

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

XVIII
НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
АСПИРАНТОВ И СТУДЕНТОВ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО
ФАКУЛЬТЕТА

23 мая 2019 года

Тверь

Тезисы докладов

ТВЕРЬ 2019

Ответственный за выпуск
доцент, к.х.н. И.Ю. Егорова

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

Содержание

Секция неорганической и аналитической химии

Антонова И.П. Определение содержания аскорбиновой кислоты в продуктах растительного происхождения методом потенциометрического титрования.....	5
Гурцева И.С. Антикоррозионная активность полианилина.....	6
Заполина И.А. Количественное определение содержания аскорбиновой кислоты в витаминно-минеральных комплексах.....	7
Лобзова В.А. Гравиметрическое определение сухого остатка в молоке.....	8
Маслобойщиков С.С. Применение полианилина в электрических аккумуляторах.....	9
Петрова В.Ю. Физико-химические методы определения магнитных сплавов.....	10
Сащенко О.А. Определение остаточных количеств антибиотиков из группы тетрациклина в мёде.....	11
Скобин М.И., Крюков Т.В. Комплексообразование в системе $\text{PrCl}_3 - \text{Na}_4\text{Hep} - \text{H}_2\text{O}$	12
Цветкова Е.Е., Шломак И.В. Определение органических кислот для установления натуральности соков методом тонкослойной хроматографии.....	13

Секция органической химии

Анисимов С.С. Влияние поверхностно-активных веществ на экстракцию биологически активных веществ из цветков календулы лекарственной.....	14
Байголова М.А. Изучение электропроводности неводных растворов ионных жидкостей на основе четвертичных солей аммония.....	15
Бодякова А.В. Синтез металлокомплексов двухвалентных металлов.....	16
Васильева В.В. Взаимодействие ароматических нитрозосоединений с СН-кислотами.....	17
Горбач К.Д. Влияние природы комплексного аниона на свойства солей бензойной кислоты.....	18
Давинян С.С. Синтез и свойства ионных жидкостей на основе триэтиламина с комплексными неорганическими анионами.....	19
Дзюба Е.И. Получение смешанных ПАВ и исследование их свойств.....	20
Елистратова М.К. Получение азотсодержащего лиганда на основе 2-оксипропановой кислоты.....	22
Ефимова П.И. Синтез и свойства солей пиперидиния с металланными анионами.....	23
Капустина С.С. Экологически-безопасные незамерзающие стеклоомывающие жидкости.....	25

Касекиви Е.С. Исследование эмульгирующей способности неионогенных ПАВ.....	26
Кафтанов А.Д. Получение азогидразонов на основе производных гидразина.....	28
Кравцова Е.Н. Синтез и спектральные характеристики ионных жидкостей с металлсодержащими анионами.....	29
Лозовская П.И. Предочистка воды реки Волги в осветлителях ТЭЦ-4.....	30
Медведева О.А. Получение 2-гидроксисодержащего формазана.....	31
Мухина М.А. Синтез мономерных и димерных солей N-алкилпиколинов...	32
Полунина О.А. Синтез и свойства сульфосукцинатов алканоламидов жирных кислот.....	33
Портнова Д.А. Влияние концентраций синтанола на температуру инверсии фаз эмульсий оливкового масла в водных растворах.....	35
Ульянова М.А. Синтез катионных ПАВ на основе 2-(диметиламино)этанола.....	36
Хадыкина Е.С. Проблема «поврежденного» крахмала.....	37
Цыплакова А.В. Синтез и свойства тартратов с органическими катионами	38
Чиликина И.В. Процесс поликонденсации молочной кислоты с азеотропной отгонкой воды.....	39
Шишкова К.В. Синтез азотсодержащего лиганда на основе ванилина.....	40
Юшкевич В.А. Что такое сайдинг?.....	41

Секция физической химии

Алхасова Э.Д. кызы Корреляции «структура-свойство» алкилзамещённых бензола.....	42
Брянцев Д.В. Корреляции «структура – свойство» алифатических альдегидов. Топологический подход.....	43
Дулимова В.В. Распределение групповых зарядов в дисульфидах.....	44
Жарова Н.А. Разработка спектроскопического метода изучения морфологии эмульсий.....	45
Крылова М.Е. Распределение электронной плотности в кетонах.....	46
Панкратов М.А. Корреляции «структура – свойство» X-замещённых этана....	47
Романюк Е.И. Корреляции структура – свойство простых эфиров.....	48
Соколов Н.А. Энергетические характеристики нитрилов.....	49
Соловьева А.Е., Чирик К.А., Шишова Р.В. Гидрогели на основе L-цистеина, нитрата серебра и водорастворимых полимеров.....	50
Тагиева А. Рагим-кызы Энергия Гиббса алифатических эфиров. Топологический подход.....	51
Шухина К.А. Процессы самосборки в низкоконцентрированных водных системах глицин – AgNO ₃ – ПВС.....	52

Секция неорганической и аналитической химии

Определение содержания аскорбиновой кислоты в продуктах растительного происхождения методом потенциометрического титрования

Антонова И.П. (студент, 5 курс)

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

Аскорбиновая кислота, должна непрерывно поступать в организм человека, т.к. не синтезируется им, но участвует во многих важнейших жизненно важных процессах [1]. Физиологическая потребность для взрослых — 90 мг/сутки, для детей – от 30 до 90 мг/сутки (беременным и кормящим женщинам необходимо употреблять на 10-30 мг больше, курящим – на 35 мг/сутки) [1]. Методом потенциометрического титрования определено количество аскорбиновой кислоты в яблоках разных сортов и шиповнике. Результаты анализа приведены в таблице.

Таблица

Данные потенциометрического титрования
количественного определения аскорбиновой кислоты

Исследуемый продукт	Объем иссл. р-ра, мл	C CuSO ₄ , моль/л	Объем CuSO ₄ , пошедший на титрование, мл	C _{аск.к-ты} , моль/л	m _{аск.к-ты} , мг
Яблоко сорта Грени Смит	20	0,1	1,3	0,0065	22,88
Яблоко сорта Голден Делишес	20		1,0	0,005	17,60
Плоды шиповника	20		32,9	0,1645	579,04

Из результатов анализа следует, что с целью профилактики гиповитаминоза следует употреблять настой из плодов шиповника, который содержит максимальное количество витамина С.

1. Машковский, М.Д. Лекарственные средства: в 2 т./М.Д. Машковский. - 18-е изд., перераб. и доп.- М.: Новая волна, 2010. - 1234 с.

Антикоррозионная активность полианилина

Гурцева И.С. (магистрант 2-го года обучения)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Рясенский С.С.

В последнее время продолжается изучение физико-химических свойств электропроводного полимера – полианилина. Этот полимер получается из дешёвого и доступного сырья, обладает интересными свойствами. В литературе сказано, что ПАНИ, обладает антикоррозионной активностью. Поэтому целью работы было изучение антикоррозионной активности плёнки ПАНИ, нанесённой на поверхности Zn, Cu и Sn. Синтез ПАНИ осуществляли по классической схеме путём химической поликонденсации ПАНИ под действием окислителя. Реакция проводилась в водной среде, содержащей гидрохлорид анилина, HCl(1M), в присутствии персульфата калия. При этом ПАНИ получали в виде порошка тёмно-зелёного цвета, в форме соли эмеральдина. Отделяли центрифугированием. Отмывали от ионов хлора и высушивали. ПАНИ не растворяется в обычных растворителях и не плавится, однако в литературе описано растворение ПАНИ в форме основания эмеральдина в N-пирролидоне [1]. Для получения плёнки ПАНИ на поверхностях подложек, раствор ПАНИ в N-пирролидоне наносили и высушивали при температуре 80°. Таким образом, вся поверхность подложек была равномерно покрыта слоем ПАНИ. Для антикоррозионных испытаний, покрытые и не покрытые пластины (для контрольного образца) опускали в растворы NaCl, CH₃COOH, Na₂CO₃. За коррозией следили гравиметрическим методом, определяли его количество, перешедшего в растворы. Было установлено, что ПАНИ существенно замедляет коррозию. Механизм этого явления предстоит ещё изучить, однако мы предполагаем, что это связано с пассивацией поверхности подложек.

1. Каталитическое действие полианилина в процессе ингибирования коррозии стали / Н.А. Огурцов, Г.С. Шаповал // Катализ и нефтехимия. 2001. – С.5-12.

Количественное определение содержания аскорбиновой кислоты в витаминно-минеральных комплексах

Заполина И.А. (магистрант 2-го года обучения)

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

Аскорбиновая кислота (АК) относится к числу наиболее важных витаминов, поддерживающих нормальное функционирование человеческого организма и участвующих во многих метаболических процессах, поэтому определение содержания аскорбиновой кислоты в различных поливитаминах является важной аналитической задачей.

Для количественного определения содержания АК поливитаминах был выбран метод окислительно-восстановительного титрования [1]. Титрование проводили двумя способами (йодатным и йодометрическим). В качестве титранта брали два вещества: KIO_3 и I_2 в KI .

Таблица

Результаты количественного определения
аскорбиновой кислоты в различных соках

Исследуемый образец	Количество аскорбиновой кислоты, мг/100 мг		Количество аскорбиновой кислоты (из аннотации к препарату мг/1 табл)
	Йодатный метод	Йодометрический метод	
«Компливит» (АО «Отисифарм» г. Москва)	$49,67 \pm 0,50$	$49,31 \pm 0,49$	50,00
«Витрум Вижн Плюс»	$59,94 \pm 0,60$	$59,88 \pm 0,60$	60,00

Из полученных результатов видно, что данные поливитамины содержат суточную норму витамина С и могут быть использованы для профилактики различных заболеваний.

1. Государственная фармакопея XIII. – Т. 1. – М.: Медицина, 2015. – 811 с.

Гравиметрическое определение сухого остатка в молоке

Лобзова В.А. (магистрант 1-го года обучения)

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

С целью определения качества молока с помощью гравиметрического анализа были выбраны следующие образцы молока под марками: «Домик в деревне», «Агуша», «Тема» и «Простоквашино».

Для проведения данного анализа, первоначально провели взвешивание пустых бюксов, с целью уточнения их массы. Затем бюксы заполняли 3 мл исследуемого молока, так же с последующим взвешиванием. Бюксы помещали в сушильный шкаф и выдерживали при температуре порядка 102°C в течении 1,5-2 часов. По истечению необходимого времени, бюксы с сухим остатком остужали в эксикаторе и проводили взвешивание. Данные анализа представлены в таблице:

Таблица

Данные анализа гравиметрического определения качества молока

Марка молока	Масса, г					ω, %	Теоретические значения
	бюкса	бюкса с молоком	бюкса с сухим остатком	молока	сухого остатка		
«Тёма»	24,63	27,74	25,03	3,11	0,40	12,94	10-13%
«Агуша»	23,21	26,31	23,60	3,10	0,39	12,54	
«Простоквашино»	25,70	28,84	26,07	3,14	0,37	11,93	
«Домик в деревне»	23,22	26,32	23,58	3,10	0,36	11,59	

Результаты проведенных исследований согласуются с ГОСТом и с информацией, представленной на упаковке.

1. Крусъ Г.Н. Методы исследования молока и молочных продуктов / Г.Н. Крусъ, А.М. Шалыгина, З.В. Волокитина. – М.: КОЛОС, 2000. – 368 с.

Применение полианилина в электрических аккумуляторах

Маслобойщиков С.С. (магистр, 2-го года обучения)
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Рясенский С.С.

В настоящее время интенсивно развиваются технологии создания электрического аккумулятора повышенной емкости. Основной упор при этом делается на поиск новых перспективных материалов для катодов и анодов этих электрических источников тока. В качестве электродных материалов, для этих целей, изучаются различные электропроводные полимеры, поэтому целью настоящей работы является изучение возможности использовать полианилин в качестве материала для создания аккумулятора.

Известно, что полианилин под действием электрического тока может обратимо окисляться и восстанавливаться, таким образом, появляется возможность использования его в качестве электродного материала аккумулятора. Электрохимический синтез осуществляли в потенциостатическом режиме, при потенциале 800 мВ, относительно хлорсеребряного электрода в среде анилина 0,25 М, в качестве подложки использовали платину. Предварительные эксперименты показали, что электролитом для такой конструкции может служить децимолярный раствор соляной кислоты. Изучение свойств данного прототипа аккумулятора показало, что зарядка его может осуществляться очень быстро (не более 10 с.), при этом раствор электролита играет лишь вспомогательную функцию, а основные электрохимические процессы происходят в слое полианилина. Аккумулятор не боится «переплюсовки», т. к. и положительный, и отрицательный электроды имеют абсолютно одинаковую конструкцию. Максимальное ЭДС изготовленного аккумулятора составило 0,6 В (эта величина ниже чем у используемых, в настоящее время, аккумуляторов, однако используя батарею таких аккумуляторов можно получить нужное значение ЭДС). При заряде и разряде КПД близок к 100%.

Доступность, дешевизна исходного вещества для синтеза полианилина, простота конструкции дают основание, на мой взгляд, считать полианилин перспективным материалом для создания электрического аккумулятора.

Физико-химические методы определения магнитных сплавов

Петрова В. Ю. (магистрант 2-го года обучения)

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

Настоящая работа посвящена физико-химическим методам определения магнитных сплавов [1]. Постоянные магниты из сплавов типа $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ обладают наилучшими магнитными свойствами.

В настоящей работе предпринята попытка применения метода производной спектрофотометрии в качестве основы для разработки методики определения $n \cdot 10^{(-2)}$ неодима в сплаве $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$.

Вскрытие проб магниевого сплава проводили следующим образом: образцы массой 1 г в виде стружки обрабатывали концентрированной азотной и соляной кислотами, вводили 10 % - ный раствор аскорбиновой кислоты для восстановления Fe^{+3} до Fe^{+2} и разбавляли водой [2]. Фиксировали производную спектра поглощения ионов Nd в диапазоне длины волны 15400 - 11000 cm^{-1} . На спектрофотометре через 15 минут измеряли оптическую плотность с толщиной поглощающего слоя 5 см.

Правильность результатов анализа контролировали сравнением с результатами, полученными фотометрическим методом с использованием реагента арсеназо. Методами производной спектрофотометрии определено 0,013 % неодима, фотометрическим методом – 0,012 %.

1. Алесковский В.Б., Бардин В.В., Булатов М.И. Физико-химические методы анализа. Практическое руководство / Под ред. Алесковского В.Б. Л.: Химия, 1988. 58 с.
2. Пешкова В.М. Практическое руководство по спектрофотометрии и колориметрии / В.М. Пешкова, М.И. Громова. – 2-е изд., перераб. и доп. – М: Изд-во Моск. ун-та, 1965. 15 с.

Определение остаточных количеств антибиотиков

из группы тетрациклина в мёде

Сащенко О.А. (студентка, 5 курс)

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

Пчелы подвержены различным инфекционным заболеваниям. Для их лечения наиболее часто используют лекарства, содержащие тетрациклин и доксициклин. Такие препараты часто используют и для стимуляции численности пчел. Остаточные следы данных препаратов нередко попадают в продукты пчеловодства. Наличие антибиотиков в мёде наносят вред здоровью человека, так как при регулярном его употреблении происходит накопление антибиотика в организме человека.

В представленной работе для определения антибиотиков в мёде использовался метод тонкослойной хроматографии. Для анализа был взят фермерский цветочный мёд. Взяв пластину, на линию старта микрошприцом наносятся пробы по 5 мкл раствора каждого антибиотика (тетрациклина и доксициклина), также наносят пробу раствора меда. После сушки пластины ее помещали в хроматографическую камеру с элюентом. Когда фронт элюента поднялся на 7 см, пластину сушили на воздухе 10 минут и в сушильном шкафу 5 минут при 100°C. Затем пластину поместили в эксикатор с парами кристаллического йода для усиления цвета пятен.

После выполнения анализа проведена обработка результатов, вследствие которой можно было сказать, что в двух образцах мёда остаточных следов антибиотиков не имеется. В образце №3 была обнаружена хроматографическая зона, которая указывает на наличие в мёде следов тетрациклина, но интенсивность окраски данной зоны оказалась настолько незначительной, что провести количественный анализ не удалось. Однако можно сказать, что содержание этого антибиотика не превышает значение в $1 \cdot 10^{-3}$ ммоль/л.

Комплексообразование в системе $\text{PrCl}_3 - \text{Na}_4\text{Hep} - \text{H}_2\text{O}$

Скобин М.И., Крюков Т.В. (аспиранты 3-го года обучения)

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

Настоящее исследование относится к циклу работ, направленных на изучение сложных ионо-молекулярных равновесий с участием ионов редкоземельных элементов и полимерного биолиганда гепарина.

Комплексообразование ионов Pr(III) с высокомолекулярным гепарином исследовалось с помощью традиционных методов – рН-метрического титрования (фоновый электролит 0.1 М NaCl ; температура 37°C) и метода математического моделирования химических равновесий (комплекс вычислительных программ New DALSFEEK (КСМ Soft, 2000)).

Спектр возможных молекулярных форм исследуемой системы $\text{Pr}^{3+} - \text{Hep}^{4-} - \text{H}_2\text{O}$ задан расширенной компонентной матрицей стехиометрических коэффициентов этих форм в термодинамическом базисе: H^+ , Pr^{3+} , Hep^{4-} (Таблица).

Таблица

Компонентная матрица системы: $\text{Pr}^{3+} - \text{Hep}^{4-} - \text{H}_2\text{O}$

Комплексная форма	$\lg(\beta_i)$	H^+	Pr^{3+}	Hep^{4-}
H^+	0	1	0	0
Pr^{3+}	0	0	1	0
Hep^{4-}	0	0	0	1
OH^-	-13.5	-1	0	0
$[\text{NHep}]^{3-}$	3.84 ± 0.04	1	0	1
$[\text{PrHep}]^-$	4.32 ± 0.03	0	1	1

В результате исследование системы было выяснено, что в интервале рН от 2.5 до 7 преобладает $[\text{PrHep}]^-$, наличие кислой и основной комплексной формы было отвергнуто алгоритмом программ New DALSFEEK. Сходимость результатов моделирования и эксперимента оценивалась величиной суммы квадратов отклонений, которая для системы $\text{PrCl}_3 - \text{Na}_4\text{Hep} - \text{H}_2\text{O}$ составила 0.09, что может говорить о достаточной достоверности результатов.

Определение органических кислот для установления натуральности соков методом тонкослойной хроматографии

Цветкова Е.Е., Шломак И.В. (магистранты 2-го года обучения)

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

В настоящее время на продуктовый рынок поступает разнообразная винопродукция всех новых неизвестных марок в эффектно оформленных бутылках, зачастую являющаяся суррогатом или выжимочным вином. Внушительные экономические показатели сокового производства и еще более внушительные показатели винодельческой промышленности обуславливают появление большого количества контрафактной (фальсифицированной) продукции.

Целью данной работы является выявление кислот в соках для определения их натуральности. Благодаря простоте и доступности метод тонкослойной хроматографии остается одним из самых популярных экспресс-методов анализа в органической химии. Преимущества метода перед другими – это большая скорость анализа, более высокое качество разделения, и возможность выбора одной из неподвижных фаз, обладающей наиболее подходящими свойствами, поэтому остановились именно на этом методе.

Для анализа были выбраны янтарная, гликолевая, щавелевая, винная, лимонная, адипиновая, яблочная кислоты. Известно, что янтарная, щавелевая, винная и гликолевая кислоты содержатся в зеленом винограде, яблочная кислота – в яблочном соке, адипиновая – в свекольном соке. Использовали свежавыжатые соки. Для выявления лимонной кислоты использовали яблочный сок «Angry birds». Были подобраны оптимальные условия для проведения эксперимента: $C = 7,5$ мг/мл, система растворителей – этанол, концентрированный аммиак, вода в соотношении, соответственно, 2,5:7,5:2,5, проявитель, состоящий из анилина и L – арабинозы.

Секция органической химии

Влияние поверхностно-активных веществ на экстракцию биологически активных веществ из цветков календулы лекарственной

Анисимов С.С. (студент, 4 курс)

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

Лечебные свойства календулы обусловлены наличием целого ряда биологически активных веществ (БАВ): флавоноидов, каротиноидов, тритерпеновых сапонинов, дубильных веществ, наличие которых подтверждено качественными реакциями (проба Шинода, реакция Лафона, реакции с хлоридами алюминия, железа, ацетатом свинца и др). Учитывая важность календулы для медицины, представляется целесообразным изучение способов повышения степени извлечения БАВ из исходного сырья. Одним из способов повышения степени извлечения БАВ при экстракции является применение поверхностно-активных веществ (ПАВ). ПАВ снижают поверхностное натяжение между жидкостью и газом, находящимся в порах растительных клеток, в результате чего улучшаются процессы смачивания и проникновение экстрагента в сырьё.

Экстракцию цветков календулы лекарственной проводили 70% спиртом в присутствии неионогенных ПАВ: ОС-20 и проксанола-268 (контроль без применения ПАВ). Степень извлечения БАВ определяли по содержанию в полученных экстрактах флавоноидов, количество которых вычисляли по следующей формуле:

$$X = \frac{D \cdot m_0 \cdot 25 \cdot 1 \cdot 25 \cdot 100}{D_0 \cdot m \cdot 50 \cdot 1 \cdot 25},$$

где D – оптическая плотность испытуемого раствора, D_0 – оптическая плотность раствора ГСО рутина, m_0 – масса ГСО рутина в граммах, m – навеска сырья в граммах.

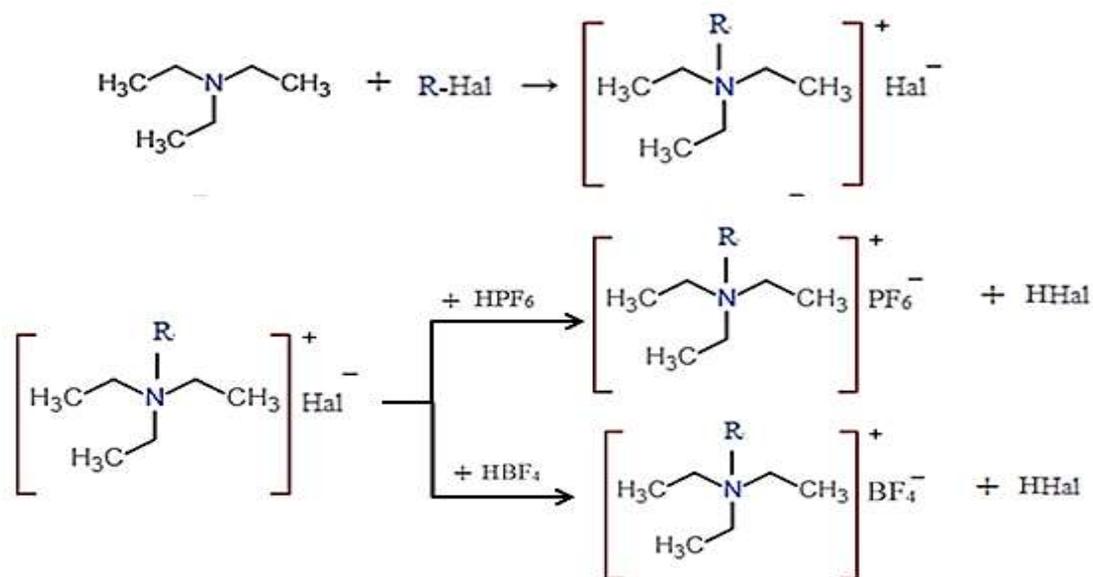
Измерение оптической плотности проводили на спектрофотометре при длине волны 412 нм. Показано, что применение ПАВ увеличивает содержание флавоноидов в экстракте цветков календулы лекарственной.

Изучение электропроводности неводных растворов ионных жидкостей на основе четвертичных солей аммония

Байголова М.А. (студентка, 5 курс)

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

Термин «ионные жидкости» означает класс солей с температурами плавления ниже 100°C . Природа аниона в ионной жидкости (ИЖ) в большей мере влияет на свойства этих соединений, такие как: вязкость, температура плавления, термическая и электрохимическая стабильность, полярность и др. Для применения ИЖ в качестве электролитов, необходимы знания о влиянии структуры ионных жидкостей на их электропроводность как в чистом виде, так и в растворах. Поэтому, целью данной работы было установление влияния структуры катиона и природы аниона на электропроводность разбавленных растворов ИЖ на основе четвертичных солей аммония в ацетонитриле. Синтез ионных жидкостей осуществлялся в две стадии (схема).



R: CH_3 , C_4H_9 , C_6H_{13} , $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2$; Hal: Br, I.

Электропроводность была исследована кондуктометрическим методом, путем приготовления серии растворов различной концентрации каждой ионной жидкости в ацетонитриле.

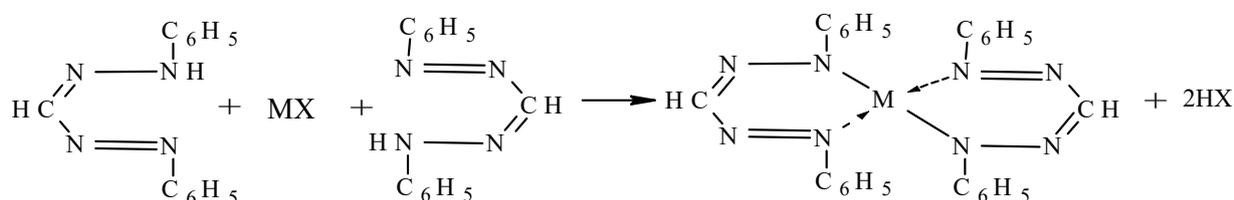
Синтез металлокомплексов двухвалентных металлов

Бодякова А.В. (магистрант 2-го года обучения)

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

Формазаминами называют соединения, содержащие азогидрозонную систему связей. Металлокомплексы на их основе имеют высокую водо- и светостойкость, что позволяет применять их как компоненты оптических регистрирующих сред, и как фото- и термочувствительные элементы. Представленная работа посвящена получению металлокомплексов на основе органического лиганда – 1,5-дифенилформаза и солей двухвалентных металлов.

Синтез металлокомплексов проводили в две стадии. На первом этапе взаимодействием пропандиовой кислоты с хлоридом фенилдиазония получен 1,5-дифенилформаза. На завершающем этапе взаимодействием спиртового раствора 1,5-дифенилформаза с водными растворами сульфата меди (II), нитрата никеля (II) и хлорида кобальта (II), синтезированы металлокомплексы – бис-1,5-дифенилформазаينات.



где: M=Cu, Ni, Co; X = SO₄, NO₃, Cl.

В ИК-спектре полученных металлокомплексов отсутствуют характерные для исходного соединения валентные колебания карбонильной группы в области 1690-1700 см⁻¹, при этом сохраняется полоса колебаний NH-связи в районе 3308-3117 см⁻¹ и появление новых полос поглощения в области 1630-1583 см⁻¹ и 1400 см⁻¹, что подтверждает образование связей C=N, N=N и соответствует литературным данным. Для металлокомплекса Ni зарегистрированы максимумы поглощения при 540-550 нм и 1040-1200 нм, для комплекса с Co наблюдается только один максимум поглощения в области 748 нм.

Взаимодействие ароматических нитрозосоединений с СН-кислотами

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

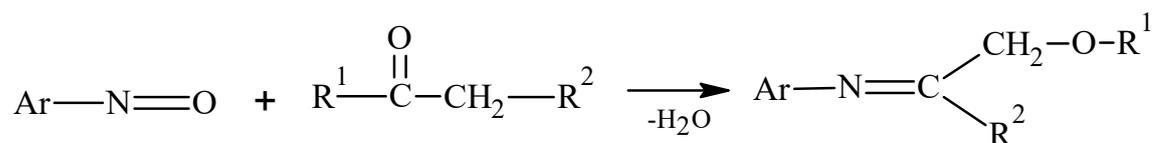
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Темникова С.А.

Возможность перехода от нитрозосоединений к другим классам веществ значительно расширяет область их использования. Разнообразие химических свойств ароматических нитрозосоединений обусловило их широкое применение в производстве полупродуктов органического синтеза, красителей и лекарственных веществ.

Одним из свойств ароматических нитрозосоединений является способность конденсироваться с соединениями, содержащими активную метиленовую группу в присутствии оснований. В результате образуется новая связь C=N.

В данной работе проведены реакции конденсации *n*-нитрозо-*N,N*-диметиланилина и 1-нитрозо-2-нафтола с СН-кислотами: ацетилацетоном, ацетоуксусным эфиром и ацетофеноном, исследованы свойства продуктов конденсации.

Реакция конденсации протекает по схеме:



R¹: -CH₃,

R²: -COCH₃, -COOC₂H₅, Ar.

Структура полученных соединений подтверждена данными ИК-спектроскопии: в спектрах наблюдается полоса поглощения валентных колебаний связи C=N при 1640 см⁻¹.

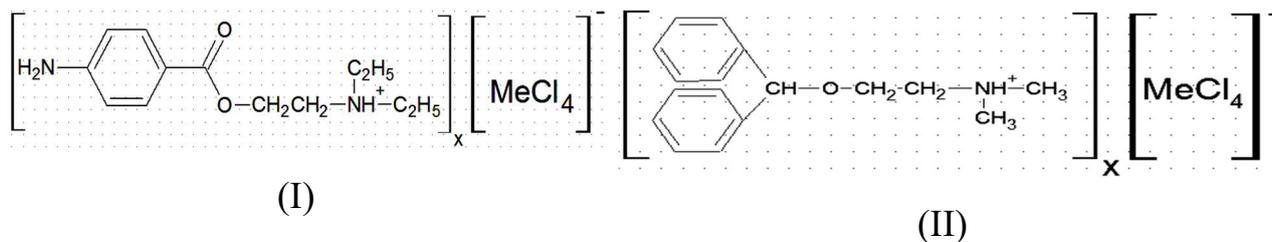
Влияние природы комплексного аниона на свойства солей бензойной кислоты

Горбач К.Д. (студентка, 5 курс)

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

Ионные жидкости (ИЖ) – это соли, содержащие в своем составе объемный органический катион и неорганический анион. Эти соединения характеризуются высокой термической стабильностью, низким давлением паров, негорючестью и др. Они используются в качестве экстрагентов растворителей, катализаторов и т.д. На свойства ИЖ существенное влияние оказывает природа катиона.

В настоящей работе представлены результаты по синтезу ИЖ, содержащие протонированные аммониевые катионы, различающиеся природой радикала и металлокомплексные анионы – тетрахлоросмат, FeCl_4^- и тетрахлорпалладат, PdCl_4^{2-} . Соединения I, II получены метатезисом хлоргидратов новокаина и димедрола с галоидными солями металлов и представляют собой окрашенные твердые вещества растворимые в полярных растворителях.



где $x = 2$; $\text{Me} = \text{Pd}$. $x = 1$; $\text{Me} = \text{Fe}$.

Полученные ИЖ различаются природой радикала в структуре катиона, что существенно сказывается на реакции образования комплекса. УФ – спектры в видимой и ультрафиолетовой областях указывают на наличие в составе комплексной соли анионов FeCl_4^- и PdCl_4^{2-} . При образовании комплексов наблюдали гипсохромное смещение λ_{max} основных хромофоров.

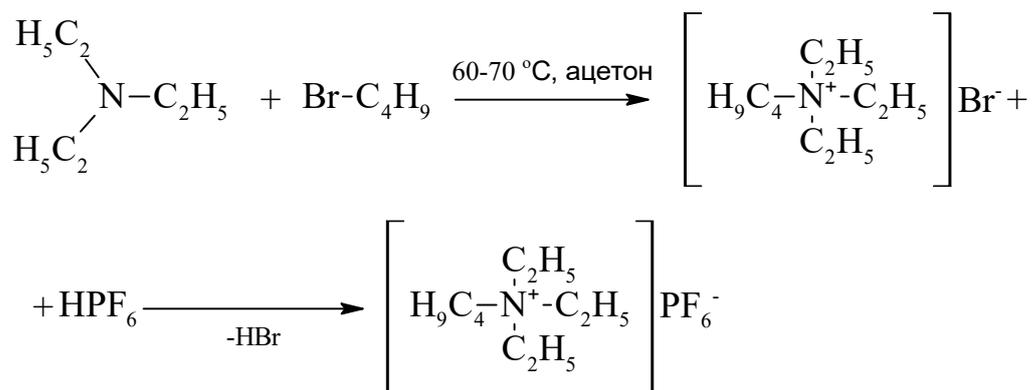
Синтез и свойства ионных жидкостей на основе триэтиламина с комплексными неорганическими анионами

Давинян С.С. (студент, 4 курс)

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

Ионные жидкости – это класс низкотемпературных расплавов солей, для которых характерны низкие температуры плавления (как правило $<100^\circ\text{C}$). В настоящее время ионные жидкости находят широкое применение в качестве экстрагентов, растворителей, в синтезе электропроводящих полимеров и др.

В настоящей работе в качестве объектов исследования были выбраны ионные жидкости с катионом триэтилбутиламмония и различными неорганическими анионами (BF_4^- , PF_6^- , $\text{N}(\text{CN})_2^-$). Проведен синтез гексафторфосфата, тетрафторбората и дицианамида триэтилбутиламмония. На рисунке представлена схема синтеза гексафторфосфата триэтилбутиламмония из триэтиламина.



Бромид триэтилбутиламмония синтезирован из триэтиламина и 1-бромбутана по реакции нуклеофильного замещения в ацетоне при нагревании. Ионные жидкости получали по реакции метатезиса из четвертичной соли и соответствующих неорганических реагентов в водном растворе при постоянном перемешивании. Полученные соединения представляют собой твердые вещества белого или желтого цвета. Определены основные физические константы для всех синтезированных соединений. Структура полученных ионных жидкостей подтверждена данным ИК-спектроскопии. Чистота соединений подтверждена ТСХ.

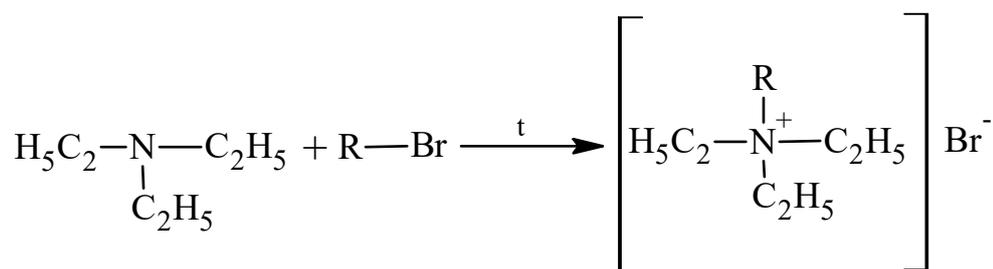
Получение смешанных ПАВ и исследование их свойств

Дзюба Е.И. (магистрант 2-го года обучения)

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

Поверхностно-активные вещества (ПАВ) являются, как правило, обязательным компонентом большинства современных технологических процессов и препаратов, таких как моющие средства, пенообразователи, стабилизаторы, эмульгаторы, косметические препараты и т.д. Такое широкое применение ПАВ связано с его способностью адсорбироваться на границе раздела фаз. Применение смесей ПАВ позволяет более эффективно регулировать свойства мицеллярных систем по сравнению с индивидуальными компонентами [1].

В данной работе осуществлён синтез катионных ПАВ по реакции нуклеофильного замещения алкилбромидов с триэтиламином:



где $\text{R} = \text{C}_{12}\text{H}_{25}; \text{C}_{14}\text{H}_{29}; \text{C}_{16}\text{H}_{33}$

Полученные додецилтриэтиламмоний бромид, тетрадецилтриэтиламмоний бромид и цетилтриэтиламмоний бромид были очищены методом перекристаллизации из смеси спирта и этилацетата.

Также в работе использованы неионогенные ПАВ ОП-10 и ОП-7 (моноалкиловые эфиры полиэтиленгликоля общей формулы $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{C}_6\text{H}_4\text{O}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_m\text{H}$, где $n=8-10$; $m=10-12$ для ОП-10 и $m=6-7$ для ОП-7) промышленного образца без предварительной очистки.

Были исследованы коллоидно-химические свойства индивидуальных водных растворов ПАВ и смесей катионных и неионогенных ПАВ с различными

мольными долями компонентов: поверхностное натяжение, пенообразующая способность и устойчивость пены.

Наибольшее снижение поверхностного натяжения среди исследованных индивидуальных веществ и их смесей происходит в растворе ОП-7 (33,5 мН/м). Среди полученных катионных ПАВ цетилтриэтиламмоний бромид сильнее снижает поверхностное натяжение (37 мН/м). Тетрадецилтриэтиламмоний бромид и додецилтриэтиламмоний бромид обладают более слабыми поверхностно-активными свойствами (до 41 и 40 мН/м соответственно).

Смеси катионных ПАВ с ОП-7 снижают поверхностное натяжения воды сильнее (до 36 мН/м), чем смеси с ОП-10 (до 39 мН/м). Однако, они не превосходят значения индивидуальных растворов неионогенных ПАВ (до 33,5 мН/м для ОП-7). Среди смесей ПАВ с различными мольными долями компонентов сильнее снижает поверхностное натяжение смесь ОП-7 / цетилтриэтиламмоний бромид в соотношении 80/20 (до 36 мН/м).

Наибольшей пенообразующей способностью среди катионных ПАВ обладает тетрадецилтриэтиламмоний бромид (83%). Додецилтриэтиламмоний бромид и цетилтриэтиламмоний бромид показали себя более слабыми пенообразователями (70 и 8% соответственно). Устойчивость пены растворов катионных ПАВ различается в меньшей степени (0,63, 0,65 и 0,5).

Среди НПАВ растворы ОП-10 обладают большей пенообразующей способностью (80%), чем растворы ОП-7 (64%). Пеноустойчивость растворов НПАВ имеет схожие значения (0,84 для ОП-10 и 0,84 для ОП-7).

Среди смесей ПАВ наибольшей пенообразующей способностью обладает смесь ОП-10 / додецилтриэтиламмоний бромид в соотношении 80/20 (136%). Устойчивость пены растворов смесей ПАВ в основном имеет схожие значения.

1. Шевердяев О.Н., Белов П.С., Шкитов А.М. Основы технологии поверхностно-активных веществ и синтетических моющих средств М. 2001. 201 с.

Получение азотсодержащего лиганда на основе 2-оксопропановой кислоты

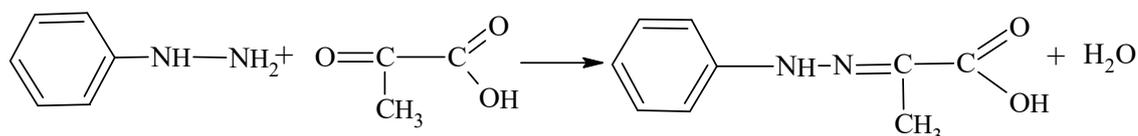
Елистратова М.К. (магистрант 2-го года обучения)

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

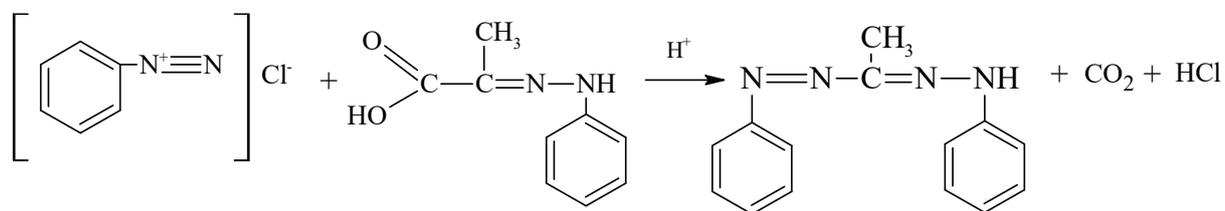
Лиганды на основе азогидразона муравьиной кислоты (формазана) широко используются как прекурсоры в органическом синтезе. Одно из важнейших свойств формазанов – способность образовывать мультидентантные комплексные соединения с ионами металлов. Широко применяются формазаны в качестве термо- и фотохромных веществ, красителей тканей. Представленная работа посвящена получению азотсодержащего лиганда на основе незамещенного фенолгидразина – 3-метил-1,5-дифенилформазана.

Окислением 2-гидроксипропаноата натрия получен 2-оксопропаноат (пируват) натрия, строение которого подтверждено качественной реакцией на карбонильную группу.

Конденсацией фенолгидразина с пируватом натрия синтезирован фенолгидразон пировиноградной кислоты.



Азосочетанием фенолдиазония хлорида с фенолгидразоном пировиноградной кислоты получен азогидразон – 3-метил-1,5-дифенилформазан.



Синтезированное соединение представляет собой мелкокристаллическое вещество темно-коричневого цвета. Исследованы физические свойства 3-метил-1,5-дифенилформазана: температура плавления и растворимость. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопического анализа.

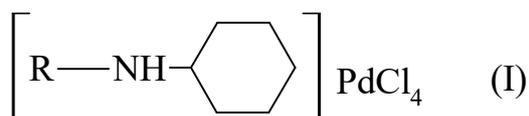
Синтез и свойства солей пиперидиния с металлатными анионами

Ефимова П.И. (студентка, 5 курс)

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

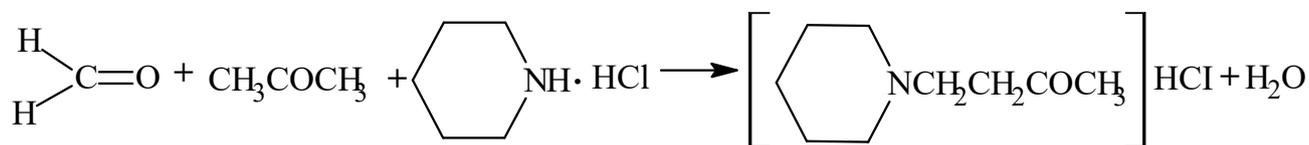
Классические ионные жидкости (ИЖ) – это расплавы органических солей, находящиеся в жидком состоянии при комнатной температуре. Природа аниона оказывает большое влияние на свойства ИЖ и в случае, если в качестве анионов выступают галогениды переходных металлов, то эти ИЖ при комнатной температуре являются, как правило, твердыми веществами и имеют большой мезофазный ряд и действуют как функциональные материалы, проявляющие одновременно каталитические, магнитные, электрические и другие свойства. Использование этих соединений открывает новые возможности в таких областях как катализ и наука о материалах. В том случае, если катион является четвертичным, то такие ИЖ нейтральные, но, если катион является протонированным, ИЖ проявляют слабые кислотные свойства и могут выступать одновременно как реакционная среда, и как катализатор в органических реакциях. Особенностью протонированных металлатных ионных жидкостей является устойчивость к влаге и вакууму.

В настоящей работе получены ИЖ с металлатными комплексными анионами OsCl_6^{-2} и PdCl_4^{-2} содержащие протонированные катионы N-алкилпиперидиния с карбонильной группой в радикале общей формулой:

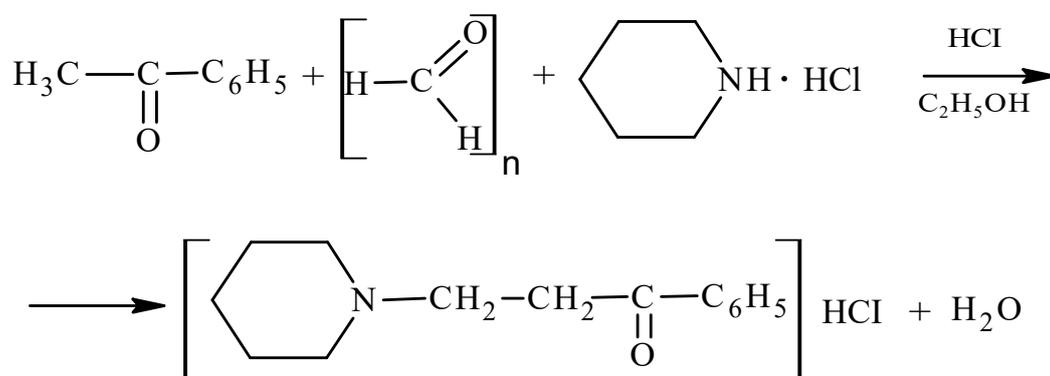


где $\text{R}=\text{H}$; $\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{CH}_2$; $\text{C}_6\text{H}_5\text{COCH}_2\text{CH}_2$.

Исходные протонированные соли 2-ацетил (этил) пиперидиний хлорид (1) и 2-бензоил (этил) пиперидиний хлорид (2) были получены по реакции Манниха взаимодействием формальдегида, хлоргидрата пиперидина и соответствующих кетонов: ацетона (1) и ацетофенона (2).



(1) 1-пиперидинобутанон-3 хлоргидрат



(2) 1-пиперидино-3-фенилпропанон-3 хлоргидрат

Металлатные комплексы с протонированным катионом были получены реакцией ионного обмена (метатезисом) и реакцией кватернизации N-алкилгалогенпроизводного с галогенидом металла.

Соединения представляют собой твердые окрашенные вещества, растворимые в воде и не растворимые в неполярных растворителях. Сопоставлены спектры комплексов в ИК-видимой и УФ-областях со спектрами исходных протонированных солей и галогенидов металлов. Установлено, что при комплексообразовании во всех случаях наблюдается гипсохромный сдвиг λ_{max} для основных хромофоров и металлатного аниона, причем в большей степени для гексахлоросмат-аниона. Согласно данным термогравиметрического анализа установлено, что введение органического радикала в структуру ИЖ приводит к снижению термической стабильности солей.

Экологически-безопасные незамерзающие стеклоомывающие жидкости

Капустина С.С. (студент 4-го года обучения)

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

С развитием современных технологий у владельцев автомобилей появляется все больше вариантов выбора незамерзающих жидкостей. Однако, проблемы качества, надежности и безопасности использования таких жидкостей все еще остаются нерешенными.

В настоящее время в качестве средств для очистки стекол используют стеклоомыватели на водно-спиртовой основе (этанол и изопропанол) с добавлением поверхностно-активных веществ, антикоррозионных добавок, солубилизаторов и комплексонов, способствующих растворению добавок в водно-спиртовой среде.

Прогрессивным направлением является создание современных не спиртовых экологически-безопасных незамерзающих жидкостей. В качестве незамерзающих компонентов использовались метиловый эфир пропиленгликоля, а также водный раствор диметилсульфоксида. Эфир пропиленгликоля имеет низкую температуру замерзания (около -95°C), вязкость при 20°C равна 1,85 сСТ (у изопропилового спирта 2,65 сСТ), по токсическим свойствам относится к 3 классу опасности, показатели предельно допустимой концентрации в воздухе 369 мг/м³ (изопропиловый спирт 10 мг/м³). Диметилсульфоксид при содержании от 35-50 мас.% достигает рабочий диапазон температур от -20°C до -50°C , нетоксичен и биоразлагаем.

В качестве поверхностно-активных веществ в работе использовались синергические смеси сульфонол – неонол АФ 9-12 подобранные в соответствии с параметром взаимодействия смешанных бинарных систем.

Для новых незамерзающих жидкостей определяли температуру замерзания, степень пожароопасности, показатели моющей способности, коррозионное воздействие на металлы, воздействие на резину по известным методикам, приведенным в ГОСТах.

1. Ланге К.Р., Зайченко Л.П. Поверхностно-активные вещества: синтез, свойства, анализ, применение. - Спб.: Профессия, 2005. - 137-141 с.
2. Вережников В.Н., Гермашева И.И., Крысин М.Ю. Коллоидная химия поверхностно-активных веществ. – М.: Лань, 2015. - 299 с.

Исследование эмульгирующей способности неионогенных ПАВ

Касекиви Е.С. (магистрант 2-го года обучения)

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

В последние годы возрос ассортимент перспективных продуктов имеющих форму паст, кремов, соусов в различных областях промышленности. Многие сложные процессы производств не обходятся без эмульгаторов. Например, нефтедобыча, бумажное, текстильное производство, пищевая промышленность, фармацевтика, косметология и многие другие.

Для стабилизации концентрированных эмульсий часто стали использовать композиции из эмульгаторов, которые состоят из неионогенных поверхностно-активных веществ и поверхностно-активных веществ других классов. Композиции на основе неионогенных поверхностно-активных веществ обладают рядом ценных свойств, одни из которых биологическая деградация и доступность для биоокисления.

Действие эмульгаторов обусловлено их способностью адсорбироваться на границе двух жидких несмешивающихся фаз и снижать межфазное натяжение; создавать вокруг капель защитный слой, который препятствует коагуляции и коалесценции [1].

Одним из факторов агрегативной устойчивости эмульсий является структурно-механический барьер – гелеобразно структурированные адсорбционные слои мылоподобных ПАВ на поверхности капель, сильно структурированные дисперсионной средой и обладающие повышенными структурно-механическими свойствами – вязкостью, упругостью, прочностью.

Возникновение структурно-механического барьера связано с самопроизвольным образованием ультрамикрoэмульсии (УМЭ) на границе раздела двух жидких фаз. Возникновение УМЭ можно легко наблюдать, если наслоить углеводород (масляная фаза) на водный раствор эмульгатора [2].

Синтанолаы — оксиэтилированные спирты, представляющие собой смесь полиэтиленгликолевых эфиров с различным количеством оксиэтильных групп и величиной радикала R (неионогенные поверхностно-активные вещества).

Предварительно исследовали коллоидно-химические свойства синтанолов ДС-4, ДС-10, ДС-20, ЭС-3. Для этих синтанолов измерены точки помутнения 1% растворов, оказалось, что для синтанола ЭС-3 она аномальная, т.е она отсутствует. Так же методом наибольшего давления пузырьков, на приборе Ребиндера было измерено поверхностное натяжение, рассчитана критическая концентрация мицеллообразования и другие характеристики. Оказалось, что синтанолы ЭС-3 и ДС-10 наиболее эффективно снижают поверхностное натяжение на границе водный раствор-воздух, чем остальные.

Синтанол ЭС-3 имеет самую короткую неразветвленную молекулу, содержит в своем составе только три оксиэтилированных звена. Молекулы этого соединения более плотно упакованы на границе раздела фаз, а новая поверхность обладает наиболее низким поверхностным натяжением.

Эмульсии встряхивали в течении 3-5 мин. и наблюдали за временем при котором наступало расслоение систем. Оказалось, что лучшим стабилизатором является синтанол ЭС-3.

1. Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных растворах / К. Холмберг, Б. Йенссон, Б. Линдман. М.: Мир; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. 528с.
2. Никитина С.А. Структурообразование в адсорбционных межфазовых слоях растворов поверхностноактивных веществ и устойчивость эмульсий и водных дисперсий полимеров (латексов)/ С. А. Никитина, А. Б. Таубман, Н. В. Кулигина, В. А. Спиридонова// Докл. АН СССР. – 1963. - №4, - с. 905– 908.

Получение азогидразонов на основе производных гидразина

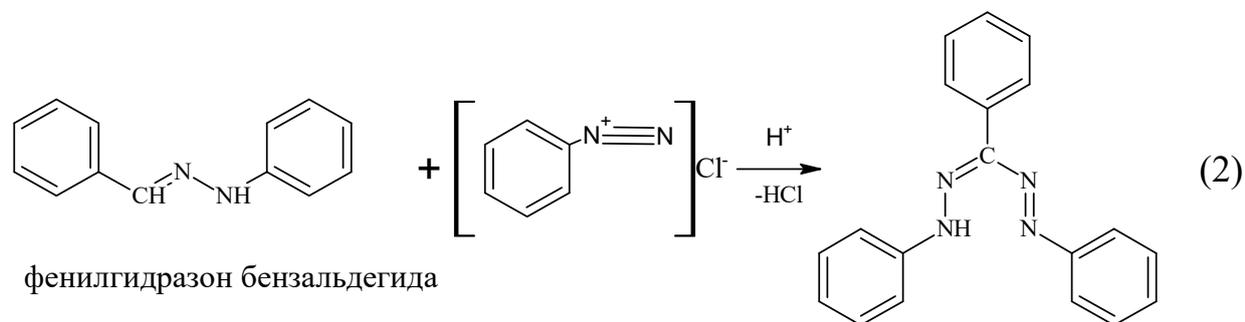
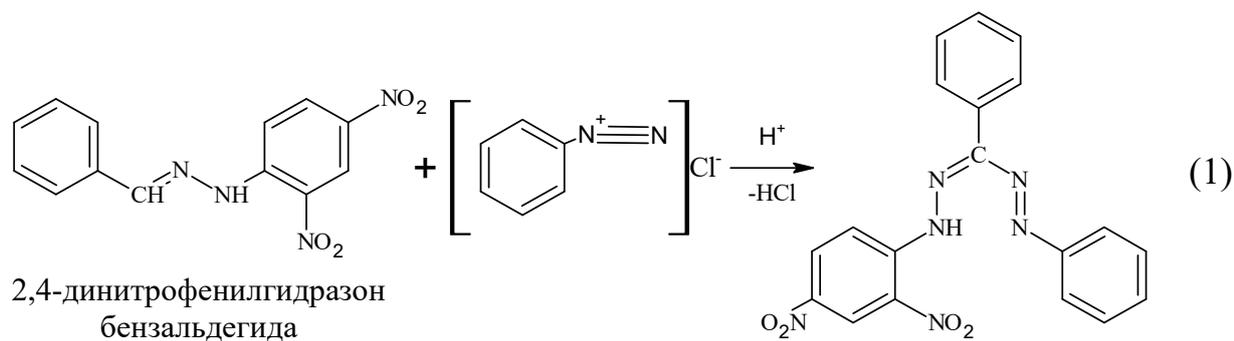
Кафтанов А.Д. (студент, 4 курс)

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

Производные гидразина - формазаны широко применяются как комплексообразователи, используют при изучении ферментативных процессов в клетках. Также комплексы азогидразонов с металлами применяются как свето- и термостойкие красители для полиэфирных и полиамидных волокон, а также шерсти. Данная работа посвящена получению азогидразонов из производных гидразина.

Конденсацией 2,4-динитрофенилгидразина и фенилгидразина с бензальдегидом получили 2,4-динитрофенилгидразон и фенилгидразон бензальдегида.

Реакцией азосочетания фенилдиазония хлорида с 2,4-динитрофенилгидразоном и фенилгидразоном бензальдегида получены 1,3-дифенил-5-(2,4-динитрофенил)-азогидразон (1) и получен 1,3,5-трифенилазогидразон (2).



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

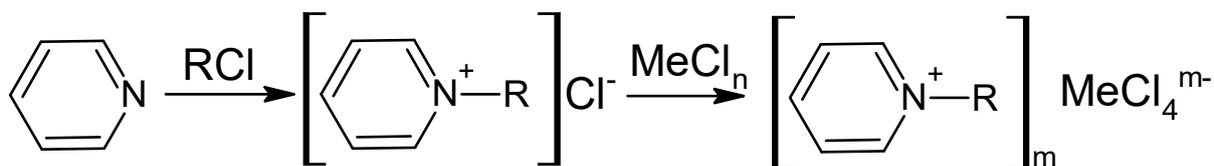
Синтез и спектральные характеристики ионных жидкостей с металлсодержащими анионами

Кравцова Е.Н. (студентка, 5 курс)

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

Ионные жидкости, содержащие в своем составе комплексные анионы переходных металлов, кроме всех прочих свойств присущих ионным жидкостям обладают также магнитными свойствами, что делает их перспективными для применения в качестве магнитно-отделяемых компонентов [1].

В настоящей работе синтезированы четвертичные соли пиридиния, с различной длиной алкильного заместителя и на их основе получены парамагнитные ионные жидкости с анионами $[\text{FeCl}_4]^-$, $[\text{MnCl}_4]^{2-}$, $[\text{CoCl}_4]^{2-}$, $[\text{NiCl}_4]^{2-}$. Полученные жидкости были охарактеризованы по данным спектроскопии в видимой области для подтверждения наличия комплексных неорганических анионов в их структуре. Для всех синтезированных ионных жидкостей определены молярные коэффициенты поглощения в растворе ацетонитрила. Данными ИК-спектроскопии была подтверждена структура органического катиона. На рисунке изображена схема получения четвертичных солей пиридиния и ионных жидкостей на их основе. Все полученные соединения являются твердыми легкоплавкими или жидкими при комнатной температуре окрашенными веществами. Для всех соединений определены основные физико-химические константы.



где R: CH_3 , C_4H_9 ; $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$.

Me: Fe, Co, Ni, Mn.

1. S. Hayashi and H. Hamaguchi // Chem. Letters. 2004. V. 33. P. 1590.

Предочистка воды реки Волги в осветлителях ТЭЦ-4

Лозовская П.И. (студентка, 5 курс)

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

Известкование воды с коагуляцией солями железа (FeSO_4) – наиболее распространенный способ осветления воды на ТЭЦ. Дозы извести и коагулянта зависят от окисляемости и жесткости исходной воды реки Волги. В качестве окислителя применялся титрованный раствор перманганата калия. Окисляемость выражается в мг О/л. В таблице №1 приведены данные по эффективности снижения окисляемости в осветлителях в зависимости от дозы коагулянта. В таблице №2 приведены данные по эффективности снижения окисляемости в зависимости от жесткости исходной и обработанной воды и дозы коагулянта.

Таблица 1.

Окисляемость сырой воды (р. Волга), мг О/л	Средняя величина, мг О/л	Доза коагулянта (FeSO_4), мг-экв/л	Снижение окисляемости, %	Эффективность использования коагулянта, %/мг-экв
меньше 5	3,5	0,27	40,8	151
5-10	8,2	0,21	44,1	210
10-15	12,8	0,34	52,8	155
больше 15	17,8	0,49	55,4	113

Таблица 2.

Границы жесткости воды (р. Волга), мг-экв/л	Средняя величина, мг-экв/л	Жесткость остаточная (после осветлителя), мг-экв/л	Окисляемость исходная, мг О/л	Доза коагулянта, мг-экв/л	Снижение окисляемости, %	Эффект сорбции, мг О/мг-экв
до 2	1,81	1,25	3,05	0,31	39,75	3,93
1,5-2,5	2,02	1,25	6,40	0,27	50,0	11,85
2-3	2,40	1,36	9,88	0,27	54,85	20,0
2,5-3,5	3,17	1,91	11,0	0,37	56,50	16,80
3-4	3,52	2,09	9,49	0,24	52,8	20,90

Из данных таблиц видно, что использование известкования с последующей коагуляцией в осветлителях ТЭЦ снижает окисляемость и жесткость исходной воды реки Волга, которая используется в пароводяном цикле станции.

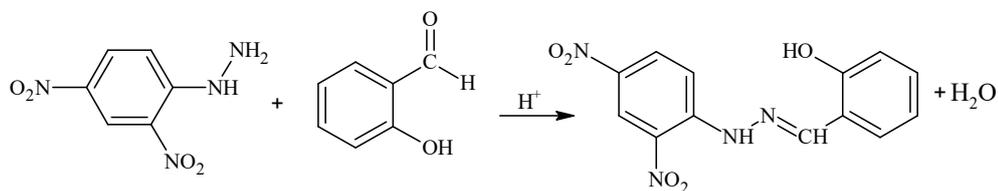
Получение 2-гидроксисодержащего формазана

Медведева О. А. (магистрант 1-го года обучения)

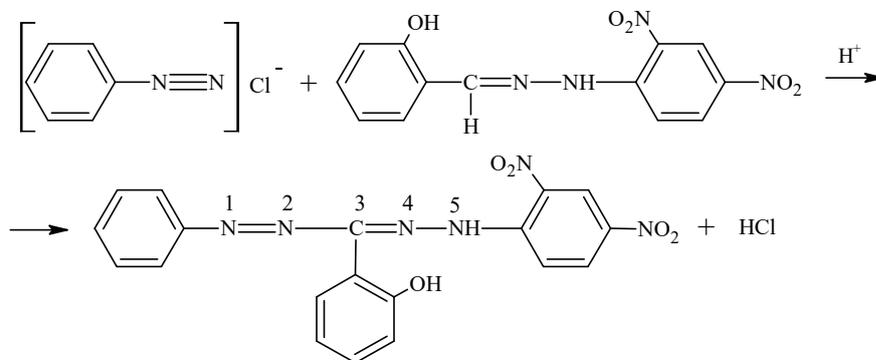
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Егорова И.Ю.

К производным гидразина относятся формазаны – азогидразоны муравьиной кислоты, которые являются хелатирующими анионными π -сопряженными N-донорскими лигандами. Одно из важнейших свойств формазанов – способность образовывать комплексные соединения с ионами металлов. Представленная работа посвящена получению N-донорского лиганда на основе 2-гидроксибензальдегида.

Взаимодействием 2,4-динитрофенилгидразина с 2-гидроксибензальдегидом синтезирован 2,4-динитрофенилгидразон альдегида. Реакцию проводили в спиртовой среде, с двукратным избытком фенилгидразина в присутствии соляной кислоты. Идентификацию фенилгидразона альдегида проводили с помощью определения температуры плавления.



Взаимодействием 2,4-динитрофенилгидразона 2-гидроксибензальдегида с фенилдиазоний хлоридом получен формазан – 1-фенил-3-(2-гидроксифенил)-5-(2,4-динитрофенил)формазан.



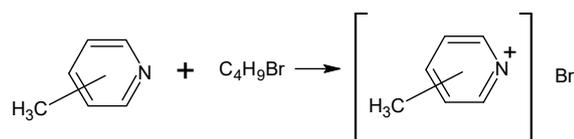
Синтезированное соединение представляет собой мелкокристаллический осадок темно-вишневого цвета. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопии и температурой плавления.

Синтез мономерных и димерных солей N-алкилпиколинов

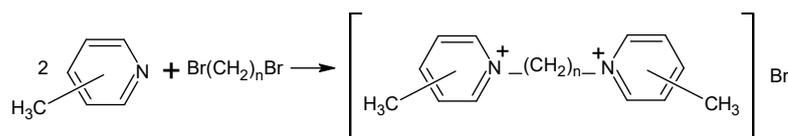
Мухина М.А. (магистрант 2-го года обучения)

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

Ионные жидкости – малоизученный класс соединений. Благодаря сильной поляризующей способности и сольватирующему эффекту, ионные жидкости успешно используются в органическом синтезе, катализе и других областях, включая биохимические процессы [1]. В настоящей работе представлены результаты по синтезу моно- и димерных солей метилпроизводных пиридина, а именно γ - и β -пиколинов. Проанализировано влияние структуры пиколинов на протекание реакции, выход продуктов и их свойства. Синтез монопроизводных осуществляли кватернизацией пиколинов галоидным алкилом – бутилбромидом при кипячении в ацетоне:



Скорость реакции и выход продуктов по сравнению с кватернизацией незамещённого пиридина находится в ряду γ -пиколин > β -пиколин > пиридин. Димерные соли пиколинов получены взаимодействием с дигалогеналканами в соотношении 2:1 в среде ацетона:



По скорости протекания реакции и выходу продукта соединения располагаются в ряд: пиридин > γ -пиколин > β -пиколин.

Все синтезированные соединения представляют собой кристаллические вещества: очищены сухим эфиром и перекристаллизованы из смеси ацетон : спирт (1:1). Строение подтверждено данными ИК-спектроскопии. Определены значения R_f для синтезированных соединений. Влияния длины спейсера в димерных солях не сказывается существенно на физико-химических константах соединений.

1. Кустов Л.М. Ионные жидкости – прорыв в новое измерение? // Химия и жизнь. 2007. №11. С. 36-41.1.

Синтез и свойства сульфосукцинатов алканоламидов жирных кислот

Полунина О.А. (студент, 5 курс)

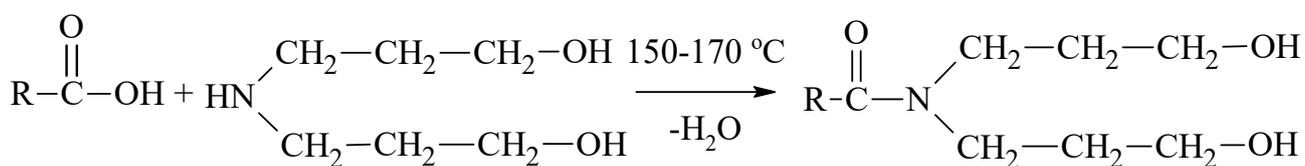
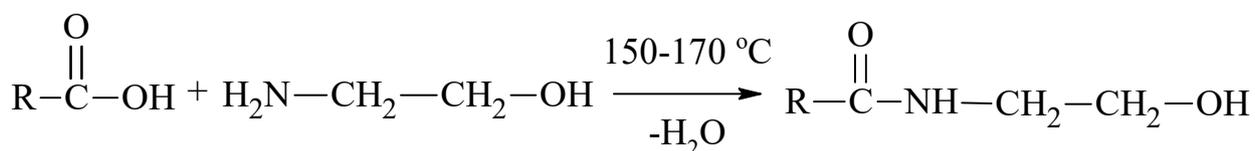
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Темникова С.А.

Алкилсульфосукцинаты – это один из типов анионных поверхностно-активных веществ (ПАВ), производные янтарной кислоты, которые проявляют хорошее смачивающее, диспергирующее, эмульсифицирующее действие. Применяются в качестве эмульгаторов при эмульсионной и микросуспензионной полимеризации, при получении наноматериалов, вспенивателей резины и пластика, диспергаторов пигментов и красителей, смачивателей в составе клеев, герметиков конструкционных и строительных материалов, при изготовлении косметических и моющих средств. Их достоинствами являются: доступность исходных веществ, высокие выходы продукта, нетоксичность, биоразлагаемость, разнообразие сфер применения.

В настоящей работе проведено несколько последовательных синтезов для получения конечных продуктов — сульфосукцинатов алканоламидов высших кислот с общей формулой: $\text{RCOHNCH}_2\text{CH}_2\text{OCOCH}(\text{SO}_3\text{Na})\text{CH}_2\text{COONa}$ и $\text{RCON}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCOCH}(\text{SO}_3\text{Na})\text{CH}_2\text{COONa})_2$, где $\text{R} = \text{C}_{13}\text{H}_{27}, \text{C}_{15}\text{H}_{31}, \text{C}_{17}\text{H}_{35}$.

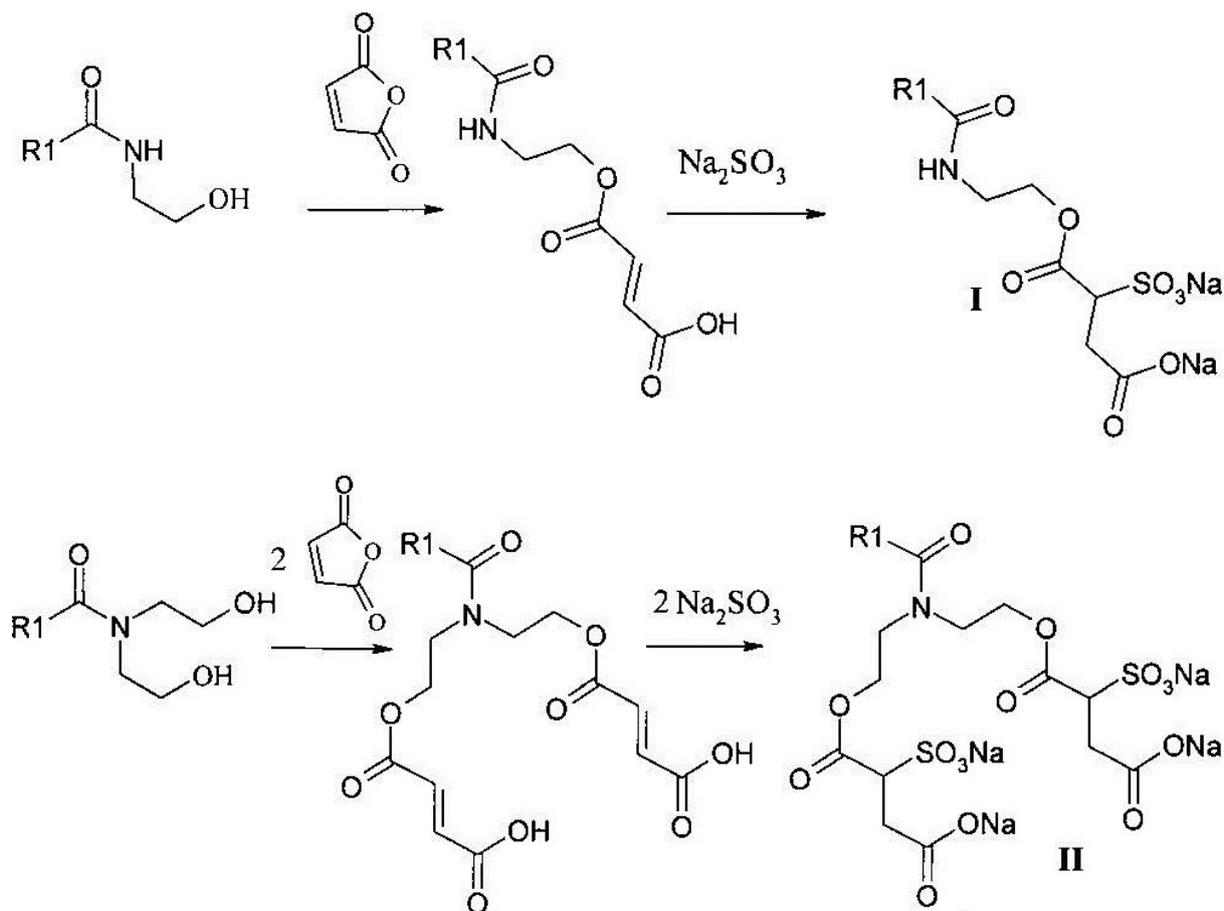
Для получения конечных продуктов, в ходе работы были получены моно- и диэтаноламиды жирных кислот – миристиновой, пальмитиновой и стеариновой. Синтез основан на реакции амидирования высших карбоновых кислот моно- или диэтаноламином.

Реакции протекают по схемам:



Получение алкилсульфосукцинатов высших карбоновых кислот, осуществляется в две стадии. На первой стадии (I) происходит взаимодействие малеинового ангидрида и, полученных ранее, моно- или диэтаноламидов жирных кислот, вследствие которого образуются моно- или диэфиры малеиновой кислоты. И на второй стадии (II) проводят сульфирование раствором сульфита натрия.

Реакции протекают по следующим схемам:



Строение и состав полученных соединений подтверждены данными ИК-спектроскопии. Для синтезированных веществ были определены физико-химические константы: растворимость и температура плавления, исследованы коллоидно-химические свойства водных растворов алкилсульфосукцинатов.

Установлено, что синтезированные соединения демонстрируют достаточно высокую поверхностную активность (снижают поверхностное натяжение воды с 72 мН/м до 30-40 мН/м), обладают высокой пенообразующей способностью и дают устойчивую пену.

Влияние концентраций синтанола на температуру инверсии фаз эмульсий оливкового масла в водных растворах

Портнова Д.А. (студентка, 4 курс)

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

Липофобные дисперсные системы, агрегативная устойчивость которых обеспечивается стабилизатором поверхностно-активным веществом в настоящее время широко применяются для создания многих видов косметических средств. Крема представляющие эмульсии типа вода/масло обладают рядом преимуществ, по сравнению с эмульсиями масло/вода. Эмульсионные кремы имеют хорошие барьерные свойства, эффективные увлажняющие свойства и являются водостойкими [1].

В качестве модели для исследования в работе было выбрано оливковое масло холодного отжима и синтанол промышленного производства ОС-20 в соотношении 1:1. Выбор неионогенного поверхностно-активного вещества был сделан благодаря его мягким дерматологическим свойствам.

Обратную эмульсию оливкового масла в растворе синтанола получали методом температурной инверсии фаз. Обращение фаз определяли по скачку удельной электропроводности, измеренную кондуктометром Mettler Toledo SG7. Исследовали системы эмульсий оливкового масла содержащие водные растворы ОС-20 с концентрациями от 1% до 10%. Нагревание эмульсионной системы проводили при термостатировании эмульсий с шагом 2°C. По результатам измерений строили политермы электропроводности, которые имели скачки, характеризующие обращение фаз, исследуемых эмульсий.

Показано, что увеличение концентрации ОС-20 с 1% до 10% в водной фазе приводит к уменьшению ТИФ с 48°C до 44°C.

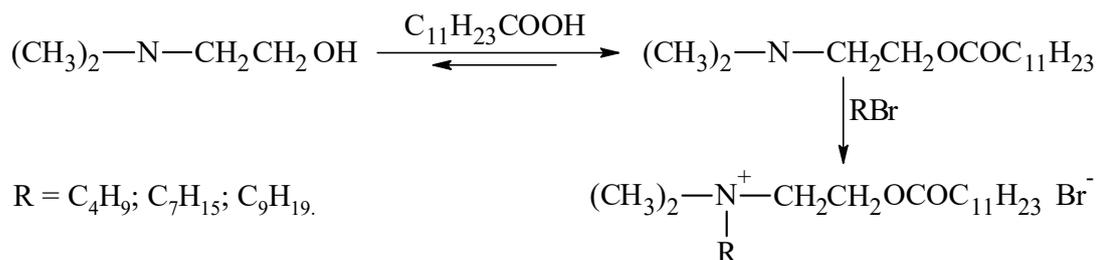
1. Вшивков А.А. Основы косметической химии. – Екатеринбург: Российский государственный профессионально-педагогический университет, 2005. – 428 с.

Синтез катионных ПАВ на основе 2-(диметиламино)этанола

Ульянова М.А. (студент, 4 курс)

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

В настоящей работе проведен синтез катионных ПАВ из класса ЧАС на основе 2-диметиламиноэтанола (ДМАЭ) по схеме:



Четвертичные соли диметиламиноэтанола и его сложного эфира получены кватернизацией алкилгалогенидами в присутствии в качестве растворителя абсолютного ацетона при 60–70°C в течение 4–5 часов. Сложный эфир ДМАЭ получен азеотропной этерификацией лауриновой кислоты при 150–160°C в течение 4 часов.

2-(Диметиламино)этиллаурат, очищенный вакуумной перегонкой, представляет собой бесцветную маслянистую жидкость, относящуюся к классу мало-растворимых ПАВ.

Продукты кватернизации, промытые абсолютным эфиром и очищенные двукратной перекристаллизацией из ацетона и смеси бутанол-этилацетат (1:1), представляют собой белые кристаллические вещества.

Строение и состав полученных соединений подтверждены данными ИК-спектроскопии и качественными реакциями на катионные ПАВ.

1. Вережников В.Н. Избранные главы коллоидной химии: учеб. пособие для вузов / В.Н. Вережников. – Воронеж: ИПЦ ВГУ, 2011. – 187 с.

2. Демьянцева Е.Ю., Копнина Р.А. Солюбилизация в растворах поверхностно-активных веществ: учебно-методическое пособие / Е.Ю. Демьянцева, Р.А. Копнина. – СПб: СПбГТУРП, 2015. – 31 с.

Проблема «поврежденного» крахмала

Хадыкина Е.С. (магистрант 2-го года обучения)

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

Опытная партия муки оказалась не пригодной для выпечки из-за повышенного содержания повреждённого крахмала. Поврежденный крахмал – это крахмальные гранулы, которые при помоле раздробились на куски, и обладают способностью поглощать воду в 4 раза больше своего веса по сравнению с показателем 0,4 у нативного крахмала [1]. Поврежденные гранулы крахмала подвергаются интенсивному влиянию ферментов – α - и β -амилаз, осуществляющих гидролиз 1,4-связей в полисахаридах.



крахмал растворимый декстрины мальтоза глюкоза

Известно, что α -амилаза не способна влиять на неповрежденные гранулы крахмала из-за защитной оболочки. Использование муки с высоким уровнем поврежденного крахмала приводит к приготовлению теста, липнущего к рукам и оборудованию, со слабыми боковыми оболочками и липким мякишем. Установлено что, чем более зерно стойко к помолу, тем больше содержание поврежденного крахмала, а твердость зерна выше при высоком содержании белка. Таким образом, существует прямая зависимость между содержанием белка и поврежденного крахмала. Если уровень поврежденного крахмала слишком высок (78-82%), рекомендуется добавлять муку мягкого помола и сухую клейковину. Для производства изделия высокого качества и избежания экономических потерь, необходим постоянный контроль баланса между объемом поврежденного крахмала, содержанием белка и амилаз.

1. Сусянок Г.М. Зерноведение с основами биохимии. Москва: ИНФА-М. С. 2013. С. 347.

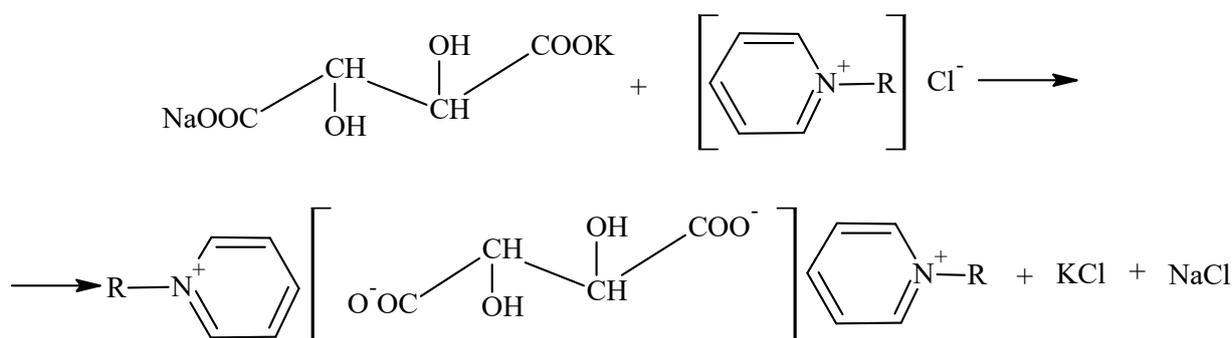
Синтез и свойства тартратов с органическими катионами

Цыплакова А.В. (студентка, 5 курс)

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

Винная кислота – распространенное природное соединение. Соли винной кислоты называются тартратами и находят широкое применение в различных областях: в качестве пищевых добавок – Е-336, Е-337, в составе лекарств, для приготовления электролитов, для гальванических покрытий, в радиотехнике, электронике и т.д. Известные тартраты, в качестве одной из составляющих, имеют неорганические катионы. Представляло интерес получить тартраты на основе органических катионов.

Для синтеза тартратов алкилпиридиния в качестве исходных веществ были использованы: сегнетова соль (калий-натрий виннокислый), N-децил-пиридиний хлорид и N-цетилпиридиний бромид. Синтез осуществили по следующей схеме:



где R: C₁₀H₂₁; C₁₆H₃₃; a Hal: Cl; Br.

Полученные тартраты ди(децилпиридиния) (ДДЦП) и ди(цетилпиридиния) (ДЦП) представляют собой белые кристаллические вещества, растворимые в воде, полярных растворителях и не растворимые в эфире и гексане. Синтезированные тартраты относятся к катионным поверхностно-активным веществам (КПАВ), что подтверждено качественными реакциями. Исследованы физико-химические свойства соединений. Отмечена хорошая пенообразующая способность. Структура синтезированных ДДЦП и ДЦП подтверждена данными ИК-спектроскопии.

Процесс поликонденсации молочной кислоты с азеотропной отгонкой воды

Чиликина И. В. (студентка, 4 курс)

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

На начальной стадии поликонденсации молочной кислоты (МК) образуются полимерные цепочки, состоящие из олигомеров и низкомолекулярного полилактида. Которые в дальнейшем подвергают полимеризации с образованием высокомолекулярных полимеров (PLA) [1]. Цель работы – исследование процесса олигомеризации молочной кислоты при использовании различных азеотропообразователей.

Из полученных олигомеров были отобраны пробы и проведен анализ на определение кислотного числа и молекулярной массы ($M_{к.ч.}$). Также с помощью вискозиметрического метода (M_B), была определена молекулярная масса олигомеров через уравнение Марка – Хувинка: $[\eta] = KM^\alpha$. Данные исследований приведены в таблице.

Таблица
Молярная масса олигомера и его выход в зависимости
от выбранного азеотропа

Азеотроп	Масса олигомера, г	Кислотное число	$M_{к.ч.}$	M_B	η олигомера, %
МК+толуол	33,17	220,89	254,02	256,14	39,55
МК+CCl ₄	15,78	341,33	164,33	157,32	29,07

Необходимо оценить эффективность применения различных азеотропообразователей на стадии концентрирования МК.

1. Тимченко Т.В., Щербакова Л.И., Компанцев В.А. Поли-D,L-лактид-когликоlid: методы получения, свойства и использование для разработки лекарственных препаратов со средствами микро- и нанодоставки // Современные проблемы науки и образования. М., 2015. №4. С. 559.

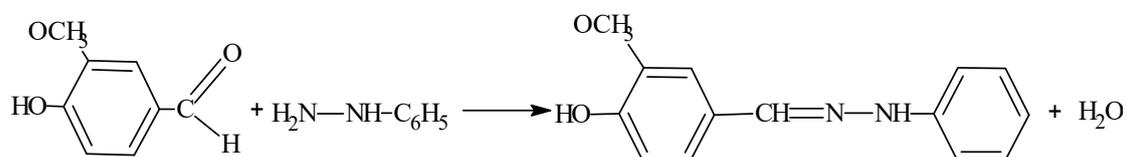
Синтез азотсодержащего лиганда на основе ванилина

Шишкова К.В (студентка, 5 курс)

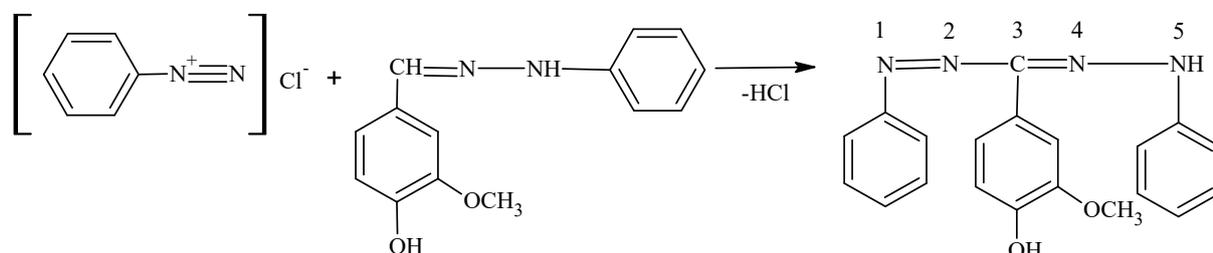
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Егорова И.Ю

Лиганды на основе азогидразона муравьиной кислоты широко применяются в органическом синтезе. На их основе получают химические и электрохимические сенсоры, тест-средства для экспресс-анализа, а также используют в качестве спектрофотометрических реагентов для определения металлов. Азогидразоновые (формазановые) красители проявляют высокую водо- и светостойкость, хорошие цветовые качества и применяются для крашения различных материалов. Представленная работа посвящена получению азотсодержащего лиганда – 1,5-дифенил-3-(4-гидрокси-3-метоксифенил)азогидразона на основе ванилина.

Получение азогидразона проводили в несколько стадий. Взаимодействием ванилина с гидрохлоридом фенилгидразина получен гидразон 4-гидрокси-3-метоксибензальдегида, строение которого подтверждено данными ИК-спектроскопии и температурой плавления.



Диазотированием анилина азотистой кислотой в водном растворе получен фенилдиазоний хлорид, который без выделения из раствора, введен в реакцию азосочетания с гидразоном ванилина. В результате чего получен 1,5-дифенил-3-(4-гидрокси-3-метоксифенил)формазан.



Полученное соединение представляет собой мелкокристаллическое вязкое вещество темно-фиолетового цвета. Исследована растворимость и температура плавления. Строение подтверждено данными ИК- спектроскопического анализа.

Что такое сайдинг?

Юшкевич В.А. (студент, 5 курс)

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

Сайдингом (в переводе с английского «siding» - «наружная обшивка») называли внешнюю облицовку, сделанную по конкретной технологии, но практически из любого материала. В 50-х годах XX века в США и Канаде была разработана технология с применением поливинилхлорида (ПВХ). В современном производстве преобладает метод коэкструзии, то есть создание виниловой панели из двух слоев, объединенных друг с другом на молекулярном уровне.

Основными компонентами для изготовления сайдинга являются: ПВХ, пластификаторы, термостабилизаторы, модификаторы ударопрочности и перерабатываемости, смазки внешние и внутренние и т.д. При обычной температуре ПВХ хрупок и неэластичен, что ограничивает область его применения, поэтому обычно его смешивают с пластификаторами (эпоксидные смолы, диоктилфталат, хлорированные парафины и др.). При температуре 140°C происходит выделение HCl и для устранения деструкции применяются стабилизаторы (стеарат свинца, свинцовые белила, ортосиликаты и др.). Для защиты ПВХ от действия света и УФ-лучей используют фенилсалицилат, резорциндибензоат, сажу и диоксид титана. Для удешевления ПВХ-композиций используют наполнители, чаще всего гидрофобизированный мел, но его избыток вызывает резкое снижение механических свойств изделия. Сам ПВХ должен иметь следующие показатели: влажность – не более 0,3%; условная плотность – 0,52-0,55 г/см³; сыпучесть – 8-12 сек; термостабильность – 3-5 мин до изменения цвета индикатора от красного до голубого (ГОСТ-14041-91).

Таким образом, для создания качественного ПВХ-сайдинга необходима кропотливая исследовательская работа в подборе и анализе компонентов.

Секция физической химии

Корреляции «структура-свойство» алкилзамещённых бензола

Алхасова Э.Д. кызы (магистрант 2-го года обучения)

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

Как правило, экспериментальное определение свойств очень трудоемко, требует больших затрат квалифицированного труда, материальных средств, времени и не всегда возможно. Поэтому большие надежды возлагаются на развитие расчетных методов, которые дают возможность, основываясь на небольшом числе экспериментальных данных, рассчитать свойства для других соединений этого же класса.

Целью настоящей работы является – установление через аналитические выражения и/или графические зависимости количественных корреляций «структура-свойство» в алкилзамещённых бензола.

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи: обсудить состояние численных данных по отдельным свойствам; дать им оценку, отобрать наиболее достоверные значения; провести численные расчеты физико-химических свойств в рядах выбранных соединений; проанализировать полученные расчетным методом свойства и сравнить с опытными данными.

В работе выявлены отдельные закономерности. Найдено, что энтальпия образования, энергия Гиббса и энтропия зависят от природы заместителя. При увеличении длины цепи алкильного заместителя и увеличении степени замещения атомов энтальпия образования замещённых бензола уменьшается, а энтропия и энергия Гиббса увеличиваются.

В работе также методом наименьших квадратов определены численные значения параметров (в кДж/моль) ряда термодинамических свойств метил- и этилзамещённых бензола. Проведены численные расчеты, согласующиеся с экспериментом. Получены новые данные (ранее неизвестные значения).

Корреляции «структура – свойство» алифатических альдегидов.

Топологический подход

Брянцев Д.В. (студент, 4 курс)

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

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций «структура-свойство» в алифатических альдегидах.

В работе показано, что многие известные ТИ участвуют как числа параметров в построении аддитивных схем. Так для альдегидов в четвертом приближении имеем:

$$P_{C_nH_{2n}O} = h_{cc}p_1 + h_{co}p'_1 + x_{cc1}p_2 + x_{co1}p'_2 + x_{ccc1}R + \\ + x_{cc2}p_3 + x_{co2}p'_3 + x_{cc3}p_4 + x_{co3}p'_4 + x_{cc3}p_5 + x_{co3}p'_5$$

В четвертом приближении рассматривается взаимное влияние атомов, удаленных не далее, чем через четыре скелетных атома по цепи молекулы.

По полученным формулам проведён численный расчёт физико-химических свойств альдегидов.

Рассчитанные величины согласуются с экспериментальными и позволяют предсказать в пределах ошибок опыта недостающие значения свойств членов исследуемого ряда.

В работе также выявлены уравнения, отвечающие наиболее тесной корреляционной связи между термодинамическими свойствами и топологическими индексами, построены и проанализированы графические зависимости «Свойство – ТИ», «Свойство - номер изомера» и «ТИ - номер изомера». Найдено, что величины $\Delta_f H^0_{298(r)}$ хорошо коррелируют с индексами W и H . С увеличением числа изомеров корреляции между свойством и ТИ усложняются, что необходимо учитывать при аналитическом изучении зависимостей «Энтальпия образования – ТИ».

Распределение групповых зарядов в дисульфидах

Дулимова В.В. (студент, 4 курс)

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

Целью работы стало получение и сравнение зарядов групп гомологического ряда дисульфидов и построение общей шкалы групповых электроотрицательностей. Оптимизация химических структур проводилась методом B3LYP/6-311++G(3df,3pd) в программе GAUSSIAN 03. В пакете AIMALL проведено вычисление зарядов (q) «топологических» атомов в рамках «квантовой теории атомов в молекулах». Суммированием атомных параметров получены групповые заряды $q(R)$ (табл.).

Таблица

Гомологический ряд дисульфидов по распределению зарядов

№	CH ₃	S	S	CH ₂	CH ₃							
1	0,016	-0,016	-0,016	-	-	-	-	-	-	-	-	0,016
2	0,015	-0,018	-0,044	0,001	-	-	-	-	-	-	-	0,046
3	0,014	-0,018	-0,044	-0,015	0,054	-	-	-	-	-	-	0,009
4	0,014	-0,018	-0,044	-0,015	0,039	-	-	-	-	-	0,027	-0,001
5	0,014	-0,019	-0,045	-0,015	0,038	0,012	-	-	-	-	0,020	-0,008
6	0,014	-0,019	-0,045	-0,015	0,037	0,012	0,010	-	-	-	0,017	-0,010
7	0,014	-0,019	-0,045	-0,015	0,038	0,012	0,010	0,003	-	-	0,017	-0,012
8	0,014	-0,019	-0,045	-0,015	0,038	0,012	0,008	0,002	0,003	-	0,016	-0,013
9	0,014	-0,019	-0,045	-0,015	0,038	0,012	0,010	0,003	0,002	0,001	0,016	-0,014

Сопоставлением полученных $q(R)$ исследуемых соединений выделен фрагмент молекулы CH₃-S-S- стягивающий на себя электронную плотность ($\rho(r)$) с ближних к нему (CH₂)_n. Отрицательная величина заряда на соседней с серосодержащим фрагментом группе CH₂ обусловлена оттоком $\rho(r)$ на S-S через атом углерода этих групп. Перенос $\rho(r)$ на S-S с углеродной цепи происходит с деформацией объема ближайшей CH₂ и уменьшением её заряда ($q(\text{CH}_2) = -0,015$ а.е.). Сравнение зарядов позволило составить качественную шкалу групповых электроотрицательностей:

$$\chi(\text{S}) > \chi(\text{CH}_3) > \chi(\text{CH}_2).$$

Разработка спектроскопического метода изучения морфологии эмульсий

Жарова Н.А. (магистрант 2-го года обучения)

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

На современном этапе развития естественнонаучных и технических дисциплин большое значение имеют исследования дисперсных систем, частицы которых обладают размерами в диапазоне от нескольких единиц до нескольких тысяч нанометров [1]. В большинстве таких систем частицы имеют различные параметры: электрические заряды, размеры и иные электрические характеристики, т.е. имеется распределение частиц по их геометрическим параметрам. Свойства и строение систем существенно зависят от вида этих распределений, что делает актуальным их изучение. Решение задачи детального изучения строения дисперсных систем, в частности эмульсий, возможно при использовании химических методов исследования.

В ходе проведенных исследований показано, что спектроскопический метод можно эффективно применять для количественного определения параметров эмульсий, изучить подробное строение эмульсий и их свойств, которые будут полезны во многих отраслях промышленности. С использованием спектроскопического метода, основанного на анализе рассеивающей компоненты света, проходящего через образец, определены средние размеры частиц в эмульсиях.

1. В. Е. Ситникова, С. Д. Хижняк, Пахомов П. М. Применение методов оптической спектроскопии для исследования морфологии полимерных композитов. *European Researcher*, 2013, Vol. (63), № 11-2.

Распределение электронной плотности в кетонах

Крылова М.Е. (студент, 4 курс)

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

Квантово-химический расчёт интегральных характеристик распределения электронной плотности гомологического ряда кетонов ($C_nH_{2n+1}-C(O)-CH_3$), где $1 \leq n \leq 8$, позволяет определить индуктивный и стерический эффекты кислородсодержащей группы и получить качественную шкалу групповых электроотрицательностей. Молекулы оптимизированы методом B3LYP 6-311++G(3df,3pd) в программе GAUSSIAN 03.

Получена электронная плотность для первых восьми гомологов кетонов, полные электронные энергии, гармоники нормальных колебаний ядер и параметры геометрии – длины связей, валентные и торсионные углы. Заряды (q) и объёмы (V) «топологических» атомов вычислены в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» с помощью программного пакета AIMALL, затем суммированы в характеристики соответствующих групп ($q(R)$, $V(R)$).

Сравнением полученных параметров $q(R)$ и $V(R)$ для гомологического ряда кетонов выделен кетоновый фрагмент молекулы $-C(O)-$, стягивающий на себя электронную плотность с ближайших к нему групп. Индуктивный эффект $C(O)$ отмечен в изменении двух соседних $q(CH_2)$, стерический $C(O)$ - в изменении q и V с четвертой от него CH_2 . Сопоставление зарядов для $C_nH_{2n+1}-C(O)-CH_3$, где $1 \leq n \leq 8$, дало их соотношение:

$$q(CO) < q(CH_3) < q(CH_2),$$

из которого получена их качественная шкала электроотрицательностей:

$$\chi(CO) > \chi(CH_3) > \chi(CH_2).$$

Корреляции «структура – свойство» X-замещённых этана

Понкратов М.А. (магистрант 2-го года обучения)

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

Целью настоящей работы является – установление через аналитические выражения и/или графические зависимости количественных корреляций «структура-свойство» в X-замещённых этана.

Для этого в работе проведена оценка состояния численных данных по термодинамическим свойствам исследуемых соединений, выведены расчётные схемы в разных приближениях. Так для X-замещённых этана получаем:

$$P'' = P_0 + P_1 + P'_1 + x_{xx2} \tau_{xx}$$

где P_0 – включает в себя валентные взаимодействия, $P_1 = x_{cx1} \Gamma_{cx} + x_{xx1}$, Γ_{xx} и Δ_{xxx} – невалентные взаимодействия пары и тройки атомов X через один атом C в цепи молекулы, $P'_1 = x_{cxx1} \Delta_{cxx} + x_{xxx1} \Delta_{xxx}$, τ_{xx} – невалентные взаимодействия атомов X через два атома C, а x_{xx1} , x_{xxx1} , x_{xx2} – число таких взаимодействий.

По полученным схемам, в работе проведены численные расчёты некоторых термодинамических свойств ряда X-замещённых этана, согласующиеся с экспериментом. Получены новые данные.

В работе также проведено сравнение полученных результатов с данными расчета по аддитивным схемам и экспериментальными данными. Показано, что точность расчета по аддитивным схемам для простейших соединений превосходит точность расчетов методами полуэмпирической квантовой химии.

В работе выявлены закономерности, связывающие термодинамические характеристики со строением замещённых этана. Найдено, что они зависят от природы заместителя. При увеличении длины цепи алкильного заместителя и увеличении степени замещения атомов энтальпия образования замещённых этана уменьшается, а энтропия, теплоёмкостей и энергия Гиббса увеличиваются.

Корреляции структура – свойство простых эфиров

Романюк Е.И. (студент, 5 курс)

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

Целью настоящей работы является – установление через аналитические выражения и/или графические зависимости количественных корреляций «структура-свойство» в простых эфирах.

Для этого в работе проведена оценка состояния численных данных по термодинамическим свойствам эфиров, выведены расчётные схемы в разных приближениях.

Так для эфиров в третьем приближении получаем:

$$P_{C|H_{2l+1}O_{S|H_{2l+1}}} = h_{cc}p_{c-c} + h_{co}p_{c-o} + x_{cc1}\Gamma_{cc} + x_{co1}\Gamma_{co} + \\ + x_{ccc1}\Delta_{ccc} + x_{cc2}\tau_{cc} + x_{co2}\tau_{co} + x_{cc3}\omega_{cc} + x_{co3}\omega_{co}$$

где Γ_{cc} , Γ_{co} , τ_{cc} , τ_{co} , ω_{cc} , ω_{co} – эффективные взаимодействия соответственно пар атомов С или Си О через один атом, два, три атома; Δ_{ccc} – эффективный вклад взаимодействия тройки атомов С около одного и того же скелетного атома; p_{c-c} и p_{c-o} – соответственно вклады связи С-С и С-О и т.д.

Так как в результате нехватки экспериментальных данных получилась система с линейно-зависимыми столбцами, то параметр p_{c-n} , пропадает, а параметры Γ_{co} и τ_{cc} пропадают.

В работе проведены численные расчёты некоторых термодинамических свойств ряда простых эфиров, согласующиеся с экспериментом. Получены новые данные (ранее неизвестные значения свойств).

В работе также были выявлены отдельные закономерности, связывающие энтальпию образования, теплоёмкость, энтропию и энергию Гиббса со строением эфиров.

Так энтальпия образования уменьшается при увеличении длины цепи алкильного заместителя и увеличении степени замещения атомов.

Энергетические характеристики нитрилов

Соколов Н.А. (студент, 5 курс)

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

Разработка теории и методов расчета свойств веществ, исходя из сведений о строении молекул, составляет фундаментальную научную задачу химии.

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

Для нитрилов в работе выведены расчётные схемы в разных приближениях. Например, во втором приближении имеем:

$$P_{C_nH_{2n+1}CN} = h_{cc}p_{c-c} + h_{cs}p_{c-N} + h_{cn}p_{C-C} + h_{cn}p_{C-N} + x_{cc1}\Gamma_{cc} + x_{CN1}\Gamma_{CN} + x_{ccc1}\Delta_{ccc} + x_{cc2}\tau_{cc} + x_{CN2}\tau_{CN}$$

В работе проведён анализ числовых данных по энтальпии образования и энергиям разрыва связей в нитрилах, проведены численные расчёты, выявлены отдельные закономерности.

1. Энергии разрыва связей D_{298} в выбранных соединениях изменяются в широких пределах.

Например, (в кДж/моль [1]):

	$C_3H_7 - CH_2CN$	$I - CH_2CN$	$C_6H - CN$
D_{298}	$81,7 \pm 3$	$44,7 \pm 1,3$	$132,3 \pm 2,0$

2. Энергии разрыва связей D_{298} в нитрилах увеличиваются при появлении фенольной группы и уменьшаются при появлении цикла в цепи молекулы.

Например, (в кДж/моль [1]):

	$C_5H_{11} - CH_2CN$	$C_6H_5 - CN$
D_{298}	$80,8 \pm 3$	$132,3 \pm 2,0$

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

Гидрогели на основе L-цистеина, нитрата серебра и водорастворимых полимеров

Соловьева А.Е. (магистрант 2-го года обучения)

Чирик К.А., Шишова Р.В. (студенты, 5 курс)

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

Гели на основе цистеина, нитрата серебра и полимеров (ПВС, ПВП, ПЭГ) были получены в две стадии [1, 2]. С помощью УФ и ИК-спектроскопии было выяснено, что макромолекулы полимера взаимодействуют с супрамолекулами ЦСР, при этом, не нарушая целостности их структуры.

Исследование реологии полученных композиций методом вибрационной вискозиметрии показало, что добавление полимера вызывает увеличение вязкостных характеристик гидрогелей по сравнению с контрольным образцом (гидрогель без полимера). При этом самое сильное влияние на вязкость системы оказывал ПВС. Реологический тест также показал и подтвердил, что гели с ПВС самые стабильные во времени.

Методами рН-анализа, измерения размеров образующихся агрегатов и их дзетта-потенциала (ДСР) был подтвержден факт взаимодействия ЦСР и полимеров путем образования водородных связей. Исследование морфологии гидрогелей (СЭМ) выявило сильное различие в их структуре. Для ПВС в независимости от молекулярной массы получалась регулярная пористая структура, тогда как для ПВП и ПЭГ – нерегулярная пористая структура.

1. *Soft Matter*. 2017. V.30. №13. P.5168-5184. DOI: 10.1039/C7SM00772H.

2. *Fibre Chemistry*. 2018. V. 50. №3. P.161-165. DOI 10.1007/s10692-018-9953-8.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности (проект №4.5508.2017/БЧ) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.

Энергия Гиббса алифатических эфиров. Топологический подход

Тагиева А. Рагим-кызы (магистрант 1-го года обучения)

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

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций «Структура – энергия Гиббса» в простых эфирах.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

- анализ экспериментальных данных по исследуемым соединениям;
- подбор топологических индексов (ТИ) и построение расчётных схем;
- проведение численных расчётов;
- построение и анализ графических зависимостей.

Для гетероядерных систем в работе рассмотрено построение таких индексов как: индекс Винера W , число W' , индекс Харари H и др.

В работе также были получены аналитические зависимости $P=f(\text{ТИ})$ наиболее точно коррелирующие с энергией Гиббса простых эфиров.

В работе обсуждены возможности теоретико-графового подхода в построении и интерпретации аддитивных схем расчёта и прогнозирования алифатических эфиров. Найдено, что многие известные ТИ участвуют как числа параметров в конструировании таких схем.

По полученным схемам проведён численный расчёт энергии Гиббса алифатических эфиров. Рассчитанные величины, в общем, согласуются с экспериментальными, и позволяют предсказать в границах ошибок опыта недостающие значения свойств членов исследуемого ряда.

В работе также рассмотрены графические зависимости «Свойство- номер изомера» и «ТИ - номер изомера», «Свойство P – ТИ».

Найдено, что в одних случаях наблюдается симбатное изменение свойства P и топологического индекса, это свидетельствует о хорошей корреляции между P и ТИ. В других случаях такой корреляции нет.

Процессы самосборки в низкоконцентрированных водных системах глицин – AgNO₃ – ПВС

Шухина К.А. (бакалавр 4-го года обучения)

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

Глицин (Gly) – простейшая аминокислота, выполняет защитную функцию в тканях, играет важную роль в адсорбции кальция. Поливиниловый спирт (ПВС) – биоразлагаемый полимер. Нитрат серебра (AgNO₃) обладает бактерицидными свойствами. Полученные системы Gly-AgNO₃-ПВС могут найти применение в медицине как плёночные материалы для заживления ран.

Объектами исследования являются серии образцов, полученные на основе водных растворов ПВС (5 и 10%), Gly и AgNO₃ (0,01 М). Из систем Gly-ПВС были получены прозрачные плёнки методом отлива из раствора в чашке Петри. Полученные образцы были изучены с помощью различных физико-химических методов: УФ, ИК-спектроскопии и динамического светорассеяния.

Методом динамического светорассеяния было установлено, что распределения частиц по размерам системе Gly-AgNO₃-ПВС отличаются стабильностью во времени. С помощью УФ и ИК спектроскопии было установлено, что процессы самосборки в системах в большей степени зависят от состава исследованных образцов, концентрации и соотношения исходных компонентов.

Таким образом, установлено, что процессы самосборки в системах на основе Gly-AgNO₃-ПВС происходят за счет межмолекулярных взаимодействий, в которых глицин связывает макромолекулы ПВС в качестве гибкого линкера. На кинетику формирования наноагрегатов в образцах влияет концентрация и соотношение компонентов, а также время выдержки образца, что можно объяснить возникновением множественных водородных связей между функциональными группами глицина и ПВС.