

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

XVII
НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
АСПИРАНТОВ И СТУДЕНТОВ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО
ФАКУЛЬТЕТА

24 мая 2018 года

Тверь

Тезисы докладов

ТВЕРЬ 2018

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

Алябина Н.В. Определение физико-химических свойств пенообразователей для пожаротушения, содержащих в своем составе водорастворимые полимеры	7
Арефьев Д.В. Количественное определение линкомицина в растворах, содержащих его близкие аналоги	8
Биберина Е.С. Термодинамические константы диссоциации L- и D-форм N-(карбоксиметил)аспарагиновой и L-N-(карбоксиметил)глю-таминовой кислот.....	9
Бугаева А.А. Твердо-контактный ионоселективный электрод с откликом на ион супрастина.....	10
Буравлёва А.С. Спектрофотометрическое определение железа и церия при их совместном присутствии.....	11
Варламова А. А. Разработка технологии создания индикаторного материала для экспресс-анализа нитрат-ионов.....	12
Гурцева И.С. Антикоррозийная активность полианилина.....	13
Исаева А.А. Содержание органических кислот в сборе витаминов.....	14
Лобзова В.А. Физико-химический анализ молока и молочных продуктов различных производителей.....	15
Лукьянова Н. И. Изучение физико-химических свойств гексаметилендиаминдиантарной кислоты.....	16
Новикова Л.А. Физико-химическое исследование комплексообразования кобальта (II) с L-аминокислотами.....	17
Петрова В.Ю. Спектрофотометрическое определение церия и меди при их совместном присутствии.....	18
Радин А.С. Исследование физико-химических свойств активированных пленок диоксида кремния гетерополикислотами.....	19
Решетова А.С. Качественное и количественное определение карбоксигемоглобина в биологических системах.....	20
Семашко Е.И. Определение влажности меда как показателя качества и пригодности для хранения.....	21
Скрыпникова И.А. Титриметрическое определение количества аскорбиновой кислоты в ягодах годжи.....	23
Цветкова Е.Е., Шломак И.В. Хроматографические исследования органических кислот для установления натуральности соков.....	24

Секция органической химии

Бодякова А.В. Синтез 1,5-дифенилформааната меди (II)	25
Васильева С.В. Изучение жирнокислотного состава растительных масел и разработка опытных купажей.....	26
Волкова М.Ю. Определение содержания протеина и липидов в кормах для домашних животных.....	27
Герасимова Н.Ю. Разработка композиции для защиты поверхностей от мхов и лишайников.....	28
Голубихина А.С. Получение и свойства ферритов d-переходных металлов на углеводородной основе.....	29
Горбунова Д.В. Синтез и физико-химические свойства ионных жидкостей производных 1-децил-3-алкилимидазолия.....	30
Гурина Е.С. Влияние неионогенных поверхностно-активных веществ на свойства растворов солей пиридиния.....	31
Елистратова М.К. Получение 3-метил-1,5-дифенилазогидразона.....	32
Климентьев И.С. Синтез и исследование диэтаноламидов жирных кислот.....	33
Ковалева Е.В. Синтез поверхностно-активных веществ на основе бисазометинов.....	34
Комаров Р.С. Синтез, спектральные характеристики и физико-химические свойства тетрагалогенферратов (III) N-алкилпиридиния.....	35
Кондратьева Д.А. Мари - Анн Лавуазье – женщина, стоявшая у истоков современной химии.....	36
Кротова Н.И. Влияние ультразвуковой обработки и концентрации прекурсоров на размер квантовых точек сульфида цинка, синтезированных в ионной жидкости.....	37
Кряжова Ж.А. Синтез и физико-химические свойства ионных жидкостей на основе β -пиколина.....	38
Левицкая Ю.В. Синтез поверхностно-активных веществ на основе малеинового ангидрида.....	39
Медведева О. А. Получение органического лиганда на основе салицилового альдегида.....	40
Новикова Л.В. Комплексы борной кислоты с аминами как ингибиторы коррозии металлов в нейтральных и солевых средах.....	41
Сергеева А.И. Алкилполигликозиды как поверхностно-активные вещества.....	42
Смирнова К.А. Синтез и бактерицидная активность четвертичных солей 1-бензил-3-алкилимидазолия.....	43
Травников Ю.Н. Влияние концентрации прекурсоров на размер квантовых точек сульфида цинка, синтезированных в системе ионная жидкость – спирт.....	44
Хадыкина Е.С. Регулирование углеводно-амилазного комплекса пшеничной	

муки.....	45
Цыплакова А.В. 170 лет со дня рождения А.А. Летнего – основоположника пиролиза нефти.....	46

Секция физической химии

Адамян А.Н. Синтез и исследование систем на основе цистеина и солей серебра.....	47
Байрамова Э.Д., Канаева В.С. Энтальпия образования замещённых бензола.....	48
Бобовская Е.С. Энтальпия образования алифатических альдегидов. Топологический подход.....	49
Ганичева А.А. Квантово-химический расчет структуры производных олиготиофена.....	50
Королева О.Е. Анализ пористых полимерных материалов методами оптической спектроскопии.....	51
Кучеренко М.А. Физико-химические аспекты биомониторинга популяций <i>Convallaria majalis</i> L. в Торжокском районе.....	52
Лютин И.А. Энергетические характеристики алифатических эфиров....	53
Сенекеримян А.К. Количественная взаимосвязь между структурой и свойствами аминсоединений.....	54
Удальцова М.Ю. Гелеобразование в низкоконцентрированных водных растворах L-цистеина и перхлората серебра.....	55
Фаткина А.А. Супрамолекулярные гидрогели на основе L-цистеина, нитрата серебра и поливинилового спирта.....	56
Цыганкова М.Р. Корреляции «структура-свойство» алифатических альдегидов.....	57
Шухина К.А. Процессы самоорганизации в водных системах на основе глицина, нитрата серебра и ПВС.....	58
Юнусова Д.В. Кинетика взаимодействия 1-бутилбромида с пиридином...	59

Секция неорганической и аналитической химии

Определение физико-химических свойств пенообразователей для пожаротушения, содержащих в своем составе водорастворимые полимеры

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

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

Специфика пен, используемых для тушения пожаров, заключается в первую очередь в способе их получения – образовании пены на сетках или тонких перфорированных листах. Формирование пенной структуры этим способом происходит за доли секунды, и здесь основными являются свойства смачивающих пленок на металлической поверхности и свободных пленок в процессе их быстрой деформации и контактного взаимодействия.

Основным показателем при анализе процесса образования пены на сетках, механизма стабилизации и контактного разрушения пены являются электроповерхностные свойства границы раздела «углеводород – раствор ПАВ – воздух». Для пены и системы «пена – жидкость» их значение является важным практически на всех этапах существования:

При образовании пены на сетках – определяется в дополнительной стабилизации смачивающих и деформируемых пленок за счет возбуждения электроосмотического противотока и электростатической компоненты расклинивающего давления;

При обезвоживании пены – в снижении скорости утончения пенной пленки и в снижении темпов нарастания капиллярного давления пенных каналов при движении пены в вертикальных трубопроводах;

При движении и деформации пены – в снижении показателя динамической компоненты капиллярного давления каналов Плато-Гиббса;

При контактном разрушении – в обеспечении изоэлектрического состояния частиц полимера в процессе формирования разделительной пленки

на границе пены с органическим растворителем; в снижении электрокинетического потенциала границы «раствор – воздух» при образовании смешанного раствора в пенных каналах при контакте пены с растворителем;

В электрическом поле – определяется возбуждением электроосмотического переноса жидкости и экранированием ионами двойного электрического слоя границы «раствор – воздух» внешнего высокочастотного электрического поля.

Основная трудность при изучении пены заключается в невозможности создания ее эталонного образца, поэтому важной стороной работы является создание устройств и методик для измерения физико–химических параметров пены и обеспечения контролируемых и воспроизводимых условий ее получения.

На полигонных испытаниях были выявлены основные закономерности тушения пламени смесевых топлив (о чем говорит ГОСТ Р 53280.2-2010) пенообразователем ПО-РЗФ (6%) с добавлением полимера (ксантановой камеди) и без него. Определяющим фактором стабилизации пены было соотношение поверхностного натяжения рабочего раствора и смесевого топлива. При увеличении концентрации спирта в смеси с углеводородом с 5% до 15% приводит к повышению критической и оптимальной интенсивности подачи пены в два-три раза, при этом удельный расход пены на тушение единицы поверхности возрастает.

Разрушение пленки происходило из-за десорбции молекул пенообразователя с межфазной границы. Изолирующая эффективность пленки из фторсинтетического пенообразователя утрачивается при достижении концентрации спирта, в смеси с углеводородом, равной 10% об.

Для исправления ситуации с процессом тушения смесевых топлив к ПО-РЗФ (6%) был добавлен полимерный компонент, который с одной стороны повышает термическую устойчивость пены, а с другой замедляет процесс растекания и ведет к накоплению избыточного слоя пены.

Количественное определение линкомицина в растворах, содержащих его близкие аналоги

Арефьев Д.В. (магистрант 2-го года обучения)

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

Ранее было показано, что возможно определение линкомицина с использованием экспериментального твердо-контактного ион-селективного электрода (ИСЭ). Возникает вопрос, будет ли экспериментальный электрод избирательно определять линкомицин в присутствии близких аналогов антибиотиков. В связи с чем, целью представленной работы было определить селективность твердо-контактного электрода, а также ИСЭ с внутренним электродом сравнения по отношению к структурным аналогам линкомицина.

После подтверждения работоспособности электродов в интервале 1-5 (pC), диапазон которой является достаточным для большинства практических измерений. После подтверждения работоспособности электрода провели перекрестное определение чувствительности структурных аналогов: клиндомицина. Для получения более достоверных результатов мы использовали два способа: 1) метод смешанных растворов, 2) метод отдельного раствора. В результате эксперимента установили, что твердо-контактный и классический электроды обладают удовлетворительной селективностью по отношению к мешающим компонентам. Коэффициент селективности для перечисленных антибиотиков находится в диапазоне 0,1-0,01, причем коэффициент селективности для твердо-контактных электродов был ниже по сравнению с классическим электродом. В целом найденные закономерности перекрестной селективности, а также коэффициенты селективности позволяют утверждать, что возможно использование экспериментальных ИСЭ для определения линкомицина в присутствии клиндомицина, причем твердотельный электрод более предпочтителен.

**Термодинамические константы диссоциации L- и D-форм
N-(карбоксиметил)аспарагиновой
и L-N-(карбоксиметил)глутаминовой кислот**

Биберина Е.С. (аспирант, 4-го года обучения)

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

Синтезированы комплексоны моноаминного типа: L-N-(карбоксиметил)аспарагиновая кислота (L-КМАК), D-N-(карбоксиметил)аспарагиновая кислота (D-КМАК), L-N-(карбоксиметил)глутаминовая кислота (L-КМГК) и исследован процесс диссоциации этих кислот в водных растворах методом потенциометрического титрования.

Таблица

Отрицательные логарифмы концентрационных и термодинамических
констант ступенчатой диссоциации лигандов

Лиганд	k_i	$pK_i^0 (I=0)$	$I=0,1$	$I=0,5$	$I=1,0$
D,L-КМАК [1]	k_1	2,95	2,58	2,65	2,58
	k_2	4,31	3,87	3,85	3,75
	k_3	10,33	9,67	9,47	9,38
L-КМАК	k_1	$2,69 \pm 0,02$	$2,65 \pm 0,01$	$2,58 \pm 0,07$	$2,40 \pm 0,05$
	k_2	$3,71 \pm 0,05$	$4,56 \pm 0,05$	$4,06 \pm 0,04$	$6,84 \pm 0,04$
	k_3	$11,06 \pm 0,01$	$9,92 \pm 0,03$	$10,46 \pm 0,01$	$6,56 \pm 0,06$
D-КМАК	k_1	$4,45 \pm 0,03$	$4,59 \pm 0,06$	$3,52 \pm 0,03$	$3,64 \pm 0,03$
	k_2	$6,14 \pm 0,04$	$6,26 \pm 0,01$	$5,56 \pm 0,04$	$5,73 \pm 0,04$
	k_3	$10,17 \pm 0,06$	$10,37 \pm 0,03$	$7,04 \pm 0,02$	$6,59 \pm 0,01$
D,L-КМГК [2]	k_1		2,49		
	k_2		4,16		
	k_3		9,28		
L-КМГК	k_1	$4,78 \pm 0,02$	$4,67 \pm 0,05$	$4,63 \pm 0,04$	$4,23 \pm 0,06$
	k_2	$5,69 \pm 0,01$	$5,26 \pm 0,01$	$5,20 \pm 0,05$	$5,15 \pm 0,02$
	k_3	$11,98 \pm 0,04$	$12,19 \pm 0,06$	$11,27 \pm 0,02$	$11,68 \pm 0,05$

1. Никольский В.М. Дисс. ... докт. Хим. Наук. – Тверь. – 2005. – 301 с.
2. Snyder R., Angelici R. //J. Inorg. Nucl. Chem. – 1973. – V.35. – P.523.

Твердо-контактный ионоселективный электрод с откликом на ион супрастина

Бугаева А.А. (студент, 4 курс)

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

Экспериментальный твердо-контактный электрод, был изготовлен по следующей методике. Ионоселективная мембрана имела состав: ПВХ : дибутилфталат (ДБФ): Электрод активное вещество (ЭА) в %. 40:35:5. В качестве ион-электродного трансдюсера, использовалась мембрана следующего состава: ПВХ : ДБФ : полианилин (в %) 40:25:35. Обе мембраны были изготовлены по классической схеме. В качестве ЭА использовался ионный ассоциат – катион супрастина с анионом фосфорновольфрамовой кислотой.

Для обоих электродов были определены метрологические характеристики. Крутизна электродной функции для твердо-контактного и классического электродов составляет 56 мВ/рС, что достаточно близко к теоретическому значению. Время отклика твердо-контактного электрода не превышало 20 с., для классического электрода составил 1-1,5 минуты. Рабочий диапазон рС для обоих электродов одинаков и составляет (1-4,5 рС). Время жизни классического электрода – 3 месяца, а твердо-контактного – 6 месяцев. Другим достоинством твердо-контактного электрода по сравнению с классическим, является отсутствие в его конструкции драгоценных металлов. Для подтверждения возможности использования твердо-контактного электрода, было определено содержание супрастина в модельных смесях. При этом взятые и найденные значения, находились в хорошем соответствии, доверительный интервал не превышал 4%.

С технологической точки зрения и по некоторым метрологическим характеристикам, твердо-контактный электрод выгодно отличается от классического. Поэтому, для практического использования и определения супрастина, на наш взгляд целесообразнее использовать твердо-контактный электрод.

Спектрофотометрическое определение железа и церия при их совместном присутствии

Буравлёва А.С. (студент, 4 курс)

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

Настоящая работа посвящена спектрофотометрическому определению железа и церия при их совместном присутствии. Окраска комплексов железа и церия с трилоном Б зависит от рН раствора. За оптимальное значение принимают рН=9,0, при котором комплекс железа имеет максимальную окраску и достаточно устойчив. [1] При добавлении H_2O_2 интенсивность комплекса церия уменьшается, а комплекса железа увеличивается.

Соблюдая данные условия, к раствору железа и равного количества церия в мерной колбе ёмкостью 25 мл вводили 3 мл 0,2 М трилона Б, 3 мл водного раствора глицерина, 2 мл 5% раствора H_2O_2 , 4 мл аммиачного буферного раствора с рН=9,0 и доводили водой до метки. На спектрофотометре через 20 минут измеряли оптическую плотность с толщиной слоя 1 см при длине волны 372 и 530 нм. Методом титрования находили точные концентрации отдельных растворов железа и церия. Установив концентрации растворов, определяли железо и церий при их совместном присутствии.

Максимальное поглощение железа наблюдали при 530 нм, а комплекса церия на этой же длине волны незначительно. Определяли железо при 530 нм, а при 372 нм – суммарную оптическую плотность комплексов церия и железа. Оптическая плотность церия равна разности оптических плотностей при 372 нм и при 530 нм.

Полученные результаты показывают возможность использования описанного метода для определения железа и церия при их совместном присутствии.

1. Гайдук О.В., Панталер Р.П. // Заводская лаборатория. 2007. Т. 73. №3. С. 15-17.

Разработка технологии создания индикаторного материала для экспресс-анализа нитрат-ионов

Варламова А. А. (магистрант 1-го года обучения)

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

Для аналитического экспресс-контроля содержания нитратов в продуктах растениеводства, воде, пищевых продуктах и сточных водах различного происхождения используются многокомпонентные химические индикаторы на твердофазном носителе. Недостатками существующих химических индикаторов является многокомпонентность, короткий срок годности входящих в них реактивов, а также содержание вредных веществ (например, 1-нафтиламин) при их сравнительно высокой цене.

Новизна проекта заключается в создании дешевой, компактной, удобной, простой в использовании и, самое главное, не содержащей вредных веществ в своем составе индикаторной бумаги для экспресс-анализа нитрат-ионов. В рецептуру запатентованной индикаторной бумаги вместо кислотных реагентов и маскирантов, включен универсальный экологически безопасный комплексон – N-(карбоксиметил)аспарагиновая кислота (КМАК), что упрощает устройство. Кроме того, в слое с тестом Грисса вместо канцерогенного 1-нафтиламина используется безопасный диметил-1-нафтиламин, который по химическому действию аналогичен 1-нафтиламину [1].

Нами предлагается простейшее устройство, состоящее из 3 отдельных полосок фильтровальной бумаги, пропитанных компонентами, закрепленных на полимерной подложке. Работа этого устройства осуществляется в процессе смачивания полосок бумаги анализируемым раствором.

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.

Антикоррозийная активность полианилина

Гурцева И.С. (магистрант 1-го года обучения)

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

В последнее время продолжается изучение физико-химических свойств электропроводного полимера – полианилина (ПАНИ). Этот полимер получается из доступного сырья, и обладает интересными физико-химическими свойствами. В литературе появились отдельные сообщения о том, что электропроводящий полимер – ПАНИ, обладает антикоррозийной активностью [1]. Поэтому целью настоящей работы являлось изучение антикоррозийной активности плёнки ПАНИ, нанесённой на поверхность стали-3.

В качестве подложки использовали сталь-3. Синтез ПАНИ осуществляли путём химической поликонденсации ПАНИ под действием окислителя. Реакция проводилась в водной среде, содержащей гидрохлорид анилина, HCl (1 М), в присутствии $\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_8$. При этом ПАНИ получали в виде порошка темно-зеленого цвета, в форме соли эмеральдина.

Полученную соль перевели в основание, путем обработки концентрированным раствором аммиака. Для получения пленки ПАНИ на поверхности подложек, полученный раствор наносили и сушили. Для антикоррозийных испытаний, покрытые и не покрытые пластины (для контрольного образца) опускали в растворы NaCl , CH_3COOH , Na_2CO_3 . За коррозией следили гравиметрическим методом и определением количества железа, перешедшего в раствор.

Было установлено, что ПАНИ существенно замедляет коррозию. Механизм этого явления предстоит еще изучить, однако мы предполагаем, что он связан с пассивацией поверхности стали-3.

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

Содержание органических кислот в сборе витаминов

Исаева А.А. (магистрант 2-го года обучения)

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

В работе рассмотрены аналитические возможности потенциметрического метода применительно к фармакопейному анализу.

Объектами исследования служили образцы плодов шиповника (ЗАО фирма "Здоровье") серия Т0086. Около 25 г (точная навеска) плодов шиповника, измельченного до размеров частиц, проходящих сквозь сито с отверстиями диаметром 2 мм, помещали в колбу вместимостью 250 мл, соединенную с обратным холодильником, заливали 200 мл очищенной воды и выдерживали в течение 2 ч на кипящей водяной бане. Затем раствор охлаждали, фильтровали, переносили в мерную колбу вместимостью 250 мл, доводили объем извлечения водой до метки и перемешивали (раствор А) [1].

В мерный стакан с помощью пипетки отмеряли 25 мл раствора А, опускали стеклянный и хлорсеребряный электроды, присоединенные к соответствующим клеммам на иономере. Титровали 0,1 М раствором гидроксида натрия с помощью микробюретки при постоянном перемешивании с помощью магнитной мешалки. Фиксировали значения ЭДС и по полученным результатам строили кривые титрования в координатах рН — f(V) для определения точки эквивалентности [2].

Результаты анализа исследуемого сбора плодов шиповника показали, что содержание суммы органических кислот в перерасчете на яблочную кислоту составили $2,79 \pm 0,002$.

1. Н.Н. Федоровский, А.И. Марахова, А.А. Сорокина и др. Потенциметрическое титрование в анализе водных извлечений // Фармация. 2008. С15-16.
2. А.И. Марахова. Применение физико-химических методов в анализе сырья лекарственных растений семейства яснотковых. Пермь. 2009. С 24.

**Физико-химический анализ молока и молочных продуктов
различных производителей**

Лобзова В.А. (студентка, 4 курс)

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

Состав молока чрезвычайно разнообразен, он включает в себя: белки, жиры, углеводы, витамины, минеральные вещества, а так же гормоны и иммунные тела. Целью настоящей работы является применение физико-химических методов анализа для исследования качества молока.

Жирность молока определяли по методике: в два молочных жиромера, наливали по 10 мл серной кислоты ($\rho = 1810 \text{ кг/м}^3$). Затем так, что бы жидкости не смешивались, помещали в жиромер 11 мл молока. После этого, при помощи дозатора добавляли 1 мл изоамилового спирта. Жиромеры плотно закрывали с помощью пробок, содержимое взбалтывали. Устанавливали жиромеры пробкой вниз в водяную баню при температуре 65°C на 5 минут, а затем центрифугировали и определяли уровень жира в жиромере [1]. В ходе проведения данного опыта были получены следующие данные:

Название	Жирность молока	
	Указанная на упаковке	Полученная экспериментально
Простоквашино	2,5%	2,5%
Домик в деревне	2,5%	2,5%
Агуша	3,2%	3,0%
Тема	3,2%	3,2%
Молоко из Ржева	3,2%	3,2%
Деревенское	–	4,0%

Результаты исследования показали, что полученная жирность молока совпадает с жирностью, указанной на упаковке. Однако, жирность детского молока «Агуша» меньше заявленной.

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

**Изучение физико-химических свойств
гексаметилендиаминдиантарной кислоты**

Лукьянова Н. И. (аспирант 4-го года обучения)

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

Нами синтезирована гексаметилендиаминдиянтарная кислота (ГМДДЯК). Термодинамические константы K_0 , находили путем экстраполяции данных потенциометрического титрования на нулевую ионную силу $I=0$.

Таблица 1.

Отрицательные логарифмы концентрационных и термодинамических ступенчатых констант кислотной диссоциации ГМДДЯК. 298К

pK_i	$I=0$	$I=0.1$	$I=0.4$	$I=0.6$
pK_1	3.30 ± 0.1	2.94 ± 0.02	3.23 ± 0.05	2.08 ± 0.03
pK_2	4.08 ± 0.02	3.88 ± 0.03	5.08 ± 0.05	4.11 ± 0.02
pK_3	6.16 ± 0.02	5.99 ± 0.02	7.27 ± 0.04	6.41 ± 0.03
pK_4	10.34 ± 0.16	10.25 ± 0.01	10.19 ± 0.02	9.94 ± 0.03

Таблица 2.

Отрицательные логарифмы констант устойчивости ГМДДЯК с щелочноземельными металлами при $I = 0,1$. 298К

ГМДДЯК				
Комплекс	Mg^{2+}	Ca^{2+}	Sr^{2+}	Ba^{2+}
МУ	5.07 ± 0.05	6.63 ± 0.08	3.18 ± 0.07	2.56 ± 0.05
МНУ	14.49 ± 0.17	14.91 ± 0.19	13.96 ± 0.19	13.68 ± 0.33

Из данных, представленных в таблице 2, следует, что с ростом ионного радиуса металлов наблюдается понижение устойчивости комплексов $\lg K_{MgL} > \lg K_{CaL} > \lg K_{SrL} > \lg K_{BaL}$.

Физико-химическое исследование комплексообразования кобальта (II) с L-аминокислотами

Проведено термогравиметрическое исследование комплексов кобальта (II) с L-аспарагиновой и L-глутаминовой кислотами на дифференциальном сканирующем калориметре. Нагрев осуществляли в атмосфере воздуха.

При нагревании комплексов кобальта (II) как с L-аспарагиновой, так и с L-глутаминовой кислотами отщепляется по 3 молекулы воды и брутто формулы этих комплексов $\text{Na}[\text{CoX}] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, где X – общее обозначение аминокислот. Установлено, что в комплексе кобальта с L-аспарагиновой кислотой присутствуют одна молекула воды во внешней сфере и две во внутренней. В комплексе кобальта (II) с L-глутаминовой кислотой две молекулы воды присутствуют во внешней сфере и одна во внутренней. Это может быть объяснено возможными стерическими затруднениями, создаваемыми более громоздкими фрагментами глутаминовой кислоты во внутренней сфере комплексов кобальта с изученными аминокислотами (табл.).

Таблица

Результаты термического анализа комплекса кобальта (II) с L-аспарагиновой кислотой – X и L-глутаминовой кислотами - Y

Комплексопат	Стадии дегидратации, °С		Убыль массы, моль H_2O
	1	2	
$\text{Na}[\text{CoX}] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	150	270	1+2
$\text{Na}[\text{CoY}] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	150	240	2+1

Авторы выражают благодарность сотрудникам Лаборатории физико-химического анализа Центра коллективного пользования научной аппаратурой и оборудования ТвГУ.

Спектрофотометрическое определение церия и меди при их совместном присутствии

Петрова В.Ю. (магистрант 1-го года обучения)

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

Настоящая работа посвящена спектрофотометрическому определению церия и меди при их совместном присутствии. Окраска комплексов меди и церия с трилоном Б зависит от рН раствора. За оптимальное значение принимают рН=9,0, при котором комплекс меди имеет максимальную окраску и достаточно устойчив [1].

Соблюдая данные условия, к раствору церия и равного количества меди в мерной колбе емкостью 25 мл вводили 3 мл 0,2 М трилона Б, 3 мл водного раствора глицерина, 2 мл 5% раствора пероксида водорода H_2O_2 , 4 мл аммиачного буферного раствора с рН=9,0 и доводили водой до метки. На спектрофотометре через 20 минут измеряли оптическую плотность с толщиной слоя 1 см при длине волны 372 и 620 нм. Методом титрования устанавливали точные концентрации отдельных растворов церия и меди, а также определяли церий и медь при их совместном присутствии [2].

Таблица

Определение церия Се и меди Си при совместном присутствии

Введено, мг		Найдено, мг		Доверительный интервал	
Се	Си				
0,1	0,1	0,098	0,097	$\pm 0,002$	$\pm 0,003$
0,2	0,2	0,197	0,196	$\pm 0,003$	$\pm 0,004$
0,3	0,3	0,297	0,295	$\pm 0,003$	$\pm 0,005$

1. Булатов М.И., Калинин И.П. Практическое руководство по фотометрическим методам анализа. Л.: Химия, 1986. 432 с.
2. Гайдук О.В., Панталер Р.П. // Заводская лаборатория. 2007. Т. 73. № 3. С. 15-17

Исследование физико-химических свойств активированных пленок диоксида кремния гетерополикислотами

Радин А.С. (магистрант 2-го года обучения)

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

Развитие химической технологии, решение проблем экологического мониторинга и анализа невозможны без развития средств автоматического контроля. Одним из перспективных решений являются химические сенсоры на основе пленок диоксида кремния, активированных различными добавками. В качестве активаторов нашли применение металлы платиновой группы, хлориды и оксиды щелочных и переходных металлов, ангидриды элементов пятой группы и другие.

Гетерополикислоты (ГПК) как класс неорганических соединений обладают ценными для активирующей добавки свойствами: способность к многопротонным и многоэлектронным переходам и изменению каталитической активности по отношению к различным реагентам при изменении состава ГПК. Это и послужило основанием для выбора нами гетерополикислот в качестве активирующей добавки в пленки диоксида кремния, используемых в чувствительных элементах сенсоров.

В настоящее время нами ведутся исследования в области допирования пленок диоксида кремния различными типами ГПС. К примеру, ГПС 2:18 ряда при высокой температуре оказались чувствительными к водороду. Введение ряда переходных металлов в активную часть сенсоров позволило использовать последние для регистрации концентрации аммиака в атмосфере при обычной температуре. Важной задачей является повышение чувствительности сенсоров на основе ГПК 2-18 ряда, во многом обусловленной содержащимися в ней лигандами. Исследуемые нами гетеролигандные ГПК 2-18 ряда на основе ванадия и вольфрама показали свою перспективность в качестве активирующих добавок пленок для чувствительных элементов сенсоров на основе пленок диоксида кремния.

Качественное и количественное определение карбоксигемоглобина в биологических системах

Решетова А.С. (студент, 5 курс)

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

Карбоксигемоглобин – комплексное соединение, образующееся в крови человека в результате связывания гемоглобина крови с угарным газом, полученным извне, например, при несчастных случаях, таких как пожар, задымление, неисправность печей и дымоходов. В зависимости от количества попавшего в организм угарного газа, пострадавший может получить отравление различной степени тяжести. Этот факт представляет интерес для судебно-медицинской экспертизы. По образующемуся комплексу карбоксигемоглобин можно установить содержание в крови угарного газа [1].

Целью данной работы является качественное исследование биологического материала человека на присутствие в нем карбоксигемоглобина. Для достижения поставленной цели были выбраны два метода определения – спектрофотометрический и фотометрический. Данный выбор обусловлен экспрессностью методов, их высокой чувствительностью, легкостью обработки данных и простота подготовки образцов к исследованию [2].

В качестве исследуемого материала были взяты образцы крови мужчин и женщин разного возраста. Были подобраны оптимальные условия для проведения эксперимента.

1. Коржов В.И., Видмаченко А.В., Коржов М.В. Монооксид углерода (обзор литературы)//Журн. АМН України. – 2010. – Т. 16, № 1. – С. 23-37. Доступно на сайте:http://archive.nbuu.gov.ua/portal/chem_biol/jamn/2010_1/Korzhov.pdf.

2. Соседко Ю.И., Самчук В.В. Судебно-медицинская экспертиза в случаях отравления окисью углерода (практическое пособие). – М., 2008. – 20 с.

**Определение влажности меда
как показателя качества и пригодности для хранения**

Семашко Е.И. (студент, 5 курс)

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

Физико-химические показатели качества меда дают точную характеристику его состава и свойств, но требуют наличия специальных приборов и оборудования. Эти показатели определяют в специальных лабораториях контроля качества пищевых продуктов. Порядок определения физико-химических показателей меда описан в действующих ГОСТ 19792-2001 и ГОСТ Р 52451-2005. На практике используют более простые и менее трудоемкие способы определения показателей качества меда. Одним из надежных и экспрессных методов анализа качества меда является определение его влажности, характеризующей его зрелость и пригодность для длительного хранения. Зрелый мед имеет влажность не более 20%. Повышенное содержание воды может быть в меде, фальсифицированном водой или жидким сахарным сиропом.

Влажность меда можно установить как рефрактометрическим методом (ГОСТ 19792-2001) по показателю преломления его водного раствора, так и в результате определения плотности этого раствора с помощью ареометра.

Для анализа готовят раствор меда с водой в соотношении 1: 2. Разведенный таким способом мед в практике лабораторных исследований называют “раствором меда”. Плотность такого раствора меда, измеренную с помощью ареометра, используют для пересчета на сухой остаток по таблице К. Виндиша (табл. 1) [1].

Таблица 1.

Определение сухого остатка по показаниям ареометра, $t = 20^{\circ}\text{C}$

Образец меда	Измеренный показатель преломления	Сухой остаток, %
Башкирский	1,1190	27,77
Подмосковный	1,1140	19,87
Тверской	1,1140	19,87

Плотность рабочего раствора Башкирского меда (1:2) при 20°C равна 1,1190, что соответствует 27,77% сухого остатка. Поскольку мед был разведен в

3 раза, то сухой остаток неразведенного меда будет равен $27,77 \cdot 3 = 83,31\%$. Тогда массовая доля воды составит: $100 - 83,31 = 16,69\%$. Аналогичный расчет для Подмосковного меда показывает массовую долю воды $19,87\%$. Для меда Тверского расчетная массовая доля воды составляет тоже $19,87\%$.

Определение массовой доли воды рефрактометром основано на изменении рефракции (преломляемости) световых лучей в зависимости от содержания и соотношения сухих веществ и воды в меде. Каплю исследуемого меда наносят стеклянной палочкой на нижнюю призму рефрактометра, предварительно юстированного по дистиллированной воде. Призмы замыкают. При помощи юстировочного винта совмещают границу между светлой и темной зонами с точкой пересечения нитей в окуляре и снимают показания прибора. По табл. 2 устанавливают содержание воды в меде.

Таблица 2.

Определение массовой доли воды
по показателю преломления образцов меда, $t = 20^\circ\text{C}$

Образец меда	Измеренный показатель преломления	Массовая доля воды, %
Башкирский	1,4946	16,8
Подмосковный	1,4876	19,6
Тверской	1,4870	19,8

Результаты измерения массовой доли воды в исследованных образцах показали высокое качество зрелого меда. Однако, рефрактометрический метод оказался более точным и позволил не только дать качественную оценку образцов меда, но и установить некоторое различие качества образцов Подмосковного и Тверского меда.

1. Кизель А.Р. Практическое руководство по биохимии растений / Биомедгиз, М.-Л.: 1934, 310 с.

Титриметрическое определение количества аскорбиновой кислоты в ягодах годжи

Скрыпникова И.А. (магистрант 1-го года обучения)

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

Аскорбиновая кислота является важным элементом питания и присутствует в составе многих продуктах питания, а также фармацевтических и косметических препаратов [1]. Аскорбиновая кислота относится к числу наиболее важных витаминов, поддерживающих нормальное функционирование человеческого организма и участвующих во многих метаболических процессах, поэтому определение содержания аскорбиновой кислоты в различных препаратах является важной аналитической задачей.

Известно, что в состав ягод годжи входят такие вещества, как: 21 минерал, 18 аминокислот, 6 жирных кислот, 4 полисахарида, линолевая кислота, углеводы, жиры, протеины, клетчатка и витамины (С, В₁, В₂, В₆, Е). Для количественного определения содержания аскорбиновой кислоты был выбран метод окислительно-восстановительного титрования [1]. Титрование проводили двумя способами (йодатным и йодометрическим). В качестве титранта брали два вещества: КЮ₃ и I₂ в KI. При титровании первым способом содержание кислоты составило 16,138 мг в 10 г ягодах, а во втором случае – 17,612 мг. Согласно теоретическим данным на 10 г ягод приходится 14,8 мг аскорбиновой кислоты. Из данных анализа видно, что экспериментальные результаты согласуются с теоретическими [1]. В связи с чем, рекомендуется употребление ягод годжи для исключения дефицита аскорбиновой кислоты в организме.

1. Лавренов С.Н. L-аскорбиновая кислота. Свойства и методы химической модификации / С.Н. Лавренов, М.Н. Преображенская // Химико-фарм. журн. – Т. 39. – №5. – 2005 – С. 26-38.

Хроматографические исследования органических кислот для установления натуральности соков

Цветкова Е.Е., Шломак И.В. (магистранты 1-го года обучения)

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

В настоящее время на продуктовый рынок поступает разнообразная винопродукция неизвестных марок в эффектно оформленных бутылках, зачастую являющаяся суррогатом или выжимочным вином. Соки – это базовое сырье для виноделия и наиболее востребованный в современном мире продукт питания, уникальный источник необходимых человеку биологически активных веществ. Внушительные экономические показатели сокового производства и винодельческой промышленности обуславливают появление большого количества контрафактной (фальсифицированной) продукции [1].

Целью данной работы является выявление кислот в соках для определения их натуральности. Благодаря простоте и доступности метод тонкослойной хроматографии остается одним из самых популярных экспресс - методов анализа в органической химии [2]. Для анализа были выбраны янтарная, гликолевая, щавелевая, винная кислоты. Известно, что янтарная, щавелевая, винная и гликолевая кислоты содержатся в зеленом винограде [3]. Использовали свежее выжатые соки. Были подобраны оптимальные условия для проведения эксперимента.

1. Напитки. Технологии и инновации. / Аникина Н.С., Гержикова В.Г, Погорелов Д.Ю., Жиликова Т.А. Науч. -метод.журн., 2015, Режим доступа: <http://techdrinks.info/ru>.
2. Количественная тонкослойная хроматография / Березкин В.Г., Бочков А.С. М.: Наука, 1980 – 183 с.
3. Аналитика и контроль / Захарова А.М. Карцова Л.А., Гринштейн. И.Л. Санкт –Петербург: ООО «Анолит», Т.17, №2, 2013-С.204.

Секция органической химии

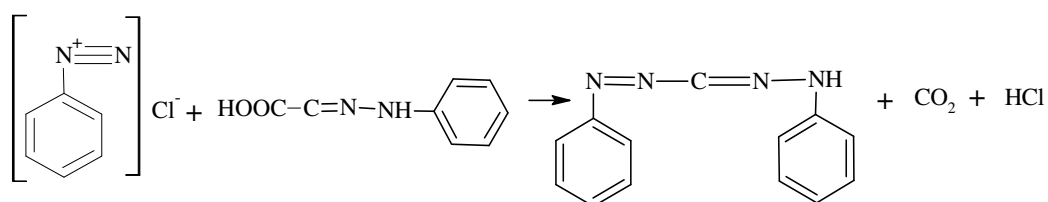
Синтез 1,5-дифенилформазаната меди (II)

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

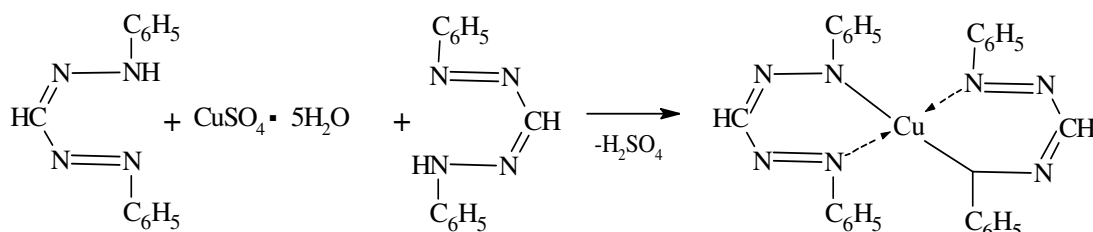
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Егорова И.Ю.

Соединения класса формазанов относятся к семейству хелатирующих анионных π -сопряженных N-донорных лигандов. Формазаны проявляют металлохромные свойства, поэтому их используют в качестве аналитических реагентов, комплексонов и красителей различного назначения. Представленная работа посвящена получению металлокомплекса на основе органического лиганда – 1,5-дифенилформазана и сульфата меди (II).

Синтез металлокомплекса проводили в несколько этапов. Взаимодействием фенилгидразона пропандиовой кислоты с фенилдиазоний хлоридом получен 1,5-дифенилформазан.



Взаимодействием водного раствора 1,5-дифенилформазана со спиртовым раствором сульфата меди (II) синтезирован металлокомплекс – 1,5-дифенилформазанат меди (II).



В ИК-спектре полученного металлокомплекса отсутствуют характерные для исходного соединения валентные колебания NH₂- связи полосы поглощения на 3473-3371 см⁻¹, при этом сохраняется полоса колебаний NH-связи в районе 3308-3117 см⁻¹ и появление новых полос поглощения на 1630-1583 см⁻¹, что подтверждает образование связи C=N и соответствует литературным данным.

Изучение жирнокислотного состава растительных масел и разработка опытных купажей

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

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

Масложировая и молочная продуктовые группы – наиболее развивающиеся в сегменте продуктов здорового питания. Жиры занимают второе место в рационе питания российского потребителя. Они играют большую роль в организме, что связано с их высокой калорийностью и структурными свойствами.

Представленные на рынке Тверской области масла – подсолнечное, льняное, кукурузное, горчичное, рыжиковое не удовлетворяют потребности организма в полиненасыщенных жирных кислотах (ПНЖК). По современным представлениям в ежедневном рационе здорового человека соотношение ω -6: ω -3 ПНЖК должно составлять 10:1, в случаях нарушения липидного обмена рекомендуется соотношение ПНЖК ω -6: ω -3 – 5:1 или 3:1 (диетическое питание).

На сегодняшний день создание новых функциональных продуктов питания является одним из наиболее перспективных направлений, которое заключается в разработке новых купажей (смесей) растительных масел с более оптимизированным жирнокислотным составом и рекомендуемым соотношением омега-6 : омега-3 кислот.

В настоящей работе методом линейного программирования были рассчитаны составы опытных купажей, которые могут быть использованы как функциональные продукты питания. Данные смеси полностью соответствуют физико-химическим показателям.

В разработанных купажах масел соблюдено необходимое соотношение ω -6 и ω -3 полиненасыщенных жирных кислот, а именно: 10:1; 5:1, 3:1. То есть данные смеси могут непосредственно использоваться в пищу в качестве салатного масла, жировой основы и как лечебно-профилактический продукт.

Определение содержания протеина и липидов в кормах для домашних животных

Волкова М.Ю. (студент, 5 курс)

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

Протеин играет первостепенную роль в жизнедеятельности живого организма; служит основой всех жизненно важных процессов – размножения, роста, развития, входит в состав ферментов, гормонов и иммунных тел. Основная же функция липидов сводится к тому, что жир является главным аккумулятором энергии в организме, служит важным источником теплоты. Липиды входят в качестве структурного материала в состав протоплазмы всех клеток живого организма. В связи с чем, представленная работа посвящена исследованию содержания протеина и липидов в кормах для домашних животных до и после термической обработки.

Проведено определение содержания сырого протеина, жира, кальция и фосфора, а также кислотного и перекисного чисел в образцах компонентов корма до термической обработки и образцах готовой продукции. Для производства готового корма для кошек «Премиум» используют процесс экструдирования, который включает в себя термическую обработку (110-160°C) при повышенном давлении (40-60 атм.) компонентов корма и дальнейшего формирования гранул продукта. А также определены качественные показатели образцов готовой продукции, которые вторично подверглись нагреванию. Анализ полученных результатов показал, что содержание протеина незначительно повысилось. Общее содержание жира в исследуемых образцах после вторичной термической обработки значительно понизилось, а кислотное и перекисное числа выросли. Возможно, это связано с окислительной деструкцией жиров, в результате чего образуются свободные жирные кислоты и первичные продукты окисления - гидроперекиси. Представленные данные говорят о том, что термическая обработка не влияет на содержание неорганических компонентов корма – кальция и фосфора.

Разработка композиции для защиты поверхностей от мхов и лишайников

Герасимова Н.Ю. (магистрант, 2-го года обучения)

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

На данный момент на рынке бактерицидных средств недостаточно композиций, которые позволяли бы защитить материалы поверхности крыш от мхов и лишайников. Так как, с каждым годом строительство развивается все интенсивнее, то проблема создания такого защитного средства широкого спектра действия весьма важна и актуальна.

Из литературных источников известно, что эффективное бактерицидное действие на мхи и лишайники оказывают четвертичные аммониевые соли производные хлорида бензалкония с длинноцепочечными радикалами децил- и додецил.

Настоящая работа посвящена разработке композиции для защиты мхов и лишайников, обладающей высокой антибактериальной активностью. Благодаря реакции кватернизации хлористого бензила с N,N – диметилдодециламином был получен бензилдодецилдиметиламмоний хлорид.

Для оценки антибактериальной активности рассчитывалась относительное снижение числа микроорганизмов в посевах по сравнению с контрольным образцом. Антибактериальная активность бензилдодецилдиметиламмоний хлорида составила 94%, что подтвердила его антибактериальные свойства.

Для создания защитного комплекса бактерицидного действия, в работе провели подбор эффективного пленкообразователя. Реакцией поликонденсации был получен полиэтиленфталатмалеат, выход реакции в эксперименте составил 94%. Исследование реологических свойств пленок показало, что наполнение пленки прочно совместимы с гидрофильной поверхностью и не отстают от подложки на протяжении всего времени эксперимента.

Получение и свойства ферритов d-переходных металлов на углеводородной основе

Голубихина А.С. (магистрант 2-го года обучения)

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

В последние годы интерес к магнитным суспензиям на основе ферритов неуклонно возрастает. Это связано с тем, что присутствию ионов переходных металлов в составе частиц дисперсной фазы повышает устойчивость этих частиц к окислению. [1].

В настоящей работе был выбран способ получения устойчивого в неоднородном магнитном поле феррита кобальта. Синтез осуществляли по реакции:



При получении сложного феррита ионы двухвалентного железа Fe^{3+} были полностью замещены ионами цинка Zn^{2+} ($\text{Fe}^{3+}/\text{Zn}^{2+}=2/1$). В ходе реакции осаждения происходило так называемое «созревание» осадков, что отмечалось постепенным переходом его окраски от тёмно-коричневой до чёрной (как у магнетита) [2].

Образовавшиеся магнитные частицы феррита кобальта (CoFe_2O_4) загущали с помощью раствора олеиновой кислоты и керосина. С помощью метода сканирующей электронной микроскопии были получены электронные фотографии суспензии и определены размеры наночастиц.

1. Меньшова С. Б. Ферриты - изделия стратегического значения // Труды международного симпозиума Надежность и качество. 2008. Т. 1. С. 16-19.
2. Пат. 2340972 Российская Федерация, МПК Н 01 F 1/44. Способ получения магнитной жидкости / Ю.П. Грабовский, М.А. Берлин, Г.В. Яковенко, В.И. Кошечев; заявитель и патентообладатель ЗАО «НИПИ «ИнжГЕО». №200710210/02; заявл. 19.01.2007; опуб. 10.12.2008, Бюл. №34. С.9.: ил.

Синтез и физико-химические свойства ионных жидкостей производных 1-децил-3-алкилимидазолия

Горбунова Д.В. (студент, 5 курс)

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

Ионные жидкости (ИЖ) – это низкотемпературные расплавы органических солей с температурой плавления ниже комнатной ($t_{пл} < 100^\circ\text{C}$), состоящие из объемных органических катионов (чаще всего с низкой степенью симметрии) и неорганических или органических анионов.

К настоящему времени ИЖ охватили широкий спектр приложений благодаря своим уникальным электрохимическим и физико-химическим свойствам, позволяющим использовать наиболее широкий диапазон потенциалов в отличие от водных растворов, а так же это дало возможность применять их в качестве альтернативны «зеленой» химии.

В настоящей работе в качестве объектов исследования были выбраны ИЖ с катионом 1-децил-3-алкилимидазолия и различными неорганическими анионами (Br^- , BF_4^- , PF_6^-). Длина алкильного заместителя варьировалась от C_1 до C_{10} . Была исследована термическая стабильность солей 1-децил-3-алкилимидазолия.

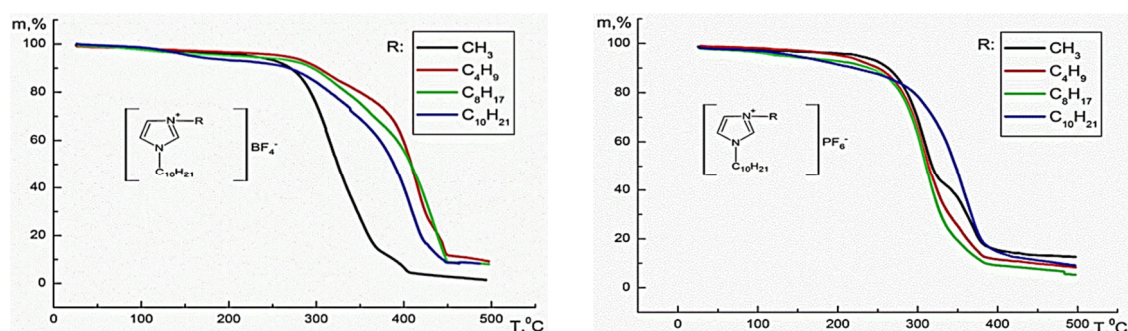


Рис. 1. Кривые потери массы тетрафторборатов и гексафторфосфатов 1-децил-3-алкилимидазолия.

Все исследованные тетрафторбораты и гексафторфосфаты 1-децил-3-алкилимидазолия устойчивы на воздухе до $270\text{--}310^\circ\text{C}$ и медленно разлагаются в интервале $300\text{--}370$ (440) $^\circ\text{C}$. Процесс разложения сложен и состоит из нескольких стадий, на что указывают перегибы на кривых потери массы.

Влияние неионогенных поверхностно-активных веществ на свойства растворов солей пиридиния

Гурина Е.С. (студент, 4 курс)

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

Актуальным направлением современной химии является изучение свойств смесей поверхностно-активных веществ (ПАВ), используемых в различных областях промышленности и при многих типах исследований. Это связано с тем, что получаемые смеси ПАВ в ряде случаев могут быть более эффективными, чем индивидуальные вещества. Особый интерес представляют смеси катионное ПАВ/неионогенное ПАВ, так как их синергизм исследован меньше всего.

В данной работе осуществлен синтез катионных ПАВ – бромидов алкилпиридиния, по реакции нуклеофильного замещения. Полученные соли общей формулы $[C_5H_5NR]Br$, где $R=C_{10}H_{21}$, $C_{12}H_{25}$ очищены перекристаллизацией из бутилового спирта до постоянной температуры плавления.

В качестве неионогенного ПАВ в работе использовали ОП-10 (моноалкиловый эфир полиэтиленгликоля) промышленного образца без дополнительной очистки.

В ходе работы были исследованы коллоидно-химические свойства растворов индивидуальных катионных и неионогенного ПАВ и их смесей (поверхностное натяжение, пенообразующая способность и устойчивость пены). В приготовленных смесях концентрация катионных ПАВ составила: 10^{-2} , 10^{-3} , 10^{-4} , 10^{-5} ; а неионогенного ПАВ 0,1%. Установлено, что наибольшее снижение поверхностного натяжения воды дает следующая смесь: децилпиридинийбромид (10^{-5})/ОП-10 (0,1%), наибольшей пенообразующей способностью обладает смесь децилпиридинийбромид (10^{-2})/ОП-10 (0,1%), а самую устойчивую пену дают смеси децилпиридинийбромид (10^{-4})/ОП-10 (0,1%) и додецилпиридинийбромид (10^{-4})/ОП-10 (0,1%).

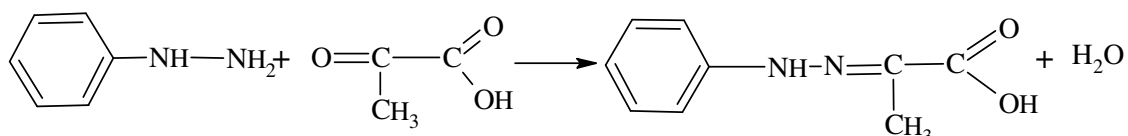
Получение 3-метил-1,5-дифенилазогидразона

Елистратова М.К. (магистрант 1-го года обучения)

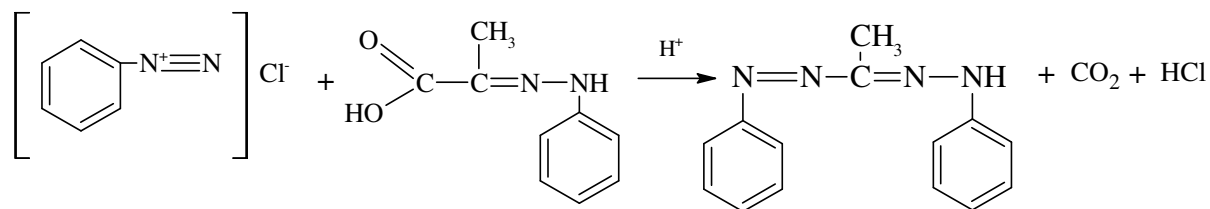
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Егорова И.Ю.

Лиганды на основе азогидразона широко используются в качестве термо- и фотохромных веществ, красителей тканей, красителей технического назначения и, особенно в биохимии и медицине. Доступность азогидразонов обусловила большой интерес химиков к фармазанам как к прекурсорам в органическом синтезе, как оптических фильтров, термочувствительных элементов и катализаторов. Представленная работа посвящена получению азотсодержащего лиганда на основе незамещенного гидразина – 3-метил-1,5-дифенилформаза.

Получение азогидразона проводили в несколько этапов. Реакцией окисления молочной кислоты получена пировиноградная кислота, строение которой подтверждено качественной реакцией. Конденсацией фенолгидразина с пировиноградной кислотой синтезирован фенолгидразон пировиноградной кислоты.



Реакцией взаимодействия фенолдиазония хлорида с фенолгидразоном пировиноградной кислоты получен азогидразон - 3-метил-1,5-дифенилформаза.



Синтезированное соединение представляет собой мелкокристаллическое вещество темно-коричневого цвета. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопического анализа. На основе синтезированного азотсодержащего лиганда планируется получить комплексные соединения с двухвалентными металлами.

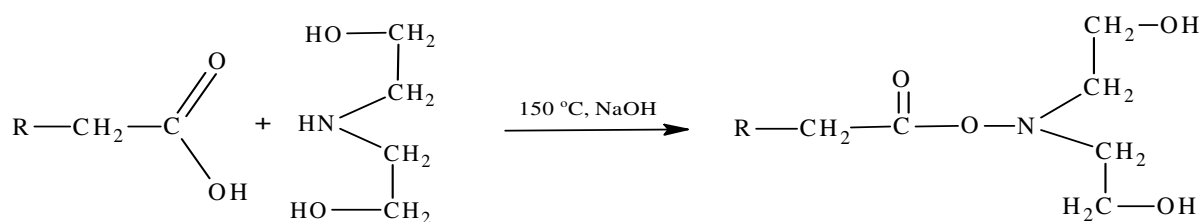
Синтез и исследование диэтаноламидов жирных кислот на основе жирных кислот

Климентьев И.С. (студент IV курс ТвГУ)

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

Гигиенические моющие средства получают на основе диэтаноламидов жирных кислот, которые обладают особыми свойствами: являются мягкими СО-ПАВ для моющих продуктов, хорошими пенообразователями, увеличивают стабильность продуктов при низких температурах, повышают вязкость. Диэтаноламиды жирных кислот находят своё применение в производстве различных гелей, шампуней, бытовой химии [1].

В представленной работе синтезированы диэтаноламиды на основе лауриновой, олеиновой и стеариновой кислот и диэтаноламина при нагревании в течении 3-х часов при температуре 150°C в присутствии катализатора – твёрдого гидроксида натрия по реакции:



где R= C₁₈H₃₃, C₁₂H₂₃, C₁₇H₃₅.

Полученное соединение представляет собой вязкую жидкость бледно желтого цвета, которую очищали методом перегонки при атмосферном давлении. Строение соединения было подтверждено данными ИК- спектроскопии. Исследованы коллоидно-химические свойства полученного соединения: поверхностное натяжение, смачивание твёрдых поверхностей, определение критической концентрации мицеллообразования (ККМ).

1. К. Холмберг, Б. Йёнссон. Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных растворах. Пер. с англ. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний 2010.

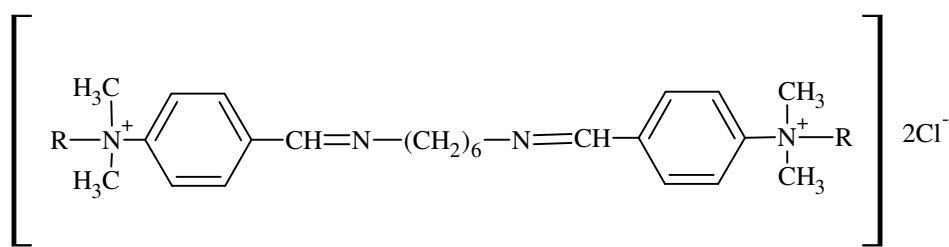
Синтез поверхностно-активных веществ на основе бис-азометинов

Ковалева Е.В. (студент, 4 курс)

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

В современном мире поверхностно-активные вещества (ПАВ) являются одним из перспективных, распространенных и развивающихся классов химических веществ. Применяются во многих областях: в промышленности, в медицине, в косметологии и т.д. Широкое применение обусловлено их способностью в низких концентрациях интенсифицировать технологические процессы, а также модифицировать поверхности, придавая им необходимые свойства. Четвертичные аммониевые соединения, которые принадлежат к классу катионных поверхностно-активных веществ и имеют азометиновую группировку в гидрофильном центре, являются веществами, которые обладают поверхностной активностью.

В данной работе были синтезированы катионные ПАВ общей формулы



где R = C₈H₁₇; C₁₀H₂₁; C₁₂H₂₅.

Соединения получены по реакции нуклеофильного замещения бис-азометинов высшими алкилгалогенидами при мольном соотношении реагентов 1:2,2 в среде этанола.

Полученные соединения представляют собой порошкообразные вещества от светло-желтого до коричневого цветов. Соединения растворимы в полярных растворителях, охарактеризованы данными ИК-спектроскопии, проведено исследование поверхностно-активных свойств водных растворов синтезированных соединений.

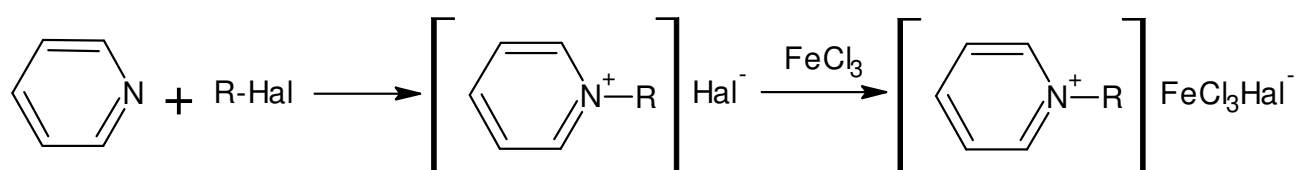
Синтез, спектральные характеристики и физико-химические свойства тетрагалогенферратов (III) N-алкилпиридиния

Комаров Р.С. (магистрант, 2 курс)

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

Ионные жидкости содержание в качестве аниона тетрагалогенферрат (III) анионы привлекают к себе внимание в последнее время в первую очередь как магнитные ионные жидкости (ИЖ), а также из-за возможностей их взаимодействия с неводными растворителями. Подобные комплексные соединения, с переходными металлами, представляющие собой новый класс ИЖ в последние годы интенсивно изучаются как с точки зрения структурных исследований, так и физико-химических свойств.

Целью данной работы было получение ионных жидкостей с тетрагалогенферрат (III) анионами и катионами N-алкилпиридиния с различной длиной алкильной цепи и изучение их спектральных характеристик и физико-химических свойств их растворов в ацетонитриле. Ионные жидкости получены из солей N-алкилпиридиния путем их взаимодействия с хлоридом железа (III). В свою очередь пиридиниевые соли синтезированы по реакции кватернизации пиридина различными алкилгалогенидами (схема).



где R: CH₃, C₄H₉; C₈H₁₇; C₁₀H₂₁; C₁₂H₂₅. Hal: Br⁻, Cl⁻, I⁻.

ИК-спектры синтезированных соединений полностью подтверждают структуру органического катиона ионной жидкости. Спектры в видимой области имеют характеристические максимумы для комплексных тетрагалогенферрат (III) анионов. Исследована электропроводность растворов ионных жидкостей в ацетонитриле. Установлено, что увеличение алкильного заместителя в катионе приводит к снижению эквивалентной электропроводности растворов ИЖ.

**Мари - Анн Лавуазье – женщина,
стоявшая у истоков современной химии**

Кондратьева Д.А. (магистрант 1-го года обучения)

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

Антуан Лоран Лавуазье внес огромный вклад в развитие химии, однако, мало кто знает о его супруге, Мари-Анн, которая работала вместе с мужем на протяжении долгих 20 лет. Чтобы быть в курсе того, чем занимается муж, Мари-Анн брала уроки химии у коллеги А. Лавуазье – Ж.-Б. Буке, присутствовала при опытах, записывая их результаты, а также аккуратно зарисовывала оборудование и приборы, представляющие сейчас интерес для знакомства с лабораторным оборудованием конца XVIII века [1].

Мадам Лавуазье, чтобы переводить для мужа труды английских химиков Дж. Пристли и Г. Кавендиша, выучила английский язык. Существенную помощь оказала Мари-Анн супругу в подготовке и написании «Элементарного курса химии» в 1789 г. Этот труд А. Лавуазье считается первым современным учебником химии.

Под влиянием событий, последовавших за французской революцией 1789 г., Лавуазье был обвинён в обогащении за общественный счёт и 8 мая 1794 г. в возрасте 50 лет был казнён на гильотине. Но это не сломило дух Мари-Анн. Она подготовила к печати научные труды супруга и приступила к редактированию 8-томного издания «Мемуаров химии». Однако, никто не оказал ей поддержки. Тогда Мари-Анн организовала публикацию двух томов мемуаров Лавуазье и его коллег, обеспечив тем самым выпуск научного наследия мужа.

Умерла Мари-Анн в возрасте 78 лет. После своей смерти она не оставила ни дневника, ни автобиографии, но без сомнения можно утверждать, что она была активным помощником и соратником своего великого мужа, одной из первых женщин – исследователей.

1. Фигуровский Н.А. Очерк общей истории химии. От древнейших времен до начала XIX в. М.: Наука, 1969г.

**Влияние ультразвуковой обработки и концентрации прекурсоров
на размер квантовых точек сульфида цинка синтезированных
в ионной жидкости**

Кротова Н.И. (аспирант 2 года обучения)

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

Полупроводниковые нанокристаллы с размером в интервале 2–15 нм, состоящие из 10^3 – 10^5 атомов, созданные на основе неорганических полупроводниковых материалов Si, InP, CdSe, ZnS и т. д., покрытые монослоем стабилизатора, получили название «квантовые точки» (КТ). Наночастицы полупроводников могут найти применения в оптоэлектрических системах, таких как светоизлучающие диоды и плоские светоизлучающие панели, лазеры ячейки солнечных батарей и фотоэлектрических преобразователей. В качестве дисперсионной среды использовались растворы ионной жидкости – тетрафторбората N-децилпиридиния в растворе ацетонитрила с концентрациями 10, 20 и 30%. Прекурсоры для синтеза КТ - 0,1 М водные растворы $ZnSO_4$ и Na_2S . Для расчета размеров КТ в золе использовался метод УФ-спектроскопии. Из спектров находили максимумы поглощения. Синтез наночастиц проводился как под воздействие ультразвука, так и без него. Установлено влияние ультразвуковой обработки на распределение квантовых точек по размеру. Кроме того, размер части зависит от количества прекурсоров. Без использования ультразвуковой обработки в спектрах поглощения наблюдается несколько максимумов для каждой концентрации наночастиц в смеси. Это указывает на полидисперсность системы. После обработки ультразвуком частицы выравниваются по размеру. При увеличении концентрации прекурсоров в растворе наблюдается рост размеров наночастиц, о чем свидетельствует сдвиг максимумов поглощения в длинноволновую область.

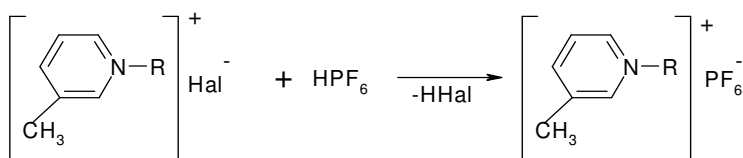
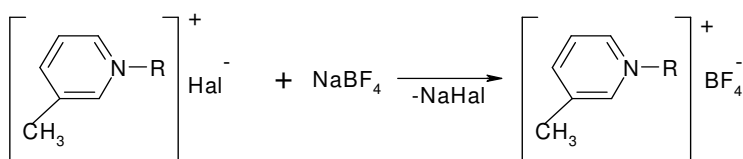
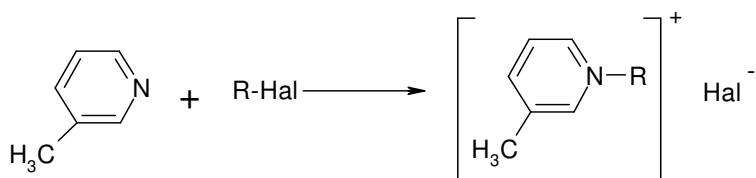
Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-33-00890

Синтез и физико-химические свойства ионных жидкостей на основе β -пиколина

Кряжова Ж.А. (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. Как правило, ионные жидкости состоят из объемных органических катионов и неорганических или органических анионов. В настоящей работе синтезированы ионные жидкости с катионом 1- алкил-3-метилпиридиния и различными неорганическими анионами (Br^- , I^- , BF_4^- , PF_6^-) (схема).



R: C_4H_9 , C_6H_{13} , C_8H_{17} , $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$.

Данными ИК–спектроскопии подтверждены состав и структура соединений. Изучены зависимости электропроводности (ЭП) ИЖ от концентрации в ацетонитриле. Эквивалентная ЭП разбавленных растворов ИЖ в ацетонитриле монотонно снижается при увеличении концентрации ИЖ в растворе. С увеличением размера катиона при одноименном анионе эквивалентная ЭП снижается.

Синтез поверхностно-активных веществ на основе малеинового ангидрида

Левицкая Ю.В. (студент, 4 курс)

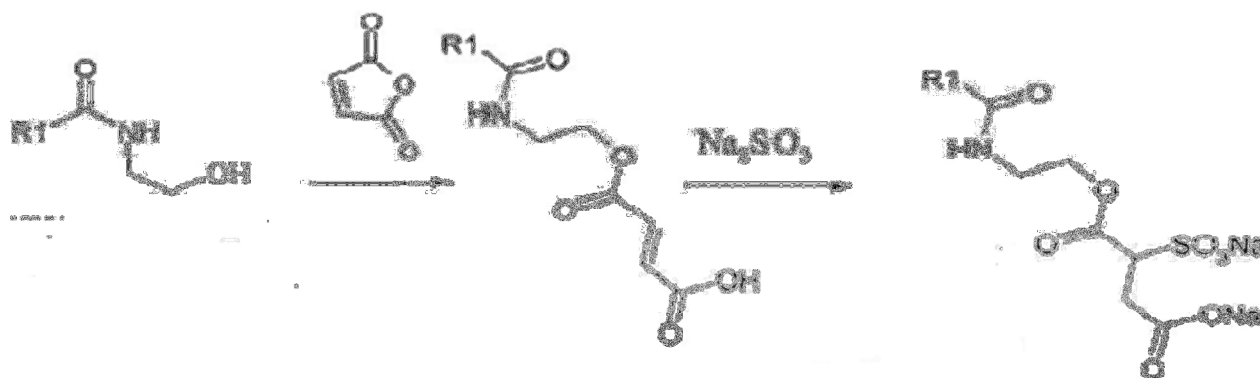
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Темникова С.А.

Алкилсульфосукцинаты – класс анионных поверхностно-активных веществ (АПАВ), являются хорошими смачивателями, пенообразователями, пеногасителями, эмульгаторами и деэмульгаторами. Широко применяются в текстильной, металлообрабатывающей, нефтяной промышленности; для изготовления различных косметических и моющих средств, производства лакокрасочных материалов и латекса. Их достоинствами являются: доступность исходных веществ, высокие выходы продукта, нетоксичность, биоразлагаемость, большое разнообразие сфер применения.

В настоящей работе были синтезированы и исследованы алкилсульфосукцинаты общей формулы:



где $R = \text{C}_{11}\text{H}_{23}$, $\text{C}_{15}\text{H}_{31}$, $\text{C}_{17}\text{H}_{35}$, на основе малеинового ангидрида и моноэтаноламидов жирных кислот, полученных взаимодействием высших жирных кислот с моноэтаноламином. Общая схема реакции:



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

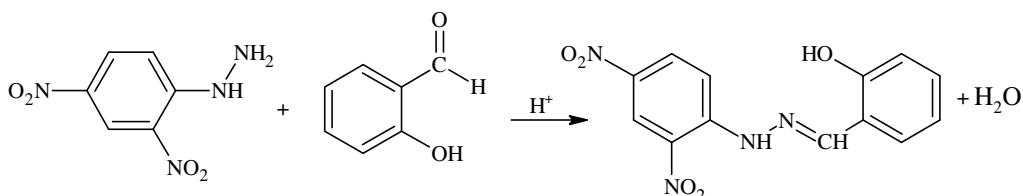
Получение органического лиганда на основе салицилового альдегида

Медведева О. А. (студент, 4 курс)

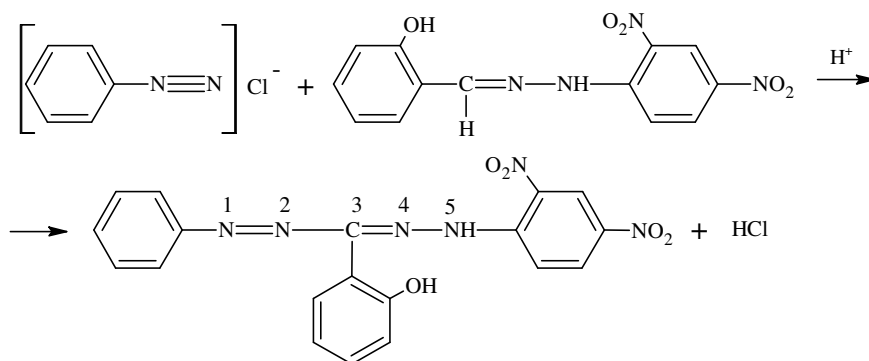
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Егорова И.Ю.

К производным гидразина относятся формазаны – азогидразоны муравьиной кислоты, которые являются хелатирующими анионными π -сопряженными N-донорскими лигандами. Одно из важнейших свойств азогидразонов (формазанов) – способность образовывать комплексные соединения с ионами металлов. Металлокомплексы формазанов используют в качестве аналитических реагентов, комплексонов и красителей различного назначения. Представленная работа посвящена синтезу N-донорского лиганда на основе салицилового альдегида.

Получение азогидразона проводили в несколько этапов. На первой стадии получен 2,4-динитрофенилгидразон салицилового альдегида.



На следующей стадии взаимодействием 2,4-динитрофенилгидразона салицилового альдегида с хлоридом фенилдиазония 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-спектроскопии и температурой плавления. На основе синтезированного лиганда планируется получить металлокомплексы формазана с двухвалентными металлами.

Комплексы борной кислоты с аминами как ингибиторы коррозии металлов в нейтральных и солевых средах

Новикова Л.В. (студент, 5 курс)

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

Особое внимание в научных источниках уделяется изучению борорганических ингибиторов коррозии, которые обладают широким спектром действия в различных коррозионных средах, большим ингибирующим эффектом, а также доступностью реагентов для их получения [1].

В настоящей работе рассмотрены методы синтеза аминокоборатных комплексов борной кислоты с моноэтаноламином, триэтаноламином, этилендиамином, диэтиламиноэтанолом, исследованы их физико-химические свойства, а также изучена их ингибирующая способность.

Коррозионные испытания проводились на образцах стали-3 в нейтральной и солевой средах в течение 360 часов. Для проведения исследований были приготовлены растворы 0,1% концентраций борной кислоты, аминоспиртов и аминокоборатных комплексов в дистиллированной воде, а также в солевом растворе NaCl и Na₂SO₄. Установлено, что введение в дистиллированную воду аминокоборатных комплексов существенно снижает скорость коррозии растворения металла. Защитный эффект соединений борной кислоты с аминами и аминоспиртами в нейтральной среде составляет 96-99 %. В водно-солевом растворе в присутствии синтезированных соединений скорость коррозии уменьшается, однако, их защитный эффект составляет 51-73 %. Стоит отметить, что комплекс на основе борной кислоты и диэтиламиноэтанола проявляет высокий ингибиторный эффект в обеих средах (99% - в нейтральной, 84% - в солевой).

1. Обзор ингибиторов коррозии на основе борорганических соединений. / В.И Левашова, И.В. Янгирова, Е.В. Казакова / Современные проблемы науки и образования. – Пенза: Дом «Академия естествознания», 2014 - №6, С 21.

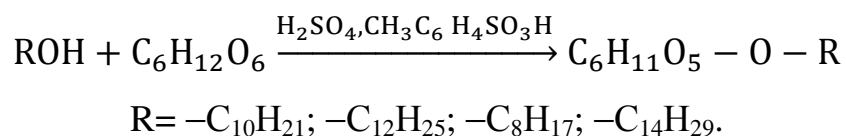
Алкилполигликозиды как поверхностно-активные вещества

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

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

Современное изготовление моющих, промышленных, косметических изделий нуждается в создании новых поверхностно-активных веществ (ПАВ) различных классов с редкими свойствами. К таким свойствам относятся очень мягкое моющее действие, хорошая биоразлагаемость. Этими свойствами обладают алкилполигликозиды (АПГ) [1].

В настоящей работе получали АПГ с длиной углеводородной цепи C_8 , C_{10} , C_{12} , C_{14} по схеме:



Методика работы: в трехгорлую колбу, объемом 250 мл, помещали 0,7 моль децилового (додецилового, октилового, тетрадецилового спирта), смешанного с 0,005 моль серной кислоты, смесь нагревали при перемешивании до температуры 90 °С. Затем добавляли 0,025 моль сильной органической кислоты (п-толуолсульфокислоту) и 0,5 моль тонко измельченной безводной глюкозы. Создавали в системе вакуум и вели процесс при температуре 90-100°С в течение 3-4 часов [2].

Полученные децил-, октил-, тетрадецил- и додецилполигликозиды в виде вязкой прозрачной массы анализировали методом ИК-спектроскопии и идентифицированы как неионогенные поверхностно-активные вещества.

1. Поверхностно-активные вещества: синтез, свойства, анализ, применение/ К.Р. Ланге; под научн. ред. Л.П. Зайченко. СПб.: Профессия. 2004. 240 с.
2. Edited by K. Hill, W. von Rybinski, G. Stoll Alkyl Polyglycosides Technology, Properties and Applications. 1997. 242 с.

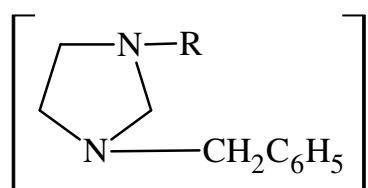
Синтез и бактерицидная активность четвертичных солей

1-бензил-3-алкилимидазолия

Смирнова К.А. (студент, 4 курс)

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

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



где R: CH₃; C₄H₉; C₁₀H₂₁.

X: Br, I.

Для получения четвертичных солей имидазолия использовали реакцию алкилирования (в данном случае арилирование) в условиях межфазного катализа. В качестве межфазного катализатора был использован (C₄H₉)₄NBr – тетрабутиламмонийбромид, широко применяемый катализатор.

Полученные соединения представляют собой вязкие жидкости, растворимые в полярных растворителях (вода, этанол) и не растворимые в неполярных (диэтиловый эфир, гексан). Строение подтверждено данными ИК-спектроскопии, проба Бейльштейна положительна, рассчитаны величины R_f 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. Как показали исследования солей имидазолия 1-бензилимидазол и имидазол не проявляют биологической активности. Антимикробную активность проявляют четвертичные соли имидазолия, причем 1-бензил-3-бутилимидазолийбромид имеет большую зону задержки роста, чем остальные четвертичные соли имидазолия.

Влияние концентрации прекурсоров на размер квантовых точек сульфида цинка, синтезированных в системе ионная жидкость - спирт

Травников Ю.Н. (студент, 4 курс)

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

Квантовые точки (КТ) являются важными полупроводниковыми наноматериалами с зависимыми от размера оптическими свойствами. Благодаря этим свойствам КТ находят широкое применение в таких областях как устройства цветного отображения, белые светодиоды, фотогальванические элементы и других. В настоящей работе были синтезированы КТ ZnS в ионной жидкости (ИЖ) с использованием ультразвука. В качестве дисперсионной среды использовались растворы ионной жидкости – тетрафторбората N-децилпиридиния в спиртовом растворе с концентрациями 10, 20 и 30%. Прекурсоры для синтеза КТ - 0,1 М водные растворы ZnSO₄ и Na₂S.

См [ZnS]*10 ³ моль/л	λ _{max} , нм	d, нм
После воздействия ультразвука		
0,84	286	3,2
3,31	294	3,5
7,33	315	4,9
12,83	331	8,4
19,73	340	34,3
27,97	340	34,3
Без воздействия ультразвука		
3,31	321; 324; 328; 330; 333; 337; 339	5,7; 6,2; 7,2; 7,9; 9,4; 13,7; 20,8
12,83	>340	>35

В таблице приведены результаты расчета размера квантовых точек в зависимости от положения максимального поглощения в УФ-спектрах. Видно, что без использования ультразвука при относительно низких концентрациях размер КТ составляет более 34 нм. Данные о размере квантовых точек сульфида цинка, полученные этим методом, хорошо согласуются с данными динамического светорассеяния и электронной микроскопии.

Регулирование углеводно-амилазного комплекса пшеничной муки

Хадыкина Е.С. (магистрант 1-го года обучения)

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

В последние годы тенденция ухудшения качества пшеничной муки обусловлена, в основном, снижением количества клейковины и понижением автолитической активности нативных ферментов. Подобная ситуация связана с нарушением агротехнических приемов, климатических условий и отсутствием высокосортных твердых пшениц. Эффективным биотехнологическим средством улучшения качества муки и изделий из нее являются ферментные препараты растительного (солодовые), бактериального и грибного происхождения. В работе изучено влияние дозировок ржаного солода на водно-мучную суспензию из муки поставщика ОАО «Истра-хлебопродукт» Московской области.

Под действием амилазного комплекса ржаного солода наблюдается ослабление клейковины [1], усиление газообразующей и газодерживающей способности теста. В опытных образцах тесто становится менее упругим и более растяжимым, что увеличивает в готовом продукте формоустойчивость (на 10%; опыт 4), пористость (на 13%; опыт 4) и сжимаемость (на 20%; опыт 4) по сравнению с контролем (опыт без солода) [2].

Работа выполнена в исследовательской лаборатории ОАО «Мелькомбинат» г. Тверь на приборах фаринограф, амилограф, алвеограф.

1. Ильченко В., Карпиленко Г. и др. Влияние агрофона на формирование углеводно-амилазного комплекса зерна пшеницы. // Хлебопродукты. – 2007. – №8. – С.56-57.

2. Матвеева, И.В. Ферментные препараты для хлебопекарной отрасли: новые технологии и перспективы применения // Хлебопечение России. – Казань: Изд-во КГТУ, 2009. – 238 с.

170 лет со дня рождения А.А. Летнего –основоположника пиролиза нефти

Цыплакова А.В. (студентка, 4 курс)

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

Александр Александрович Летний родился в 1848 г. в Петербурге в семье портного. В 1871 г. окончил Петербургский технологический институт со степенью технолога I разряда и работал в нем ассистентом по химии до 1879 г. Его первые исследования посвящены изучению сызранского смолистого известняка и разработке технологии получения из него асфальта. Он спроектировал и построил первый асфальтовый завод в России в г.Сызрани и указал на возможность прекращения его ввоза из Западной Европы. Дальнейшие его исследования - изучение и разработка процесса глубокой переработки (пиролиза) нефти. В настоящее время этот процесс называется высокотемпературным крекингом. На заводе В. Рагозина он спроектировал и построил установку, на которой впервые в России получили способом пиролиза ароматические углеводороды (бензол, толуол, ксилол, кумол, нафталин, антрацен и фенантрен). Летний считал, что антрацен может применяться для получения искусственного ализарина и Россия должна стать серьезным конкурентом Англии в экспорте его в страны Западной Европы. В 1880 г., в 12 км от Баку, в селении Кирмаку под руководством Летнего был построен завод по получению антрацена из нефтяных остатков. Кроме того он спроектировал завод для получения масел из нефтяных остатков, который был построен в Петербурге. Это был первый и единственный завод минеральных масел. Под его руководство в Баку был построен завод по производству церезина. Летний предлагал экспорт бакинской нефти через порты Черного моря и считал это основным условием успешной конкуренции ее с американской нефтью.

1. Мир-Бабаев М.Ф. Краткая история азербайджанской нефти. Книга вторая. / М.Ф. Мир- Бабаев.- Баку : Socar, 2012.-288 с.

Секция физической химии

Синтез и исследование систем на основе цистеина и солей серебра

Адамян А.Н. (студент, 4 курс)

Научные руководители: д.х.н. Пахомов П.М., к.х.н. Хижняк С.Д.

Известно, что L-цистеин образует гидрогели с некоторыми солями, такими, как AgNO_3 , AgNO_2 , CH_3COOAg , AgClO_4 . Поскольку L-цистеин обладает широким спектром свойств, которые успешно применяются в медицине, а серебро обладает антисептическим, противовоспалительным дезинфицирующим, восстанавливающим свойствами, то проблемы синтеза, изучения и применения супрамолекулярных гелеобразующих систем на их основе вызывают повышенный интерес. Целью данной работы являлось синтез новой системы и поиск условий образования супрамолекулярных гелей на основе L-цистеина и сульфата серебра.

Для приготовления данных систем использовали водные растворы исходных компонентов с концентрацией 0,01 М (аналогично уже известным системам), а так же с концентрацией Ag_2SO_4 , равной 0.005 М. Механизм взаимодействия в системах был изучен методом УФ спектроскопии.

При аналогичных условиях синтеза системы L-цистеин- Ag_2SO_4 (температура, концентрация, соотношения компонентов) при различных соотношениях исходных компонентов во всех образцах образовывались осадки разной окраски, некоторые растворы опалисцируют.

1. Пахомов П.М., Овчинников М.М., Хижняк С.Д., Рощина О.А., Комаров П.В. Супрамолекулярный гидрогель медицинского назначения на основе L-цистеина и ионов серебра. // Высокомолек. соед. 2011. серия А. Т.53, №.9. С.1574-1581.

Энтальпия образования замещённых бензола

Байрамова Э.Д., Канаева В.С. (магистранты 1-го года обучения)

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

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций «структура-энтальпия образования» в замещённых бензола.

Для этого в работе выведена расчётная схема в разных приближениях. Коэффициенты схемы имеют явный структурный смысл. Это – числа подграфов (цепей) различной сложности.

Показано, что энтальпия образования зависит от длины цепи молекулы. Так при увеличении длины цепи алкильного заместителя энтальпия образования уменьшается. Энтальпия образования также зависит от природы заместителя. $\Delta_f H^0_{298(\Gamma)}$ меньше всего у фторзамещённых бензола и больше у хлорзамещённого бензола. Она уменьшается при увеличении степени замещения атомов.

Показано, что последовательный учет разновидностей структурных элементов молекулы исследуемого гомологического ряда позволяет построить схемы с различным набором параметров, что позволяет повысить точность прогноза исследуемого физико-химического свойства веществ данного ряда.

По полученной схеме, в работе проведены численные расчёты энтальпии образования замещённых бензола, согласующиеся с экспериментом. Получены новые данные.

В работе также построены и проанализированы графические зависимости ряда свойств, замещённых бензола, от степени замещения. Данные зависимости нелинейны, линии замещения на одну и ту же группу - $\text{CH}_3, \text{C}_2\text{H}_5, \dots$ не везде симбатны между собой и т.д.

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

Энтальпия образования алифатических альдегидов.

Топологический подход

Бобовская Е.С. (студентка, 5 курс)

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

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций «структура – энтальпия образования» в алифатических альдегидах.

В работе выведены аддитивные схемы расчёта в разных приближениях, в которых топологические индексы (ТИ) участвуют как числа параметров:

$$P = p_1b + p'_1b' + x_{cc1}p_2 + x_{co1}p'_2 + x_{ccc1}R + x_{cc2}p_3 + x_{co2}p'_3 + \\ + x_{cc3}p_4 + x_{co3}p'_4 + x_{cc4}p_5 + x_{co4}p'_5$$

Здесь p_1, p_2, p_3, p_4, p_5 – соответственно число путей (рёбер) длины один, два, три, четыре и пять; R – число троек смежных рёбер; $x_{cc1}, x_{co1}, x_{cc2}, x_{co2}, x_{cc3}, x_{co3}, x_{cc4}, x_{co4}$ эффективные взаимодействия пар атомов С (С и О) соответственно через один атом, два, три и четыре атома и т.д.

По полученным формулам проведён численный расчёт энтальпии образования ряда алифатических альдегидов.

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

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

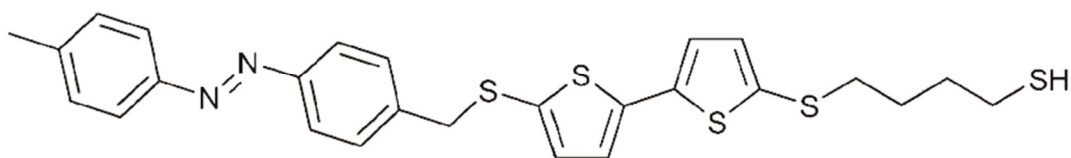
Квантово-химический расчет структуры производных олиготиофена

Ганичева А.А. (студент, 4 курс)

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

В последнее время широкое развитие получило изучение органических материалов на основе соединений олигомеров, которые имеют множество возможностей для использования их в молекулярной электронике и фотонике. Одними из таких соединений является класс молекул олиготиофенов и их производных. Молекулы олиготиофенов обладают рядом таких преимуществ, как возможностью образовывать кристаллическую структуру за счёт создания π -сопряжённых связей как при высаживании из раствора, так и нанесением молекул испарением в вакууме; химической чистотой - количество примесей не более 3% после всех этапов синтеза; высокой подвижностью заряда; способностью интенсивно эмитировать свет, за счёт приложенного напряжения, что делает данный класс материалов эффективным при создании на его основе органических транзисторов, фотодетекторов, а также органических светодиодов.

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.



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

Анализ пористых полимерных материалов методами оптической спектроскопии

Королева О.Е. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Полимерным материалам с уникальными свойствами (суперсорбенты, сверхпрочные волокна и др.) уделяется большое внимание в связи с тем, что их получение и изучение является актуальной проблемой настоящего времени. Разработка новых методов и подходов для изучения строения полимеров, от которого зависят конечные свойства, является важной задачей. Уже на протяжении 20 лет разрабатывается спектроскопический подход для изучения морфологии «мутных» сред [1-4]. Для таких сред при прохождении через них электромагнитного излучения существенное снижение светопропускания происходит за счет упругого рассеяния света на рассеивающих частицах (поры, частицы наполнителя и др.). Выделение и анализ рассеивающей компоненты в спектре образца позволяет оценить, средний размер рассеивающей частицы и распределение частиц по их размерам, анизотропию рассеивающих частиц и их ориентацию в полимерной матрице. Эти характеристики в значительной степени определяют такие конечные свойства полимерных материалов, как их сорбция, прочность, электропроводность и др.

1. Пахомов П.М., Круглова Е.В., Хижняк С.Д. // Высокомолек. соедин. 2000. Т.42Б. №6. С.1081-1086.
2. Пахомов П.М., Маланин М.Н., Круглова Е.В., Хижняк С.Д. // Высокомолек. соедин. 2001. Т.43Б. №4. С.764-768.
3. Пахомов П.М., Хижняк С.Д., Маланин М.Н., Михайлова Ю.Н. // Заводская лаборатория. 2002. Т.68. №5. С.31-33.
4. Пахомов П.М., Маланин М.Н., Хижняк С.Д. // Высокомолек. соедин. 2005. Т.47Б. №6. С.1066-1072.

**Физико-химические аспекты биомониторинга популяций
Convallaria majalis L. в Торжокском районе**

Кучеренко М.А. (магистрант, 2-го года обучения)

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

Целью настоящей работы явился биомониторинг популяций ландыша майского (*Convallaria majalis* L.) на основе физико-химических методов исследования в составе лесов Торжокского района Тверской области.

Наибольший вред дикорастущему ландышу наносит воздействие антропогенного фактора, из-за активного уничтожения вида цветок занесен в красные книги России нескольких регионов.

Ландыш майский произрастает в Торжокском районе в благоприятных условиях хвойно-широколиственных лесов; растение имеет определенную устойчивость химического состава к антропогенной нагрузке, однако популяционные сообщества вида подвержены действию загрязняющих веществ.

Идентифицированные флавоноидные соединения ландыша образованы флавонолами и кумаринами.

Показания содержания семи металлов в ландыше превысили фоновые значения. Следствием загрязнения растений явились антропогенная нарушенность территории, выбросы автотранспорта, содержащие в себе соединения тяжелых металлов, а также атмосферные осадки.

Оценка условий биотопов показала, что во всех изученных популяциях экологические условия соответствуют потребностям вида.

Морфологический анализ вегетативных органов ландыша – листьев – не обнаруживает патологий в физиологии растения (его функционировании), признаков экологической загрязненности среды его произрастания.

Энергетические характеристики алифатических эфиров

Лютина И.А. (студентка, 5 курс)

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

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

В работе проведён анализ числовых данных по энтальпии образования и энергиям разрыва связей в эфирах, выявлены отдельные закономерности. Найдено, что энтальпия образования зависит от длины цепи молекулы. Данная зависимость носит линейный характер для гомологов аналогичного строения, что говорит о постоянном энергетическом вкладе CH_2 -группы. При увеличении длины цепи молекулы $\Delta_f H^0_{298(\text{г})}$ уменьшается. Разности энергий между структурными изомерами альдегидов достигают 26,3 кДж/моль, причем наибольшие значения $\Delta_f H^0_{298(\text{г})}$ и $\Delta_f H^0_{298(\text{ж})}$ имеют неразветвленные эфиры.

В работе определено, что энергии разрыва связей D_{298} в выбранных соединениях с увеличением длины цепи уменьшаются, энергии разрыва С–С связей уменьшаются при разветвлении радикала, а увеличиваются при появлении атома галогена.

Например, (в кДж/моль) [1]:

	$\text{CH}_3 - \text{CH}_3$	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CO} - \text{CH}_3$	CH_3OCH_3
D_{298}	351,9±4,2	349,8±4,2	402,1

В работе проведены численные расчеты по энтальпии образования и энергиям разрыва связей выбранных соединений, согласующиеся с экспериментом [1].

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

Количественная взаимосвязь между структурой и свойствами аминосоединений

Сенекеримян А.К. (студент, 5 курс)

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

В настоящей работе проведено исследование взаимосвязи между структурой и некоторыми физико-химическими свойствами аминосоединений с использованием методологии QSAR (поиск количественных соотношений структура-свойство). В качестве объектов исследования выбраны 30 аминосоединений, содержащих в молекуле одну аминогруппу, связанную с углеводородным радикалом (алифатическим, циклическим или ароматическим), а также некоторые вторичные и третичные амины, для которых известны экспериментальные данные по исследуемым свойствам. В соответствии с выбранной методологией все исходные соединения были разделены на два поднабора: тренировочный и тестовый. В качестве дескриптора структуры выбран топологический параметр — индекс Винера (W) [1].

По тренировочному набору были найдены корреляционные зависимости температуры плавления, температуры кипения, плотности и показателя преломления аминов от индекса Винера с использованием программы Origin с максимальным значением коэффициента корреляции. Найденные уравнения проверялись на соединениях тестового набора. Качество полученных количественных корреляций оценивалось по близости рассчитанных и известных из эксперимента значений исследуемых свойств соединений тестового набора.

1. Химические приложения топологии и теории графов / Под ред. Р. Кинга. — М.: Мир, 1987. — 560 с.

Гелеобразование в низкоконцентрированных водных растворах L-цистеина и перхлората серебра

Удальцова М.Ю. (магистрант 1-го года обучения)

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

Изучение строения и свойств гелей, а также процессов гелеобразования [1] является важной задачей современной прикладной и фундаментальной науки.

С практической точки зрения супрамолекулярные гидрогели представляют интерес благодаря возможности их использования в биомедицинских целях (тканевая инженерия, контролируемое высвобождение лекарственных препаратов) [2].

Обнаружено, что низкоконцентрированные водные растворы перхлората серебра (AgClO_4) и аминокислоты L-цистеин (L-Cys) при молярном соотношении компонентов Ag/Cys от 1.50 до 2.00 образуют супрамолекулярные гели при добавлении электролитов (сульфата и хлорида натрия). Механизм гелеобразования исследован при помощи методов вискозиметрии, просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), УФ спектроскопии и динамического светорассеяния (ДСР). Установлено, что в результате процессов самоорганизации в водном растворе L-Cys– AgClO_4 на первой стадии происходит образование супрамолекулярных цепочек $(-\text{AgS}\dots\text{AgS}-)_n$. Формирование гидрогеля (вторая стадия) инициируется добавлением электролита.

1. Odriozila I., Ormategui N., Loinaz I. Coinage Metal–Glutathione Thiolates as a New Class. *Macromol. Symp.* Weinheim, 2008, Vol. 1, 266, pp. 96-100.
2. Hahn, S. Kwang. *Smart Supramolecular Hydrogels for Long-term Bioengineered Stem Cell Therapy.* 2014 г.

Супрамолекулярные гидрогели на основе L-цистеина, нитрата серебра и поливинилового спирта

Фаткина А.А. (студентка 5 курса)

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

Супрамолекулярные гидрогели принадлежат к особому классу гелей с экстремально низкой концентрацией дисперсной фазы (0.01 % масс.) [1]. Для таких систем наряду с пластической формосохраняемостью часто наблюдается явление обратимой тиксотропии. В настоящей работе получены первые результаты по изучению самоорганизации в цистеин-серебряных водных растворах (ЦСР) с поливиниловым спиртом (ПВС).

Получены гомогенные оптически прозрачные гидрогели при смешении ЦСР, ПВС и инициатора гелеобразования Na_2SO_4 . С помощью комплекса методов (вискозиметрия, УФ- и ИК-спектроскопия, рН-метрия и ДСР) исследованы процессы самоорганизации в данной системе. Показано, что макромолекулы ПВС взаимодействует с супрамолекулами ЦСР путем образования водородных связей. При этом увеличение концентрации ПВС ведет к росту вязкости гидрогелей, более выраженным тиксотропным свойствам, росту интенсивности основных полос поглощения в УФ спектре, увеличению значений рН, росту средних гидродинамических размеров частиц и падению электропроводности системы. Изучение морфологии полученных гидрогелей методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) выявило образование регулярной макропористой структуры. Установлено, что путем изменения концентрации ПВС в растворе, можно регулировать как плотность пространственной сетки геля, так и пористость ксерогеля.

1. Soft Matter. 2017. V.30. N13 .P.5168-5184. DOI: 10.1039/C7SM00772H.

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

Корреляции «структура-свойство» алифатических альдегидов

Цыганкова М.Р. (студент, 5 курс)

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

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

Для этого в работе проведена оценка состояния численных данных по термодинамическим свойствам исследуемых соединений, выведены расчётные схемы в разных приближениях. Так для альдегидов простая схема записывается соответственно:

$$P_{C_nH_{2n}O} = h_{cc}p_{c-c} + h_{co}p_{c-o} + h_{cn}p_{c-n}$$

В первом приближении имеем:

$$P_{C_nH_{2n}O} = h_{cc}p_{c-c} + h_{co}p_{c-o} + h_{cn}p_{c-n} + x_{cc1}\Gamma_{cc} + x_{co1}\Gamma_{co} + x_{ccc1}\Delta_{ccc}$$

Во втором приближении:

$$P_{C_nH_{2n}O} = h_{cc}p_{c-c} + h_{co}p_{c-o} + h_{cn}p_{c-n} + x_{cc1}\Gamma_{cc} + x_{co1}\Gamma_{co} + x_{ccc1}\Delta_{ccc} + x_{cc2}\tau_{cc} + x_{co2}\tau_{co}$$

В третьем приближении:

$$P_{C_nH_{2n}O} = h_{cc}p_{c-c} + h_{co}p_{c-o} + h_{cn}p_{c-n} + x_{cc1}\Gamma_{cc} + x_{co1}\Gamma_{co} + x_{ccc1}\Delta_{ccc} + x_{cc2}\tau_{cc} + x_{co2}\tau_{co} + x_{cc3}\omega_{cc} + x_{co3}\omega_{co}$$

В четвёртом приближении:

$$P_{C_nH_{2n}O} = h_{cc}p_{c-c} + h_{co}p_{c-o} + h_{cn}p_{c-n} + x_{cc1}\Gamma_{cc} + x_{co1}\Gamma_{co} + x_{ccc1}\Delta_{ccc} + x_{cc2}\tau_{cc} + x_{co2}\tau_{co} + x_{cc3}\omega_{cc} + x_{co3}\omega_{co} + x_{cc3}\nu_{cc} + x_{co3}\nu_{co}$$

По полученным схемам, в работе проведены численные расчёты некоторых термодинамических свойств ряда алифатических альдегидов, согласующиеся с экспериментом [1]. Получены новые данные (ранее неизвестные значения свойств).

1. Lange's Handbook of Chemistry / Editor: J.A. Dean. (15th Edition), McGraw-Hill. 1999. [Электронный ресурс]. – URL: <http://fptl.ru/biblioteka/spravo4niki/dean.pdf>.

Процессы самоорганизации в водных системах на основе глицина, нитрата серебра и ПВС

Шухина К.А. (бакалавр, 3-го года обучения)

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

Глицин – простейшая аминокислота, единственная, не имеющая оптических изомеров, единственный атом углерода в ней соединен с амино- и карбоксильной группами. Маленький размер молекулы помогает ей исполнить роль гибкого линкера в белках, что приводит к образованию спирали. Известно, что свободный глицин является строительным материалом для всех белков, включая белок мышц, при этом он выполняет защитную функцию в тканях, играет важную роль в адсорбции кальция и т.д.

В данной работе процессы самоорганизации в различных модельных системах были исследованы с помощью методов УФ-спектроскопии и динамического светорассеяния (ДСР). Объектами исследования были серии образцов с различным содержанием аминокислоты и нитрата серебра, аминокислоты и ПВС, а также Gly–AgNO₃–ПВС.

Данные УФ спектроскопии свидетельствуют о том, что процессы самоорганизации в системах существенно зависят от состава исследованных образцов, от концентрации исходных компонентов и от концентрации ПВС. На формирование наноагрегатов, содержащих в образцах глицин, в большей степени влияет концентрация ПВС и время выдержки образца, что можно объяснить возникновением множественных водородных связей между функциональными группами глицина и ПВС. Данные УФ спектроскопии согласуются с результатами метода ДСР, согласно которым размеры наноагрегатов в образцах в большей степени зависят от содержания ПВС, чем от концентрации аминокислоты и ионов серебра.

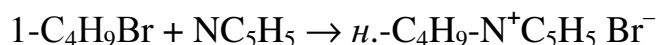
Кинетика взаимодействия 1-бутилбромида с пиридином

Юнусова Д.В. (магистр 2-го года обучения)

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

Взаимодействие алкилгалогенидов с третичными аминами служит основным способом получения четвертичных солей, представляющих значительный интерес как поверхностно-активные вещества и ионные жидкости (ИЖ). Среди ИЖ важную роль играют соединения на основе пиридина содержащие в качестве заместителя *n*-бутил-радикал.

В настоящей работе для исследования кинетики взаимодействия 1-бутилбромида с пиридином использован метод УФ-спектроскопии. Реакцию проводили в водно-этанольном растворе при комнатной температуре в избытке пиридина. Показано, что реакция в исследованных условиях протекает по схеме:



и описывается кинетическим уравнением второго порядка. Константу скорости k реакции рассчитывали графическим способом, учитывая, что [1]:

$$1/(a-x) = 1/a + kt,$$

где a – исходная концентрация 1-бутилбромида, моль/л; x – текущая концентрация продукта реакции, моль/л; t – время реакции, мин.

Текущую концентрацию продукта x , моль/л находили по стандартной методике [2] с учетом поглощения всех компонентов реакционной смеси согласно уравнению:

$$D = \varepsilon l C = l [\varepsilon_{Py} (C_{Py}^0 - x) + \varepsilon_{BuBr} (C_{BuBr}^0 - x) + \varepsilon_{4ПБ}].$$

1. Денисов Е.Т. Кинетика гомогенных химических реакций. – М.: Высшая шк., 1978. – 267 с.

2. Плисс Е.М. Применение спектральных методов для исследования механизма химических реакций / Е.М. Плисс, И. В. Тихонов, А.И. Русаков; Яросл. гос. ун-т им. П.Г. Демидова. – Ярославль: ЯрГУ, 2013. – 78 с.

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Адамян А.Н.	47	Левицкая Ю.В.	39
Алябина Н.В.	7	Лобзова В.А.	15
Арефьев Д.В.	8	Лукьянова Н. И.	16
		Лютина И.А.	53
Байрамова Э.Д.	48	Медведева О. А.	40
Биберина Е.С.	9		
Бодякова А.В.	25	Новикова Л.А.	17
Бобовская Е.С.	49	Новикова Л.В.	41
Бугаева А.А.	10		
Буравлёва А.С.	11	Петрова В.Ю.	18
Волкова М.Ю.	27	Радин А.С.	19
Варламова А. А.	12	Решетова А.С.	20
Васильева С.В.	26		
		Семашко Е.И.	21
Ганичева А.А.	50	Сергеева А.И.	42
Герасимова Н.Ю.	28	Смирнова К.А.	43
Голубихина А.С.	29	Скрыпникова И.А.	23
Горбунова Д.В.	30		
Гурина Е.С.	31	Травников Ю.Н.	44
Гурцева И.С.	13		
		Удальцова М.Ю.	55
Елистратова М.К.	32		
		Фаткина А.А.	56
Исаева А.А.	14		
		Хадыкина Е.С.	45
Климентьев И.С.	33		
Ковалева Е.В.	34	ЦветковаЕ.Е., Шломак И.В.	24
Комаров Р.С.	35	Цыганкова М.Р.	50
Кондратьева Д.А.	36	Цыплакова А.В.	46
Королева О.Е.	51		
КротоваН.И.	37	Шухина К.А.	57
Кряжова Ж.А.	38		
Кучеренко М.А.	52	Юнусова Д.В.	59