Министерство науки и высшего образования

Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное

образовательное учреждение высшего образования

«Тверской государственный университет»

XIX

НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

АСПИРАНТОВ И СТУДЕНТОВ

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО

ФАКУЛЬТЕТА

*25 мая 2020 года*

*Тверь*

Тезисы докладов

ТВЕРЬ 2020

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***

|  |  |
| --- | --- |
| **Алексеева А.В.** Термический анализ афобазола ………………………….. | 6 |
| **Варламова А.А.** Создание и применение оптических изомеров экологически безопасных комплексонов …………………………………………….. | 7 |
| **Варфоломеева В.В.** Анализ Fe (II) и Fe (III) в травильных растворах при их совместном присутствии ………………………………………………… | 8 |
| **Вахрушкина М.В**. Новые ионоселективные электроды для анализа лекарственных средств группы ремантадина …………………………………… | 9 |
| **Грачев Е. М.** Потенциометрические характеристики ионоселективного электрода с откликом на метформин ………………………………………. | 10 |
| **Жаров Д.С.** Ионоселективный электрод на пропамокарб гидрохлорид… | 11 |
| **Зуева А.С.** Количественное определение анальгина в лекарственных средствах ……………………………………………………………………… | 12 |
| **Иванова Н.В.** Определение селена в биологически активных добавках и косметических средствах …………………………………………………….. | 13 |
| **Карчевский А.В.** Исследование полиморфизма индометацина ИК-спектроскопическим методом ………………………………………………. | 14 |
| **Ковалева Н. Ю.** Ионоселективный электрод для определения амброксола в фармацевтических препаратах …………………………………………… | 15 |
| **Крылов А.А.** Электромеханические свойства поли-α-нафтиламина от потенциала в среде неорганических и органических кислот …………………. | 16 |
| **Крюков Т.В., Скобин М.И.** Твердые комплексы неодима и самария с цефазолином …………………………………………………………………….. | 17 |
| Кузнецова А.А. Отнесение полос валентных колебаний карбонильных группв ИК спектре натриевой соли цефуроксима ………………………… | 18 |
| **Лобзова В.А.** Количественное определение белков в молоке …………… | 19 |
| **Макарова Е.А.** Определение Fe2+ и Ni2+ при совместном присутствии …. | 20 |
| **Перевозова В.И.** Ионные ассоциаты N,N-диметилбигуанида с гетерополикислотами ………………………………………………………………….. | 21 |
| **Радин А. С.** Применение полианилина модифицированного гетеро-поликислотами типа Доусона для разработки газовых сенсоров для определения водорода ……………………………………………………………. | 22 |
| **Скобин М.И., Крюков Т.В.** Синхронный термический анализ комплекса [EuHep]·3H2O …………………………………………………………………. | 23 |
| Соколова А.Д. Использование картриджа для твердофазной экстракции при подготовке пробы для определения полихлорированных бифенилов | 24 |
| Филиппова О.А. Определение ионов меди и никеля при совместном присутствии методом бумажной хроматографии ……………………………….. | 25 |
| **Шарапова Л.А.** Изучение ионного состава водных объектов на территории Тверской области ……………………………………………………….. | 26 |

***Секция органической химии***

|  |  |
| --- | --- |
| **Базутин А.С.** Получение формазанатов меди (II) и кобальта (II) ……….. | 27 |
| **Барабанова А.А.** Синтез гетероциклических соединений по реакции Биджинелли ……………………………………………………………………. | 28 |
| **Веролайнен В. А.** Получение обратных эмульсий масла авокадо в воде | 29 |
| **Веселова А. В.** Получение алкилполигликозидов ферментативным способом ……………………………………………………………………………. | 30 |
| **Взорова О.Ю.** Высокодисперсные системы, как методы очистки воды … | 31 |
| **Дубов М.О.** Исследование свойств полученных цвиттер-ионных поверхностно-активных веществ на основе N,N-диэтилэтаноламина …………… | 32 |
| **Кафтанов А.Д.** Металлокомплексы меди с производными азогидразонов | 33 |
| **Ковальчук К.М.** Влияние различных факторов устойчивости на стабильность суспензий ментола в воде …………………………………………….. | 34 |
| **Кузьмина В.А.** Синтез и свойства ионных жидкостей на основе бис-четвертичных солей пиридиния …………………………………………….. | 35 |
| **Малякова А.А.** Синтез и свойства ионных жидкостей на основе четвертичных солей N-алкилпиридиния …………………………………………… | 36 |
| **Медведева О. А.** Получение 1-фенил-3-(2-гидроксифенил)-5-(2,4-динит-рофенил)формазана …………………………………………………………... | 37 |
| **Петрова Е.Н.** Получение сопряженных азинов путем конденсации ароматических альдегидов с гидразином ………………………………………… | 38 |
| **Просяник Ю. А.** Исследование пенообразующих свойств смесей сульфанола и неионогенных поверхностно-активных веществ ………………….. | 39 |
| **Рассказова Н.Ю.** Синтез и термическая стабильность тетрафторборатов N-алкилпиридиния ……………………………………………………….….… | 40 |
| **Смирнова К.А.** Синтез и бактерицидная активность четвертичных солей имидазолия ………………………………………………………………..…… | 41 |
| **Суворова А. М.** Влияние природы катиона на спектральные характеристики тетрахлорпалладата четвертичного аммония ……………………...…. | 42 |
| **Тараскина М.Ю.** Синтез четвертичных солей N-алкилпиперидиния .….... | 43 |
| **Левицкая Ю.В.** Синтез алкилсульфосукцинатов на основе малеинового ангидрида ……………………………………………………………...……….. | 44 |
| **Травников Н.Ю.** Влияние природы ионных жидкостей на размер квантовых точек сульфида цинка …………………………………………...……….. | 45 |
| **Ушанова О.С.** Синтез и свойства ионных жидкостей на основе триэтиламина и 3-метилпиридина ………………………………………...……………. | 46 |
| **Чигина М.Д.** Изучение реакции алкилирования 6-метилурацила ….…… | 47 |
| **Шторих К.А.** Синтез четвертичных солей N-алкилморфолиния ….…….. | 48 |
| **Шубин А.Д.** Синтез производных 6-метилурацила ………………….……... | 49 |
| **Ярмак Д.В.** Определение точки Крафта и исследование свойств синтезированных катионных ПАВ на основе 2-диметиламиноэтанола ……….…… | 50 |

***Секция физической химии***

|  |  |
| --- | --- |
| **Аньшакова А.А.** Корреляции «структура-свойство» алифатических аминов. Топологический подход ……………………………………………….. | 51 |
| **Багиров Т.Л.** Корреляции «структура-энтальпия образования» тиоэфиров | 52 |
| **Брянцев Д.В.** Энергия Гиббса алифатических альдегидов. Топологический подход …………………………………………………………………… | 53 |
| **Ганичева А.А.** Квантово-химический расчет геометрии и энергии транс- и цис-изомеров производных азобензола …………………………………. | 54 |
| **Данилова А. Б.** Моделирование методом диссипативной динамики частиц ламелярных структур триблок-сополимеров …………………………. | 55 |
| **Дорошенко И.Д.** Изучение химического состава образцов мать-и-мачехи спектральными методами …………………………………………………..…. | 56 |
| **Завилейская В.А.** Структурообразование в низкоконцентрированных водных системах на основе аминокислоты N-ацетил-L-цистеина и ацетата серебра ……………………………………………………………………….… | 57 |
| **Зиганшин А.В.** Cлабые внутримолекулярные взаимодействия в краун-эфирах и их тиоаналогах …………………………………………………..… | 58 |
| **Исаев Г.Д.** Энергетические характеристики карбоновых кислот ……….. | 59 |
| **Калюжная Л.А.** Корреляции «структура-энтропия» тиоспиртов. Топологический подход ……………………………………………………………….. | 60 |
| **Королёв Р.В.** Деструкционные процессы при получении СВМПЭ волокон методом гель-формования …………………………………………………… | 61 |
| **Крылова М.Е.** Электронные параметры метилоктилкетона, метилоктилтиокетона и метилоктиосульфоксида ……………………………….………. | 62 |
| **Курочкин Г.А., Софронова Ю.И.** Интегральные электронные характеристики циклогексана и его серосодержащих аналогов ………………….… | 63 |
| **Кучурова А.К.** Образование гидрогелей в водном растворе ПГМГ-ГХ,  L-цистеина и ацетата серебра ……………………………………………….. | 64 |
| **Левчукова В.А., Мосолова Д.И.** Усиление механических свойств L-цис-теин/AgNO3/ПВС супрамолекулярной системы …………………………… | 65 |
| **Русаков М. В.** Изучение влияния антропогенных факторов на химический состав березы повислой спектральными методами …………………. | 66 |
| **Селезнева Т.В.** Надмолекулярное структурирование в низкоконцент-рированных водных растворах на основе L-цистеина, N-ацетил-L-цистеина и ацетата серебра ..… | 67 |
| **Тагиева А. Рагим-кызы** Корреляции «структура – свойство» алифатических эфиров. Топологический подход ………………………….…………… | 68 |
| **Филяровская Н-М. Н.** Одностадийный способ получения гидрогелей на основе аминокислоты L-цистеин с галогенидами металлов………………. | 69 |
| **Шухина К. А.** Процессы самоорганизации в низкоконцентрированных водных растворах глицина, нитрата серебра и поливинилового спирта….. | 70 |
| **Ярусов М.В.** Оценка морфологии эмульсий методом оптической спектроскопии ……………………………………………………………..…………… | 71 |

***Секция неорганической и аналитической химии***

**Термический анализ афобазола**

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

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

Афобазол представляет собой дигидрохлорид 2-[2-(морфолино)этил-тио]-5-этоксибензимидазола и имеет температуру плавления 190-196 °C [1], при этом термическое разложение происходит в две стадии: сначала происходит отрыв двух молекул хлороводорода при температуре 125°C, затем следует разложение органической части молекулы [2].

Известно [1], что добавки, входящие в состав лекарственного препарата могут изменять температуру плавления. Добавки, имеющие более высокую температуру плавления (крахмал и целлюлоза – около 200°C, лактоза α - 223°C, лактоза β - 252°C) приводит к завышению температуры плавления. Добавки, имеющие температуру плавления ниже температуры плавления афобазола (повидон среднемолекулярный – 150-180°C и стеарат магния – 88,5°C) занижают его истинную температуру плавления. В связи с этим была проведена перекристаллизация афобазола из эталона. Анализ проводился на приборе для синхронного термического анализа STA 449 F3. В результате анализа установлено, что разложение органической части молекулы произошло при 261,5 °C. Из результатов анализа видно, что температура плавления имеет более высокие значения. На основании результатов можно предположить, что данный лекарственный препарат, возможно, является фальсифицированным.

1. С. Б. Середенин, Ю. А. Бледнов, В. Л. Савельев и др.; Патент РФ № 2061686; Бюл. изобрет., № 16 (1996).

2. Аносова Е. Б. Пажаровзрывоопасность новых фармацевтических препаратов и продуктов их синтеза: дис. канд. техн. Наук (05.26.03 – пожарная и промышленная безопасность (химическая технология)) / Е. Б. Аносова. – М., 2009. – 177 с.

**Создание и применение оптических изомеров**

**экологически безопасных комплексонов**

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

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

Удешевление и упрощение процедуры анализа в аналитической химии достигается разработкой методов экспресс-контроля. На протяжении столетий химический анализ осуществлялся в лабораториях. Сегодня химический анализ постепенно перемещается из лаборатории к анализируемому объекту.

Нами создано простейшее устройство «Индикаторная бумага для анализа нитратов» [1]. Установленные нами особенности кислотно-основных характеристик оптических изомеров N-(карбоксиметил)аспарагиновой кислоты позволили нам усовершенствовать созданное устройство для экспресс-анализа нитрат-ионов в продуктах питания.

По этому изобретению в состав маскирантно-кислотного слоя включена D-N-(карбоксиметил)аспарагиновая кислота. Это позволяет не только усилить востребованные кислотные характеристики маскирантно-кислотного слоя, т.к. D-N-(карбоксиметил)аспарагиновая кислота при одинаковых условиях (ионная сила растворов I = 0,1) является более сильной кислотой (), чем L-N-(карбоксиметил)аспарагиновая кислота ( или их рацемат N-(карбоксиметил)аспарагиновая кислота (), но и в два раза сократить расход применяемого комплексона моноаминного типа D-КМАК по сравнению с расходом рацемата N-(карбоксиметил)аспарагиновой кислоты.

Изобретение обеспечивает высокую чувствительность и селективность экспрессного определения нитрат-ионов при одновременной возможности осуществления способа в присутствии нитрит-ионов.

1. Патент на полезную модель №169694, опубл. 28.03.2017, «Индикаторная бумага для анализа нитратов» / Авторы: Варламова А.А., Гюльханданьян Е.М., Никольский В.М., Гридчин С.Н.

**Анализ Fe (II) и Fe (III) в травильных растворах**

**при их совместном присутствии**

Варфоломеева В.В. (студент, 5 курс)

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

Работа посвящена разработке методики аналитического контроля содержания Fe(II) и Fe(III) при их совместном присутствии в травильных растворах методом комплексонометрического и потенциометрического титрования с визуальной и инструментальной фиксацией точки эквивалентности. Комплексонометрически определяли суммарное содержание Fe(II) и Fe(III) и содержание Fe(III) в травильном растворе, до и после его окисления азотной кислотой. Точку эквивалентности определяли визуально при переходе окраски раствора с коричнево-красной до лимонно-желтой. Затем рассчитали содержание Fe(III), суммы Fe(II) и Fe(III), Fe(II) в травильном растворе. Потенциометрически определили концентрацию двухвалентного железа, суммарное содержание Fe(II) и Fe(III).

На первом этапе осуществили титрование травильного раствора, содержащего Fe(II) и Fe(III), без добавления восстановителя, т.е. потенциометрически определили Fe(II) в травильном растворе с использованием Pt-электрода в качестве индикаторного. Кривая титрования имеет S-образную форму. На втором этапе провели определение суммарного содержания Fe(II) и Fe(III). Оно основано на предварительном восстановлении Fe(III) до Fe(II) избыточным количеством SnCl2, и последующем титровании смеси двух восстановителей (Sn2+ и Fe2+ ) раствором K2Cr2O7. Определив точку эквивалентности графическим методом, рассчитали содержание Fe(II) и суммарное содержание Fe(II) и Fe(III), и по их разности нашли содержание в нем Fe(III). Сопоставив результаты определения Fe(II) методом комплексонометрического и потенциометрического титрования, можно сделать вывод, что взятые для анализа количества вещества находятся в соответствии с найденными в большей степени при потенциометрическом определении Fe(II). Для повышения точности результатов целесообразнее использовать потенциометрическое определение железа.

**Новые ионоселективные электроды**

**для анализа лекарственных средств группы ремантадина**

Вахрушкина М.В. (магистрант 1-го года обучения)

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

В связи с возрастающим количеством новых лекарственных веществ (ЛВ) как никогда актуальна проблема их идентификации и определения.

Равновесные электрохимические методы анализа ЛВ (прямая потенциометрия и потенциометрическое титрование) являются перспективными для определения лекарственных препаратов [1].

В своей работе для стабилизации потенциала на границе ионоселективная мембрана – токоотвод мы использовали ионно - электронный трансдьюсер на основе полианилина. Чувствительный элемент созданного электрода выполнен в виде ионоселективной мембраны на основе пластифицированного поливинилхлорида и электродоактивного вещества в виде ионного ассоциата фосфорновольфрамовой кислоты с ремантадином [2,3].

Важнейшей характеристикой ИСЭ является рабочий диапазон pH.

Исследования показали, что рабочий диапазон pH созданного электрода достаточно широк от кислой области (pH = 2) до нейтральных значений (pH = 6). Это свидетельствует о том, что созданный электрод применим для анализа различных лекарственных средств – аналогов ремантадина (Ремантадин Авексима, Ремантадин Актитаб, Ремантадин Велфарм, Ремантадин Кидс).

1. Ионоселективные электроды для определения лекарственных веществ. / Харитонов С.В. // Успехи химии. –2007. № 4 – с. 397 – 420.

2. Селективные электроды на органические ионы. / Шведене Н.В. // Соросовский образовательный журнал. – 2004. № 4 – с. 37 – 43.

3. Дарст Р. Ионоселективные электроды. – М.: Мир, 1983. – с. 430.

**Потенциометрические характеристики**

**ионоселективного электрода с откликом на метформин**

Грачев Е. М. (магистрант 1-го года обучения)

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

Потенциометрические методы, в частности, с использованием ионоселективных электродов (ИСЭ) отличаются простотой и экспрессностью анализа. Применение этого метода для определения метформина (N,N-диметилимид-дикарбоимиддиамид) не описано в литературе, поэтому целью настоящей работы явилось создание ИСЭ для определения последнего, изучение его потенциометрических характеристик и разработка методики ионометрического определения метформина (в виде гидрохлорида) в готовых лекарственных формах.

В работе использовали N,N-диметилимиддикарбоимиддиамид (в виде гидрохлорида) фармакопейной чистоты, фосфорно-молибденовую (ФМК) и фосфорновольфрамовую (ФВК) кислоты ч.д.а., диоктилфталат (ДОФ) ч.д.а., поливинилхлорид (ПВХ) марки С-70 х.ч. Электродноактивные вещества получали добавлением к раствору метформина растворов гетерополикислот (ФВК и ФМК) до полного выпадение осадка. Пластифицированные мембраны ИСЭ имели следующий состав (в масс. %): ПВХ-35, ДОФ-60, ЭАВ-5. ИСЭ перед применением вымачивали в 0,05 М растворе метформина. Для определения электродных характеристик использовали электрохимическую ячейку:

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Ag/AgCl | 0,1 M р-р  Metf × HCl +  + 0,1 М р-р KCl | ИС  мембрана | Исследуемый раствор | Насыщенный раствор KCl | AgCl | Ag |

Изготовленные электроды обладали хорошими потенциометрическими характеристиками. Интервал линейности электродной функции находится в промежутке 1-4 рС, крутизна электродной функции близка к теоретическому значению (50 мВ для ФВК), время отклика составляло 5-10 с. Показано, что потенциал ИСЭ не изменяется в интервале рН 4-6. Определение N,N-диметилимиддикарбоимиддиамида в готовых лекарственных формах показало работоспособность созданного ИСЭ.

**Ионоселективный электрод на пропамокарб гидрохлорид**

Жаров Д.С. (студент, 5 курс)

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

Данная работа посвящена созданию ионоселективного электрода с откликом на пропамокарб гидрохлорид, входящего в состав фунгицида «Консенто», производства компании «Bayer» и исследованию его основных метрологических характеристик.

Электродоактивное вещество (ЭАВ) готовили по следующей схеме: раствор фунгицида «Консенто» центрифугировали, затем сливали полученный раствор и добавляли к нему фосфорно-вольфрамовую кислоту, полученный осадок центрифугировали, данную операцию проводили несколько раз до прозрачности раствора с целью вымывания из полученного осадка серы. Затем осадок сушили несколько дней до постоянной массы.

Ионоселективную мембрану изготавливали по классической схеме, представленной в литературе [1]. Состав мембраны приведен ниже:

поливинилхлорид – 5,3 г, дибутилфталат – 7,26 г, ЭАВ – 0,66 г. К смеси этих компонентов был добавлен циклогексанон до получения густой однородной массы.

Определены основные метрологические характеристики изготовленного электрода: диапазон линейности электродной функции (1-4 PC), рабочий диапазон PH (4-8), время отклика (40с). Рассчитана дисперсия S2 (3⋅10-6) и доверительный интервал EL (±0,004)

Подтверждена возможность практического применения изготовленного электрода путем определения в готовом препарате пропамокарб гидрохлорид.

1. Холошенко Н.М., Рясенский С.С., Горелов И.П. // Хим.-фарм. Журн. 2005. No 40(5). C. 54-56

**Количественное определение анальгина в лекарственных средствах**

Зуева А.С. (студент, 4 курс)

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

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

В качестве объекта исследования были выбраны препараты, которые содержат метамизол натрия в качестве активного вещества. Количественное определение метамизола натрия проводили методами йодометрического и йодатометрического титрования [1]. Результаты исследования приведены в таблице.

Таблица

Результаты количественного определения анальгина

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Метод анализа | Масса метамизола натрия в исследуемом образце, мг | | | |
| ЗАО «МЕДИСОРБ» | АО «ФП «Оболенское» | ЗАО «ПФК Обновление» | Сафони Индия Лимитед, Индия |
| Йодометрическое титрование | 495,00 | 490,21 | 492,54 | 494,78 |
| Йодатометрическое титрование | 495,42 | 490,48 | 492,48 | 496,79 |

В результате проведенного анализа можно сделать вывод о соответствии заявленного и фактического количества активного вещества в одной таблетке от разных производителей, что подтверждает подлинность этих препаратов.

1. Государственная фармакопея XIV. Метамизол натрия. – М: МЗ РФ, 2018. – С.4333.

**Определение селена в биологически активных добавках**

**и косметических средствах**

Иванова Н.В. (магистрант 2-го года обучения)

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

Селен является одним из жизненно важных микроэлементов, выполняя роль мощного природного антиоксиданта. Селен предупреждает возникновение и развитие кардиологических и ряда онкологических заболеваний, участвует в метаболизме йода и поддерживает иммунологический статус организма, является составной частью множества белков, липосахаридов и ферментов. Дефицитом селена обусловлено около 20 патологий и 50 болезненных состояний. Недостаток селена(IV) отрицательно сказывается на целостности клеточных мембран и работоспособности сгруппированных на них ферментов, нарушает метаболизм амино- и кетокислот, снижает эффективность энергопродуцирующих процессов [1]. Актуальность разработки методов определения разных химических форм селена в объектах окружающей среды обусловлена их различной биологической активностью и токсичностью. Проведено количественное определение селена в биологически активных добавках и косметических средствах с использованием двух турбидиметрических методик. Методики основаны на переводе соединений селена, содержащихся в анализируемых объектах, в селенистую кислоту, восстановлении селенистой кислоты до элементарного селена и измерении оптической плотности образующихся коллоидных растворов селена. Проведено сравнение метрологических характеристик использованных методик. Показано, что методики отличаются хорошей точностью и воспроизводимостью результатов и могут быть рекомендованы для контроля производства и проверки биологически активных добавок и косметических средств, содержащих селен.

1. Вапиров В.В., Венскович А.А., Бородулина Г.С. Варианты фотометрического определения селена // Принципы экологии. 2014. № 3. С. 4–10.

**Исследование полиморфизма индометацина**

**ИК-спектроскопическим методом**

Карчевский А.В. (студент, 5 курс)

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

Полиморфизм – это способность вещества существовать в различных кристаллических формах при одинаковом химическом составе. К полиморфным превращениям и аморфизации вещества приводят механическое воздействие на молекулярные кристаллы и таблетирование в присутствии бромида калия. Индометацин существует в нескольких кристаллических модификациях и аморфном состоянии, среди которых при нормальных условиях стабильной является γ-форма. Известно, что для сохранения кристаллической структуры индометацин используют полиэтиленгликоль (ПЭГ), применяющийся в качестве эксипиента в лекарственных средствах [1].

Проведен ИК-спектроскопический анализ образца препарата индометацин (Софарма, Болгария) и ПЭГ-2000. В таблице представлены полосы поглощения для всех функциональных групп индометацина. Изменения в ИК-спектре свидетельствуют о том, что происходит ослабление системы водородных связей в индометацине или образование новых, более прочных.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Функциональная группа | Полоса поглощения, см-1 | |
| Индометацин | Индометацин + ПЭГ |
| Индолил-радикал | 1479 | 1468 |
| Ароматическое кольцо | 1692, 1224 | 1692, 1281 |
| ̶ С(О) ̶ | 2900, 1717 | 2900, 1716 |
| СООН-группа | 3380 | 3383, 2926 |

Рекомендуется применять ПЭГ для стабилизации индометацина при таблетировании с KBr.

1. Федотов А.П. О влиянии таблетирования с бромидом калия на инфракрасные спектры поглощения индометацина // Химико-фармацевтический журнал. – 2009. – Т. 43. - №1. – С.50.

**Ионоселективный электрод для определения амброксола**

**в фармацевтических препаратах**

Ковалева Н. Ю. (магистрант 2 -года обучения)

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

В настоящее время для анализа многих лекарственных веществ предложены надёжные ионоселективные электроды (ИСЭ), которые наряду со значительным упрощением аналитической процедуры позволяют получить достаточно высокую чувствительность и низкую погрешность измерений. Целью работы явилось создание твердотельного ИСЭ с откликом на ион амброксола (4-[(2-амино-3,5-дибромфенил) метиламино]циклогексан-1-ол (в виде гидрохлорида) и изучение его характеристик.

Использовали амброксол фармакопейной чистоты. Для синтеза электродактивного вещества (ЭАВ) применяли молибдофосфорную кислоту квалификации ч.д.а., поливинилхлорид (ПВХ) использовали марки С-70, диоктилфталат (ДОФ) и циклогексанон – квалификации ч.д.а. ЭАВ использовали для изготовления ионоселективной мембраны и ИСЭ по методике описанной ранее [1]. Состав использованной ионоселективной мембраны (% по массе): 5 - ЭАВ, 40 - ПВХ, 55 - ДОФ. Для определения электродных характеристик изготовленного ИСЭ использовался иономер И-130 и электрохимическая ячейка, изображённая на схеме.

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Ag/AgCl | 0,1 M р-р  Ambr× HCl +  + 0,1 М р-р KCl | Ионоселек-тивная  мембрана | Исследуемый раствор | Насыщенный раствор  KCl | AgCl | Ag |

Изготовленные электроды обладали хорошими потенциометрическими характеристиками. Интервал линейности электродной функции находится в промежутке 1-4 рС, крутизна электродной функции близка к теоретическому значению (54 мВ для ФМК), время отклика составляло 5-10 с. Показано, что потенциал ИСЭ не изменяется в интервале рН 4 - 6. Определение амброксола в готовых лекарственных формах показало работоспособность созданного ИСЭ.

1. Холошенко Н.М., Рясенский С.С., Горелов И.П.//*Хим.-фарм. журн.*  2005. № 40(5). С. 54-56.

**Электромеханические свойства поли-α-нафтиламина от потенциала в среде неорганических и органических кислот**

Крылов А.А. (аспирант 4-го года обучения)

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

Ранее были показаны электромеханические свойства полианилинового актуатора, допированного различными анионами[1]. Интересно было бы проверить, обладают ли такими же свойствами другие полупроводниковые полимеры, аналоги полианилина. В качестве исследуемого вещества был выбран поли-α-нафтиламин (ПНА). В качестве среды были использованы растворы неорганических (соляная; серная; бромоводородная; фосфорная) и органических (моно-, ди- , трихлоруксусная; муравьиная; лимонная) кислот. На платиновую подложку с пленкой поли-α-нафтиламина подавался потенциал от -200 до 800 мВ, рис.

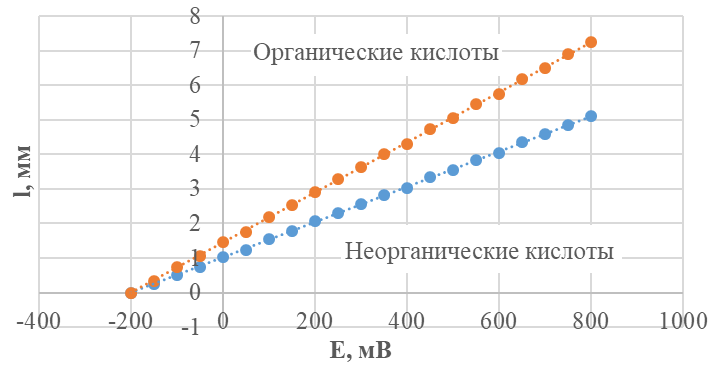


Рис. Отклонение положение пленки ПНА от потенциала

Отклонение положения среди неорганических кислот, так и среди органических кислот было близкое. Существенное отклонение можно наблюдать между органическими и неорганическими допантами. Очевидно, это связано с определенной гидрофобностью органических анионов, которая позволяет им «встраиваться» в слои полимерной пленки, вызывая её набухание.

1. Крылов А.А., Рясенский С.С., Феофанова М.А., Баранова Е.В. Электрохимический отклик полианилинового актуатора, допированного различными органическими анионами // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. 2018. № 4. С. 208-212.

**Твердые комплексы неодима и самария с цефазолином**

Крюков Т.В., Скобин М.И. (аспиранты 4-го года обучения)

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

Взаимодействием водных растворов хлоридов соответствующих редкоземельных элементов и натриевой соли цефазолина (NaCzl) были получены и выделены в твердом виде комплексные соединения цефазолина. Полученные соединения исследованы методом ИК-спектроскопии.

Цефазолин – антибиотик цефалоспориновой группы относящийся к первому поколению, так же он является антибиотиком кислотного типа и содержит одну карбоксильную группу [1]. Для проведения эксперимента использовали натриевые соли цефазолина (NaCzl) производства компании «Деко» г. Москва. Комплексы были получены в виде осадков в результате взаимодействия в нейтральном водном растворе хлоридов металлов и натриевой соли цефазолина в мольном соотношении 1:3.

Таблица

Данные ИК-спектроскопии

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Образец | Отнесение колебаний | | |
| ν( C=O) β-Лактам | ν(C=O) Амид | ν (C(O)O–)  (симм.) |
| NaCzl | 1762 | 1668 | 1389 |
| NdCzl | 1760 | 1679 | 1416 |
| SmCzl | 1760 | 1680 | 1416 |

Исследование полученных образцов методом ИК-спектроскопии показало, что в процессе получения комплексов химическая структура антибиотиков не претерпела изменений, так как ИК-спектры комплексов и соответствующей натриевой соли схожи между собой. При этом отмечается смещение полос поглощения валентных колебаний карбоксилатной группы, −C=O бета-лактамной и амидной −C=O, что можно расценивать как координацию этих групп с трехвалентными ионами этих металлов.

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

Отнесение полос валентных колебаний карбонильных групп

в ИК спектре натриевой соли цефуроксима

Кузнецова А.А. (студент, 5 курс)

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

Цефуроксим – цефалоспориновый антибиотик второго поколения, в медицине применяется в виде натриевой соли (NaCfur). В экспериментальном спектре NaCfur проявляются четыре близко расположенные интенсивные полосы поглощения валентных колебаний ν(C=O) амидной, бета-лактамной, карбаматной и карбоксилатной групп, однако литературных данных об отнесении полос найти не удалось.



Структурная формула NaCfur с указанием экспериментальных значений волновых чисел полос поглощения. В скобках указаны теоретически рассчитанные значения.

Отнесение полос поглощения проведено на основе результатов расчёта ИК-спектра NaCfur в программе Spartan 18 методом DFT/BLYP/6-31G\*+. Функционал существенно влияет на результаты DFT расчёта. Выбор функционала BLYP сделан на основе расчёта и сопоставления с экспериментальными данными ИК-спектров натрия ацетата, 2-пирролидона, N-метилацетамида и метилкарбамата с использованием функционалов BP86, BLYP, B3LYP, EDF1, EDF2, M06 и ωB97x-D. Эти молекулы можно рассматривать как структурные фрагменты молекулы NaCfur. Экспериментальный ИК-спектр NaCfur записан на приборе Bruker Equinox 55 для образца в виде таблетки с KBr.

**Количественное определение белков в молоке**

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

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

Как правило, аминокислоты в белках содержится в виде внутримолекулярных солей. Именно поэтому титрование щелочью невозможно без предварительного блокирования аминогрупп с помощью формальдегида. В ходе реакции формалин способствует затуханию основных свойств аминогрупп. Образующаяся при этом метиленаминокислота оттитровывается щелочью. Количество титруемых карбоксильных групп эквивалентно количеству связанных формальдегидом аминных групп [1].

Согласно методу Дуденкова [1], в коническую колбу вносят 20 мл исследуемого молока и 0,5 мл 1% раствора фенолфталеина. Титрование проводят 0,1 н. раствором щелочи до появления слабо-розового окрашивания, устойчивого в течение 30 секунд. Затем в эту же колбу добавляют 4 мл 40% формалина, прежде нейтрализованного раствором щелочи. При взбалтывании содержимого, окраска пропадает, после чего вновь титруют щелочью.

В качестве исследуемых образцов выбрали несколько торговых марок молока различного производителя: «Простоквашино», «Домик в деревне», «Агуша» и «Тема». Результаты исследования представлены в таблице:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Образец | Содержание белка, г | |
| Практическое | Теоретическое (на упаковке) |
| Простоквашино | 3,06 | 2,91 |
| Домик в деревне | 2,97 | 3,00 |
| Агуша | 3,26 | 2,90 |
| Тема | 3,16 | 3,00 |

В ходе проведенного анализа, было выявлено то, что содержание белка в исследуемых образцах немного отличаются, от значений, указанных на упаковке, но все они колеблются в допустимых значениях, установленных ГОСТом.

1. Горбатов К.К. Химия и физика молока и молочных продуктов. − СПб.: ГИОРД. 2012.

**Определение Fe2+ и Ni2+ при совместном присутствии**

Макарова Е.А. (студент, 4 курс)

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

В настоящее время железо и никель нашли широкое применение. Они входят в состав многих сплавов и содержаться в горных рудах. Поэтому часто возникает необходимость определения их при совместном присутствии.

В качестве объекта исследования была использована модельная смесь, содержащая Fe2+ и Ni2+ в виде соответствующих солей.

Количественное определение Fe2+ и Ni2+ проводили методом комплексонометрического титрования трилоном Б. Определение Fe2+ было проведено путём предварительного окисления до Fe3+. Для устранения влияния ионов Fe3+ на определение Ni2+, провели маскирование Fe3+ фторид-ионом. Результаты исследования приведены в таблице.

Таблица

Результаты определения Fe2+ и Ni2+ в модельной смеси

методом комплексонометрического титрования

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Ион | Объём иссл.  р-ра, мл | C  трилона Б, моль/л | Объём трилона Б, пошедшего на титрование, мл | С, моль/л | Взято, моль | Найдено, моль |
| Fe2+ | 10 | 0,05 | 1,06 | 0,0053 | 0,50∙10-4 | 0,53∙10-4 |
| Ni2+ | 10 | 10,04 | 0,0502 | 5,00∙10-4 | 5,02∙10-4 |

Из полученных результатов следует, что взятые и найденные значения находятся в хорошем соответствии, следовательно, данную методику можно использовать для количественного определения данных катионов при их совместном присутствии.

Ионные ассоциаты N,N-диметилбигуанида с гетерополикислотами

Перевозова В.И. (студент, 5 курс)

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

Получены малорастворимые ионные ассоциаты N,N-диметилбигуанида (BG) с анионами гетерополикислот: фосфорновольфрамовой (ФВК), фосфорно-молибденовой (ФМК), кремневольфрамовой (КВК), кремнемолибденовой (КМК) состава: (BG)2H7[P(Mo2O7)6]·3H2O, (BG)2H7[P(W2O7)6]·3.5H2O, (BG)3H8[Si(Mo2O7)6]·3H2O, (BG)3H8[Si(W2O7)6]·3.5H2O. Образцы были выделены в виде осадков белого (ФВК и КВК) и зеленого (ФМК и КМК) цвета. После промывания на фильтре холодной водой образцы были высушены при комнатной температуре и, затем, при 100°С в течение 3 часов в сушильном шкафу. Образцы исследованы методами ТГ/ДСК термического анализа на установке Netzsch STA 449 F3 Jupiter и методом ИК спектроскопии на приборе Bruker Equinox 55.



N,N-диметилбигуанид (метформин) широко используется в медицинской практике для лечения сахарного диабета. В лекарственных формах (таблетках) используется в виде гидрохлорида. Полученные ионные ассоциаты в дальнейшем будут исследованы как электродоактивные вещества химических сенсоров, предназначенных для анализа лекарственных форм метформина.

*Эксперименты выполнены на приборах Тверского регионального межведомственного центра коллективного пользования.*

**Применение полианилина модифицированного**

**гетерополикислотами типа Доусона для разработки**

**газовых сенсоров для определения водорода**

Радин А. С. (аспирант)

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

Стремительное ухудшение экологической ситуации, требующее развития альтернативных источников энергии, привело к развитию водородной энергетики, для эффективной выработки электрической и тепловой энергии с помощью топливных элементов. Развитие водородной инфраструктуры, из-за его высокой взрывоопасности, требует развития средств оперативного контроля его концентрации в рабочих зонах, что невозможно без развития средств автоматического контроля, в частности газоанализаторов, способных селективно определять концентрацию водорода в смесях с другими газообразными компонентами от нескольких ppm до объемных процентов.

Применяемые в современных газоанализаторах оперативного контроля электрохимические, полупроводниковые и термокаталитические газовые сенсоры во многом не удовлетворяют предъявляемым к ним требованиям по селективности, чувствительности, быстродействию, себестоимости и др. Для решения поставленной задачи, разработано чувствительное покрытие на основе полианилина, модифицированного вольфрамовыми гетерополианионами, обладающее высокой каталитической активностью. Легирование полианилина вольфрамовыми гетерополикислотами позволяет увеличить его чувствительность и селективность по отношению к различным газообразным компонентам, в частности и к водороду, а также химически стабилизировать гетерополисоединения в матрице полианилина.

Разработанный на основе полученного чувствительного покрытия резистометрический газовый сенсор, обладает высокой чувствительностью по отношению к водороду – минимально определяемая концентрация 10 ppm и может быть использован в стационарных или переносных газоанализаторах с принудительной подачей пробы для измерения водорода в широком диапазоне концентраций.

**Синхронный термический анализ комплекса [EuHep]·3H2O**

Скобин М.И., Крюков Т.В. (аспиранты 4-го года обучения)

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

В результате синхронного термического анализа удалось получить термические характеристики исследуемого комплекса. После анализа дериватограмме выделены 3 основные стадии: дегидратация, термодеструкция комплексного соединения и разрушение мономерного звена гепарина.

Удаление кристаллизационной воды сопровождается эндотермическим эффектом, максимум которого приходится на ≈ 120°С, данная температура соответствует максимальной скорости удаления воды. По данным анализа удалось определить, что комплексное соединение [EuHep] содержит 3 молекулы кристаллизационной воды.

Следующий пик на кривой ДСК характеризует термодеструкцию комплексного соединения [EuHep]. Максимум пика приходится на ≈ 180°С, при этой температуре по данным ИК-спектроскопии образуется преимущественно сульфат европия, и, соответственно, гепарин теряет свои сульфатные группы. Данная стадия начала деструкции мономерного звена гепарина.

При дальнейшем исследовании дериватограммы можно отметить образование множества экзотермических пиков, соответствующих деструкции в молекуле гепарина. В диапазоне от 270 - 420°С происходит разрыв C-O-C связей в каждой точке структуры высокомолекулярного гепарина. При температуре ≈ 600°С фиксируется сложный комплексный пик, характеризующий множество физико-химических процессов: дальнейшая деструкция углеродного скелета, окисление углерода, азота и серы до газообразных веществ, образование оксида европия.

В результате качественного анализа и расшифровке данных ДСК установлено, что при сжигания навески при 700°С остается только оксид европия. Данный факт был использован для уточнения количественного состава комплексов.

## Использование картриджа для твердофазной экстракции при подготовке пробы для определения полихлорированных бифенилов

Соколова А.Д. (магистрант 2-го года обучения)

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

Пробоподготовка имеет большое значение в ходе проведения анализа. Именно от ее правильности выполнения зависит исходный результат любого исследования. При определении полихлорированных бифенилов (ПХБ) в пищевых продуктах используется флоризил (силикат магния), применение которого требует его очистки и регенерации, что занимает значительное количество времени [1]. Поэтому нами было предложено вместо флоризила использовать картридж для твердофазной экстракции Strata с типом сорбента SDB-L (100 мкм, 260А, 500мг/6 мл) для ускорения процесса пробоподготовки и улучшения очистки экстракта. Это прочный полимерный сорбент, стабильный при рН от 1-14 с гидрофобной и ароматической селективностью по обращенно-фазовому механизму [2].

Благодаря данному картриджу удалось сократить время пробоподготовки, добиться более эффективного удаления загрязнителей. Уровень извлечения исследуемого вещества стал значительно выше, получен чистый и нещелочной экстракт, а также была понижена склонность к засорению и высыханию слоя сорбента.

# 1. Забелина О. Н. Анализ смесей полихлорированных бифенилов методом газовой хроматографии/ О. Н. Забелина, В. И. Салоутин, О. Н. Чупахин.// Журнал аналитической химии.― 2010.― Т 65.― № 11.― С. 1124–1134

2. МУК 4.1.1023-01.Изомерспецифическое определение полихлорированных бифенилов (ПХБ) в пищевых продуктах.― Введ. 15.06.2001.―М.: Федеральный центр госсанэпиднадзора Минздрава России, 2001.―20 C.

## Определение ионов меди и никеля при совместном присутствии

## методом бумажной хроматографии

Филиппова О.А. (студент, 5 курс)

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

Широкое применение в практике аналитической химии нашёл способ разделения с помощью хроматографии на бумаге. Метод широко применяют для разделения смесей, содержащих катионы металлов [1].

С целью определения ионов меди и никеля при совместном присутствии было проведено хроматографирование. На линию старта хроматографической пластины нанесли несколько проб различных растворов, содержащих медь и никель. Лист оставляли на воздухе пятнами вверх до их полного высыхания, затем его помещали в камеру с элюентом пятнами вниз и выдерживали камеру на воздухе 40 минут при температуре 18°С. За это время растворитель проходит расстояние от линии нанесения до почти верхнего края листа бумаги. При этом полностью разделяют медь и никель. Никель проявился с помощью этанольно-аммиачного раствора диметилглиоксима, а медь с помощью паров аммиака (которые тут же исчезают на воздухе). Метод был апробирован на модельной смеси и дал удовлетворительные результаты:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Взято (моль/л) | Найдено (моль/л) | S | Среднее значение |
| Ni 0.030 | 0.0318  0.0297  0.0308  0.0295  0.0309 | 0.00095 | 0.0305±0.0012 |
| Cu 0.035 | 0.0368  0.03  0.0305  0.0298  0.0308 | 0.00294 | 0.0316±0.0036 |

1. Методы обнаружения и разделения элементов. Практическое руководство / Под ред. Алимарина И.П. – М.: Изд-во МГУ, 1984, 207 с.

**Изучение ионного состава водных объектов**

**на территории Тверской области**

Шарапова Л.А. (магистрант 2-го года обучения)

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

Осуществлен химический анализ проб воды реки Волга в ее истоке, в районе впадения в неё реки Селижаровки и при впадении в неё реки Тьмаки в г. Твери [1].

Исследования показали, что вода имеет нейтральную реакцию и отличается низким содержанием солей. В истоке Волги отмечено высокое содержание железа, что характерно для болотных вод. В Волгу впадает вытекающая из озера Селигер река Селижаровка, почти наполовину пополняя Волгу селигерской водой. Приток характеризуются малым содержанием железа и повышенным, по сравнению с Волгой, содержанием солей. Это оказывает значительное влияние на химический состав воды реки Волга, делая её более минерализованной, но с меньшим содержанием ионов железа по сравнению с водой истока.

Повышение минерализации обусловлено вкладом сульфатов, хлоридов и гидрокарбонатов. Результаты исследований показывают, что от истока реки Волга до города Твери наблюдается некоторая трансформация химического состава воды, что обусловлено как природными, так и антропогенными факторами.

1. Л.А. Шарапова, В.М. Никольский. ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ В СОСТАВЕ ВОДЫ РЕКИ ВОЛГИ ОТ ИСТОКА ДО ТВЕРИ / Инновационные материалы и технологии: материалы Междунар. науч.-техн. конф. молодых ученых, г. Минск, 9–10 янв. 2020г. – Минск: БГТУ, 2020. С.576-579.

***Секция органической химии***

# Получение формазанатов меди (II) и кобальта (II)

Базутин А.С. (студент, 5 курс)

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

Формазаны представляют собой целый класс соединений, которые объединены наличием группировки –N=N–C=N–N–. Именно эта группа обусловливает многогранные свойства формазанов, а значит – и их применение в самых различных областях. Благодаря упомянутой выше группировке формазаны способны образовывать хелаты с ионами металлов. Такие комплексные соединения отличаются хорошими водо- и светостойкостью и поэтому применяются в качестве красителей и компонентов регистрирующих сред в CD- и DVD-дисках. Также их рассматривают в качестве катализаторов.

Синтез формазанатов проводился в несколько этапов. Реакцией взаимодействия 4-гидрокси-3-метоксибензальдегида и 2,4-динитрофенилгидразина получен гидразон альдегида. На следующем этапе реакцией азосочетания гидразона 4-гидрокси-3-метоксибензальдегида с фенилдиазоний хлоридом ситезирован 1-фенил-3-(4-гидрокси-3-метоксифенил)-5-(2,4-динтрофенил)формазан, структура которого приведена на рисунке.



Рис. 1-Фенил-3-(4-гидрокси-3-метокси-фенил)-5-(2,4-динтрофенил)формазан

Взаимодействием водных растворов солей CuSO4 и CoCl2 непосредственно со спиртовым раствором формазана получены формазанаты меди (II) и кобальта (II). Синтезированные соединения представляют собой твёрдые мелкокристаллические вещества. Строение исследуется с помощью ИК-спектроскопического анализа и определения температуры плавления.

**Синтез гетероциклических соединений по реакции Биджинелли**

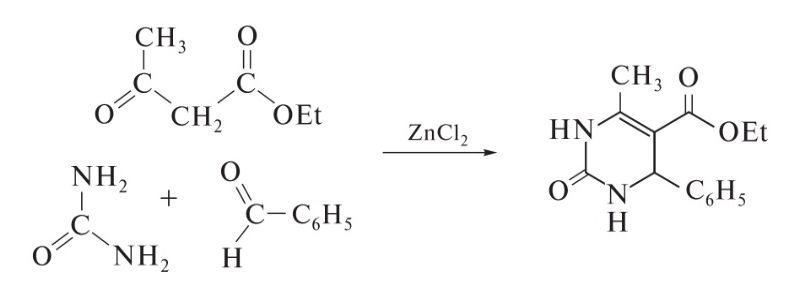
Барабанова А.А. (студент, 4 курс)

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

Гетероциклические соединения ­– органические соединения, которые содержат циклы и атомы других элементов помимо углерода. Разнообразие типов гетероциклов велико. Эти соединения имеют большое биологическое значение, они распространены в природе в форме витаминов, алкалоидов, пигментов и других компонентов клеток животных и растений и участвуют в образовании аминокислот, которые составляют белки. Они входят в состав нуклеотидов, нуклеиновых кислот.

В данной работе для получения гетероциклов использована реакция Биджинелли – трёхкомпонентная реакция между мочевиной, альдегидом и ацетоуксусным эфиром в присутствии катализатора (кислоты Льюиса, ионные жидкости).

Ниже представлена схема получения этилового эфира 1,2,3,4-тетрагидро-6-метил-2-оксо-4-фенилпирамидин-5-карбоновой кислоты с использованием ацетоуксусного эфира, бензальдегида и мочевины с катализатором обезвоженным хлоридом цинка.



Полученное соединение представляет собой твердое вещество желтого цвета. Определены основные физико-химические характеристики синтезированного соединения.

**Получение обратных эмульсий масла авокадо в воде**

Веролайнен В. А. (студент, 2 курс)

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

Косметические продукты на основе эмульсий масло/вода включают в себя огромный ассортимент: детские кремы, лечебные мази, ночные кремы для рук и ног, защитные кремы от непогоды, кремы для сухой и чувствительной кожи, ночные питательные кремы. Эмульсии стали широко использоваться благодаря тому, что состав позволяет объединить полярные и неполярные фазы в одном продукте. Это обеспечивает свободу выбора компонентов при составлении композиций.

Эмульсии типа вода/масло могут быть стабилизированы поверхностно-активными веществами (ПАВ), у которых низкое значение ГЛБ, обладающие высокой растворимостью в фазе масла. Так же известно, что использование смесей ПАВ с низкими и высокими числами ГЛБ для получения эмульсий оказывается очень эффективным и часто применяется на практике [1,2].

В работе в качестве модели для исследования было выбрано масло авокадо, синтанол OC-20, сорбитан моностеарат span 60 и их смеси. Обратные эмульсии получали методом температурной инверсии фаз. Обращение фаз определяли по скачку удельной электропроводности, измеренную кондуктометром Mettler Toledo SG7. Была исследована температурная инверсия фаз 50% эмульсии, содержащая 5% растворы span 60 и ОС-20. Измерения показали, что данная система имеет две точки инверсии: 34°С и 42°С.

1. К. Б. Холмберг К., Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных растворах, Я. Г.П., Ред., М: БИНОМ, 2015, С. 530.
2. А.В. Кульская, М.Ю. Лежнева, Разработка космецевтики – натуральной косметики // Актуальные проблемы науки и образования в области естественных и сельскохозяйственных наук. - Петропавловск: 2016. - С. 3-6.

**Получение алкилполигликозидов ферментативным способом**

Веселова А. В. (студент, 4 курс)

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

Поверхностно-активные вещества (ПАВ) давно используются в различных областях промышленности, благодаря своим уникальным свойствам. Поэтому синтез новых ПАВ с уникальными свойствами является важной и актуальной задачей.

Алкилполигликозиды принадлежат к неионогенным поверхностно-активным веществам, проявляют мягкие дерматологические моющие, пенообразующие, очищающие и смачивающие свойства, благодаря чему применяются в косметологии, медицине, фармацевтической промышленностях. Так же этот класс соединений является хорошо биоразлагаемым, что очень важно в настоящее время. Благодаря комплексу указанных свойств, алкилполигликозиды относятся к «мягким» поверхностно-активным веществам.

Алкилполигликозиды являются простыми эфирами, которые образованны длинноцепочечными спиртами и фрагментами углеводов (мальтозы, глюкозы и др.) [1]. В работе были рассмотрены существующие способы получения алкилполигликозидов и выбран наиболее эффективный – ферментативный способ. Полученные октил- и децилполигликозиды представляют собой желтоватые вязкие жидкости, которые плохо растворяются в этаноле и практически не растворяется в диэтиловом эфире. Состав и строение полученных соединений подтверждены данными ИК-спектроскопии.

1. Прохорова Г.В. Коллоидно-химические свойства смесей анионных ПАВ с алкилполигликозидами.: дис. ... на соискание ученой степени канд. хим. наук. - М., 2012. - 116 с.

**Высокодисперсные системы, как методы очистки воды**

Взорова О.Ю. (магистрант 2-го года обучения)

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

До сих пор промышленные сточные воды не очищают от масел и загрязнений гидрофобной природы, а разбавляют большим количеством воды с добавками поверхностно-активных веществ и отправляют на очистные сооружения. Одним из перспективных методов очистки сточных вод от масляных загрязнений является метод ультрафильтрации с использованием мембранного фильтра [1].

В настоящей работе в качестве модели исследовали систему, содержащую вакуумное масло и водные растворы оксиэтилированного спирта ОП-10. Для нахождения температуры инверсии фаз (ТИФ) прямые эмульсии масла в водных растворах эмульгатора с концентрациями 25-50% подвергали нагреву в термостате с шагом в 2. Температуру инверсии фаз подтверждали с помощью определения эквивалентной электропроводности эмульсий масла в водных растворах ОП-10 [2]. Обращение фаз проводили с использованием красителя Судан III. Переход прямых эмульсий в обратные изучали с помощью метода электронной спектроскопии.

Найденные в работе температуры инверсии фаз системы вакуумное масло – растворы ОП-10 могут быть использованы для очистки от гидрофобных загрязнений сточных вод на предприятиях металлургической и машиностроительной промышленности.

1. Голберг, В.М. Техногенное загрязнение природных вод углеводородами и его экологические последствия / В.М. Гольберг, В.П. Зверев, А.И. Арбузов. - М.: Наука, 2001 - 125 с.

2. Холмберг К., Йенссон Б., Кронберг Б., Линдман Б. Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных растворах/ Холмберг К.; под ред. Ямпольской Г.П. – М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2015. – 530 с.

**Исследование свойств полученных цвиттер-ионных**

**поверхностно-активных веществ на основе N,N-диэтилэтаноламина**

Дубов М.О. (студент 5 курс)

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

В данной работе проводился синтез и изучение свойств цвиттер-ионных поверхностно-активных веществ (ПАВ). Синтез осуществляли в две стадии. Этерификацию амина проводили декановой и октановой кислотами   
при температуре 150°C в присутствии цеолита. Полученные эфиры очищали с помощью вакуумной перегонки. На второй стадии процесса проводили нуклеофильное присоединение полученного эфира к акриловой кислоте при комнатной температуре. Впоследствии, для данных веществ исследовано поверхностное натяжение, определен показатель преломления, измерена удельная электропроводность их водных растворов, а также пенообразующая способность.

Строение полученных соединений подтверждали качественными реакциями на катион аммония и данными ИК-спектроскопии.

Критическую концентрацию мицелообразования (ККМ) определяли тремя способами: по изотермам поверхностного натяжения, кондуктометрическим и рефрактометрическим методами. Для всех измерений использовались растворы различных концентраций. Диапазон концентраций от 1⋅10-1 до 1⋅10-5 моль/л. Для производных декановой и октановой кислот данный параметр соответственно равен С=0,0047 моль/л и С=0,01 моль/л.

При изучении пенообразующей способности было выявлено, что данные ПАВ, при достижении ККМ, способны создавать пену стабильную свыше 30 минут и кратностью равной 3 и 2,8 соответственно для производных от декановой и октановой кислот.

**Металлокомплексы меди с производными азогидразонов**

Кафтанов А.Д. (магистр 1-го года обучения)

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

Азогидразоны (формазаны) широко применяются в аналитической химии как комплексообразователи, при определении таких металлов, как литий, таллий, галлий. Комплексы азогидразонов с металлами применяются как свето- и термостойкие красители для полиэфирных и полиамидных волокон, а также шерсти. С помощью различных ионов металлов и заместителей в формазане возможно получить цвета от желтого до темно-лилового [1]. Представленная работа посвящена получению комплексного соединения меди (II) с производными азогидразона.

Взаимодействием бензальдегида с 2,4-динитрофенилгидразином получен его фенилгидразон. Реакцией азосочетания соли диазония и 2,4-динитрофенилгидрозона бензальдегида синтезирован 1,3-дифенил-5-(2,4-динитрофенил)-азогидразон. После чего получено его комплексное соединение с медью (II), схема синтеза представлена ниже:



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

1. Прогресс в химии формазанов: Синтез свойства применение: Монография. / Б.И. Бузыкин, Г.Н. Липунова, И.Г. Первова. М.: Научный мир, 2009. - 295с.

**Влияние различных факторов устойчивости на стабильность**

**суспензий ментола в воде**

Ковальчук К.М. (студент, 4 курс)

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

Суспензии позволяют широко варьировать потребительские качества корригирующими веществами, маскирующими неприятный вкус и запах лекарств. Они обладают возможностью регулировать продолжительность действия лекарственных препаратов путём изменения величины частичек медикаментозного средства. Основным недостатком, препятствующим увеличению количества аптечных суспензий, является их нестабильность. В качестве стабилизирующих реагентов используют неионогенные поверхностно-активные вещества (НПАВ) и низкомолекулярные электролиты.

В работе в качестве модели для исследования был выбран ментол. Для составления синергических смесей использовали сорбитан, твин-80 и синтанол ДС-20. Для всех НПАВ была определена температура помутнения и проведена очистка от полиэтиленгликолей. Стабилизирующее действие коллоидных ПАВ определяется их способностью адсорбироваться на межфазной поверхности, образуя адсорбционные пленки [1]. В связи с этим было исследовано влияние каждого стабилизатора на агрегативную устойчивость суспензии. Для этого была проведена оценка качества приготовляемой суспензии с помощью исследования таких факторов, как однородность частиц дисперсной фазы, высота отстоявшегося слоя, ресуспендируемость и седиментативная устойчивость. Таким образом, было установлено, что наиболее эффективным стабилизирующим действием на суспензию ментола обладает твин-80.

1. Сумм Б. Д. Основы коллоидной химии/ Б.Д. Сумм. – М.: Академия, 2007. – 240 с.

**Синтез и свойства ионных жидкостей на основе**

**бис-четвертичных солей пиридиния**

Кузьмина В.А. (студент, 5 курс)

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

Ионные жидкости (ИЖ) – это низкотемпературные расплавы органических солей с температурой плавления ниже комнатной, которые состоят из органических катионов и неорганических или органических анионов.

В данной работе в качестве объектов исследования были синтезированы бис-четвертичные соли пиридиния с различной длиной алкильной цепи (схема), и на их основе были получены ионные жидкости с анионами (BF4‑, PF6‑, N(CN)2‑). Исходные бис-четвертичные соли пиридиния были получены в ходе реакций кватернизации пиридина дигалогенпроизводными. Ионные жидкости получали по реакции метатезиса из бис-четвертичных солей пиридиния и соответствующих неорганических реагентов (схема):

,

где n=2-4; Hal: Cl, Br; X-: BF4‑, PF6‑, N(CN)2‑.

Состав и структура полученных ионных жидкостей были подтверждены данными ИК-спектроскопии. Важнейшим вопросом химии ионных жидкостей является их состояние в растворах. ИЖ могут полностью или частично диссоциировать на ионы. Для изучения поведения ИЖ нами проведено кондуктометрическое исследование растворов ИЖ. В качестве растворителя был выбран ацетонитрил. Для всех ионных жидкостей были получены зависимости эквивалентной электропроводности от концентрации в диапазоне 10-2-10-4 моль/л.

**Синтез алкилсульфосукцинатов на основе малеинового ангидрида**

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

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

Алкилсульфосукцинаты – класс анионных поверхностно-активных веществ (АПАВ), являются хорошими смачивателями, пенообразователями, пеногасителями, эмульгаторами и деэмульгаторами, которые применяются в текстильной, металлообрабатывающей, нефтяной промышленностях; для изготовления различных косметических и моющих средств, производства лакокрасочных материалов и латекса.

В настоящей работе были синтезированы и исследованы алкилсульфосукцинаты с общими формулами:

RCOHNCH**2**CH**2**OCOCH(SO**3**Na)CH**2**COONa

RCON(CH**2**CH**2**OCOCH(SO**3**Na)CH**2**COONa)2,

где R = C**11**H**23**, C**13**H**27**, C**17**H**35**.

Соединения получены с использованием промышленного малеинового ангидрида и синтезированных моно- и диэтаноламидов жирных карбоновых кислот. Реакции протекают по схемам (I) и (II):

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| (I) | (II) |

Достоинствами полученных соединений являются: доступность исходных веществ, высокие выходы продукта, нетоксичность, биоразлагаемость, большое разнообразие сфер применения.

Строение синтезированных соединений подтверждено данными ИК-спектроскопии. Исследованы коллоидно-химические свойства водных растворов полученных веществ.

**Синтез и свойства ионных жидкостей**

**на основе четвертичных солей N-алкилпиридиния**

Малякова А.А. (студент, 4 курс)

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

Ионные жидкости (ИЖ) представляют собой класс солей, являющихся жидкостями с низкими температурами плавления (ниже 100°С). В современной химии ионные жидкости весьма широко используются в качестве растворителей, катализаторов, электролитов для аккумуляторных батарей. Большой интерес представляет изучение влияния структуры органического катиона и природы аниона в составе ионной жидкости на их термические свойства.

Синтезированы ИЖ с гексафторфосфат-анионом [PF6]− и катионом N-алкилпиридиния с различной длиной алкильных заместителей (CH3, C4H9, C8H17, C10H21). Прекурсорами для получения гексафторфосфатов по реакции метатезиса выступали галогениды N-алкилпиридиния, которые в свою очередь были получены по реакции нуклеофильного замещения между пиридином и алкилгалогенидами. Схемы реакций представлены ниже. Синтезированные соединения представляют собой жидкости или низкоплавкие твердые вещества белого или кремового цветов. Хорошо растворимы в полярных органических растворителях (спирт, ацетон, ацетонитрил), плохо растворимы в воде. Все синтезированные соединения охарактеризованы данными ИК-спектроскопии. Определены основные физико-химические константы.

,

где R: CH3, C4H9, C8H17, C10H21. Hal: I, Cl, Br.

Для оценки термической стабильности ионных жидкостей было изучено их поведение в температурном интервале 25-500 0C в воздушной атмосфере.

**Получение 1-фенил-3-(2-гидроксифенил)-5-(2,4-динитрофеил) формазана**

Медведева О. А. (магистрант второго года обучения)

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

К производным гидразина относятся формазаны – азогидразоны муравьиной кислоты, которые являются 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.

Получение азогидразона проводили в несколько этапов. На первой стадии 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. На следующей стадии реакцией азосочетания получен формазан – 1-фенил-3-(2-гидроксифенил)-5-(2,4-динитрофенил)-азогидразон.



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

**Получение сопряженных азинов путем конденсации**

**ароматических альдегидов с гидразином**

Петрова Е.Н. (студент, 4 курс)

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

Азины представляют собой класс органических веществ, получаемые при N‑нуклеофильном взаимодействии гидразина с избытком карбонильного соединения. Благодаря наличию в молекулах азометиновой группы C=N, их можно отнести к основаниям Шиффа. Они востребованы в медицине в качестве антиоксидантных, противовоспалительных, противоопухолевых и противомикробных веществ [1].

Схема конденсации гидразина с избытком фурфурола и салицилового альдегида:





Происходит образование азинов с сопряженной π‑системой. Полученные соединения представляют собой твердые вещества желтого цвета, обладающие оранжево-желтой флуоресценцией в УФ-свете. Температуры плавления азина фурфурола и салицилальдазина 115°С и 214°С, соответственно. Азин фурфурола растворяется в ацетоне, хлороформе, этиловом спирте; салицилальдазин – только в толуоле при нагревании.

1. Wazir, J. Synthesis and characterization of salicylaldazine and its metal (II) complexes derived from metal (II) chlorides / J. Wazir. // International journal of engineering works. – 2014. – T.3. – № 24. – С. 1-4.

**Исследование пенообразующих свойств смесей**

**сульфанола и неионогенных поверхностно-активных веществ**

Просяник Ю. А. (студентка, 4 курса)

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

Пенообразователи получили широкое применение в пожаротушении. С их помощью значительно сокращаются расходы воды, и появляется возможность тушения пожаров больших площадей. В литературе приводится информация о пенообразующих свойствах отдельных поверхностно-активных веществ, однако все большее значение приобретают исследования взаимного влияния смесей поверхностно-активных веществ на их физико-химические свойства.

Стабильные пены характеризуются пенообразующей способностью и устойчивостью. Мерой пенообразующей способности является объем пены сразу после ее образования, а мерой устойчивости – время жизни образовавшейся пены [1].

В данной работе были исследованы свойства смесей на основе сульфанола, полиэтиленгликоля-100 (ПЭГ-100), полиэтиленгликоля-115 (ПЭГ-115) и НПАВ ОП-4. Для оценки воздействия ОП-4, ПЭГ-100, ПЭГ-115 на свойства раствор сульфанола были исследованы пенообразующие способности отдельных компонентов и их смеси: пеноустойчивость, кратность пены. Было установлено, что по сравнению со смесью, содержащей ПЭГ-115, смесь с ПЭГ-100 обладает более сильными пеногасящими свойствами: устойчивость пены уменьшилась в четыре раза. Смеси с ОП-4 наоборот показали хорошие пенообразующие свойства.

1.Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных растворах/ Холмберг К., Йенссон Б., Кронберг Б., Линдман Б. М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2015. 530 с.

**Синтез и термическая стабильность тетрафторборатов N-алкилпиридиния**

Рассказова Н.Ю. (студент, 4 курс)

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

В настоящее время повышается востребованность использования ионных жидкостей в качестве растворителей в области «зеленой» химии. Они обладают уникальными физическими и химическими свойствами: нелетучесть, низкая температура плавления (<100°С), давление паров близка к нулю, высокая электропроводность. Исследование ионных жидкостей является актуальной задачей, так как их свойства еще мало изучены, и нет четких закономерностей влияния их структуры на свойства.

Получены четвертичные соли N-алкилпиридиния по реакции нуклеофильного замещения (схема 1). По реакции метатезиса (схема 2) получены тетрафторбораты N-алкилпиридиния, с различной длиной алкильных заместителей: CH3, C4H9, C8H17, C10H21. Полученные соединения представляют собой жидкости или низкоплавкие твердые вещества белого или кремового цветов. Хорошо растворимы в полярных органических растворителях (спирт, ацетон, ацетонитрил), плохо растворимы в воде. Все синтезированные соединения охарактеризованы данными ИК-спектроскопии.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |
|  | (2) |

Для оценки температурного интервала, в котором возможно использование полученных ионных жидкостей, изучена их термическая стабильность в воздушной атмосфере в температурном интервале 25-500 0C. Установлено, что все тетрафторбораты стабильны до 200-250 0C и разлагаются в несколько стадий в интервале 230-350 0C.

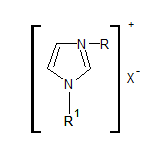
**Синтез и бактерицидная активность четвертичных солей имидазолия**

Смирнова К.А.(магистрант 2-года обучения)

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

Четвертичные аммониевые соединения (ЧАС) вошли в медицинскую практику в качестве [дезинфекционных средств](http://www.ramtec.ru/dezinfektsija1/category/mediinskie_chrezhdeniya.aspx) в 30-е годы прошлого века. Благодаря низкой токсичности и хорошим моющим свойствам препараты на основе ЧАС широко применялись для обработки поверхностей и инструмента. Благодаря им, совместились процессы дезинфекции и предстерилизационной очистки в один процесс, стало возможным проводить дезинфекцию помещений в присутствии людей.

В данном сообщении представлены результаты исследования биологической активности синтезированных четвертичных солей имидазолия общей формулы

где R: CH3; C4H9; C10H21; C12H25.

R1: CH2C6H5; CH3

X: Br; BF4; Cl; I.

Для получения четвертичных солей имидазолия использовали реакцию алкилирования в условиях межфазного катализа.

Строение полученных соединений было подтверждено данными ИК-спектроскопии, проба Бейльштейна положительна, рассчитаны величины Rf по данным ТСХ (элюент был составлен нами). Синтезированные соединения были исследованы в качестве бактерицидных препаратов. Исследования проведены в «ООО Институт лабораторной диагностики» г.Тверь. Антибактериальную активность образцов оценивали по диаметру зон задержки роста тест-штаммов в мм. Антимикробную активность проявляют четвертичные соли имидазолия, причем было замечено, чем больше длина радикала, тем больше биологическая активность. Наибольшую биологическую активность проявляет 1-метил-3-додецилимидазолийтетрафторборат.

**Влияние природы катиона на спектральные характеристики тетрахлорпалладата четвертичного аммония**

Суворова А. М. (студент, 5 курс)

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

В настоящее время широкое применение в органическом синтезе находят ионные жидкости (ИЖ) с ионами переходных металлов – металлсодержащие ИЖ с комплексным металлатным анионом, которые являются твердыми веществами при комнатной температуре. Металлсодержащие ИЖ в химических реакциях могут служить катализаторами или реакционной средой, помимо этого они проявляют магнитные, электрические и другие свойства.

В данной работе металлатные комплексы получены двумя способами: реакцией кватернизации при взаимодействии хлоридов аммония и пиридиния с PdCl2 (1) и реакцией метатезиса между бромидами и иодидами исходных четвертичных солей и Na2PdCl4 (2):

|  |  |
| --- | --- |
| 2RCl + PdCl2 → R2PdCl4 | (1) |
| 2R+Hal- + Na2PdCl4 → R2PdCl4 + 2NaHal | (2) |
| где R: (CH3)4N; (C2H5)4N; (C2H5)3NC3H7; (C2H5)3NCH2C6H5; (CH3)3NC16H33; | |
| C5H5NC4H9; C5H5NC10H21; C5H5NC16H33. | |

В работе изучены электронные спектры металлатных комплексов в УФ и видимой областях в сравнении со спектрами четвертичных солей и Na2PdCl4. Спектры сняты в ацетонитриле при концентрации 10-4 моль/л.

Взаимодействия в ионной паре показывает смещение полос поглощения в катионе и анионе. В видимой области наблюдается поглощение при 430 нм, характерные для PdCl4-2 аниона. При замене неорганического катиона на органический наблюдается батохромный сдвиг λmax в катионе. Влияние аниона PdCl4-2 наибольшим образом наблюдается для катиона пиридиния, затем бензильного катиона, и в меньшей степени для аммониевых катионов.

**Синтез четвертичных солей N-алкилпиперидиния**

Тараскина М.Ю. (студент, 4 курс)

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

Фрагменты пиперидина, содержащиеся во многих органических соединениях, обладают достаточно высокой физиологической активностью, поэтому широко применяются в медицинской практике в качестве анальгетиков и анестетиков, нейролептиков и анальгетиков. Исследованные соединения пиперидина применяют для стабилизации минеральных и синтетических масел [против окисления](https://www.chem21.info/info/730617), в качестве фунгицидов, ингибиторов коррозии в различных средах. Известно, что большинство N-алкильных производных пиперидина обладают ядовитым свойствами, однако его соли не отличаются ядовитостью, чем и представляют интерес как бактерицидные препараты широкого спектра действия. В настоящей работе получены соли N-алкилпиперидиния алкилированием алкилгалогенидами в присутсвии ацетона в соотношении 2:1 по схеме (I), приведенной ниже:



R=CH3, CH2COOC2H5, X=Cl, I.

N-алкилпиперидин очищали перегонкой при атмосферном давлении. Кватернизацией N-алкилпиперидина получены четвертичные соли по схеме(II):



R= CH2CH2CN, CH2C6H5, C16H33, X=Cl.

Четвертичные соли представляют собой кристаллические вещества, хорошо растворимые в воде. Соединения охарактеризованы данными ИК-спектроскопии, тонкослойной хроматографии. Проба Бейльштейна во всех случаях положительная.

**Влияние природы ионных жидкостей**

**на размер квантовых точек сульфида цинка**

Травников Н.Ю. (магистрант 2-го года обучения)

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

Сульфид цинка относится к наиболее распространенным и хорошо известным полупроводниковым материалам, которые излучают в видимой области спектра при оптическом или электрическом возбуждении. Интерес к таким соединениям постоянно растет на протяжении последних двух десятилетии из-за изучения так называемых квантовых точек, то есть наноразмерных кристаллов, обладающих уникальными оптическими свойствами.

В настоящей работе проведено исследование влияния концентрации и природы ионных жидкостей на размеры наночастиц сульфида цинка в золях. В качестве ионных жидкостей были использованы гексафтофросфаты и тетрафторбораты N-алкипиридиния в растворе ацетонитрила. Для оценки среднего размера наночастиц полупроводника по величине сдвига края фундаментального поглощения спектральным методом были записаны спектры поглощения в УФ-области золей сульфида цинка. Для золей сульфида цинка полученных в растворах гексафторфосфата N-додецилпиридиния, величина среднего размера наночастиц возрастает с ростом концентрации ZnS в золе, о чем свидетельствует смещения полос поглощения в спектрах при увеличении концентрации прекурсоров. Поэтому, можно говорить о доращивании наночастиц при добавлении очередных порций реагентов. С другой стороны, рост размера относительно не велик, т.е. вероятнее всего одновременно происходит образование и рост новых частиц, на что указывает увеличение интенсивности поглощения. Таким образом, для получения наночастиц сульфида цинка с минимальным отклонением размеров наночастиц целесообразно использование 20%-ного раствора ионной жидкости – гексафторфосфата N-додецилпиридиния в ацетонитриле.

**Синтез и свойства ионных жидкостей**

**на основе триэтиламина и 3-метилпиридина**

Ушанова О.С. (студент, 5 курс)

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

Ионные жидкости (ИЖ) - это расплавы органических солей, находящиеся в жидком состоянии в широком интервале температур, в ряде случаев ниже комнатной. Наиболее важными характеристиками ИЖ являются высокая полярность, ионная проводимость, низкая температура плавления и широкий интервал жидкого состояния, высокая термическая стабильность, способность растворять комплексы металлов, соли, органические вещества и газы. Изучение взаимосвязи структура-свойство для ионных жидкостей является актуальной задачей. В настоящей работе были получены ионные жидкости на основе бис-четвертичных солей триэтиламина и 3-метилпиридина с различной длинной алкильного заместителя (n = 2-4). В качестве анионов выступали тетрафторборат- и гексафторфосфат-анионы (BF4-, PF6-). Исходные бис-четвертичные соли были получены по реакции нуклеофильного замещения триэтиламина и 3-метилпиридина (γ-пиколин) с различными алкилгалогенидами:



Ионные жидкости синтезированы по реакции метатезиса:



где Hal: Cl-, Br - ; n = 2-4.

Полученные соединения представляют собой вещества белого или жёлтого цвета, хорошо растворимые в полярных органических растворителях (спирт, ацетон, ацетонитрил). Структура ионных жидкостей подтверждена данными ИК-спектроскопии. Чистота подтверждена ТСХ.

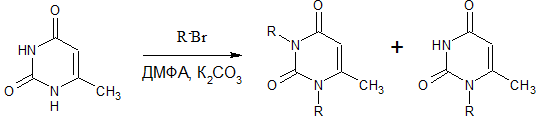
**Изучение реакции алкилирования 6-метилурацила**

Чигина М.Д. (студент, 5 курс)

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

Производные урацила, проявляющие свои снотворное, анаболическое, противоязвенное, противовоспалительное, противовирусное, антиоксидантное, антикатаболическое и другие свойства, имеют обширную фармакологическую применяемость. В настоящее время известны не все возможные действия подобных веществ, поэтому в настоящее время является актуальным не только синтез новых соединений, но и анализ и усовершенствование уже известных методов. Целью работы является выявление наиболее эффективных условий реакции алкилирования 6-метилурацила и сравнение алкилирующей способности галогеналканов.

Синтез проведен по схеме:

  
где R= C4H9, C8H17.

Проведен синтез моно- и диалкил производных 6-метилурацила в среде диметилформамида (ДМФА) с помощью катализаторов тетрабутиламмонийбромид (ТБАБ) / тетраэтиламмонийбромид (ТЭАБ) при взаимодействии с бромбутаном и бромоктаном. Полученные смеси веществ были разделены экстракцией хлороформом при различных значениях рН.

Соединения представляют собой твердые вещества. Исследованы физические и химические свойства синтезированных соединений: температура плавления и растворимость. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопического анализа.

**Синтез четвертичных солей N-алкилморфолиния**

Шторих К.А. (студент, 4 курс)

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

Морфолин относится к важнейшим шестичленным неароматическим циклам с двумя гетероатомами. N-алкилморфолины и их четвертичные соли представляют интерес как ионнные жидкости, КПАВ, ингибиторы коррозии.

В настоящей работе получены четвертичные соли N-алкилморфолиния алкилированием морфолина с алкилгалогенидами в соотношении 2:1 (реакция I) и алкилированием нитрилами в соотношении 1:1 (реакция II).





N-алкилморфолины очищали перегонкой при атмосферном давлении и в вакууме. Кватернизацией N-алкилморфолинов получены четвертичные соли (реакция III).



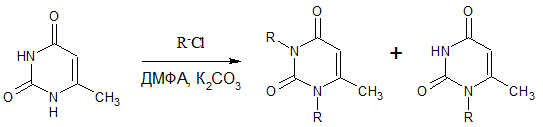
Четвертичные соли N-алкилморфолиния представляют собой кристаллические вещества, хорошо растворимые в воде. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопии, чистота продукта подтверждена данными тонкослойной хроматографии, наличие галогена доказано положительным результатом пробы Бельштейна.

**Синтез производных 6-метилурацила**

Шубин А.Д. (студент, 5 курс)

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

Замещенные урацила обладают разнообразными биологическими свойствами и успешно используются во многих областях медицины. Так, ряд производных пиримидина используется в медицинской практике в качестве лекарственных средств, проявляющих противоопухолевое, противовоспалительное, антиоксидантное, анаболическое, противоязвенное, антикатаболическое и другие виды действия. Широкий спектр фармакологической активности существенным образом определяется их структурным сродством к эндогенным пиримидиновым основаниям, играющих важную роль в механизмах обмена веществ и наследственности. Целью работы является ацилирование 6-метилурацила с целью синтеза новых биологическиактивных соединений, стимулирующих регенерацию тканей. Синтез проведен по схеме:

  
где R= НОС6Н4СО, ClOCC2H4CO.

Ацилирование 6-метилурацила проведено хлорангидридами салициловой и янтарной кислот в среде диметилформамида (ДМФА) с использованием комплекса межфазного катализатора тетрабутиламмонийбромида (ТБАБ) и K2CO3. Смесь веществ разделена с помощью экстракции хлороформом при различных значениях рН. Синтезированные соединения очищены перекристаллизацией.

Исследованы физические и химические свойства синтезированных соединений: температура плавления и растворимость. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопии.

**Определение точки Крафта и исследование свойств**

**синтезированных катионных ПАВ на основе 2-диметиламиноэтанола**

Ярмак Д.В. (студент, 5 курс)

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

Настоящая работа посвящена синтезу катионных ПАВ из класса ЧАС на основе 2-диметиламиноэтанола (ДМАЭ) с последующим определением критической концентрации мицеллообразования (ККМ), размера частиц в разных температурных условиях и точки Крафта с целью установления оптимальных условий для практического использования ПАВ.

Для определения ККМ и точки Крафта полученных ПАВ использовался кондуктометрический метод. Значения электропроводности устанавливались при разных температурах в диапазоне от 13 до 39°С. Наблюдаемые значения ККМ варьируются от 5,7⋅10-3 до 7,1⋅10-3 моль/л, при этом с увеличением температуры ККМ уменьшается, что согласуется с известной температурной интерпретацией ККМ для ионных ПАВ. На основании полученных данных по электропроводности установлена величина точки Крафта, равная 20°С, что определяет нижний температурный интервал для данного класса соединений.

Методом динамического светорассеяния (ДСР) определен размер частиц в растворах ПАВ с концентрацией на порядок ниже, чем концентрация ККМ, с целью сохранения монодисперсности системы. При увеличении концентрации размер молекул уменьшается от 199,9 нм до 151,4 нм. Прослеживается зависимость между размером частиц и временем приготовления раствора (свежеприготовленные растворы дают меньший показатель). Увеличение температуры растворов ПАВ приводят к небольшому увеличению размеров частиц вне зависимости от концентрации раствора.

***Секция физической химии***

**Корреляции «структура-свойство» алифатических аминов.**

**Топологический подход**

Аньшакова А.А. (студент, 5 курс)

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

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

В работе обсуждены возможности теоретико-графового подхода в построении рабочих схем расчёта и прогнозирования аминов. Были выведены аддитивные схемы расчета в разных приближениях. Так втретьем приближенииполучаем:

*Р*= *р1*bСС+*р*’*1*bСN+*p*2ГСС+*p*2*’*ГCN+*p*2\**’*ГNN *+R*CCC+ *R’*CCN+ *R”*CNN+

+*R\**NNN+*p*3CC+*p*3*’*CN+*p*3*\**NN+*p*4CC+*p*4*’*CN+*p*4*\**NN  .

Здесь *p*1,*p*2,*p*3, *p*4 – соответственно число путей (рёбер) длины один, два, три и четыре; *R –* число троек смежных рёбер; Гcc,cc, cc, -эффективные взаимодействия пар атомов соответственно через один атом, два, три атома. По данной схеме проведены численные расчеты термодинамических свойств аминов, согласующиеся с экспериментом. Получены новые ранее, неизвестные значения. В работе также были исследованы зависимости вида *Р*=*f*(ТИ) и графические зависимости «Свойство – топологический индекс», «Свойство – номер изомера» и «Топологический индекс – номер изомера». Выявлены уравнения, отвечающие наиболее тесной корреляционной связи между термодинамическими свойствами аминов и ТИ. Показано, что в одних случаях наблюдается симбатное изменение свойства *Р* и ТИ, например, fН0298(г) и *W,* S0298(г) , fG0298(г) и индексов *W* и *Н,*  С0р (г, 298) и *J* для изомеров C3H9N , что свидетельствует о хорошей корреляции между *Р* и ТИ. С увеличением числа изомеров корреляции между *Р* и ТИ усложняются. Это необходимо учитывать при аналитическом изучении зависимостей «Свойство – ТИ».

**Корреляции «структура-энтальпия образования» тиоэфиров**

Багиров Т.Л. (студент, 4 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 − энтальпия образования» в тиоэфирах.

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи: оценка и анализ экспериментальных данных по энтальпии образования исследуемых соединений; построение расчётных схем и проведение численных расчетов; построение и анализ графических зависимостей «энтальпия образования – степень замещения». Для этого в работе применялись – феноменологические методы, методы статистического анализа и линейной алгебры.

В работе проведена оценкасостояния численных данных по энтальпии образования тиоэфиров, выявлены отдельные закономерности: f*Н*0298(г) зависит от длины цепи молекулы, причем для гомологов аналогичного строения эта зависимость носит линейный характер, что свидетельствует о постоянном энергетическом вкладе СН2-группы; при увеличении длины цепи молекулы f*Н*0298(г) увеличиваются; разности энергий между структурными изомерами тиоэфиров достигают 19 кДж/моль, причем наибольшие значения fН0298(г) имеют разветвленные тиоэфиры.

В работе выведены расчётные схемы. Так для тиоэфиров в четвёртом приближении имеем :

*Р*(с*n*н2*n*+1)2S=hсс*pс-с*+ hсs*pс-s*+ hсн*pс-н* +*х*сс1Гcc+*х*сs1Гcs + *х*ссс1ccc+*х*ссs1ccs *+*

+ *х*сс2*cc*+*х*сs2*cs*+ *х*сс3*cc* +*х*сs3*cs+х*сс4*νcc*+*х*сs4*νcs*

По приведенной формуле проведён численный расчёт энтальпии образования ряда тиоэфиров. Рассчитанные величины, в общем, вполне согласуются с экспериментальными.

**Энергия Гиббса алифатических альдегидов. Топологический подход**

Брянцев Д.В. (магистрант 1-го года обучения)

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

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

Проанализированы и выбраны для построения корреляций «структура–свойство» наиболее подходящие топологические индексы.

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

*Рсnн2nО=hссp1+hсоp’1 +хсс1р2+хсо1р’2+хссс1 R+*

+*х*сс2*p3*+*х*со2*p’3*+*х*сс3*p4*+*х*со3*p’4*+*х*сс3*p5*+*х*со3*p’5*

Здесь *p*1,*p*2,*p*3, *p*4, *p*5 – соответственно число путей длины один, два, три, четыре и пять; *R –* число троек смежных рёбер.

По полученным формулам проведён численный расчёт энергии Гиббса простых 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 энергией Гиббса и ТИ, построены и проанализированы графические зависимости «Энергия Гиббса – ТИ», «Энергия Гиббса- номер изомера» и «ТИ - номер изомера».

Найдено, что величины fG0298(г) хорошо коррелируют с индексами *W* и *Н.* С увеличением числа изомеров корреляции между свойством и ТИ усложняются.

**Квантово-химический расчет геометрии и энергии**

**транс- и цис-изомеров производных азобензола**

Ганичева А.А. (магистрант 2 года обучения)

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

В последнее время интерес к органическим полупроводникам неуклонно возрастает. Молекулы олиготиофенов обладают рядом таких преимуществ, как высокая подвижность заряда; способностью интенсивно эмитировать свет, за счёт приложенного напряжения.

Одним из интересных соединений данного класса является производное олиготиофена и азобензола, которое при облучении УФ светом с длиной волны 366 нм переходит в цис- изомер, а при облучении светом с длиной волны 440 нм наблюдается обратный переход в транс- форму [1]. Переход азобензола из транс- формы в цис- для мономолекулярного слоя приводит к резкому уменьшению электропроводности монослоя.

****

Оптимизация геометрии производилась в программе Gaussian с использованием метода DFT в базисе B3LYP 6-311 G++(5d,7f).

В рамках квантовой теории атомов в молекуле [2], проведено исследование строения электронной плотности гош- и транс-конформеров производных азобензола и олиготиофена. Рассчитаны разность энергий конформеров, дипольные моменты и распределение парциальных зарядов на атомах. Показано, что переход в цис-форму приводит к уменьшению электронной плотности на тиофеновых циклах.

1. Karpe S., Ocafrain M., Smaali K., Lenfant S., Vuillaume D., Blanchard P., Roncali. // J. Chemical Communications 2010, V. 46, (21), p. 3657– 3659.
2. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. М.: Мир. 2001. 528 с.

**Моделирование методом диссипативной динамики**

**частиц ламелярных структур триблок-сополимеров**

Данилова А. Б. (магистрант 2 года обучения)

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

Блок-сополимерные материалы уже достаточно давно используются в промышленности, однако недавно стала обсуждаться возможность их применения в области нанотехнологий. Как известно, в расплавах и концентрированных растворах блок- сополимеров в результате равновесной самоорганизации возможно образование структур с упорядоченными областями от нано- до микро- размера. Для диблок-сополимеров фазовое поведение хорошо изучено, построена диаграмма Лейблера с использованием среднеполевых методов.

Для триблок-сополимеров построение аналогичной диаграммы вызывает трудности, в связи с необходимостью учета большого количества параметров. Такие диаграммы предложены, однако всесторонней проверки правильности предлагаемых морфологий нет. Для триблок-сополимеров одной из возможных морфологий предсказана морфология «ламель в ламели» (лестничная структура), когда два разнородных блока образуют ламелярную структуру в одной из ламелей

В данной работе методом диссипативной динамики частиц (ДДЧ) сделана попытка моделирования ламеллярной фазы в триблок-сополимерах типа А-В-С, при различных соотношениях длин блоков и энергий взаимодействия. В широких диапазонах длин блоков возникают ламеллярные фазы, однако «лестничные структуры» нами не наблюдались. При уменьшении длины одного из блоков образуется структура цилиндр на ламелях. Предсказываемая лестничная структура (ламель в ламели) в наших расчетах не наблюдается.

**Изучение химического состава образцов мать-и-мачехи**

**спектральными методами**

Дорошенко И.Д. (студент, 4курс)

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

Почти половина всех фармакологических препаратов производится на основе лекарственных растений, к которым относится мать-и-мачеха. Анализ химического состава растений очень важен для оценки качества лекарственного сырья, а также для оценки состояния окружающей среды.

Цель данной работы ̶ исследование химического состава листьев мать-и-мачехи методами Фурье-ИК и УФ спектроскопии. Растения были собраны в пяти районах города Твери (Пролетарский, СНТ Светлый, пл. Гагарина, Парк победы и Южный), а также в фоновой зоне (СНТ Рябинки), 6 - 8 июня 2019 года. Для проведения спектрального анализа листья растений были высушены и измельчены. Для регистрации ИК спектров на спектрометре «Vertex 70» фирмы «Bruker» были изготовлены таблетки с бромидом калия по стандартной методике. Спиртовые и водные экстракты образцов были исследованы на спектрометре «Evolution Array» фирмы «Thermo Scientific».

Установлено, что в ИК спектрах образцов листьев мать-и-мачехи основные различия проявляются в области деформационных колебаний амино- карбоксильных, гидроксильных групп. В УФ спектрах водных экстрактов обнаружены полосы поглощения с максимумами ~240,~285, ~ 330нм, которые соответствуют фенольным соединениям – простым фенолам, оксибензойным кислотам. Следовательно, методы спектроскопии могут быть использованы для изучения изменений химического состава лекарственных растений под воздействием различных антропогенных факторов.

*Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.*

**Структурообразование в низкоконцентрированных водных системах на основе аминокислоты N-ацетил-L-цистеина и ацетата серебра**

Завилейская В.А. (студент, 4 курс)

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

Коллективом кафедры физической химии были исследованы растворы L-цистеина с ацетатом и нитратом серебра, однако для более точного ответа на вклад сопряженных амино- и карбоксилных групп аминокислоты L-цистеина в образовании агрегатов, авторами было проведено исследование самоорганизации в растворах ацетата серебра и аминокислоты N-ацетил-L-цистеина (НАЦац), где амин о-группа заблокирована.

Установлено, что система НАЦац способна к самоорганизации при концентрациях N-ацетил-L-цистеина - 0,1-1 мМ и объемных соотношениях аминокислота/соль серебра - 1/1-1/1.4. При регистрации электронных спектров в УФ-видимом диапазоне установлено, что всем системам характерно поглощение при 265 нм. и 320 нм. Метод электрофоретического светорассеяния регистрирует наличие агрегатов с поверхностным зарядом от -40 до -60 мВ в зависимости от концентрации компонентов и мольного соотношения аминокислоты и ацетата серебра. Методом динамического светорассеяния установлено, что гидродинамический диаметр частиц лежит в диапазоне от 40 нм до 1000 нм и индексом полидисперсности от 0.8 до 1. Самоорганизация происходит путем образования хелатных комплексов ионов серебра и N-ацетил-L-цистеина и их дальнейшее взаимодействие между собой через ацетат-анионы и недиссоциированные молекулы ацетата серебра.

*Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.*

**Cлабые внутримолекулярные взаимодействия**

**в краун-эфирах и их тиоаналогах**

Зиганшин А.В. (студент, 4 курс)

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

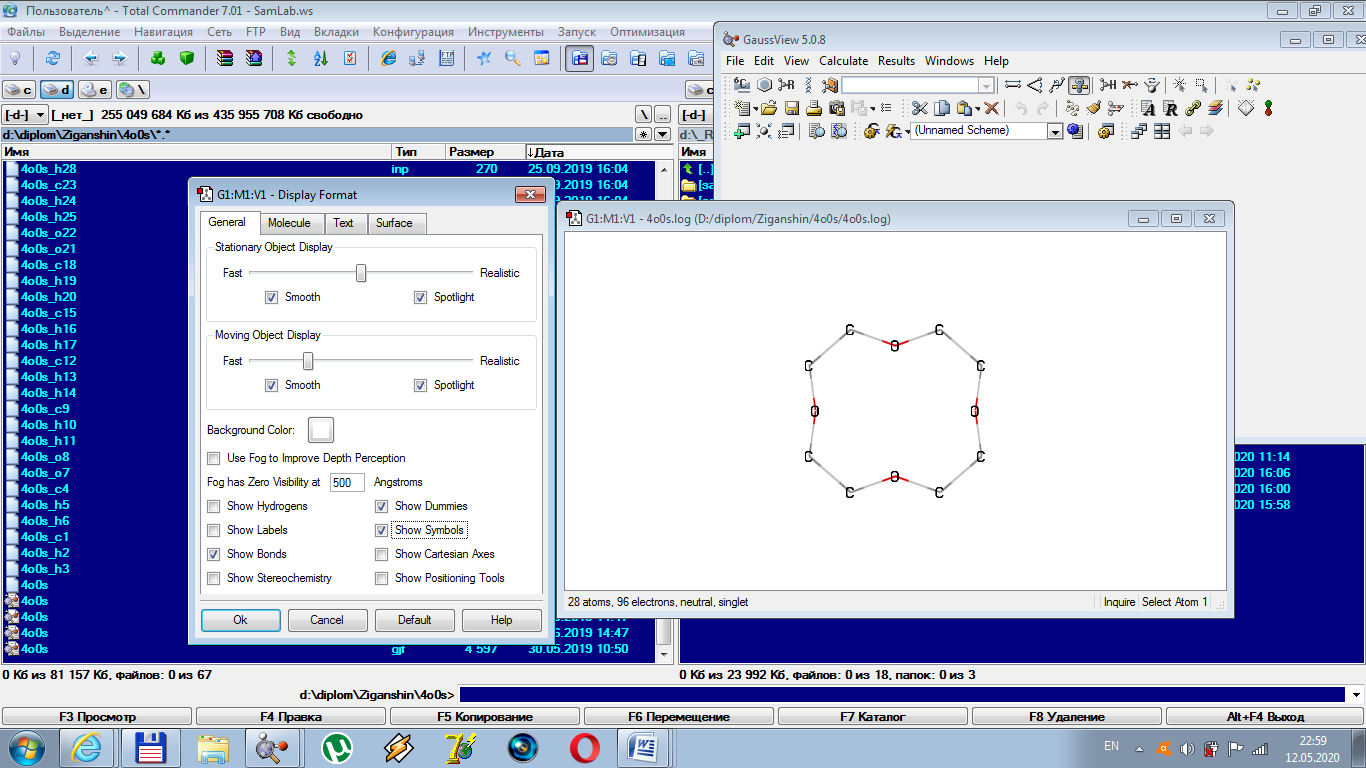
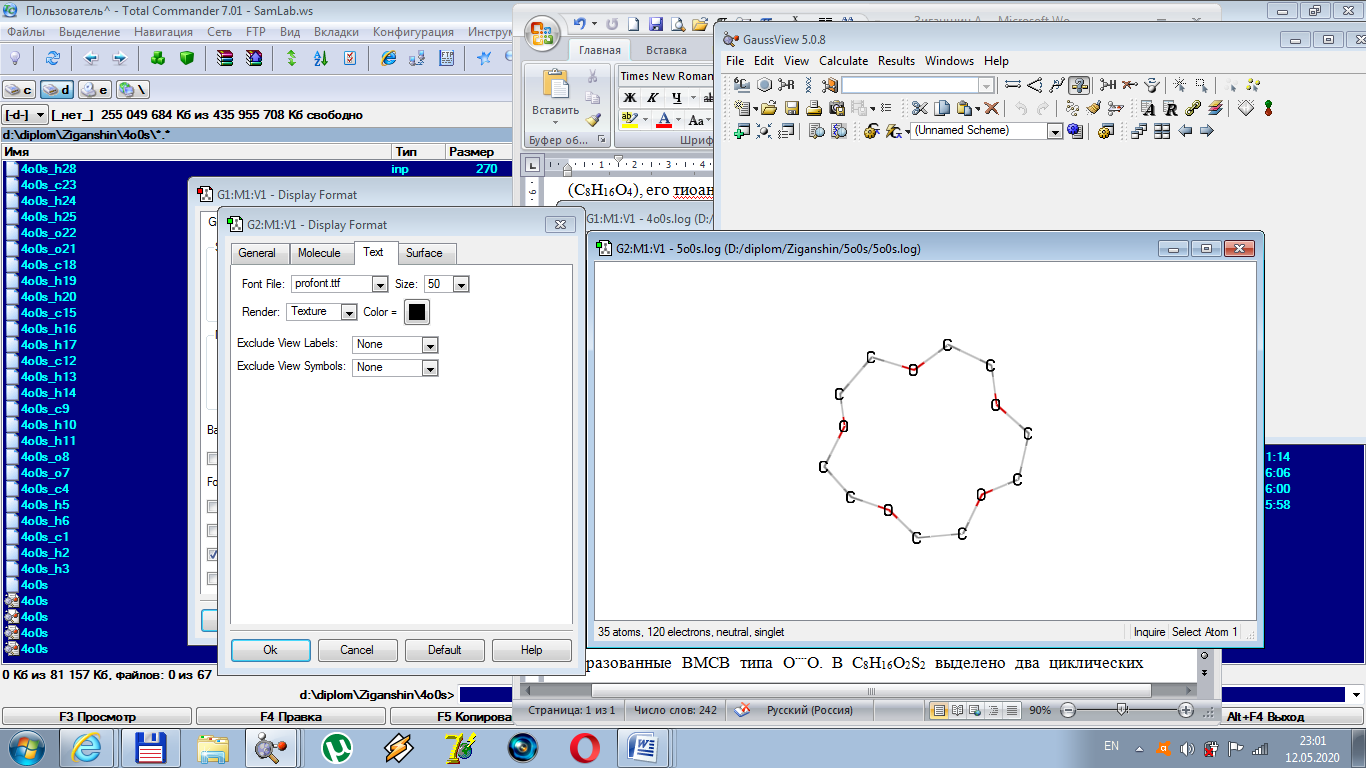
Слабые внутримолекулярные взаимодействия (ВМСВ) были обнаружены в результате квантовохимического исследования 12-краун-4 (C8H16O4), его тиоаналогов, (C8H16O3S1 (1-тио-12-краун-4), C8H16O2S2 (1,4-дитио-12-краун-4), C8H16O1S3 (1,4,7-тритио-12-краун-4), C8H16S4 (1,4,7,10-тетратио-12-краун-4)). 15-краун-5 (C10H20O5) и его тиоаналогов (C10H20O4S1 (1-тио-15-краун-5), C10H20O3S2 (1,4-дитио-15-краун-5), C10H20O2S3 (1,4,7-тритио-15-краун-5), C10H20O1S4 (1,4,7,10-тетратио-15-краун-5), C10H20S5 (1,4,7,10,13-пентатио-15-краун-5)). В соединениях C10H20O5 и C10H20O4S1 ВМСВ отсутствуют.

Рис. Молекулы:

а) 12-краун-4 и б)15-краун-5

б)

а)

Получено пять типов ВМСВ, отличающихся атомным составом (Ω): O¨¨H, S¨¨H, H¨¨H, O¨¨O, O¨¨S. В восьми изученных структурах ВМСВ приводит к образованию дополнительных циклов. Так в C8H16O3S1 присутствует сразу нескольких ВМСВ: O¨¨H, O¨¨S, H¨¨H, что приводит к образованию пяти циклов: на 6 Ω, 4 Ω, 7 Ω, 3 Ω и 6 Ω. Тогда как в C8H16O4 отмечено два цикла по 7 Ω образованные ВМСВ типа O¨¨O. В C8H16O2S2 выделено два циклических элемента на 7 Ω и 5 Ω в результате взаимодействия O¨¨H, а в C8H16O1S3 сформировано четыре кольцевых фрагмента на 5 Ω, 6 Ω, 7 Ω и 6 Ω в результате образования ВМСВ O¨¨H, H¨¨S. В C10H20O3S обнаружены два цикла на 13 Ω и 6 Ω, а в C8H16S4 и в C10H20O2S3 по шесть циклов: на 7 Ω, 7 Ω, 5 Ω, 5 Ω, 6 Ω, 6 Ω и 5 Ω, 6 Ω, 5 Ω, 4 Ω, 7 Ω, 7 Ω соответственно. Три цикла в C10H20O1S4 на 6 Ω, 13 Ω, 6 Ω и четыре цикла в C10H20S5 на 6 Ω, 6 Ω, 6 Ω и 7 Ω.

**Энергетические характеристики карбоновых кислот**

Исаев Г.Д. (студент, 5 курс)

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

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

Для исследуемых соединений в работе выведены расчётные схемы в разных приближениях. Например, в третьем приближении имеем:

*Р*с*n*н2*n*+1СOOH =hCC*pC-C*+ hCO*pC-O*+ hCH*pC-H*+ hсн*pC-Н*+*х*CC1ГCC+*х*CO1ГCO +

+*х*OO1ГCO +*х*CCC1CCC *+х*CC2*CC*+*х*CO2*CO* *+х*CC3*νCC*+*х*CO3*νCO*

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

1. Энергии разрыва связей D298 в выбранных соединениях изменяются в широких пределах.

Например (в кДж/моль [1]):

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | СН3 – СOOH | СН3 СOO – H | СCl3 – СOOH |
| D298 | 384,9±8,4 | 468,6±12,6 | 310,5±12,6 |

2. Энергии разрыва связей D298 в карбоновых кислотах уменьшаются при появлении фенильной группы, гетероатома в цепи молекулы и при увеличении длины молекулы.

Например (в кДж/моль [1]):

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | СН3 – СOOH | PhСН2 СOO – H | СH2Br – СOOH |
| D298 | 384,9±8,4 | 282,3 | 358,2±8,4 |
|  | СН3 – СOOH | С3Н7 –СOO H | С4Н9– СOOH |
| D298 | 384,9±8,4 | 380,7±8,4 | 375,3±6,3 |

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

**Корреляции «структура-энтропия» тиоспиртов.**

**Топологический подход**

Калюжная Л.А. (студент, 4 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 – энтропия» в тиоспиртах.

Для тиоспиртов в работе выведены расчётные схемы в разных приближениях. Например, в третьем приближении, учитывая взаимное влияние атомов, удалённых не далее чем через три скелетных атома по цепи молекулы получаем:

*Р*с*n*н2*n*+1SH = *p1*b+*p’1*b’+*p”1*b” +*p\*1*b\* +*р*2Гcc+*р’*2Гcs +*R*ccc+*R’*ccs *+*

+ *p*3*cc*+*p’*3*cs* +*p*4*cc*+*p*’4*cs*

По данной схеме проведены численные расчеты энтропии тиоспиртов, согласующиеся с экспериментом. Получены новые ранее, неизвестные значения. Также были исследованы зависимости вида *Р*=*f*(ТИ). Выявлены уравнения, отвечающие наиболее тесной корреляционной связи между энтропией тиоспиртов и топологическими индексами.

В работе также были проанализированы графические зависимости [1] «Энтропия – топологический индекс», «Энтропия – номер изомера» и «Топологический индекс – номер изомера. Найдено, что величины S0298(г) хорошо коррелируют с индексами *W* и *W’.* С увеличением числа изомеров корреляции между энтропией и ТИ усложняются, что необходимо учитывать при аналитическом изучении зависимостей «Энтропия– ТИ».

1. Виноградова М.Г. Графические зависимости в изучении корреляций структура – свойство тиоспиртов **/**/ Вестник Тверского государственного университета. Серия «Химия»- 2017.- № 4. -С.73-78.

**Деструкционные процессы при получении СВМПЭ волокон**

**методом гель-формования**

Королёв Р.В. (студент, 4 курс)

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

Соколов А.В. (аспирант)

В технологии получения высокопрочных волокон из сверхвысоко-молекулярного полиэтилена (СВМПЭ) методом гель-формования в качестве растворителя реакторного порошка СВМПЭ используется вазелиновое масло (ВМ), качественный состав которого представлен преимущественно коротко цепными *н*.-алканами. При эксплуатации ВМ подвергается значительному воздействию термоокислительной деструкции в узле растворения СВМПЭ при температуре 180°С и в узле вытяжки волокна в среде ВМ при постепенно повышающейся температуре 110-135°С [1]. Происходит изменение химического состава ВМ, в результате чего изменяется цвет от бесцветного до желтого и желто-коричневого и снижается растворяющая способность. В связи с этим возникает необходимость в контроле изменений химического состава ВМ, в результате его термоокислительной деструкции в узлах установки по получению высокопрочных волокон.

Главной задачей является осуществление контроля изменений химического состава ВМ, в результате его термоокислительной деструкции, методами Фурье-ИК-спектроскопии и спектрофотометрическим методом определения цветности с использованием медь-железо-кобальт-бихроматной (МЖКБХ) шкалы цветности.

1. Высокопрочные и высокомодульные полимерные волокна. / П.М. Пахомов В.П. Галицын и др. Тверь: ТвГУ, 2012. 327 с.

**Электронные параметры метилоктилкетона, метилоктилтиокетона**

**и метилоктиосульфоксида**

Крылова М.Е. (студент, 5 курс)

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

Квантовохимические методы вычисления распределения электронной плотности позволяют оценить индуктивный эффект в соединении, а также сопоставить электроотрицательность групп (*χ*(*R*)) и собрать качественную шкалу групповых электроотрицательностей. Целью работы стало получение групповых зарядов и объемов метилоктилкетона (H3C-C(O)-C8H17), метилоктилтиокетона (H3C-C(S)-C8H17), метилоктил-сульфоксида (H3C-S(O)-C8H17) и составление общей качественной шкалы *χ*(*R*).

Таблица

Групповые заряды (*q*(*R*)) и объемы (*V*(*R*)) C8H17-*R*-CH3, где *R*=C(O), C(S), S(O)

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| ***R*** | **CH3** | **CH2** | **CH2** | **CH2** | **CH2** | **CH2** | **CH2** | **CH2** | ***R*** | **CH3** |
| ***q*(*R*), в а.е.** | | | | | | | | | | |
| **CO** | -0,014 | 0,014 | 0,001 | -0,002 | 0,007 | -0,005 | 0,060 | 0,014 | -0,134 | 0,054 |
| **CS** | -0,014 | 0,015 | 0,003 | -0,001 | 0,009 | -0,004 | 0,051 | 0,053 | -0,200 | 0,089 |
| **SO** | -0,013 | 0,015 | 0,001 | 0,001 | 0,011 | 0,008 | 0,061 | -0,065 | -0,008 | -0,015 |
| ***V*(*R*), в Å3** | | | | | | | | | | |
| **CO** | 33,12 | 23,67 | 23,51 | 23,51 | 23,46 | 23,60 | 22,79 | 23,44 | 26,96 | 32,51 |
| **CS** | 33,11 | 23,66 | 23,49 | 23,51 | 23,42 | 23,50 | 22,82 | 23,00 | 45,58 | 32,10 |
| **SO** | 33,10 | 23,66 | 23,50 | 23,51 | 23,41 | 23,49 | 22,87 | 23,43 | 39,15 | 32,44 |

Анализ зарядов групп (табл.) показал, что группы CH3, C(O), C(S) и S(O) проявляют *I*-эффект и стягивают на себя электронную плотность с ближайших CH2. Индуктивный эффект CH3, C(O), C(S) и S(O) проявляется в изменении *q*(*R*) и *V*(*R*) ближайших четырех групп СН2 (табл.). Сопоставление *q*(*R*) (табл.) позволило составить общую качественную шкалу электроотрицательностей *χ*(*R*)рассматриваемых рядов:

*χ*(CH2) < *χ*(S(O)) < *χ*(СН3) < *χ*(C(O)) < *χ*(C(S)).

**Интегральные электронные характеристики циклогексана**

**и его серосодержащих аналогов**

Курочкин Г.А. (студент, 4 курс)

Софронова Ю. И. (аспирант)

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

Геометрия молекул циклогексана (C6H12) и его моно- (C5SH12), ди- (C4S2H12) и тетросеросодержащих (C2S4H4) (рис.) оптимизирована методом B3LYP в Gaussian03. Заряды на атомах получены в рамках квантовой теории атомов в молекулах численным интегрированием с помощью пакета AIMALL, суммированы в заряды групп - *q*(*R*) и сведены в таблицу.

Циклогексан взят в качестве реперной молекулы для данной группы соединений, поскольку заряды групп СН2 в нем равны нулю (табл.). Присутствие серы в цикле приводит к перераспределению электронной плотности (*ρ*(*r*)) и соответственно изменению *q*(СН2). В C5SH12 и C4S2H12 сера выступает донором *ρ*(*r*) для соседних атомов углерода и С, находящихся в *пара-*положении. Это сказывается на зарядах соответствующих групп СН2 (табл.). Наличие более одного атома S приводит к увеличению оттока *ρ*(*r*) с S в бассейны СН2, что приводит к повышению *q*(SH2) в C4S2H12 на 0,107а.е. по сравнению с *q*(SH2) в C5SH12. В C2S4H4 наличие четырех последовательно соединенных атомов S(II) приводит к тому, что наблюдается отток *ρ*(*r*) в сторону двух центральных атомов S(II), приводящий к понижению их *q*(S). И по отношению к *q*(SH2) в C5SH6 заряды этих атомов становятся меньше на 0,099а.е.

Таблица

Сравнение зарядов групп *q*(*R*) циклогексана и его серосодержащих аналогов, в а.е.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| группа | C6H12 | C5SH12 | C4S2H12 | C2S4H4 |
|  |  | **SH2** | **SH2** | **S** |
| 1 СН2 | 0,000 | 0,121 | 0,228 | 0,022 |
| 2 СН2 | 0,000 | -0,074 | -0,348 | -0,070 |
| 3 СН2 | 0,000 | 0,026 | 0,137 | -0,058 |
| 4 СН2 | 0,000 | 0,013 | -0,093 | 0,040 |
| 5 СН2 | 0,000 | 0,019 | 0,054 | 0,022 |
| 6 СН2 | 0,000 | -0,105 | 0,021 | 0,044 |

**Образование гидрогелей в водном растворе ПГМГ-ГХ,**

**L-цистеина и ацетата серебра**

Кучурова А.К. (студент, 3 курс)

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

Полигексаметиленгуандин гидрохлорид (ПГМГ-ГХ) является катионным полиэлектролитом, который обладает уникальным сочетанием физико-химических и биоцидных свойств. Благодаря этим свойствам исследуемые гидрогели на основе ПГМГ-ГХ могут обладать широким спектром свойств: антибактериальными, противогрибковыми, цитостатическими. Целью работы является изучение механизма в цистеин-серебряном растворе при добавлении ПГМГ-ГХ. Процессы самоорганизации в системах исследованы c помощью методов УФ и ИК спектроскопии, рН-метрии, сканирующей электронной микроскопии.

Авторами работы обнаружено, что в ЦСР происходит формирование супрамолекулярных цепочек, о чем свидетельствует появление через некоторое время в электронном спектре образца полос поглощения с максимумами 314 и 394 нм, происходит образование цистеин-серебряного раствора (ЦСР). При добавлении ПГМГ-ГХ также образуются супрамолекулярные гидрогели, о чем свидетельствуют аналогичные изменения в электронных спектрах растворов. Так, при добавлении ПГМГ-ГХ в ЦСР исчезают обе полосы поглощения с максимумами 314 нм и 394 нм и появляется новая полоса поглощения с максимумом 354 нм. Так, УФ полосы поглощения 314 и 394 нм отвечают за формирование супрамолекулярных цепочек (−Ag-S(Cys)−Ag-S(Cys)−)n и пространственной гель-сетки, а полоса 354 нм, возможно, за образование фрагментов супрамолекулярных цепей комплексов с ПГМГ-ГХ. Уставлено, что гидрогели имеют антибактериальные свойства.

**Усиление механических свойств L-цистеин/AgNO3/ПВС**

**супрамолекулярной системы**

Левчукова В.А. (студент, 3 курс),

Мосолова Д.И. (студент, 3 курс)

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

На первой стадии, готовился цистеин-серебряный водный раствор (ЦСР). Далее, к созревшему в течение 24 ч. ЦСР добавлялся ПВС разных концентраций (0.002, 0.01, 0.02, 0.1, 0.25, 0.5, 0.75, 1, 1.25, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4.0 % масс. в конечной смеси). К полученной смеси добавлялся сульфат натрия (0.0001 % масс. в конечной смеси) в качестве инициатора гелеобразования. Часть гелей была высушена при 25оС с получением тонких пленок. Другая была заморожена при -18оС, после 24 ч. разморожена. Полученные водно-гелевые массы были отцентрифугированы (6 тыс. об/мин, 30 мин.), вода декантирована. Полученные криогели нанесены на подложку и высушены при 25оС. В итоге получены пленки.

Методом УФ и ДСР анализа установлено, что вода, декантированная после стадии центрифугирования, не содержит L-цистеин/AgNO3 супрамолекулярной системы. Методом УФ и ИК-спектроскопии показано, что L-цистеин/AgNO3 супрамолекулярная система сохраняет свою нативную структуру в полученных пленках. Методом СЭМ исследована морфология пленок. Показано, что на образование макропористых структур и размеры пор оказывает влияние концентрация и молекулярная масса ПВС, что также независимо подтверждается данными ИК-спектроскопии. Методом элементного анализа установлено, что содержание серебра и серы в объеме пленок отличается от их содержания на поверхности, что подтверждает стабильность супрамолекулярной системы в матрице ПВС.

*Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.*

**Изучение влияния антропогенных факторов на химический состав березы повислой спектральными методами**

Русаков М. В. (студент,4 курс)

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

Благодаря многолетним биохимическим и морфологическим исследованиям было установлено, что береза повислая, хорошо приспособленная к условиям городской среды, подходит на роль биоиндикатора антропогенного воздействия.

Цель данной работы ̶ изучение влияния антропогенных факторов на химический состав березы методами Фурье-ИК и УФ спектроскопии. Объектом исследования являлись листья березы, собранные 6 - 10 июня 2019 года в пяти районах города Твери – Пролетарский, СНТ Светлый, пл. Гагарина, Парк победы, Южный, а также фоновой зоне – в лесу на Сахаровском шоссе.

Для исследования образцы листьев березы были высушены и измельчены в вибромельнице. Для регистрации ИК спектров образов на спектрометре «Vertex 70» фирмы «BRUKER» были изготовлены таблетки с KBr. Для регистрации электронных спектров на спектрометре «Evolution Array» фирмы «ThermoScientific» использовали водные и спиртовые экстракты.

Установлено, что в спектрах листьев березы проявляются различия в области валентных и деформационных колебаний. В электронных спектрах обнаружены значительные колебания в содержании фенольных соединений различного типа. Таким образом, методы спектроскопии могут быть эффективно использованы для мониторинга отдельных компонентов окружающей среды и для оценки современного состояния природных объектов.

*Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.*

**Надмолекулярное структурирование в низкоконцентрированных водных растворах на основе L-цистеина, N-ацетил-L-цистеина и ацетата серебра**

Селезнева Т.В. (студент, 4 курс)

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

Установлено, что при добавлении простых электролитов, таких как NaCl и Na2SO4, дополнительное структурирование происходит путем связывания заряженных агрегатов в растворе за счет взаимодействия ионов электролита с амино- и карбоксильными группами аминокислот, а также за счет специфического взаимодействия анионов с серебром в узлах организации исходных молекул и ионов.

Установлено, что введение гептамолибдата аммония с концентрацией 1 сМ в объеме от 0,02 мл в 1 мл супрамолекулярных растворов вызывает «перезарядку» исходных агрегатов, что регистрируется с помощью метода электрофоретического светорассеяния. В ЦСРац происходит изменение дзета-потенциала с +60мВ до -40мВ, В НАЦац с -50мВ до +30мВ. В УФ-спектрах систем с ЦСРац регистрируется отсутствие пика 275нм и увеличение интенсивности пика 398нм, в системах с НАКац наблюдается отсутствие характеристических полос поглощения 260 нм и 315нм.

Введение ПВС упорядочивает пространственную организацию агрегатов, о чем свидетельствуем уменьшение среднеквадратичного отклонения поверхностного заряда и стабильность систем под действием электрического поля: дзета-потенциал равен +35мВ в растворе НАЦац и, соответственно, +42мВ в ЦСРац. УФ-спектры для систем на основе НАЦац не регистрируют изменение полос поглощения, что говорит о сохранении исходной структуры растворов, однако в УФ-спектрах систем на основе ЦСРац уменьшается поглощение в районе 275нм.

*Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.*

**Корреляции «структура – свойство» алифатических эфиров.**

**Топологический подход**

Тагиева А. Рагим-кызы (магистрант 2-го года обучения)

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

В настоящее время для решения проблемы «структура-свойство» в химии часто используют методы, основанные на теории графов.

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций «структура – свойство» в простых эфирах.

В работе проанализированы и выбраны для построения корреляций «структура–свойство» алифатических эфиров наиболее подходящие топологические индексы. Дана теоретико-графовая интерпретация аддитивных схем. Так втретьем приближенииимеем:

Здесь *p*1,*p*2,*p*3, *p*4 – соответственно число путей длины один, два, три и четыре; *R –* число троек смежных рёбер.

По данной схеме проведены численные расчёты термодинамических свойств выбранных соединений. Получены новые данные.

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

В работе были получены аналитические зависимости *Р*=*f*(ТИ) наиболее точно коррелирующие с термодинамическими свойствами простых эфиров.

В работе также рассмотрены графические зависимости "Свойство- номер изомера" и "ТИ - номер изомера", "Свойство Р – ТИ".

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

**Одностадийный способ получения гидрогелей на основе аминокислоты L-цистеин с галогенидами металлов**

Филяровская Н-М. Н. (магистрант 2-го года обучения)

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

Изучение процессов гелеобразования в гидрогелях на основе низкомолекулярных соединений представляет интерес, т.к. подобные системы находят применение в различных областях. В данной работе изучаются гидрогели на основе аминокислоты L-цистеин, нитрата серебра и галогенидов щелочных металлов. Цель работы – изучение механизма гелеобразования в системах под влиянием хлорид и бромид анионов с помощью различных физико-химических методов.

Исследуемые образцы были получены так называемым одностадийным методом – путем смешения компонентов в определенном порядке при интенсивном перемешивании [1]. Молярное соотношение исходных компонентов (Ag+/L-Cys) в образцах меняли в интервале 1,33 – 2,00; содержание хлорид и бромид анионов варьировали в диапазоне 0,5 – 2,0 мМ; концентрация L-Cys составляла 3,0 мМ. Процессы структурирования в гель-системах изучали с помощью методов УФ спектроскопии, динамического светорассеяния (ДСР), вискозиметрии, сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). При одинаковой концентрации и соотношении компонентов динамическая вязкость образца с хлорид-ионом выше, чем образца с бромид-ионом. Наблюдается возрастание вязкости образца с хлорид-ионом во времени, вязкость с бромидом изменяется незначительно. Стабильность гелей определяется структурой супрамолекулярных цепочек – фрагментов гель-сетки, что подтверждается данными УФ спектроскопии. Разная методика получения данных гидрогидрогелей позволяет регулировать прочность и устойчивость.

1. Овчинников М.М., Лагусева В.С., Хижняк С.Д., Пахомов П.М. // Вестник ТвГУ. Серия: Химия. 2017. №4. С. 135-145.

**Процессы самоорганизации в низкоконцентрированных водных растворах глицина, нитрата серебра и поливинилового спирта**

Шухина К. А. (магистрант 1-го года обучения)

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

Процесс самоорганизации представляет собой явление спонтанной ассоциации как минимум двух или более компонентов, приводящее к образованию протяжённых полимолекулярных ансамблей. Благодаря карбоксильной, гидроксильной и аминогруппам, системы Gly-ПВС способны образовывать многочисленные межмолекулярные связи. Полученные системы Gly-AgNO3-ПВС могут найти применение в медицине, в частности как плёночные материалы для заживления ран. Кроме того, благодаря нитрату серебра плёнки обладают антибактериальной активностью.

Были исследованы двухкомпонентные (Gly-ПВС) и трёхкомпонентные (Gly-AgNO3-ПВС) образцы с различным объёмным соотношением и концентрациями исходных компонентов (ПВС 5 и 10%, Gly 0,01 и 0,1М). Из исследуемых систем были получены прозрачные плёнки методом полива. Полученные образцы были изучены с помощью различных физико-химических методов: УФ, ИК-спектроскопии, динамического светорассеяния, вискозиметрии и pH-метрии.

Сдвиг максимума полосы поглощения в области 3290-3269 см-1 в ИК-спектрах пленок Gly-ПВС с разной концентрацией полимера (1, 5, 10%) и соотношением компонентов свидетельствует о множественных межмолекулярных взаимодействиях глицина и ПВС. С помощью метода ДСР установлено, что на размер и кинетику образования наноассоциатов влияет концентрация, объемное соотношение исходных компонентов и время выдержки образца.

*Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.*

**Оценка морфологии эмульсий методом оптической спектроскопии**

Ярусов М.В. (студент, 3 курс)

Руководитель: проф. д.х.н. Пахомов П.М., А.И. Маркова

Эмульсии имеют широкое применение в промышленности, медицине и сельском хозяйстве. Однако для изучения их морфологии используется дорогостоящее оборудование, которое требует больших трудозатрат в использовании и последующей обработке данных. В связи с этим важно иметь простой, доступный и точный метод оценки размера капель в эмульсиях и их распределении по размерам при различных концентрациях. Нами предлагается достаточно простой и эффективный метод УФ спектроскопии.

Целью данной работы являлось выяснение возможности использования метода УФ спектроскопии для изучения морфологии эмульсий.

В качестве образцов для исследования использовалась эмульсия – сливки (капли молочного жира в воде), для определения распределения размеров частиц при разных концентрациях системы. Основным методом оценки морфологии эмульсий являлась УФ спектроскопия, в качестве контролирующего метода был использован метод динамического светорассеяния (ДСР).

За счет разницы в показателях преломления матрицы и наполнителя исследуемая система относится к «мутным» сильно рассеивающим свет средам. Спектроскопическим методом определены размеры капель в системе и их распределение при различных концентрациях. Установлено, что при увеличении концентрации дисперсной фазы происходит агрегация капель в эмульсии.

Данные полученные методом УФ спектроскопии совпадают с данными контролирующего метода ДСР, полученными с одними и теми же образцами, что говорит об эффективности данного метода.