-0,82; Al-2,67; Fe-29,1; Zn-8,42.

Работа осуществлялась по следующим стадиям:

- Измельчение шлака до размеров частиц 0,2-0,4 мм;
- Магнитная сепарация, с получением железного концентрата;
- Флотация оставшегося шлака

Железо-основной компонент, содержащийся в шлаке, поэтому сухая магнитная сепарация является достаточно эффективным методом разделения. Магнитной сепарацией получен ферромагнитный концентрат с выходом 22 %.

Флотацию проводили с помощью лабораторной установки (механической флотомашины) с использованием бутилового ксантогената калия в качестве реагента-собирателя и соснового масла в качестве пенообразователя.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ларионов В. С. Разработка и внедрение процесса комплексной переработки отвалов металлургических шлаков с целью извлечения металлических компонентов и получения строительных материалов: Дис. канд. тех. наук. – М.: 2001. – с. 28.

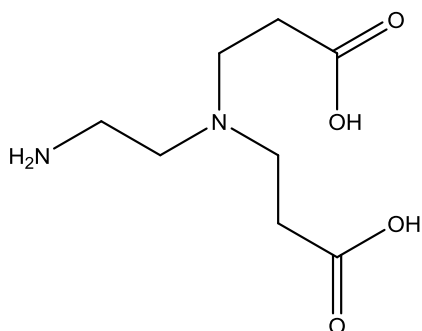
2. Купряков Ю. П. Шлаки медеплавильного производства и их переработка. – М.: Металлургия, 1987, с. 116–120.

КИСЛОТНО-ОСНОВНЫЕ И КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩИЕ СВОЙСТВА N,N-БИС(КАРБОКСИЭТИЛ)ЭТИЛЕНДИАМИНА

Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

N,N-бис(карбоксиэтил)этилендиамин – новый комплексон, синтезированный в ИРЕА (Москва) и предоставленный ТвГУ для исследования кислотно-основных и комплексообразующих свойств.



N,N-бис(карбоксиэтил)этилендиамин,
H₂bceen

Методом рН-метрического титрования были определены константы протонирования аниона bceen²⁻ и константы образования его комплексов с ионами Cu²⁺ и Ni²⁺ при 25 °С на фоне 0.1 моль/л KNO₃. Константы равновесий рассчитаны с использованием программы New DALSFEEK (КСМ Soft, 2000 г.). Результаты приведены в таблице:

Равновесие	lgβ
$H^+ + bceen^{2-} \rightleftharpoons Hbceen^-$	10.46 ± 0.02
$2H^+ + bceen^{2-} \rightleftharpoons H_2bceen$	17.42 ± 0.02
$3H^+ + bceen^{2-} \rightleftharpoons H_3bceen^+$	20.71 ± 0.03
$4H^+ + bceen^{2-} \rightleftharpoons H_4bceen^{2+}$	23.04 ± 2.33
$Cu^{2+} + bceen^{2-} \rightleftharpoons Cubceen$	14.46 ± 0.09
$Ni^{2+} + bceen^{2-} \rightleftharpoons Nibceen$	13.22 ± 0.08

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

ПЕРСПЕКТИВЫ ВОЗДЕЛЫВАНИЯ ТОПИНАМБУРА НА ТЕХНОГЕННО
ЗАГРЯЗНЕННЫХ ПОЧВАХ

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра общего земледелия и растениеводства

Проведен вегетационный опыт (2014 г) по выращиванию топинамбура сорта Скороспелка на дерново – подзолистой почве, искусственно загрязненной экотоксикантами: азотной кислотой (HNO_3), серной кислотой (H_2SO_4) уксуснокислым свинцом ($\text{Pb}(\text{CH}_3\text{COO})_2$), хлористым калием (KCl). Вещества вносили два раза (до посадки и при высоте растений 30 см) в трех концентрациях из расчета на увеличение их содержания в почве после второго внесения до 1, 3 и 9 ПДК. Так же исследован контрольный вариант (без загрязнения). Изучены особенности формирования урожайности топинамбура, а так же качества урожая.

Показано, что наиболее перспективно выращивание топинамбура на почвах, загрязненных азотной кислотой до 3 ПДК. При этом вследствие улучшения азотного питания растения ускоряется их рост и развитие, увеличивается урожайность. По сравнению с контролем урожай сухой биомассы ботвы возрастает на 73 %, клубней - на 165 %. Содержание сырого протеина в ботве увеличивается на 1,57 %, клубнях – на 4,33 %, и Количество нитратов меньше ПДК (500 мг/кг) и составило 269 и 183 мг/кг. Такую продукцию можно использовать на любые цели, включая пищевые. При повышении дозы до 9 ПДК количество нитратов превышает контроль в ботве в 8 раз (до 2700 мг/кг), клубнях в 1,5 раза (до 269 мг/кг), поэтому использование продукции из зеленой массы возможно только в технических целях.

Доказана возможность возделывания земляной груши на почвах, загрязненных серной кислотой и хлористым калием до уровня 1 ПДК, а так же уксуснокислым свинцом – до 3 ПДК, что не оказывает отрицательного влияния на формирование урожайности топинамбура, повышает содержание сухого вещества в ботве и клубнях, сахаров в клубнях. Содержание свинца в ботве и клубнях не превышает МДУ (50 мг/кг). Продукция может использоваться на любые цели, включая пищевые. В варианте с 9 ПДК $\text{Pb}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ концентрация свинца в клубнях составила 75,44, а в ботве – 114,01 мг/кг, что превышает МДУ. Целесообразно использовать такую продукцию только на технические цели.

ВЛИЯНИЕ ФОНА МИНЕРАЛЬНОГО ПИТАНИЯ И ФОТОПЕРИОДИЗМА НА ФОРМИРОВАНИЕ УРОЖАЙНОСТИ СОРТОВ ТОПИНАМБУРА В УСЛОВИЯХ ВЕРХНЕВОЛЖЬЯ

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра общего земледелия и растениеводства

Изучено влияние искусственного сокращения светового дня на формирование урожайности разных по скороспелости сортов топинамбура (Скороспелка и Интерес) на двух фонах минерального питания (без удобрения и расчетная доза на урожайность 40 т/га клубней + 40 т/га ботвы) в трехфакторном полевом опыте на опытном поле ТГСХА в 2014 г. Исследованы два срока сокращения длинны дня (на 10-й и на 20-й день после всходов) и четыре - продолжительности затенения: без затенения (контроль), 10, 20 и 30 дней.

Показано, что наибольший урожай клубней формируется у сорта Скороспелка (до 46,8 т/га), а ботвы - у сорта Интерес (до 51,0 т/га).

Внесение удобрения позволило увеличить урожай ботвы и клубней. Однако в условиях засушливого лета данный фактор оказал слабое влияние на урожайность топинамбура, что объясняется его способностью формировать мощную корневую систему и усваивать труднодоступные питательные вещества из почвы, а так же размещением его в севообороте после многолетних трав. При этом на неудобренном фоне в среднем по вариантам затенения сформирована урожайность по сорту Скороспелка 19,4 т/га зеленой массы и 31,3 т/га клубней, по сорту Интерес 37,9 т/га зеленой массы и 24,5 т/га клубней, а на удобренном – у сорта Скороспелка 22,7 и 38,2 т/га, у сорта Интерес – 43,3 и 29,6 т/га.

Наиболее сильно реагирует на затенение позднеспелый сорт Интерес, у которого наблюдалось цветение главных побегов (с 15 сентября) при более продолжительном затенении (30 дней) на 20-й день после всходов. Меньшая продолжительность (10 дней) при том же сроке позволяет получить наибольшую прибавку по урожаю клубней (до 5,1 т/га – 16,1%), а меньший срок (на 10-й день после всходов) при продолжительности 20 дней обеспечивает максимальную прибавку урожая ботвы (до 10 т/га – 24,4 %). Реакция растений сорта Скороспелка слабее, однако созревание семян (с 3 сентября) отмечено только на вариантах с затенением на 10-й день после всходов продолжительностью 30 дней и на 20-й день после всходов, продолжительностью 20 и 30 дней. 20-и дневное затенение на 20-й день после всходов позволяет получить наибольшую прибавку в урожае клубней (до 9,3 т/га – 24,7%), а на 10-й день после всходов при той же продолжительности затенения дает максимальную прибавку в урожае ботвы (до 3,1 т/га – 12,9 %).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ ФЕРРИТА КОБАЛЬТА НА ГАЗИФИКАЦИЮ ТОРФА

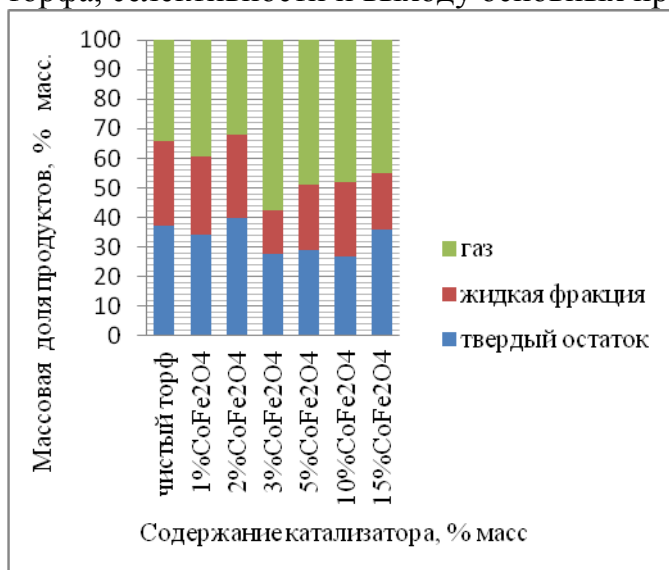
Руководитель А.А. Степачева

Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии и химии

В последние годы в связи с использованием невозобновляемых природных ресурсов, в развитых странах возрос интерес к использованию возобновляемых источников энергии, к числу которых относится биомасса. Биомасса является уникальным возобновляемым сырьем, так как она может быть использована для самых разных целей, в том числе энергетических – для производства тепла, электроэнергии и для получения биотоплив для транспорта.

Работа направлена на исследование влияния условий протекания процесса газификации биомассы (в качестве биомассы был использован сфагно-пушицевый торф) и нахождение оптимальных параметров проведения процесса с целью получения высокого выхода газообразных продуктов.

Приготовленный образец торфа смешивался с магнитными частицами феррита кобальта и был внесен в реактор экспериментальной установки. Реактор помещали в электрическую печь, предварительно прогретую до необходимой температуры. Масса твердого остатка и жидких продуктов вычислялись по разности масс реактора и каплеуловителя соответственно. Масса газообразных продуктов была найдена расчетным путём. В ходе работы было проведено изучение влияния различных технологических параметров на протекание процесса. В ходе исследования процесса каталитической газификации торфа было изучено влияние содержания катализатора; влияние температуры; влияние скорости подачи воздуха; влияние времени. Эффективность процесса определялась по значениям конверсии торфа, селективности и выходу основных продуктов.



Зависимость выхода продуктов от массы катализатора

При некаталитической газификации торфа выход газообразных продуктов составляет 34%, а твердый остаток образуется в количестве 37%. Из представленных данных видно, что изменение массы катализатора практически не влияет на выход жидкой фазы, которая составляет 20–30% от всех образующихся продуктов, а твердый остаток составляет 30–35%.

По полученным результатам видно, что, меняя содержание катализатора в торфе можно получить как газ, жидкую фракцию, так и твердый остаток, которые, в свою очередь можно использовать в качестве топлива и энергоресурсов.

А.В. Петрова

СИНТЕЗ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ НА ОСНОВЕ
ТРИЭТАНОЛАМИНА

Руководитель А.С. Левина

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Поверхностно-активные вещества (ПАВ) при их незначительном расходе позволяют интенсифицировать технологические процессы, повысить производительность труда, качество выпускаемой продукции. В настоящее время поверхностно-активные вещества находят широкое применение: в качестве стабилизаторов пены, эмульгаторов, в крашении трудно красящихся синтетических волокон. Они обладают хорошими смачивающими и антикоррозионными свойствами, сравнительно несложной технологией получения и доступной сырьевой базой [1; 2].

Цель работы – синтез ПАВ на основе триэтанолamina, исследовании их коллоидно-химических свойств (поверхностного натяжения, растворимости, пенообразования, пеноустойчивости).

На данный момент получены соли триэтанолamina с *n*-нитробензойной, лауриновой, пальмитиновой, и коричной кислотами. Взаимодействие триэтанолamina с монокарбоновыми кислотами может протекать с образованием солей или смеси эфиров. Преимущественное протекание реакций определяется условиями синтеза, что и было исследовано в данной работе. Продукты реакции, после очистки и перекристаллизации, представляют собой: соль триэтанолamina лауриновой кислоты – кристаллическое вещество белого цвета, соль триэтанолamina пальмитиновой и *n*-нитробензойной кислот – пастообразные вещества жёлтоватого цвета, соль триэтанолamina коричной кислоты – вещество коричневого цвета. Строение синтезированных соединений подтверждено данными ИК-спектроскопии и качественными реакциями. Синтезированные соединения будут использованы для химического никелирования [3].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Амбразон А.А., Зайченко Л.П., Фанголец С.И. Поверхностно-активные вещества. Синтез, анализ, свойства, применение. Л.: Химия, 1988.
2. Поверхностно-активные вещества и моющие средства. Справочник./ Под. ред. Абрамзона А.А. М., 1993.
3. Скокина Р.Е., Ворончихина Л.И. Моющая способность синергических смесей ПАВ при подготовке стеклянных волокон к химической металлизации // Журнал прикладной химии. 2002. Т.75. №12. С. 2026–2028.

ИЗУЧЕНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ГИДРИРОВАНИЯ НИТРОБЕНЗОЛА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАГНИТНЫХ RU-СОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Руководитель Э.М. Сульман

Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии и химии

Каталитическое гидрирование нитробензола является важным химико-технологическим процессом получения анилина, который, в свою очередь, используется в качестве полупродукта в синтезе полиуретанов, резины, фармацевтических препаратов, пестицидов и гербицидов.

В настоящее время особое внимание уделяется магнитноразделяемым катализаторам. Их использование позволяет упрощать стадию отделения катализатора от реакционной смеси, что значительно уменьшает себестоимость целевого продукта, делает процесс энергосберегающим.

Каталитическое гидрирование нитробензола в среде изопропилового спирта проводилось на установке Parr Series 5000 Multiple Reactor System (США). Для проведения реакции в среде сверхкритического диоксида углерода использовался реактор высокого давления Parr Instruments 4307 (США), с общим объемом колбы 250 см³ и максимальным рабочим давлением 1000 атм. Для перекачивания углекислоты использовался плунжерный насос Supercritical 24 (США).

Качественная и количественная идентификация полупродуктов синтеза проводилась методом газо-жидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием веществ. Концентрации нитробензола и анилина определяли по стандартным веществам и соответствующим калибровочным зависимостям с использованием дифениламина в качестве внешнего стандарта.

Гидрирование нитробензола в среде изопропилового спирта осуществлялось в следующих условиях: концентрация катализатора $4.2 \cdot 10^{-6}$ – $1.3 \cdot 10^{-5}$ моль/л, парциальное давление водорода 3 МПа, время реакции 180 минут, температура 120–180°C, частота вращения мешалки 1100 об/мин, концентрация нитробензола 0.06–0.37 моль/л.

Гидрирование нитробензола в среде сверхкритического диоксида углерода осуществлялось в следующих условиях: концентрация катализатора $6.3 \cdot 10^{-6}$ моль/л, парциальное давление водорода 3 МПа, парциальное давление диоксида углерода 18 МПа, время реакции 180 минут, температура 120–180°C, концентрация нитробензола 0.06 моль/л.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда
Фундаментальных Исследований (грант № 13-08-00403 А).*

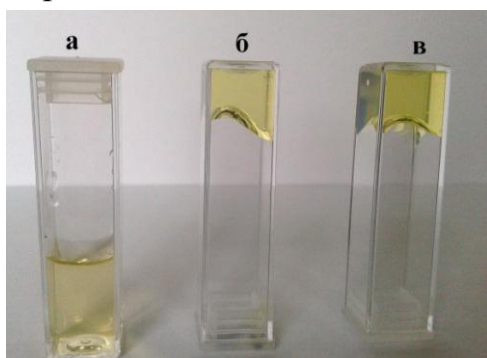
ИССЛЕДОВАНИЕ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОГО ГЕЛЯ НА ОСНОВЕ НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ РАСТВОРОВ L-ЦИСТЕИНА И AgNO_2

Руководители: П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Гелеобразование на основе низкомолекулярных низкоконцентрированных соединений – аминокислот и их производных – редкое явление. В данной работе открыто гелеобразование в низкоконцентрированных водных растворах (3,0 мМ) в системе L-цистеин – нитрит серебра и с помощью различных физико-химических методов – УФ спектроскопии, динамического светорассеяния (ДСР) – изучены строение гелей и условия их образования.



Установлено, в результате смешивания растворов исходных компонентов в соотношении 1:1 и 1:1,25, образуется прозрачный или слегка опалесцирующий раствор, который при стоянии желируется и приобретает желтый оттенок. Скорость формирования гелей зависит от концентрации компонентов, их соотношения, температуры и времени стояния. Все гелеобразцы являются

тиксотропными, способными к многократному восстановлению после механического разрушения, устойчивы во времени. Измерение вязкости образцов, полученных при различном соотношении компонентов показало, что наиболее прочные гели образуются при соотношении 1:1,25. На рисунке представлены фотографии образцов L-цистеин– AgNO_2 системы: раствор (а), гели (б, в). С помощью метода УФ спектроскопии установлено, что в системе цистеин– AgNO_2 сразу после смешения компонентов происходят значительные изменения – исчезают полосы поглощения с максимумами 283 и 355 нм, и затем появляются две более слабые по интенсивности полосы поглощения – 315 и 395 нм, что является свидетельством структурирования системы. Согласно данным ДСР размер агрегатов в водных системах цистеин– AgNO_2 оказывается достаточно устойчивым, при этом увеличение содержания ионов серебра до соотношения 1:1,25 приводит к уменьшению среднего размера частиц. Таким образом, изучение данной гелевой системы может представлять не только научный, но и практический интерес, поскольку эти гели могут найти применение в биомедицине.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

А.А. Погудкина

ОПТИМАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ КОМПАКТИЗАЦИИ И МОНОЛИТИЗАЦИИ РЕАКТОРНЫХ ПОРОШКОВ СВЕРХВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛИЭТИЛЕНА

Руководители: П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк
Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

Получение высокомолекулярных высокопрочных нитей из сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) по безрастворному методу – процесс, основанный на нетрадиционных приемах формования. Основным достоинством безрастворного метода, по сравнению с методом гелевого формования, являются его экологическая безопасность. Однако основной проблемой рассматриваемого способа, требующей своего научного исследования, является выявление оптимальных условий для успешного проведения всех основных стадий непрерывного твердофазного формования реакторных порошков (РП) СВМПЭ (компактизация, монолитизация и последующая ориентационная вытяжка).

Основная цель настоящей работы – именно определение оптимальных условий (давление, температура и время) для проведения компактизации и монолитизации РП СВМПЭ.

Объектом исследования являлись РП СВМПЭ со средневязкостной молекулярной массой $M_n = 4,3 \times 10^6$ г/моль (партия № 399), и $M_n = 3,7 \times 10^6$ г/моль (партия №24), синтезированные в Институте катализа им. Г.К. Борескова СО РАН с помощью титан-магниевого катализатора ТС-71 (партия №399) и ТС-115 (партия №24).

Для подбора оптимальных условий твердофазного формования была создана специальная ячейка (пресс-форма), позволяющая проводить компактизацию и монолитизацию РП СВМПЭ в широком диапазоне давлений и температур. С помощью методов сканирующей электронной микроскопии и Фурье-ИК спектроскопии исследовано влияние приложенного давления на компактизацию, а температуры – на монолитизацию РП СВМПЭ. Установлено, что при давлении 136 МПа в течение 8 мин и более образуются стабильные таблетки из РП, и процесс компактизации завершается. Оптимальной температурной областью для монолитизации компактизованных таблеток РП СВМПЭ является 135–140 °С.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

ВЛИЯНИЕ КОМПОСТОВ НА ОСНОВЕ ОСВ Г.ТВЕРИ НА УРОЖАЙНОСТЬ И КАЧЕСТВО ЗЕРНА ОЗИМОЙ РЖИ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

В современных условиях при остром дефиците традиционных органических и минеральных удобрений важно шире задействовать осадок сточных вод (ОСВ), получаемый в процессе очистки канализационных вод. Сдерживающим фактором широкомасштабного использования ОСВ на удобрение является возможное содержание в них повышенного количества тяжелых металлов и особенно патогенной микрофлоры. Если их наличие превышает требования ГОСТа, то использовать такой продукт для внесения в почву не допускается. На кафедре агрохимии, почвоведения и агроэкологии Тверской ГСХА, на основе осадков, с участием опилок и торфа разработали технологию получения компостов, отвечающих требованиям ГОСТа.

Для их производственной апробации был заложен полевой мелкоделяночный опыт. Почва опытного участка: дерново-сильноподзолистая, остаточно-карбонатная, глееватая, супесчаная на моренном карбонатном суглинке. На опыте в первый год возделывалась вико-овсяная смесь на зеленый корм, на второй (2014г) – озимая рожь на зерно.

Полученная урожайность ржи свидетельствует, что все компосты в сравнении с контролем обеспечили повышение урожая зерна на 18–71%.

С учетом неоднозначного отношения производителей к удобрениям, содержащим ОСВ, мы исследовали количество тяжелых металлов (ТМ) как в почве, так и в урожае. Применительно к их накоплению в почве, в наших исследованиях это не подтверждается. Не выявлено сколько-нибудь заметного накопления поллютантов и в продукции с удобренных вариантов.

Таблица. Влияние компостов на содержание ТМ в зерне озимой ржи, 2014 г., мг/кг

Вариант опыта	Pb	Cd	Cu	Zn	Ni
1. Контроль	0,040	0,005	1,5	4,0	0,05
2. ОСВ в чистом виде	0,049	0,005	1,9	5,1	0,06
3. ОСВ: опилки 1:2	0,047	0,005	1,8	4,8	0,06
4. ОСВ: опилки 1:3	0,045	0,005	1,7	4,6	0,06
5. ОСВ: опилки 1:5	0,044	0,005	1,7	4,6	0,05
6. ОСВ: торф 1:2	0,048	0,006	1,9	4,9	0,06
7. ОСВ: торф 1:3	0,046	0,006	1,8	4,7	0,05
8. ОСВ: торф 1:5	0,043	0,005	1,7	4,8	0,05
9. ОСВ: опилки 1:3+ биодоб.	0,044	0,005	1,8	4,4	0,05

Наши исследования показывают, что в настоящее время, когда большинство хозяйств не имеют возможности закупать в полном объеме необходимые минеральные удобрения, пополнять плодородие почвы можно за счет удобрений с участием ОСВ. При этом важно учитывать необходимость проведения мониторинговых исследований, чтобы не допустить избыточного накопления ТМ как в почве, так и в растительной продукции.

И.А. Пресняков

КОЛЛОИДНЫЙ СИНТЕЗ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК ZNS В СРЕДЕ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Руководитель О.Е. Журавлев

Тверской государственной университет

Кафедра органической химии

Квантовые точки – полупроводниковые нанокристаллы с размером в диапазоне 2–10 нанометров, состоящие из 10^3 – 10^5 атомов, созданные на основе неорганических полупроводниковых материалов Si, InP, CdSe.

Квантовые точки могут быть использованы в производстве различных люминесцентных материалов, а также в качестве основы для производства сверхминиатюрных светодиодов, источников белого света, одноэлектронных транзисторов, нелинейно-оптических устройств, фоточувствительных и фотогальванических устройств.

Метод коллоидного синтеза обладает рядом преимуществ: возможность контролировать процесс роста наночастиц, например с помощью варьирования температурных параметров; возможность получать наночастицы в виде порошка; относительно невысокие температуры синтеза; метод позволяет синтезировать наночастицы с небольшим разбросом геометрических параметров (дисперсия среднего размера 5–10 %)*.

В настоящей работе синтезированы наночастицы полупроводников (сульфида цинка и сульфида кадмия). Прекурсоры для синтеза наночастиц (растворы солей цинка и кадмия, а также сульфид натрия) вводились одновременно при постоянном перемешивании в систему содержащую ионную жидкость в смеси с органическими растворителями. Наличие наночастиц полупроводников в золях было установлено методами УФ-спектроскопии и динамического светорассеяния. Синтез проведен в среде ионной жидкости тетрафторбората N-децилпиридиния в присутствии этилацетата и ацетона. Размеры синтезированных наночастиц сульфида цинка лежит в области 2–15 нм.

Ионная жидкость в данном случае одновременно выступает в роли растворителя для получения наночастиц и в роли стабилизатора. Стабилизирующее действие ИЖ вызвано наличием доменной структуры которая в свою очередь обусловлена различного рода взаимодействиями (кулоновские взаимодействия, водородное связывание, стекинг-взаимодействия и др.).

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

* Васильев Р.Б., Дирин Д.Н.// Квантовые точки: синтез, свойства и применение. Методические материалы. М. 2007. 34 с.

МОДЕРНИЗАЦИЯ КОМПЛЕКТА ЦИФРОВОЙ КАМЕРЫ С КОМПАКТНЫМ ПЕРЕНОСНЫМ МИКРОСКОПОМ

Руководитель Т.В. Буланова

Кузбасский государственный технический университет
Кафедра химии и технологии неорганических веществ и наноматериалов

Техническое диагностирование опасных производственных объектов выполняет значимую роль в КОО «Азот» в вопросах контроля качества изготовления и ремонта различных технических устройств и сооружений. Задачи в области металловедения решает участок контроля эксплуатационных свойств конструкционных материалов (УКЭСМ). Оснащение и укомплектование лаборатории металлов УКЭСМ, осуществлялось 40-50 лет назад. Для проведения всех видов контроля с высоким уровнем оперативности, качества и безопасности, необходимо было произвести замену устаревшего оборудования на новое, современное.

Для решения вопроса проведения металлографического контроля на месте установки технического устройства, был осуществлен поиск на основе подтверждения репутации фирмы изготовителя, цены и качества оборудования. Исходя из этого, выбор был сделан на компании СИАМС, которая поставила компактный микроскоп в комплекте с цифровой фотокамерой Nikon COOLPIX 4500 для выполнения металлографического анализа на месте установки технического устройства. Опыт эксплуатации показал, что выполнение фотоснимков на месте довольно затруднителен, так как практически во всех цехах предприятия есть вибрация, и этот фактор мешал наведению резкости на фотоаппарате, и соответственно, возможности получить качественные снимки. Путем проработки различных вариантов был сконструирован переходник, который впоследствии был изготовлен по заявке в цехе КИПиА. Данный переходник представляет собой втулку, один конец которой имеет резьбу, которая позволяет присоединить к ней объектив фотокамеры. К микроскопу переходник крепится при помощи трех винтов.

Микроскоп СИАМС нашел свое применение, как замена устаревшему переносному микроскопу, который был довольно тяжелым и габаритным.

ЭНЕРГИИ РАЗРЫВА СВЯЗИ В НИТРОАЛКАНАХ

Руководитель М.Г. Виноградова
Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Энергия разрыва связи – одна из характеристик обуславливающая стабильность молекул и вещества в целом. Экспериментальные же сведения по энергиям разрыва связей скудны и порой противоречивы.

Поэтому важное значение имеет развитие расчетных методов определения, предсказания физико-химических свойств молекул и получение с помощью этих методов новой информации.

Целью настоящей работы является – проведение анализа энергии разрыва связи в нитроалканах.

Для достижения поставленной цели в работе были решены следующие задачи:

- проведена оценка состояния численных данных по энергиям разрыва связи в рассматриваемых соединениях,
- выявлены определённые закономерности связывающие энергии разрыва связей со строением нитроалканов,
- проведены численные расчёты, согласующиеся с экспериментом,
- построены и проанализированы графические зависимости “энергия разрыва связи – число заместителей”.

Найдено, что данные зависимости в общем случае нелинейны, однако линии замещения на одну и ту же группу симбатны между собой.

Такие зависимости позволяют наглядно оценить влияние вида и числа разных заместителей, а с практической стороны графическим путем получать недостающие значения свойств.

Анализ числовых данных по энергиям разрыва связей в нитроалканах позволил выявить определенные закономерности.

- Энергии разрыва связей D_{298} в нитроалканах с увеличением длины цепи молекулы колеблется в некоторых пределах.
- Энергия разрыва связей D_{298} в рассматриваемых соединениях увеличивается при разветвлении радикала.
- Энергии разрыва связей C–N в нитроалканах увеличиваются при появлении фенольной или цикла в цепи молекулы.
- Энергии разрыва связей C–N в нитроалканах уменьшаются при увеличении числа заместителей.

Также в работе показано, что численные расчеты (там, где можно сделать сопоставления) согласуются с экспериментом.

ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ КРЕМНИЙОРГАНИЧЕСКИХ
СОЕДИНЕНИЙ. ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Руководитель Ю.Г. Папулов

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций “структура – энтальпия образования” в кремнийорганических соединениях.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

- анализ экспериментальных данных по исследуемым соединениям,
- подбор топологических индексов (ТИ),
- построение расчётных схем и функциональных зависимостей вида $P=f(\text{ТИ})$,
- проведение численных расчётов,
- построение и анализ графических зависимостей.

В работе была проведена оценка состояния численных данных по энтальпии образования кремнийорганических соединений, выявлены отдельные закономерности.

Были получены аналитические зависимости наиболее точно коррелирующие с энтальпией образования рассматриваемых соединений.

Также в работе рассматриваются расчётные схемы для алканов и их аналогов.

Так в третьем приближении для алканов имеем :

$$P_{C_n H_{2n+2}} = a + bn + p_2 \Gamma_{CC} + R \Delta_{CCC} + p_3 \tau_{CC} + p_4 \omega_{CC} ,$$

где

$$a = -rc - c + 2rc - n , \quad b = rc - c + 2rc - n .$$

Здесь p_2, p_3, p_4 – соответственно число путей (рёбер) длины два, три и четыре; R – число троек смежных рёбер; $\Gamma_{CC}, \tau_{CC}, \omega_{CC}$ – эффективные взаимодействия пар атомов С соответственно через один атом, два, три и четыре атома и т.д.

Аналогичная схема получена для кремнийорганических соединений.

По полученным формулам проведён численный расчёт энтальпии образования ряда кремнийорганических соединений. Рассчитанные величины, в общем, согласуются с экспериментальными.

В работе также были построены и проанализированы графические зависимости энтальпии образования от различных факторов.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ БИОКАТАЛИЗАТОРОВ С ПОМОЩЬЮ ФУРЬЕ-ИК СПЕКТРОСКОПИИ И МЕТОДА БЭТ

Руководитель Н.В. Лакина

Тверской государственной технической университет

Кафедра Биотехнологии и химии

Для переэтерификации растительных масел с целью получения биодизеля кроме соблюдения конкретных условий реакций необходимо использование катализатора. В последние годы наиболее перспективными считаются биокатализаторы на основе гидролитического фермента липазы.

В данной работе исследовались биокатализаторы на основе липазы, иммобилизированной на магнитные наночастицы (МНЧ), обработанные различными модифицирующими и сшивающими агентами, – $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Na}_3\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7/\text{Glu}/\text{Lip}$ и $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{APTS}/\text{Glu}/\text{Lip}$.

Изучение структуры многокомпонентных биокатализаторов проводилось с использованием ИК-Фурье спектрофотометрического метода анализа. Полученные результаты указывают на наличие ковалентных связей между функциональными группами модифицирующего и сшивающего агентов и фермента – липазы, что обуславливает стабильность полученного катализатора.

Измерения структурно-морфологических параметров синтезированных биокатализаторов проводились методом низкотемпературной адсорбции азота. На основании модели БЭТ было определено распределение пор по объему для биокатализаторов (рис.1).

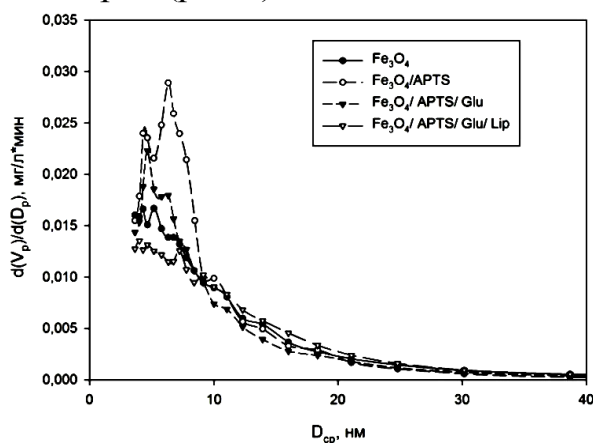


Рис. График распределения объема пор в зависимости от их диаметра для МНЧ, стабилизированных 3-аминопропилтриэтоксисиланом

Из рисунка видно, что МНЧ, в основном, имеют мезопористую структуру, способствующую химической сорбции как модифицирующих агентов, так и фермента в процессе синтеза биокатализатора.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРИБЛОК-СОПОЛИМЕРОВ
С БЛОКАМИ РАЗНОЙ ЖЕСТКОСТИ

Руководитель А.С. Павлов

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Блок-сополимеры являются достаточно общим объектом для изучения процессов микрофазного расслоения. Они охватывают весь спектр явлений, которые можно наблюдать при микрофазном разделении. Однако наличие в блок-сополимерах гибких и жестких блоков усложняет фазовое поведение данных систем, что приводит к большому разнообразию возникающих структур.

В ходе исследований с системами триблок-сополимеров с жесткими и гибкими блоками были обнаружены многие морфологии, включающие центрально-симметричные ламеллярные структуры, биконтинуальные сетевые структуры, цилиндры, сферические мицеллы и другие*. Однако наиболее интересной оказалась морфология гексагонально расположенных хиральных цилиндров (Hex*), возникающая в результате фазового перехода из обычной гексагональной фазы (Hex).

В данной работе проведено исследование процессов самоорганизации в расплаве триблок-сополимеров, содержащих блоки с разной жесткостью. Моделирование осуществлялось с помощью метода диссипативной динамики частиц, относящегося к мезоскопическим методам моделирования. Проведенное исследование показало, что найденная морфология хиральных цилиндров является стабильной при значениях объемной доли жестких блоков $f=0,25$ и $0,33$, при этом параметр несовместимости блоков, связанный с параметром Флори-Хаггинса известным соотношением $a_{ij} = 25 + 3,497\chi_{ij}k_B T$, был равен 60. Показано, что образующаяся фаза построена из жестких блоков и имеет нематический тип упорядочения, однако в случае $f=0,33$ упорядоченные области состояли из гибкоцепных блоков. Поскольку значение параметра порядка (по Френкелю) для всей ячейки оказалось неэффективным вследствие различной ориентации доменов, расчет параметра порядка проведен для отдельных доменов. Построены графики парной корреляционной функции и структурного фактора.

* Селина Т.Ю., Павлов А.С. Компьютерное моделирование триблок-сополимеров // Вестник Тверского государственного университета. 2014. Серия Химия. №2. С. 114–122.

В.Е. Ситникова

ИССЛЕДОВАНИЕ МУТНЫХ СРЕД МЕТОДАМИ ОПТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Руководители: П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк
Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

В последнее время существенно возрос интерес к полимерным наполненным и пористым материалам, рассеивающим электромагнитное излучение («мутные» среды).

Для анализа «мутных» сред используют в основном неразрушающие методы анализа (ЯМР, эллипсометрия и др.). Однако многие из методов являются дорогостоящими и редко используются в лабораторной практике. Наиболее часто для анализа «мутных» сред используют визуальные методы микроскопии (оптическая, электронная и атомно-силовая), а также методы рассеяния электромагнитного излучения в рентгеновском (малоугловое рентгеновское рассеяние) диапазоне.

В связи с этим важно иметь простой, доступный и эффективный экспериментальный метод оценки размеров частиц наполнителя (или пор) в широком диапазоне (от нм до мм). Большинство имеющихся методов не удовлетворяют этим критериям. Поэтому настоящая работа направлена на разработку нового спектроскопического подхода в оптическом диапазоне длин волн для анализа морфологии полимерных «мутных» сред, который позволил бы решить указанные задачи.

В ИК спектрах поглощения «мутных» сред часто проявляется эффект рассеяния, с которым спектроскописты обычно борются путем использования иммерсионных сред. Наша методика основана на выделении и анализе рассеивающей компоненты ослабленного излучения, падающего на образец, с целью характеристики размеров, концентрации и ориентации рассеивающих частиц.

В качестве исследуемых «мутных» сред в данной работе были использованы водные суспензии порошков, полимерные композиты и пористые материалы.

Исследования данных объектов с применением спектроскопического подхода показали неплохую корреляцию между результатами этого подхода и данными визуальных методов (оптическая, электронная и атомно-силовая микроскопия), полученными на одних и тех же образцах. Все это свидетельствует о правильности научных основ развиваемого спектроскопического подхода.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

М.И. Скобин, Т.В. Крюков

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ГЕПАРИНА С КАТИОНАМИ ЦИНКА(II), МАРГАНЦА(II) И АМИНОКИСЛОТОЙ (ПРОЛИН)

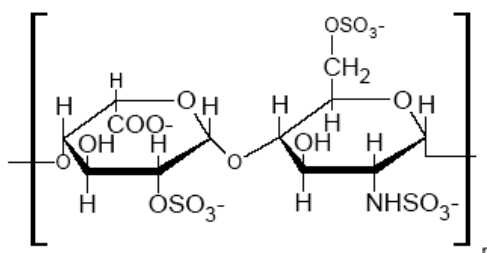
Руководитель М.А.Феофанова

Тверской государственный университет

Кафедра неорганической и аналитической химии

Целью данной работы было исследование смешаннолигандного комплексообразования ионов Zn(II), Mn(II) с высокомолекулярным гепарином и аминокислотой (пролин) в соотношении компонентов 1 : 1 : 1 с помощью традиционных методов – рН-метрического титрования (фоновый электролит 0,15 М NaCl; температура 37°C) и метода математического моделирования химических равновесий (алгоритмы New DALSFЕК, AUTOEQUIL и HYPERQUAD 2008).

При выполнении работы учитывалось, что высокомолекулярный гепарин образует с ионами Zn(II), Mn(II) как монолигандные комплексы, так и смешаннолигандные (обуславливается рядом факторов: конформация полимерной цепи, стерические факторы), мономерное звено гепарина выступает в данном случае в качестве четырехдентатного лиганда.



В итоге, после обработки кривых титрования тройных систем вида: ион металла – гепарин – аминокислота были получены модели, включающие наиболее вероятные комплексные формы. Равновесия, формы и соответствующие им константы устойчивости представлены в таблице:

Равновесие	lgβ
$\text{Hep}^{4-} + \text{Pro}^{-} + \text{Zn}^{2+} \leftrightarrow \text{ZnHepPro}^{3-}$	9.54 ± 0.29
$\text{Hep}^{4-} + \text{H}^{+} + \text{Pro}^{-} + \text{Zn}^{2+} \leftrightarrow \text{ZnHepHPro}^{2-}$	16.26 ± 0.31
$\text{Hep}^{4-} + \text{H}^{+} + \text{Pro}^{-} + \text{Mn}^{2+} \leftrightarrow \text{MnHepHArg}^{2-}$	17.76 ± 0.11

Все усилия, проявленные в данной работе, направлены на изучение сложных ион-молекулярных равновесий с участием катионов Zn(II), Mn(II) и полимерного биолиганда гепарина, а также аминокислоты (пролин). Особый интерес представляют синтез и структурные исследования идентифицированных тройных металлокомплексов ввиду возможности их применения в медицине.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

В.В. Смелкова, М.А. Рубин

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОЛИМЕР-СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ
КАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ ЦИНКА В ПРОЦЕССЕ
ЖИДКОФАЗНОГО СИНТЕЗА МЕТАНОЛА

Руководитель А.В. Быков

Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии и химии

В работе представлены результаты каталитического тестирования полимер-стабилизированных катализаторов на основе цинка в жидкофазном синтезе метанола. В качестве полимерной матрицы использовался промышленный полимер MN-100.

В ходе исследования изучалось влияние содержания активной фазы в катализаторе, состава растворителя и давления газовой смеси на скорость и селективность образования метанола. Эксперименты проводились при температуре 170⁰С и скорости газового потока ($H_2+CO+CO_2+N_2$) 45 мл_н/мин.

При варьировании состава активной фазы катализатора в пределах от 3% до 10% Zn в полимерной матрице, наибольшую скорость образования метанола показал катализатор с содержанием Zn 7.5%, обеспечивая стационарную скорость образования метанола 2236 мг на килограмм катализатора в час при скорости потока 45 мл_н/мин. Одновременно с увеличением выхода метанола происходит повышение селективности процесса до 92.5 %.

При варьировании состава растворителя додекан: ИПС: 1) 2:1; 2) 1:1; 3) чистый изопропиловый спирт, наибольшая скорость образования метанола наблюдается при проведении процесса в чистом изопропиловом спирте, с достижением селективности по метанолу 92.5%.

При варьировании давления в пределах от 20 атм. до 50 атм., в среде изопропилового спирта для 3% Zn на MN100, было установлено, что наибольшая скорость образования метанола достигается при давлении в 20 атм., с достижением селективности процесса 94.0 %.

Во всех экспериментах при использовании всех исследованных каталитических систем в качестве побочных продуктов были зафиксированы метан и следовые количества воды. Кислородсодержащие соединения представлены только целевым продуктом. Во всем исследованном диапазоне в парогазовой смеси отсутствует типичный побочный продукт синтеза метанола – диметиловый эфир.

СИНТЕЗ Ag, Pd, Ag –СОДЕРЖАЩИХ НАНОЧАСТИЦЫ

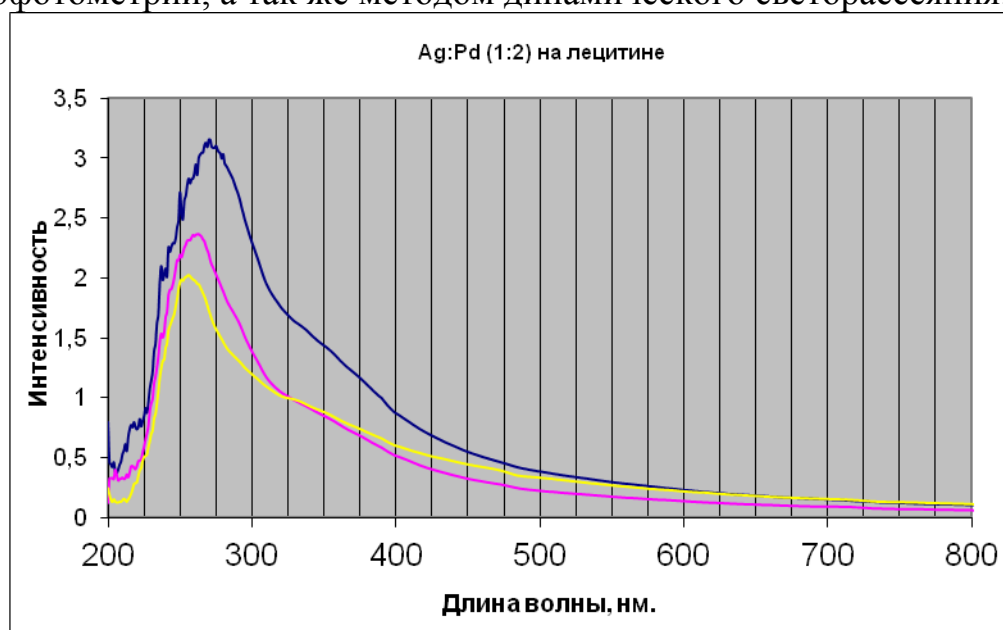
Руководитель А.И. Сидоров

Тверской государственный технический университет

Кафедра биотехнологии и химии

В настоящее время большое внимание уделяется изучению каталитических систем, содержащих Au, Pd и Ag. Это связано с высоким потенциалом использования таких систем в реакциях каталитического окисления. Спектр их применения довольно широк: реакции окисления спиртов, сахаров; использования для обезвреживания вредных веществ, выделяемых в атмосферу; гидрирование углеводородов и т.д. В связи с этим, высока актуальность разработка новых и усовершенствования старых методов получения данных каталитических систем.

В данной работе исследованы способы получения методом самосборки Au, Pd и Ag (а так же их различные сочетания) – содержащих наночастицы с использованием в качестве носителя PVP, лецитина и PVA.. Анализ, получаемых частиц (размер, полидисперсность и др.), осуществлялся методом спектрофотометрии, а так же методом динамического светорассеяния.



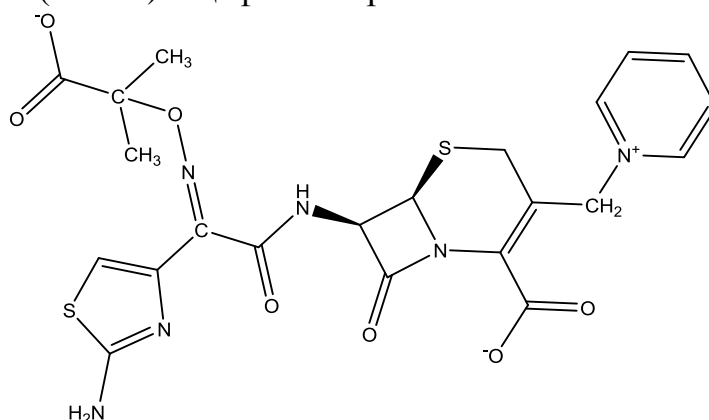
Были рассмотрены и описаны различные системы. А так же на основе полученных данных была произведена оптимизация используемого метода.

КИСЛОТНО-ОСНОВНЫЕ И КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩИЕ СВОЙСТВА ЦЕФТАЗИДИМА

Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Цефтазидим (HСtzd) – цефалоспориновый антибиотик III поколения.



Анион цефтазидима Ctzd^-

Методом рН-метрического титрования были определены константы протонирования аниона цефтазидима Ctzd^- и константы образования его комплексов с ионами Cu^{2+} и Ni^{2+} при 25 °С на фоне 0.1 моль/л KNO_3 . Константы равновесий рассчитаны с использованием программы New DALSFЕК (КСМ Soft, 2000 г.) Результаты приведены в таблице:

Равновесие	$\lg\beta$
$\text{H}^+ + \text{Ctzd}^- \leftrightarrow \text{HCtzd}$	4.82 ± 0.04
$2 \text{H}^+ + \text{Ctzd}^- \leftrightarrow \text{H}_2\text{Ctzd}^+$	7.62 ± 0.06
$3 \text{H}^+ + \text{Ctzd}^- \leftrightarrow \text{H}_3\text{Ctzd}^{2+}$	9.23 ± 0.09
$\text{Cu}^{2+} + \text{Ctzd}^- \leftrightarrow \text{CuCtzd}^+$	5.03 ± 0.06
$\text{Ni}^{2+} + \text{Ctzd}^- \leftrightarrow \text{NiCtzd}^+$	4.04 ± 0.03
$\text{Ni}^{2+} + 2 \text{Ctzd}^- \leftrightarrow \text{Ni}(\text{Ctzd})_2$	6.41 ± 0.06

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

СХЕМА РАСЧЕТА СВОЙСТВ Х-ЗАМЕЩЕННЫХ БЕНЗОЛА

Руководители: Смоляков В.М., Нилов Д.Ю.

Тверской государственной университет

Кафедра физической химии

Для описания строения изомеров Х-замещенных ($X=CH_3$) бензола D_{6h} получена аддитивная схема на основе разбиения многоугольных чисел треугольника Паскаля. При использовании строк треугольника Паскаля схема оценки свойства P изомеров Х-замещенных молекул группы D_{6h} запишется в виде:

$$P(D_{6h}) = C_n^0 p_0 + C_n^1 p_1 + \dots + C_n^{n-1} p_{n-1} + C_n^n p_n, \quad (1)$$

где p_0, p_1, p_2, \dots – параметры, а $C_n^0 = 1, C_n^1 = nX, C_n^2, C_n^3, C_n^4, \dots$ – треугольные (K_3), тетраэдрические ($K_{TЭ}$), арифметических рядов 5, 6 и 7 порядков. Так, при $n = 1, 2, 3, 4, \dots$, столбцы схемы (1) есть многоугольные числа: $K_3 = n(n-1)/2 = 1, 3, 6, 10, \dots$, $K_{TЭ} = n(n-1)(n-2)/6 = 1, 4, 10, 20, \dots$, $K_5 = n(n-1)(n-2)(n-3)/24 = 1, 5, 15, 35, \dots$, $K_6 = n(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)/120 = 1, 6, 21, 56, \dots$, $K_7 = n(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)(n-5)/720 = 1, 7, 28, 84, \dots$ и т.д. Разлагая числа (1) для Х-замещенных молекул D_{6h} получим (табл. 1 и 2):

$$P = n_0 \rho_0 + n_1 \rho_1 + n_2 \rho_2 + \dots + n_{11} \rho_{11} + n_{12} \rho_{12}, \quad (2)$$

где $\rho_0, \rho_1, \dots, \rho_{12}$ – эмпирические параметры, определяемые МНК по опытным данным для свойства P ряда Х-замещенных молекул, а n_0, n_1, \dots, n_{12} – их числа.

Для $\Delta_f G_{\text{газ}}$ бензола D_{6h} числовые значения параметров схемы (2) найдены МНК следующими (кДж/моль): $p_0 = 129,7; p_1 = -7,7; p_2 = 6,8; p_3 = 4,5; p_4 = 7,7; p_5 = -8,8; p_6 = 24,4; p_7 = -2,1; p_8 = 17,5; p_9 = -20,8; p_{10} = 7,2; p_{11} = 13,8; p_{12} = -31,8$.

Таблица 1. Схема (2) расчета свойств Х-замещенных бензола D_{6h} .

Х-замещенные молекул бензола ($X=CH_3$)	n_0	n_1	K_3			$K_{TЭ}$			K_5			K_6	K_7	2^n
			n_2	n_3	n_4	n_5	n_6	n_7	n_8	n_9	n_{10}	n_{11}	n_{12}	
C_6H_6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
C_6H_5X	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2
пара- C_6X_2	1	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4
мета- C_6X_2	1	2	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4
орто- C_6X_2	1	2	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	4
1,2,4- C_6X_3	1	3	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	8
1,3,5- C_6X_3	1	3	0	3	0	0	1	0	0	0	0	0	0	8
1,2,3- C_6X_3	1	3	0	1	2	0	0	1	0	0	0	0	0	8
1,2,4,5- C_6X_4	1	4	2	2	2	4	0	0	1	0	0	0	0	16
1,2,3,5- C_6X_4	1	4	1	3	2	2	1	1	0	1	0	0	0	16
1,2,3,4- C_6X_4	1	4	1	2	3	2	0	2	0	0	1	0	0	16
C_6X_5	1	5	2	4	4	6	1	3	1	2	2	1	0	32
C_6X_6	1	6	3	6	6	12	2	6	3	6	6	6	1	64

Таблица 2. Расчет по (2) свойств Х-замещенных $C_6H_6 D_{6h}$.

Бензол D_{6h}	Опыт	Расч.	Бензол D_{6h}	Опыт	Расч.
C_6H_6	129,7	129,7	1,2,3- C_6X_3	124,6	124,6
C_6H_5X	122,0	122,0	1,2,4,5- C_6X_4	119,5	119,5
пара- C_6X_2	121,1	121,1	1,2,3,5- C_6X_4	118,7	118,7
мета- C_6X_2	118,9	118,9	1,2,3,4- C_6X_4	123,4	123,4
орто- C_6X_2	122,1	122,1	C_6X_5	123,3	123,3
1,2,4- C_6X_3	116,9	116,9	C_6X_6	130,2	130,2
1,3,5- C_6X_3	144,7	144,7			

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ОКИСЛЕНИЯ РАСТИТЕЛЬНОГО МАСЛА
В ПРОЦЕССЕ ДЛИТЕЛЬНОГО НАГРЕВАНИЯ

Руководитель И.Ю.Егорова

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

К жирам относят природные органические соединения, не растворимые в воде, но растворимые в органических растворителях, и способные утилизироваться живыми организмами. Большинство жиров принадлежит к сложным эфирам многоатомных спиртов с высшими жирными кислотами. Например, растительное масло, которое является продуктом повседневного питания.

Растительное масло - это высококалорийный продукт, имеющий большое физиологическое значение. Масло употребляется как в пищевом, так и в промышленном производстве. Оно используется для приготовления кулинарных блюд, выработки консервов, непосредственно в пищу. В технике из масел производят мыла, олифы, глицерин и различного вида лаки. В состав масел входят ацилы высших предельных и непредельных карбоновых кислот, которые подвергаются окислительной деструкции при нагревании. В связи с чем, исследование динамики окисления углеводородных цепей в процессе длительного нагревания, приводящих к образованию первичных и вторичных продуктов окисления, представляет значительный интерес и является целью представленной работы.

Процессы окисления контролировались с помощью определения кислотного, эфирного и йодного чисел по известным методикам. Кислотное число показывает суммарное содержание свободных кислот, эфирное число – характеризует содержание связанных жирных кислот, йодное число – степень ненасыщенности кислотных остатков.

Анализ полученных данных показал, что разрушению подвергаются как сложноэфирные группы, причем доля свободных жирных кислот возрастает (значения кислотного числа возрастают, а эфирного – падают), так и фрагменты кислотных остатков, содержащих непредельные связи (значения йодного числа падают). Длительное нагревание приводит к нарастанию концентрации перекисных соединений с дальнейшим образованием альдегидов и оксикислот, концентрации которых постоянно растут. Окислительная деструкция приводит к значительному понижению качества масла, что в конечном итоге отрицательно сказывается на его физиологических свойствах. Процессы окисления и деструкции приводят к старению масла и невозможности применения его в пищу.

ВЛИЯНИЕ ПРОМЫШЛЕННЫХ ЗАГРЯЗНЕНИЙ НА ХИМИЧЕСКИЙ
СОСТАВ И МОРФОЛОГИЮ ОДУВАНЧИКА ЛЕКАРСТВЕННОГО
(*TARAXACUM OFFICINALE*)

Руководители П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк
Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

Загрязнение почвы, воды, воздуха различными промышленными отходами приводит к ухудшению состояния природных ландшафтов. Промышленные загрязнители попадают в окружающую среду и поглощаются растениями, многие из которых используются в медицине. Поэтому актуальной задачей является анализ изменений химического состава и морфологии растений (лекарственных или биоиндикаторных), происходящих под воздействием антропогенного фактора, для оценки качества лекарственного сырья или уровня экологической обстановки. Цель работы – оценить влияние промышленных загрязнений на химический состав и морфологию одуванчика лекарственного методами Фурье-ИК и УФ спектроскопии, атомно-адсорбционной спектрометрии (ААС) и растровой электронной микроскопии (РЭМ). В качестве объектов исследования были выбраны образцы одуванчика лекарственного (корни, листья, цветки), собранные в г. Твери в местах с различной антропогенной нагрузкой (промышленные зоны).

Анализ полученных данных показал, что одуванчик лекарственный чувствителен к промышленным загрязнениям. Так, ИК спектры образцов из разных мест сбора отличаются по интенсивности и положению максимума для следующего ряда характеристических полос: $\sim 1638\text{--}1624\text{см}^{-1}$ (Амид I), $\sim 1523\text{см}^{-1}$ (Амид II), $\sim 1259\text{см}^{-1}$ (Амид III). УФ спектры спиртовых и водных экстрактов корней, листьев и цветков одуванчика различаются по положению и интенсивности полос поглощения, а, следовательно, по содержанию и концентрации определенных групп фенольных соединений. Результаты ААС показали, что исследуемое растение проявляет способность к аккумулярованию некоторых тяжелых металлов (Fe, Zn, Cu, Co, Cd, Cr, Mn, Pb). С помощью РЭМ получены изображения поверхности листьев одуванчика, в которых наблюдаются некоторые изменения морфологических признаков. В соответствии с полученными результатами, можно сделать вывод, что одуванчик лекарственный восприимчив к изменению экологической обстановки. Его химический состав и внешнее строение листовых пластин могут служить показателями, характеризующими состояние окружающей среды, что необходимо учитывать при заготовке лекарственного сырья.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности

В.А. Стригина, А.С. Скворцов

ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ГИДРИРОВАНИЯ ФУРФУРОЛА В ФУРФУРИЛОВЫЙ И ТЕТРАГИДРОФУРФУРИЛОВЫЙ СПИРТ

Руководитель В.Ю. Долуда

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Растущая социальная, экономическая и политическая заинтересованность в применении возобновляемого сырья в качестве топлива связана с необходимостью снижения зависимости от нефтяных ресурсов и повышения ответственности за окружающую среду. Биомасса является одной из возможных альтернатив ископаемому невозобновляемому источнику топлива. После температурной переработке биомассы наиболее часто встречающимся компонентами являются фурфурол и его производные. Большой интерес к фурановым соединениям может стимулировать разработку новых процессов каталитической конверсии фурфурола и его производных, которые в будущем могут снизить стоимость их производства, а, следовательно, увеличить масштабы производства. Это приведет к запуску на рынке выгодных альтернативных видов топлива для двигателей с искровым зажиганием, представляющие собой перспективную замену обычного бензина [1; 2].

Данная работа посвящена процессу гидрирования фурфурола в атмосфере H_2 на 3% Ru катализаторе, нанесенном на сверхсшитый полистирол. Реакцию гидрирования проводят в шестиячеечном реакторе Multiple Reactor System (MRS) Series 5000 при давлении H_2 6 МПа, в интервале температур от 363 до 403 К. 0,1 г Ru-содержащего катализатора, 2 мл чистого фурфурола и 48 мл гексан вносили в реактор. В качестве растворителя используется гексан. Гидрирование проводили при непрерывном перемешивании (800 об / мин).

Максимальная конверсия, полученная при использовании 3% Ru катализатора, нанесенного на сверхсшитый полистирол, составила 99.1% при селективности 1.4% and 60.7% по фурфуроловому и тетрагидрофурфуроловому спирту соответственно. Наблюдалось увеличение конверсии фурфурола с 79.5% до 99.1% в температурном диапазоне 363 – 403 К.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. C. Stamigna, D. Chiaretti, E. Chiaretti, P.P. Prosini, *Biomass and bioenergy*. 39 (2012) 478-483
2. A. Malinowski, D. Wardzinska, *CHEMIK*. 66 (2012) 982–990.

ЭФФЕКТИВНОСТЬ СОЕДИНЕНИЙ СЕЛЕНА ПРИ ВОЗДЕЛЫВАНИИ ОВОЩНОЙ КУЛЬТУРЫ

Руководители: О.В. Смирнова, Т.И. Смирнова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Необходимый для нормальной жизнедеятельности человека селен участвует в процессах метаболизма, защищает организм от ядовитых веществ, повышает иммунитет, способствует образованию антител, контролирующих рост опухолей различного происхождения, включая и онкологические новообразования и пр. В связи с этим особое внимание следует уделять использованию биологически активных и экологически безопасных веществ, содержащих селен. К ним относятся комплексоны микроэлементов на основе комплексонов, производных янтарной кислоты - этилендиаминдиантарной кислоты (ЭДДЯК).

Целью исследования стало изучение действия соединений селена на урожайность и биохимический состав овощной культуры.

Наблюдения проводились на экспериментальном участке кафедры агрохимии, почвоведения и агроэкологии Тверской ГСХА. Общая площадь участка составила 150 м², площадь учетной делянки – 1 м². Повторность опыта четырехкратная, расположение делянок – рендомизированное.

Схема опыта включала варианты с применением агрогумата калия в дозе 500 кг/ га и обработку вегетирующих растений растворами Na₂SeO₃, ЭДДЯК и Se-ЭДДЯК и H₂O. В качестве опытной культуры выращивались кабачки сорта «Мавр».

Перед закладкой опыта был проведен химический анализ агрогумата калия. Он показал, что исследуемое удобрение обладало слабощелочной реакцией и невысокой зольностью. Среди основных питательных элементов преобладали калий (7,75%) и азот (2,86 %), а содержание фосфора оказалось самым низким (0,22 %).

В течение вегетационного периода количество нитратного азота, подвижного фосфора и обменного калия снижалось с июня по август, при этом наибольшим содержанием в течение всех периодов наблюдений отличался вариант с агрогуматом калия и Se-ЭДДЯК.

Наибольшая урожайность плодов кабачков (3,79 кг/м²) и прибавка к контролю (1,89 кг/м²) получены на варианте с применением Se-ЭДДЯК, а наименьшие результаты установлены на фоне агрогумата с комплексоном ЭДДЯК (1,88 кг/м² и 0,625 кг/м² соответственно).

Максимальным содержанием рутина в плодах отличались варианты с применением ЭДДЯК и Se-ЭДДЯК (в среднем 26-50 мг/100 г плодов).

КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ ТИПА «СЭНДВИЧ» В ХИРУРГИИ

Руководители: Г.Е. Бордина, Н.П. Лопина
ГБОУ ВПО Тверская ГМА Минздрава России
Кафедра химии

Несмотря на то, что в последние годы в мире появилось множество раневых покрытий, существенно ускоривших процесс заживления ожогов II - III степени, для успешного заживления более серьезных ран необходимо создание более эффективных аппликаций на раны и ожоги. В настоящее время актуальным является разработка композитных полимерных покрытий, обеспечивающих атравматичный перенос клеток и создающих оптимальные условия для заживления глубоких и обширных поражений кожи. Существующие на сегодняшний день покрытия не удовлетворяют тем требованиям, которые предъявляются к современным полимерным материалам в медицине. Это связано с тем, что они созданы на основе либо синтетических полимеров, либо полимеров, полученных из биологических источников. Синтетические полимеры, являясь хорошим механическим каркасом, не обладают необходимой биологической активностью для обеспечения адгезии клеток. Природные полимеры, обладая хорошей биологической активностью, не имеют достаточной механической прочности.

Таким образом, для обеспечения адгезии клеток и оптимальных условий для миграции клеток и регенерации кожи необходимым становится создание композитных материалов, объединяющих достоинства природных и синтетических полимеров. Примером таких материалов являются появившиеся в последнее время композиционные материалы типа «сэндвич», которые являются прототипом «искусственной кожи».

Искусственная кожа в случае ее массового производства найдет широкое применение у хирургов и у других специалистов в клиниках РФ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Давыдова Г.А. “Разработка новых биоматериалов типа "искусственная кожа" на основе фторполимерного латекса, модифицированного полисахаридами” // Автореф. дис. ...канд. физ.-мат. наук.- Пушкино, 2005.- 25 с.
2. Бекман И.Г. “Мембраны в медицине” [Текст]: курс лекций. Москва, 2010.

В.А. Таскаева

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СОЕДИНЕНИЯ МЕДИ(II) С ИЗОНИКОТИНОВОЙ КИСЛОТОЙ

Руководитель Э.С. Татарина

Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева
Кафедра химии, технологии неорганических веществ и наноматериалов

Координационные соединения, в которых ионы металла связаны с полидонными органическими лигандами, интенсивно исследуются в связи с широкими возможностями химического дизайна и разнообразием проявляемых свойств: каталитических, люминесцентных, магнитных [1]. В работе [2] описано образование трехмерной каркасной структуры комплексом меди(II) с изоникотиновой кислотой за счет водородной связи.

Синтезировано соединение состава $\text{Cu}(\text{Inic})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, изученное методами химического, ИК спектроскопического, термического и рентгенофазового анализов. При смешении нагретых до кипения водных растворов $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (1г, 0,0059 моль, 100 мл H_2O) или $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (1г, 0,004 моль, 100 мл H_2O) и HInic (2 г в 100 мл H_2O) выпадали голубые кристаллические осадки, которые отфильтровывали и высушивали на воздухе. Анализ изоникотината меди(II) на Cl^- и SO_4^{2-} показал отрицательный результат. ИК спектр синтезированного соединения подтверждает координацию Inic к иону металла через кислород карбоксильной группы ($\nu=1551 \text{ см}^{-1}$). Широкие полосы поглощения при 3422 см^{-1} подтверждают присутствие воды в составе комплекса. По данным рентгенофазового анализа можно утверждать, что полученное соединение имеет кристаллическую структуру. При температуре около 120°C соединение обезвоживается и необратимо изменяет окраску от голубой до темно-синей. Обезвоженный комплекс устойчив до 300°C , выше этой температуры разлагается.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Синтез, кристаллическая структура и люминесцентные свойства координационных полимеров на основе изоникотинатов кадмия / М.С. Завахина [и др] // Коорд. химия. 2013. №4. С.211–217.
2. Wen, Y.S. Bond characterization of the 3-D framework structure of the copper(II) isonicotinic acid complex formed by hydrogen bonding / Y.S Wen, Y. Wang // Chem. Res. Chin. 2001. 17. №3. С. 212.

А.А. Томилина, И.В. Горюнова

ОСОБЕННОСТИ ВОЗДЕЛЫВАНИЯ ЗЕРНОВЫХ КУЛЬТУР В УСЛОВИЯХ ВЕРХНЕВОЛЖЬЯ

Руководитель П.Н.Кузнецов

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра общего земледелия и растениеводства

Одной из актуальных проблем современного сельскохозяйственного производства является увеличение производства зерна с высокими качественными показателями. В этой связи, нами на опытном поле Тверской государственной сельскохозяйственной академии были проведены специальные исследования по испытанию различных агротехнических приемов.

Предварительные испытания отдельных приемов технологии в условиях в целом благоприятного 2014 года на овсе сорта «Кречет» показали, что в максимуме, сбор зерна был получен на фоне удобрений под планируемый урожай 30ц/га с применением стимулятора роста Биоплант Флора и гербицида Дианат – 33,2ц/га, что на 6,6ц/га выше контрольного показателя.

Определенный интерес представляют экспериментальные данные, полученные в условиях нынешнего года на озимой ржи сорта «Фаленская-4». Так, максимальный урожай зерна был получен на фоне обычной вспашки на глубину 20-22см с применением в вегетационный период регулятора роста Биоплант Флора и гербицида Эллай Лайт – 34,8ц/га, что выше контрольной величины на 5,9ц/га.

Таким образом, правильное, научно-обоснованное применение современных приемов агротехники, особенно в их комплексном сочетании, способствует лучшим условиям роста и развития растений, наиболее высокой урожайности ведущих зерновых культур Верхневолжья.

ЦЕОЛИТЫ ТИПА Y И ZSM-5 В КАЧЕСТВЕ КАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ИЗОМЕРИЗАЦИИ ОКСИДА ВЕРБЕНОЛА

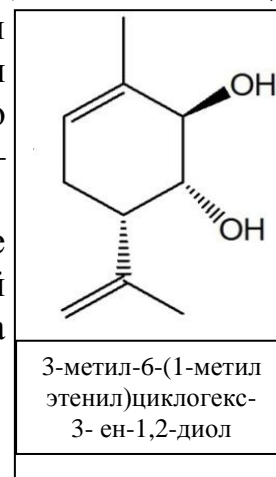
Руководитель Э.М. Сульман

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

Широко известно, что терпены, полученные из биомассы, содержат такие химические вещества, которые используются для производства вкусовых и ароматических добавок и фармацевтических препаратов, например, α -пинен. А вербенон – один из компонентов, принадлежащих к терпеноидам монотерпенового ряда, получают из α -пинена, и, кроме того, он может быть выделен из эфирных масел хвойных деревьев. В свою очередь, из вербенона синтезируют оксид вербенола (ОВ). Один из продуктов изомеризации ОВ, транс-диол (3-метил-6-(1-метилэтенил)циклогекс-3-ен-1,2-диол), объединяет такие важные свойства, как низкая токсичность и высокая противосудорожная активность, и может применяться в лечении болезни Паркинсона. Надо отметить, что селективный синтез данного соединения – весьма сложная задача.

ОВ был получен в Новосибирском институте органической химии им. Н.Н. Ворожцова с чистотой 87,5%, определенной методом ЯМР. В ходе работы была изучена серия цеолитов для реакции изомеризации ОВ: H-USY-6 (Si/Al = 6), H-USY-12 (Si/Al = 17), H-USY-80 (SiO₂/Al₂O₃ = 80), ZSM-5-80 (SiO₂/Al₂O₃ = 80).

Характеристика катализаторов была осуществлена с помощью следующих методов: низкотемпературная адсорбция азота, адсорбция/десорбция пиридина, сканирующая электронная микроскопия, просвечивающая электронная микроскопия. Эксперименты проводились в четырехгорлой стеклянной колбе объемом 250 мл, безводный диметилацетамид ($\geq 99.5\%$) использовался в качестве растворителя. Размер частиц цеолитов составил менее 90 мкм. Кроме того, была обеспечена скорость перемешивания 390 оборотов в минуту, чтобы избежать лимитирования из-за массопереноса. В итоге после проведения расчетов для цеолитов H-USY, значение начальной скорости реакции возрастает с уменьшением соотношения SiO₂/Al₂O₃ и с увеличением концентрации брэнстедовских кислотных сайтов. Высокое значение селективности 50% при полной конверсии субстрата было достигнуто на катализаторе H-USY-80. Для катализатора H-ZSM-5-80 реакция идет с более высокой селективностью 57%, но в данных условиях за время эксперимента конверсия составила 75%.



К.Д. Травникова

КОМПЛЕКСНЫЕ СОЛИ АЦЕТИЛХОЛИНА С d-ПЕРЕХОДНЫМИ МЕТАЛЛАМИ Co, Ni, Mn

Руководитель Н.В. Веролайнен

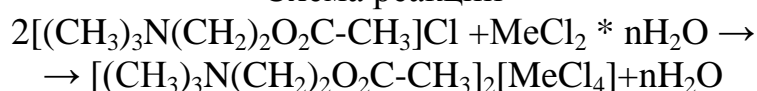
Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Комплексы переходных металлов с органическими лигандами широко применяются в различных областях науки и техники. Важную роль координационные соединения играют в изучении строения и механизма действия биохимических молекул (ДНК, РНК, ферментов и др.), в промышленном катализе, фармакологии, аналитической химии и новых областях современной электроники. Разработка методов синтеза металлокомплексов с органическими лигандами и установление закономерностей их образования и взаимосвязи между строением и физико-химическими свойствами является актуальной проблемой современной препаративной химии.

Целью данной работы было получение и исследование свойств тетрахлорметаллатных солей переходных металлов Co, Ni, Mn на основе хлорида ацетилхолина, который является важнейшим нейромедиатором, отвечающим за множество процессов, протекающих в нервных тканях головного мозга.

Комплексные соли были получены из хлоридов Co, Ni, Mn и хлорида ацетилхолина твердофазным синтезом и синтезом из спиртового раствора.

Схема реакций



Твердофазный синтез проводили в соотношении реагентов 2:1 при $t=90^\circ\text{C}$ в течение 10 часов. Синтез в спиртовом растворе вели в соотношении реагентов 2:1 при $t=60-70^\circ\text{C}$ в течение 30 минут. Цвет комплекса зависит от используемого хлорида металла. Полученные соли в виде кристаллов зеленого, синего, светло-розового цветов с $T_{\text{пл}}$ от 210 до 290°C , растворяются в воде, ацетоне и не растворяются в диэтиловом эфире.

Для всех полученных комплексов сняты спектры поглощения в видимой и инфракрасной области. Спектры поглощения в видимой области указывают на наличие в составе полученных комплексов тетрахлорметаллатных анионов $[\text{NiCl}_4]^-$, $[\text{CoCl}_4]^-$, $[\text{MnCl}_4]^-$. Проведены галоформные реакции, установлены их физико-химические характеристики. Исследована термическая стабильность комплексов хлорида ацетилхолина с переходными металлами. Показано, что полученные комплексы устойчивы до $270-280^\circ\text{C}$ и теряют 50% массы при 400°C , выше 500°C наблюдаются неразложившиеся остатки.

СОДЕРЖАНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ ПИТАНИЯ В САПРОПЕЛЯХ
ТВЕРСКОЙ ОБЛАСТИ

Руководитель И.А. Дроздов

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Для поддержания содержания органического вещества в пахотных почвах Тверской области на существующем уровне необходимо вносить в них органические удобрения из расчета 5–6 т/га в год. К сожалению, за последнее время насыщенность полей органическими удобрениями составляет только около 1 т/га, что крайне мало. Резко увеличить поставку органического вещества в дерново-подзолистые почвы области можно в основном за счет торфа и сапропеля, запасы которых в регионе поистине огромны.

Если применительно к торфу имеется большая литература, то касательно использования сапропеля, данных крайне мало.

В противоположность торфу, сапропель образуется в открытых водоемах и в основной своей массе слагается из остатков микроскопически мелких растений и животных (планктонных организмов), свободно плавающих в воде. В зависимости от преобладания образующих сапропель исходных субстратов он бывает органический и минеральный.

Мы исследовали содержание основных элементов питания в указанных видах сапропелевых месторождений расположенных в Тверской области. Органический сапропель брали из Ивановского водохранилища, а минеральный- из водоемов в Калининском районе. Полученные данные представлены в табл.

Таблице. Химический состав сапропелей

Месторождение	Влажность, %	рН	В абсолютно сухом веществе, %				Зола
			N _{общ}	P ₂ O ₅ _{общ}	K ₂ O _{общ}	Fe ₂ O ₃ _{общ}	
Иваньковское вод-ще (органический)	30,62	5,7	3,12	0,17	0,15	0,57	36,42
Калининский р-он (минеральный)	19,11	6,6	1,19	0,16	0,16	0,24	96,32

Они свидетельствуют, что минеральный сапропель имел очень высокую зольность (96,33%), по сравнению с органическим (36,42%). Однако он содержал меньшее количество общего азота и железа, а количество общих форм фосфора и калия в исследуемых образцах было практически одинаково. Из полученных данных видно, что для обогащения наших дерново-подзолистых почв органическим веществом и азотом, в них следует вносить органический сапропель, желательно в виде различных компостов.

Л.И. Фотаки

ВЛИЯНИЕ ФРАКЦИЙ СВИНОГО НАВОЗА ЗАО «ЗАВОЛЖСКОЕ» НА СОДЕРЖАНИЕ И СОСТАВ ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА ДЕРНОВО-ПОДЗОЛИСТОЙ ПОЧВЫ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

За последние два десятилетия в России резко увеличилось количество крупных животноводческих комплексов. В них животные содержатся на щелевых полах без подстилки. Проваливающийся через щели навоз, поступает в заглубленные навозоприемники, где проходит бактериологическую выдержку (примерно 8 суток). Из навозоприемников органическое сырье поступает на сепараторы, которые разделяют его на твердую и жидкую фракции. Твердая фракция отвозится на площадку для компостирования, после чего используется как обычный навоз. На жидкую фракцию приходится около 92-93% от исходного навоза. После сепаратора она перекачивается в лагуны, в которых хранится в течение 6 месяцев. По истечении этого срока применяется в виде удобрений. Данная фракция практически нигде не используется в полном объеме, поскольку животноводческие агрофирмы, как правило, обладают не большими площадями, на которые ее можно было бы вносить. Мы исследовали исходный навоз и его твердую фракцию в качестве удобрения для дерново-подзолистой супесчаной почвы. Дозы удобрений составляли из расчета содержания в них N100 и N200. Определили их влияние на содержание и состав гумуса в перегнойном слое. Полученные данные по динамике гумуса за два года проведения опыта свидетельствуют (табл.), что равновеликие по азоту дозы твердой фракции вызвали несколько большее накопление в почве гумуса, по сравнению с жидким навозом. В год последствия удобрения на фоне двойных доз такого преимущества не наблюдалось.

Таблица. Влияние удобрений на содержание гумуса почвы опытного участка

Вариант опыта	2011 год			2012 год		
	осень 2011, %	± к контролю	± к исходному	осень 2012, %	± к контролю	± к исходному
1. Контроль	2,10	-	0,01	2,10	-	0,01
2. Исходный навоз на N ₁₀₀ (153,8 т/га)	2,21	0,11	0,12	2,20	0,10	0,11
3. Исходный навоз на N ₂₀₀ (307,6 т/га)	2,28	0,18	0,19	2,29	0,19	0,20
4. Твердая фракция на N ₁₀₀ (15,2 т/га)	2,23	0,13	0,14	2,24	0,14	0,15
5. Твердая фракция на N ₂₀₀ (30,4 т/га)	2,30	0,20	0,21	2,28	0,18	0,19

Анализ состава гумуса показал, что твердая фракция способствовала большему формированию в почве гуминовых кислот, чем исходный навоз, притом в их составе отмечено повышенное содержание фракции 1 гуминовых кислот, слабо связанных с минеральной частью почвы. Если учесть, что доза внесения одинаковых по азоту твердых фракций была на порядок ниже, а оказанное влияние на органическую часть почвы практически одинаковым, то следует сделать заключение о целесообразности разделения исходного навоза на твердую и жидкую фракции. Применительно к твердой фракции это позволяет заметно экономить на стоимости внесения такого навоза в почву.

ИСКУССТВЕННЫЕ КРОВЕЗАМЕНИТЕЛИ

Руководители: Г.Е. Бордина, Н.П. Лопина
ГБОУ ВПО Тверская ГМА Минздрава России
Кафедра химии

В связи с возможностью заразиться опасными инфекциями или с несовместимостью при переливании донорской крови стала актуальна проблема создания искусственных кровезаменителей. Впервые над материалом для искусственных кровезаменителей задумались биофизики. Они изучили свойства перфторуглеродов, которые имеют поразительные свойства. Жидкие перфторуглероды (ПФУ) способны растворять до 50% объема кислорода и в 4 раза больше углекислого газа. Вслед за этими исследованиями был проведен первый опыт на живом организме. Опыт “мышь как рыба” был проведен Л.Кларком и Ф.Голланом в 1966 году. Мышь была погружена в жидкий перфторуглерод, но при этом не умерла и продолжала жить. На этом опыте ученые окончательно убедились в газотранспортной функции ПФУ. В это же время в России проводят аналогичный опыт и наши ученые решают найти применение перфторуглеродам в медицине. На научной конференции в г.Пушино в центре биологических исследований была разработана комплексная целевая программа по разработке искусственных кровезаменителей. Ученые, стоявшие у истоков исследования ПФУ: Ф.Ф.Белоярцев (1941 – 1985), И.Л.Кнунянц (1906 – 1990), Г.Р.Иваницкий (1936). Они вместе с исследовательской группой создали один из первых искусственных кровезаменителей на основе перфторуглеродов. В состав перфторана входит: перфтордекалин (ПФД), перфторметилциклогексилпиперидин (ПМЦП), эмульгатор проксанол – 268. В 1985 году перфторан спас около 200 солдат в Афганской войне. Но после неоднократных применений этого препарата на Ф.Ф.Белоярцева начались гонения. “Белоярцев экспериментирует на людях, как на кроликах!” — гневно пишут газеты. Разработки были задержаны на 6 лет и только в 1991 году их возобновили. В 2002 группе разработчиков вручили премию “Призвание”, в том числе и Ф.Ф. Белоярцеву (посмертно).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Софронов Г. “Применение перфторорганических соединений в экспериментальной и клинической медицине” [Текст]: сборник методических рекомендаций. - Санкт – Петербург, ВМедА, 2002. – 98с.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ АНТИОКСИДАНТНОЙ АКТИВНОСТИ ЧАЯ
И ЕГО ЗАМЕНИТЕЛЕЙ

Руководитель Т.И. Смирнова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Недостаток веществ, обладающих антиоксидантной активностью, в организмах человека и животных способствует развитию целого ряда патологических состояний (повышение проницаемости стенок кровеносных сосудов, злокачественные новообразования, нарушение функций мозга, заболевания сердца и т.д.). К числу активных антиоксидантов относится витамин Р, точнее, витамины группы Р – свыше десятка флавоноидов – соединений растительного происхождения, основой молекул которых служит флавоновый скелет.

Натуральные флавоноиды наряду с появившимися в последние годы синтетическими используются в производстве различных продуктов питания для предупреждения образования продуктов окисления, а также снижения потерь полезных компонентов (аминокислот, витаминов и др.). В фармации и пищевой промышленности в качестве Р-активных соединений применяют: цитрин или гесперидин, выделяемый из кожуры цитрусовых; рутин, выделяемый из листьев гречихи; кверцитин, выделяемый из листьев чая. Кроме кверцитина в составе листьев и побегов чайного куста (камелии китайской, *Cameliasinensis*) содержатся кверцитрин, изокверцитрин, рутин и другие флавоноиды.

Чай как напиток является существенным источником Р-активных веществ в рационе людей большинства стран мира. Кроме собственно чая становятся всё более распространёнными его местные заменители: латиноамериканский – мате (листья и побеги кустарника падуба парагвайского, *Plexparaguariensis*) и африканский – ройбуш (листья и побеги кустарника ройбуш, *Aspalanthuslinearis*).

Целью нашего исследования было сравнение антиоксидантной ценности различных сортов чёрного и зелёного чая, а также его аналогов: мате и ройбуша. В двукратной повторности определяли содержание Р-активных веществ в образцах чёрного и зелёного чая 18 различных торговых марок, а также мате и ройбуша – по 2 образца. Если принимать среднее содержание флавоноидов в проанализированных образцах чёрного чая за 100%, то в зелёном чае этих веществ 107%, в мате – 74%, а в ройбуше – лишь 31%. Следует отметить, что химический состав мате и ройбуша недостаточно исследован. Возможно, по содержанию каких-либо иных биологически активных веществ они превосходят камелию китайскую, но по уровню содержания Р-активных веществ и антиоксидантной активности лидирует традиционный зелёный чай.

КИСЛОТНО-ОСНОВНЫЕ РАВНОВЕСИЯ И ПРОЦЕССЫ
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ БЕТАКСОЛОЛА И КАРВЕДИЛОЛА
С ИОНАМИ КАЛЬЦИЯ И МАГНИЯ

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Блокаторы бета - адренергических рецепторов, широко известные как бета-блокаторы, являются важной группой лекарств от гипертонии, которые воздействуют на симпатическую нервную систему. Открытие бета-блокаторов значительно повысило эффективность лечения сердечно - сосудистых заболеваний. Одними из наиболее распространенных бета – адреноблокаторов являются карведилол и бетаксоллол.

Карведилол оказывает неселективное бета-адреноблокирующее, альфа 1-блокирующее и антиоксидантное действие.

Бетаксоллол - кардиоселективный бета-1 адреноблокатор без внутренней симпатомиметической активности.

На первом этапе были исследованы химические равновесия в составляющей подсистеме Кар- NaCl - H₂O и Вет - NaCl - H₂O.

Цель исследования заключается в изучении кислотно-основных свойств карведилола и бетаксоллола, а также ионно-молекулярных равновесий с участием ионов биометаллов. Из биометаллов были выбраны кальций и магний, так как кальций совместно с магнием участвует во многих процессах, происходящих в организме, например, в регулировании тонуса кровеносных сосудов и сокращении мышц, включая сердечную мышцу.

В работе исследованы карведилол и бетаксоллол, выделенные из лекарственной формы, чистота которых была подтверждена методами элементного анализа и термогравиметрическим анализом. По данным рН-метрического титрования в среде физиологического раствора (ионная сила 0,15 NaCl и t°=37 С°) и с использованием методов математического моделирования (DALSFЕК) изучены кислотно – основные свойства карведилола и бетаксоллола.

М.А. Чаткина, Е.С. Большаков, А.И. Пичугина

ОЦЕНКА КАТАЛИТИЧЕСКОГО ВЛИЯНИЯ ИОНОВ Cu^{2+} И Fe^{3+}
НА РАСТВОРЕНИЕ МИЛЛЕРИТА В АЗОТНОЙ КИСЛОТЕ

Руководитель В.И. Луцик

Тверской государственной технической университет

Кафедра химии

Миллерит ($\alpha\text{-NiS}$) является важнейшим минеральным сырьём для получения никеля. Разработка гидрометаллургических технологий извлечения никеля возможна на основе исследований по кинетике растворения сульфидов никеля в кислых средах. Поскольку в составе природного минерала содержатся примеси железа и меди, необходимо оценить их влияние на удельную скорость растворения NiS (W , моль/дм²·с).

Определение W проведено методом вращающегося диска* на синтетических образцах миллерита. В качестве растворителя выбрана азотная кислота концентрацией 1 моль·дм⁻³. Заданную концентрацию катионов меди и железа в исходном растворе кислоты обеспечивали добавлением расчётного количества соответствующих сульфатов.

Каталитическое влияние ионов меди и железа на удельную скорость окислительного растворения миллерита отражает рисунок.

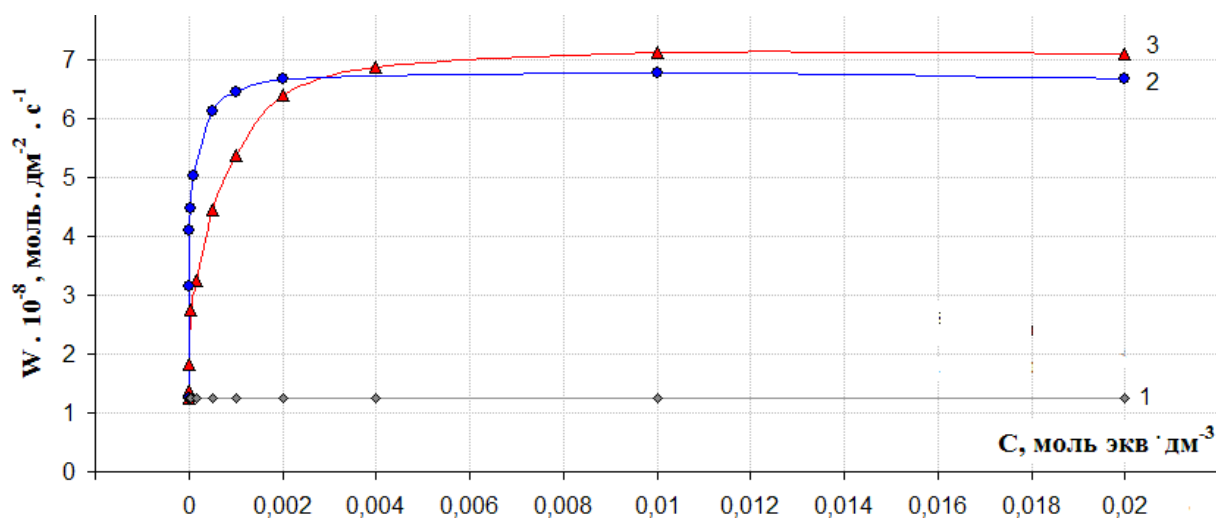


Рис. Зависимость удельной скорости растворения миллерита в одномолярном растворе азотной кислоты (1) от концентрации Cu^{2+} (2) и Fe^{3+} (3) при 298 К.

Удельная скорость растворения миллерита в азотной кислоте в присутствии катионов Fe^{3+} и Cu^{2+} при их концентрациях $> 2 \cdot 10^{-3}$ моль·экв·дм⁻³ увеличивается в 5–6 раз.

* Луцик В.И. Кинетика гидролитического и окислительного растворения сульфидов металлов / В.И. Луцик, А.Е. Соболев. Тверь.: ТГТУ, 2009. 140 с.

О.И. Шаляпина

СОВМЕСТНЫЙ КАТАЛИТИЧЕСКИЙ ПИРОЛИЗ ТОРФА И ОТХОДОВ ДРЕВЕСИНЫ

Руководитель В.Г. Матвеева

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Одной из нерешенных экологических проблем в настоящее время является утилизация все возрастающих объемов углеводородсодержащих отходов нефтепереработки и древесины [1]. Перспективным способом использования отходов является каталитический пиролиз. С помощью пиролиза можно перерабатывать возобновляемое сырье: торф и отходы древесины. После пиролиза не остается биологически активных веществ, поэтому подземное складирование пиролизных отходов не наносит вреда природной среде. Для оценки процесса пиролиза служит количество полученного синтез-газа (CH_4 , C_3H_6 , CO_2 , CO , H_2). В свою очередь качество синтез-газа оценивается по его теплотворной характеристике, наличию смолы и твердого углеродсодержащего остатка [2–4].

В настоящей работе было проведено исследование каталитического процесса термодеструкции торфа с добавлением природных и искусственных алюмосиликатов. В качестве сырья был использован сфагново-пушицевый торф, широко распространенный в Тверской области, со степенью разложения 30%, влажностью 20%, зольностью 5% и дисперсностью 400 m^2/kg . В качестве катализаторов исследовались следующие алюмосиликаты. Определено влияние температуры, влажности, природы и содержания алюмосиликатов на состав газовой смеси и ее теплотворную способность. Исследован качественный состав получаемой горючей газовой смеси.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Солодкова Н.Л., Абдуллин А.И. «Пиролиз углеродного сырья», К. 2008, 240с.
2. Sierra Vargas F. Zur katalytischen Vergasung von Biomasse / F. Sierra Vargas. – Kassel, 2006. – 140 с.
3. Чалов К.В., Луговой, Ю.В., Косивцов, Ю.Ю., Сульман, Э.М. //Химическая промышленность сегодня. – 2013. – №. 9. – С. 8.
4. K.V. Chalov, Yu.V. Lugovoy, V.Yu. Doluda, A.I. Sidorov, M.G. Sulman, Yu.Yu. Kosivtsov, O.P. Tkachenko, E.M. //Chemical Engineering Journal, 2014. - №. 238. – p. 219-226.

Д.С. Шеховцова

ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА САМООРГАНИЗАЦИИ В ВОДНЫХ СИСТЕМАХ N-АЦЕТИЛ-ЦИСТЕИНА И НИТРАТА СЕРЕБРА

Руководители: П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк
Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

В настоящее время проявляется повышенный интерес к исследованию гидрогелей, которые находят все более широкое применение в различных областях – медицине, косметологии, пищевой промышленности. Особое значение имеют гели на основе низкомолекулярных соединений (например, аминокислот), которые могут рассматриваться как супрамолекулярные системы, образованные за счет слабых не ковалентных взаимодействий разного рода. Один из таких гелей может быть получен в результате взаимодействия низкоконцентрированных водных растворов N-ацетилцистеина (НАЦ) и нитрата серебра. Оба эти компонента – биологически активные вещества, которые уже используются в фармакологии, поэтому создание геле-систем на их основе открывает новые перспективы в применении. Целью данной работы является – изучение процесса гелеобразования в системе на основе НАЦ и нитрата серебра с помощью методов УФ спектроскопии и динамического светорассеяния (ДСР).

В работе были исследованы системы на основе НАЦ–AgNO₃, полученные при смешивании водных растворов исходных компонентов (концентрация 0,005 М) в разных соотношениях: 0,5:0,5; 0,6:0,6; 0,7:0,3; 0,6:0,4; 0,4:0,6; (мл). Установлено, что гель образуется в узком диапазоне концентраций и соотношения компонентов, является достаточно устойчивым во времени, однако не обладает тиксотропными свойствами, т.е. не восстанавливается после разрушения при механической нагрузке.

Результаты спектроскопических исследований в УФ диапазоне, выполненных на спектрометре «Evolution Array» фирмы «Thermo Scientific», показали, что процессы структурирования в системах с разным соотношением компонентов имеют существенные различия и протекают с различной скоростью. Согласно данным ДСР, полученным на приборе «Zetasizer Nano Series» фирмы «Malvern», распределение агрегатов по размерам в образцах, их изменение во времени также зависит от соотношения компонентов и их концентрации. На основе полученных данных предложен механизм гелеобразования.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности.

ИЗМЕНЕНИЕ АГРОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЧВЫ И ПРОДУКТИВНОСТИ КУЛЬТУР ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ АГРОГУМАТА КАЛИЯ

Руководитель: О.В. Смирнова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Несмотря на большое разнообразие почвенных условий, удобрения выполняют важную роль в Нечерноземной зоне: улучшают физические, химические и биологические свойства. Среди разнообразных органических удобрений одним из наиболее перспективных видов, содержащих водорастворимые соли гуминовых веществ, являются гуматы.

В проводимом полевом опыте изучалось удобрительное действие агрогумата калия, полученного путем глубокой физико-химической переработки торфа, произведенного в ЗАО «Селигер-Холдинг».

Для этого на экспериментальном участке кафедры агрохимии, почвоведения и агроэкологии Тверской ГСХА были проведены комплексные исследования на дерново-подзолистой легкосуглинистой почве. Почва характеризовалась следующими агрохимическими показателями: содержание гумуса – 2,2%, $pH_{\text{ккл}}$ – 6,0; P_2O_5 – 230 мг/кг, K_2O – 110 мг/кг почвы.

Схема опыта включала следующие варианты: контроль (без агрогумата калия), агрогумат в чистом виде в дозах 300 и 500 кг/га, минеральные удобрения (N_{60} , P_{60} и K_{60}), а также совместное применение агрогумата калия и N_{60} , P_{60} , K_{60} .

В ходе проведенных исследований выявлено, что внесение агрогумата калия в почву способствовало увеличению количества подвижных форм элементов питания. В частности, наибольшее количество нитратного азота, подвижного фосфора и обменного калия установлено на фоне совместного внесения минеральных удобрений и агрогумата калия в разных дозах (в среднем на 20-30% больше по отношению к контролю).

Величина $pH_{\text{ккл}}$ практически не изменялась на протяжении вегетационного периода, однако отмечалось незначительное снижение (на 0,1-0,2) на фоне минеральных удобрений и на контрольном варианте.

Использование удобрений обеспечило прибавку корнеплодов столовой свеклы. Наибольшая прибавка корнеплодов по отношению к контролю (1,4 кг/м²) получена при внесении агрогумата калия (500 кг/га) и $N_{60}P_{60}K_{60}$, а наименьшая – при использовании агрогумата в дозе 300 кг/га (0,9 кг/м²).

В корнеплодах, выращенных на фоне агрогумата калия и минеральных удобрений, увеличилось содержание аскорбиновой кислоты по сравнению с контрольным вариантом (в среднем на 4,3 – 7,1%).

ТЕХНОЛОГИЯ ВОЗДЕЛЫВАНИЯ ЯЧМЕНЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ ВЕРМИ-УДОБРЕНИЯ И БИОКОМПОСТА

Руководители: З.И. Усанова, А.А. Акимов

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра общего земледелия и растениеводства

В условиях современного земледелия получение экологически чистой продукции требует поиска путей замены минеральных туков на новые виды органических удобрений, которые не содержали бы патогенной микрофлоры, семян сорных растений и других вредных веществ. К таким удобрениям относятся компосты, созданные на основе вермикультуры, а также путем ускоренной аэробной биоферментации. Однако в настоящее время большинство полей севооборотов имеет сильную степень засоренности, в пахотном слое почвы количество семян сорных растений насчитывается от 100 млн. до 3...4 млрд. шт./га (Баздырев, 2004). В таких условиях невозможно реализовать потенциальные возможности культуры и удобрений. На рынке современных средств защиты растений предлагают гербициды, которые экологически безопасны в связи с их малой токсичностью, периодом распада и прочими характеристиками. Поэтому нами поставлена цель – выявить лучшие варианты технологии возделывания ячменя с применением экологически безопасных органических удобрений и смеси гербицидов с наименьшим классом опасности для животных и окружающей среды.

Для достижения этой цели был заложен и проведен двухфакторный полевой опыт по следующей схеме: Фактор А (гербициды в посевах ячменя): 1 – без гербицидов; 2 – гранстар (10 г/га) + эстет (400 мл/га) + пума супер 75 (800 мл/га); Фактор В (удобрения на основе куриного помета): 1 – контроль (без удобрений); 2 – пометно-опилочный компост (ПОК), 10 т/га; 3 – биокомпост на основе куриного помета (БК), 10 т/га; 4 – верми-удобрение «Биостронг» (ВУ), 10 т/га.

В результате исследований выявлено: применение биокомпоста и верми-удобрения без использования гербицидов не способствовало росту урожайности ячменя. Наоборот, в вариантах технологии с использованием баковой смеси гербицидов получены высокие прибавки урожая: от биокомпоста – 3,1 ц/га (15,7%), от верми-удобрения – 6,9 ц/га (35,0%). Баковая смесь гербицидов оказала большое фитотоксическое действие, как на однодольные, так и двудольные сорняки. Более сильное влияние отмечено на фоне применения пометно-опилочного компоста и верми-удобрения, что обеспечило биологическую эффективность 93,9 и 96,0% соответственно. Увеличение урожайности получено за счет большей величины продуктивного стеблестоя и продуктивности самого колоса.

Таким образом, в условиях повышенной засоренности полей наиболее эффективно применение верми-удобрения и пометно-опилочного компоста при одновременном использовании смеси малотоксичных гербицидов (гранстар+эстет+пума супер 75), что позволяет не только увеличить урожайность ячменя на 15,7–35,0%, но и снизить его засоренность на 93,9–96,0%.

МЕХАНИЗМ ГИДРОДЕОКСИГЕНИРОВАНИЯ СТЕАРИНОВОЙ КИСЛОТЫ НА ПАЛЛАДИЕВЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ

Руководители: В.Г. Матвеева, А.А. Степачёва
Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

Каталитическое деоксигенирование жирных кислот и их производных является одним из возможных методов получения топлив из биомассы. Процесс основан на проведение следующих типов реакций:

- (i) декарбонилирование – удаление карбоксильной группы жирных кислот в форме CO_2 с получением предельных алканов
- (ii) декарбоксилирование – удаление карбоксильной группы жирных кислот в форме CO с получением олефинов
- (iii) гидрирование карбоксильной группы до алканов
- (iv) гидродеоксигенирование - удаление карбоксильной группы жирных кислот в форме CO с последующим гидрированием до алканов.

В данной работе проводилось исследование процесса гидродеоксигенирования модельного сырья – стеариновой кислоты – с использованием катализаторов на основе свёрхсшитого полистирола. Эксперименты по гидродеоксигенированию жирных кислот проводили в стальном реакторе периодического действия PARR – 4307 (PARR Instrument, США) при следующих условиях: скорость перемешивания – 700 об/мин, размер гранул катализатора – 70 μm , температура процесса – 255 $^\circ\text{C}$, давление водорода – 0.6 МПа, концентрация раствора стеариновой кислоты в додекане – 0.1 моль/л. В качестве растворителя использовали додекан. Палладий-содержащие катализаторы на основе свёрхсшитого полистирола предварительно восстанавливали в токе водорода при 300 $^\circ\text{C}$.

Проведенные исследования позволяют предположить, что процесс гидродеоксигенирования стеариновой кислоты на палладиевых катализаторах на основе свёрхсшитого полистирола протекает по каталитическому механизму Ленгмюра-Хиншельвуда, причем давление водорода в ходе реакции остается постоянным и входит в выражение константы скорости реакции. Математическое описание скорости процесса выражается следующей формулой (1).

$$-\frac{dC_{\text{СВБ}}}{d\tau} = \frac{K' C_{\text{СВБ}}}{K_{\text{СВБ}} C_{\text{СВБ}} + K_{\text{ПР}} C_{\text{ПР}}} \quad (1)$$

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда
Фундаментальных Исследований (грант 12-08-00024-а).*

ВЫБОР ЭФФЕКТИВНЫХ МЕТОДИК ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ВОДЫ В НЕФТЯХ РАЗЛИЧНЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ

Руководитель И.В. Исакова

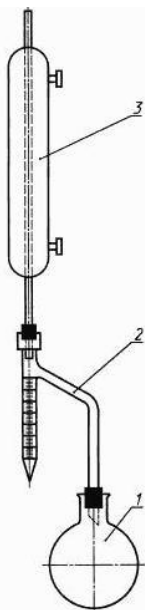
«Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачёва»

Кафедра химии и технологии неорганических веществ и наноматериалов

Знание содержания воды важно для точного определения нетто объемов нефти при продаже, налогообложении, товарообмене, и приемо-сдаточных операциях. Также, вода в нефтехранилищах может стимулировать активность микроорганизмов, поэтому в бескислородной среде могут образовываться коррозионно-активные кислоты и сероводород (известны случаи анаэробного разложения нефти).

В зависимости от количественного содержания воды в перерабатываемой нефти выбирается наиболее выгодный и результативный способ очистки от нее. Все это позволяет снизить экономические затраты, связанные с износом и коррозией оборудования и получить более качественные продукты переработки нефти.

Целью данной работы является сравнение методик определения воды в нефти.



В результате проведенной работы выяснили, что азеотропная перегонка является наиболее точным методом. На рисунке показан прибор для определения воды методом азеотропной перегонки, которая заключается в нагревании исследуемой нефти с нерастворимым в воде растворителем и непрерывном разделении сконденсировавшихся воды и растворителя. Способ позволяет определить объемную долю воды в интервале 0–25%.

Таким образом, контроль данного показателя позволяет сохранить в силе проектные экономические оценки и оперативные стратегии.

Рис.:

1- сосуд дистилляционный;

2-приемник-ловушка;

3- холодильник водный.

СОДЕРЖАНИЕ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ В ПОЧВАХ ООО «НОВАЯ ЗАРЯ»
СТАРИЦКОГО РАЙОНА

Руководитель И.Н. Барановский
Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

За последние годы, как во всем мире, так и в Тверской области, особое внимание уделяется получению экологически чистой сельскохозяйственной продукции. Поскольку на данные показатели оказывает особое влияние содержание тяжелых металлов в почве, которые могут негативно влиять на качество урожая, то важно проводить мониторинг почв на содержание в них тяжелых металлов (ТМ). Исследования по их выявлению в почвах ООО «Новая заря» Старицкого района проведены нами в 2013 году. Для этого на проблемных участках отбирались с пахотного слоя образцы почвы, в которых и определяли содержание ТМ – цинк, железо, медь.

Первый образец был взят в 500 м на север от бывшего склада пестицидов. Второй – недалеко от функционирующего асфальтного завода, третий – между складом пестицидов и асфальтным заводом, четвертый – в 1500 м от бывшего склада пестицидов в южном направлении.

Полученные данные проведенных анализов по трем элементам свидетельствуют, что их содержание заметно отличается в зависимости от места отбора почвенных образцов. Наибольшее количество цинка выявлено в почвенном образце №4 (17,3 мг/кг почвы), превысив его содержание в образце №1 на 7 мг/кг почвы. В этом же образце отмечено и максимальное количество меди (1,15 мг/кг почвы), тогда как в других образцах либо вообще не выявлено, или элемент находился в гораздо меньшем объеме (табл.1). По железу максимальное количество установлено в почвенном образце №3, отобранном между бывшим складом пестицидов и существующим асфальтовым заводом.

Таким образом, находящиеся в пределах хозяйства проблемные объекты оказывают определенное влияние на содержание в эксплуатируемых почвах ТМ. Одновременно следует отметить, что их абсолютная выраженность намного ниже, по сравнению с ПДК. Исходя из этого можно сделать вывод, что на землепользовании ООО «Новая Заря» в настоящее время можно безбоязненно для накопления в растениеводческой продукции ТМ выращивать все полевые культуры, возделываемые в пределах Тверской области.

Таблица. Содержание ТМ в пахотных почвах ООО «Новая Заря», с слое 0–20 см

Номера почвенных образцов	Массовая доля мг/кг		
	цинк	железо	медь
1	10,28	206,72	0,39
2	11,28	206,72	0,00
3	14,26	410,61	0,00
4	17,33	292,05	1,15
ПДК в почве	55,0	-	33,0

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Абдуллина А.Р.	3
Адамян А.А.	4
Айдинян Н.В., Гаваян М.Ю., Рыбина С.С., Хохлов Д.В., Соколова Е.И., Морозова К.А., Арямин Е.Е., Воронцов М.С.	5
Амантаева Г.Ю., Мифтахова Г.В.	6
Андреева А.М.	7
Андрианова Е.В.	8
Андрианова Я.В.	9
Андросова А.С.	10
Акопян В.А.	11
Асгаров А.А.	12
Бабуркин П.О.	13
Бадешкин Д.Д.	14
Базанова Э.А.	15
Бакланова К.Д.	16
Балибихина О.В.	17
Баранова Е.Д.	18
Баранова Е.Д.	19
Барсукова М.С., Сергеева А.В.	20
Беляева А.А.	21
Беляева Е.В.	22
Василенко П.С.	23
Бобков Э.О.	24
Варпетян Э.Э.	25
Васильев С.А.	26
Васильев С.А., Рыбаков Д.И.	27
Васильев С.А., Чернышова А.А.	28
Веселова К.А.	29
Виноградов А.А., Яковлев А.А.	30
Виноградов В.В.	31
Виноградов О.В.	32
Волкова А.М.	33
Гаевская В.В.	34
Грачев А.Н., Зигерт А.Д.	35
Гребешков В.В.	36
Гребешков В.В.	37
Гросс Е.Р.	38
Гумашян Г.А., Василенко П.С., Корогод К.М.	39
Гусаров А.А.	40
Гусева Д.А.	41
Демидова М.С.	42
Демичев Г.А.	43
Денисов Ф.О.	44
Долотин Д., Касаткина А., Исханов М.	45
Дьякова Е.В.	46
Епифанова Н.А., Кротова Н.И., Пресняков И.А.	47
Епифанова Н.А., Кротова Н.И., Пресняков И.А.	48
Жарников А.А.	49
Жерихова А.М.	50

Жестокова О.И.	51
Жигалова Ю.Э.	52
Журавлев Е.В., Тормозова И.А.	53
Зайковская А.О.	54
Землянушина О.А., Хоменко Г.М.	55
Золотухина С.Ю.	56
Иванов А.С.	57
Иванова В.В., Антонов И.В.	58
Иванова В.Н.	59
Иванов С.Б.	60
Ильина Н.В.	61
Исоян А.Л.	62
Коренева А.В., Голосова А.Н.	63
Корогод К.М.	64
Костина А.В.	65
Котомкин А.В.	66
Красильникова Ю.А., Старовойтов А.В.	67
Красноперов	68
Крутских В.В.	69
Крылов А.А.	70
Крылов П.Н.	71
Куликов Г.С.	72
Куракин Г.Ф.	73
Кутузов Д.С., Морозова К.А., Шмелева А.В., Рыбина С.С.,	74
Калугин И.В., Самохвалов Н.Е.	
Кутузова О.А., Маякова М.Н., Соколова Е.М.	75
Кушнеров А.И., Ярышкина М.И.	76
Лагусева В.С., Романова О.А.	77
Логинова Е.С.	78
Лой Н.С.	79
Лосев Д.А.	80
Львова Н.Е.	81
Любимова Н.А.	82
Маркин Г.И.	83
Маркова Е.В.	84
Маркова Е.В.	85
Мартюгин К.В.	86
Матюшенко М.С.	87
Маякова М.Н.	88
Мизинкина Ю.А.	89
Минажетдинов Р.Р., Бродин Д.	90
Минина М.В.	91
Мифтахова Г.В., Амантаева Г.Ю.	92
Михайлов М.А., Шемякин А.А.	93
Огурцова А.В.	94
Осипенко А.А.	95
Осипова А.Ю.	96
Павлов М.Н.	97
Павлов М.Н.	98
Пенькова Т.А.	99

Петрова А.В.	100
Петрова А.И., Ракитин М.Ю.	101
Первозова Т.В., Адамян А.Н.	102
Погудкина А.А.	103
Подолян Е.А.	104
Пресняков И.А.	105
Рязанкина Е.А.	106
Садовская Е.Г.	107
Сазонова А.М.	108
Сальникова К.Е., Бурматова О.С.	109
Селина Т.Ю.	110
Ситникова В.Е.	111
Скобин М.И., Крюков Т.В.	112
Смелкова В.В., Рубин М.А.	113
Смирнов И.С.	114
Соколова Е.М.	115
Соколов А.В.	116
Соколов М.Н.	117
Соловьева Н.А., Торопова Д.М.	118
Стригина В.А., Скворцов А.С.	119
Сулейманова Ш.Ф.Г.	120
Сулова К.В.	121
Таскаева В.А.	122
Томилина А.А., Горюнова И.В.	123
Торозова А.С.	124
Травникова К.Д.	125
Федосюк Д.П., Крамер А.А.	126
Фотаки Л.И.	127
Хабиев Р.Р.	128
Христоева Н.П., Кучко А.А.	129
Цветкова И.С., Новикова В.В.	130
Чаткина М.А., Большаков Е.С., Пичугина А.И.	131
Шаляпина О.И.	132
Шеховцова Д.С.	133
Шмакотин И.А., Ляшко О.Ю.	134
Шоля П.С.	135
Юдова К.В.	136
Юрьева Е.Г.	137
Якубовская А.А.	138
Авторский указатель	139

XXII КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ

С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ

Всероссийская научно-техническая конференция
молодых учёных
«Физика, химия и новые технологии»

26 марта 2015 года

г. Тверь

Тезисы докладов

Отпечатано с оригиналов авторов

Технический редактор А.В. Жильцов

Подписано в печать 11.03.2015. Формат 60x84 ¹/₁₆.

Усл. печ. л. 9.00. Тираж 200. Заказ № 89.

Редакционно-издательское управление

Тверского государственного университета

Адрес: 170100, г. Тверь, Студенческий пер. 12, корпус Б.

Тел. РИУ (4822) 35-60-63.