

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

ХV НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
АСПИРАНТОВ И СТУДЕНТОВ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО
ФАКУЛЬТЕТА

25 мая 2016 года

Тверь

Тезисы докладов

ТВЕРЬ 2016

УДК 54(082)
ББК Г.я431
Н34

Ответственный за выпуск

Е.В. Журавлев

Н34 XV научная конференция аспирантов и студентов химико-технологического факультета 25 мая 2016 года: Тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2016. – 84 с.

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

УДК 54(082)
ББК Г.я431

© Авторы статей, 2016
© Тверской государственный
университет, 2016

Содержание

Секция неорганической и аналитической химии

Арефьев Д.В., Соколова С.А., Хорламова А.В. Ионселективный электрод с откликом на ион линкомицина	6
Белова И.С. Синтез и исследование комплексов меди(II) с анионами цефалоспоринов	7
Василенко П.С. Термический анализ ацетилсалициловой кислоты	8
Веселова К.А. ИК идентификация оптических изомеров глутаминовой кислоты	9
Выродова В.О. Изучение взаимодействия L-серина с ионами Ag^{2+}	10
Грачева К.А. Создание и исследование характеристик ионселективного электрода с откликом на никотиновую кислоту	11
Гусева Д.А. Индикаторная бумага для экспресс-анализа содержания нитратов и нитритов	12
Дремлева О.Ю. Комплексообразование борной кислоты с комплексонами, производными янтарной кислоты	13
Иванова В.Н. Влияние рН на оптические свойства полианилиновой пленки	14
Исаева А. А. Количественный анализ жидких лекарственных форм методом рефрактометрии	15
Кустарев Б.А. Полианилиновый газовый сенсор на NO_2 резистивного типа	16
Лукиенко М.Ю. Синтез и исследование комплексов кобальта(II) с анионами цефалоспоринов	18
Лютова Д.В. Твердоконтактный ионоселективный электрод с откликом на доксициклин	19
Муравьева Т.А. Твердотельный ионоселективный электрод с откликом на либексин	20
Некрасова Е.Н., Багиров Т.Л. Исследование процессов комплексообразования в системах: катионы металла (медь, цинк) антиаритмический препарат (атенолол)	21
Полыскина Д.Е. Анализ афобазола методом дифференциальной сканирующей калориметрии	22
Радин А. С. Разработка твердотельной универсальной электрохимической топливной ячейки для создания электрохимических сенсоров и топливных элементов	23
Рыбаков И.И. Газовый сенсор на основе полианилина с откликом на двуокись серы	25
Скобин М.И., Крюков Т.В., Новикова В.В., Барина М.Н. Выделение комплексных соединений, состоящих из металла, аргинина и гепарина, из их водных растворов	26
Соколова Е.М. Структура комплексов цефтазида с ионами d-элементов по результатам компьютерное моделирование	27
Сударикова Ю.Д. Рецепт губной помады	28
Титова Е.Р. Твердоконтактный ионоселективный электрод для	29

определения иона тетрациклина

Хивинцева Т. А. Влияния переменного электрического поля на скорость процессов сорбции редкоземельных элементов **30**

Секция органической химии

Астахова А.С., Астахов И.А. М.В. Ломоносов и «нефтяное дело» **32**

Васильева С.В. Влияние температуры, времени и рН на содержание антибиотиков тетрациклиновой группы в молоке **33**

Герасимова К. П. Синтез имидазолиевых ионных жидкостей и изучение их физико-химических свойств **34**

Герасимова Н.Ю. Разработка химического метода защиты поверхностей от мхов и лишайников **35**

Голубихина А.С. Получение и свойства ферритов на основе D-переходных металлов **37**

Дрозд А.В. Качественное определение арбутина в растительном сырье **38**

Комаров Р.С. Синтез и спектральные характеристики ионных жидкостей на основе N-алкилпиридиния с железосодержащими анионами **39**

Кротова Н.И. Взаимодействие бис-(N,N-диметиламида)метилфосфоновой кислоты с алкилгалогенидами **40**

Кулагин А. С. Синтез четвертичных солей трифенилфосфония. **41**

Куликов М.Д. Синтез и свойства тетрафторборатов и гексафтофосфатов N-алкилпиридиния **42**

Мухина М. А. Синтез бис-четвертичной соли N-метилимидазолия **43**

Орликова Ю.А. Синтез производных N-алкилморфолина **45**

Постнова О.И. Синтез и свойства ионные жидкостей на основе N-алкилоксикарбонилметил-β-пиколина **46**

Пресняков И.А. Коллоидный синтез нанокристаллов сульфида цинка в среде ионной жидкости **47**

Прохорова А.О. Неионогенные ПАВ на основе природных кислот **48**

Решетова А.С. «Отгадай элемент!» **50**

Русакова Е.И. Синтез N-алкилпиридиний тозилатов **50**

Рыбаков Е. В. Соли бис-пиперидиния как ингибиторы коррозии в кислых средах **51**

Сергеева А. И. Синтез и поверхностно-активные свойства алкилполигликозидов **52**

Сергеева И.В. Синтез и свойства тетрахлорпалладатов четвертичного аммония и пиридиния **53**

Смирнов Е.И. Синтез ионных жидкостей на основе четвертичных солей аммония **54**

Соколов М.Н. Исследование динамики окисления липидов растительного происхождения **56**

Тимофеева Е.Н. Синтез и свойства бис – четвертичных аммониевых солей, обладающих поверхностно–активными свойствами **57**

Титова Т.Н. Синтез поверхностно-активных веществ на основе малеинового ангидрида и исследование их свойств **58**

Цветкова Т. В. Влияние природы растворителя на экстракцию терпеновых соединений из гвоздики **59**

Секция физической химии

Аверкин Д.В. Роль инициатора в процессах гелеобразования низкоконцентрированных водных растворов, содержащих L-цистеин и ацетат серебра	60
Адамян А.Н. Супрамолекулярные гели на основе L-цистеина и ацетата серебра	61
Аксенов А.А. Влияние антропогенных факторов на химический состав крапивы двудомной	62
Андрианова Я.В. Исследование реологических свойств цистеин-серебряных гидрогелей на основе хлоридов металлов	63
Белова А.А. Энергетические характеристики тиоспиртов	64
Виноградов В.С. Аддитивные схемы расчета свойств X-замещенных этана	65
Волкова Е.А. Корреляции «структура-свойство» нитроалканов. Топологический подход	66
Ершова Я.Н. Энергии разрыва связи в кетонах	67
Жерихова А.М. Корреляции структура – свойство алкинов	68
Ильина Н.В. Моделирование гексагональной фазы расплавов диблочных сополимеров методом диссипативной динамики частиц	69
Калинин А.И. Анализ влияния промышленных загрязнений на химический состав подорожника большого	70
Кринкина Е.А. Энергетические характеристики замещённых бензола	71
Крылов П.Н. Энергии разрыва связи в германийорганических соединениях	72
Милорадова А.Н. Корреляции «структура - свойство» одноатомных спиртов. Топологический подход	73
Савельев М.О. Гелеобразование в растворах L-цистеина и перхлората серебра	74
Селина Т.Ю. Моделирование гексагональной фазы в расплаве триблок-сополимеров	75
Смирнова Е.С. Влияние полярности растворителя на электронные спектры	76
Соколов А.В. Аддитивная схема расчета X-замещенных бензола	77
Федотов П.А. Исследование пористости полимерных плёнок методом ИК спектроскопии	78
Храброва Л.А. Энергетические характеристики галогензамещённых алканов	79
Эрендженова А.А. Компьютерное моделирование методом молекулярной динамики ионной жидкости	80

Секция «Юный химик»

Корсарская Дарья Альбумины	82
Кравцова Анна Применение сложных эфиров	83

СЕКЦИЯ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ И АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Ионселективный электрод с откликом на ион линкомицина

Арефьев Д.В. (студент, 4 курс),
Соколова С.А. (магистрант, 1 курс),
Хорламова А.В. (ученик, 11 класс)

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

На сегодняшний день остро встает вопрос о создании методик как качественного, так и количественного анализа этих препаратов. Среди широко применяемых для лечения инфекционно-воспалительных заболеваний применяют линкомицин. В настоящее время для анализа биологически-активных веществ предложены надежные ионоселективные электроды (ИСЭ), которые упрощают аналитическую процедуру и имеют низкую погрешность измерений. Цель работы - создание ионоселективного электрода с откликом на линкомицин. Для изготовления ИСЭ использовали ионоселективную мембрану состава (процент по массе): поливинилхлорид: дибутилфталат: электрод активное вещество (ЭАВ)-55:40:5. В качестве ЭАВ использовали ионный ассоциат катиона линкомицина и молибдодокремниевой кислоты. Известно, что использование трансдюсера вместо внутреннего электрода сравнения позволяет улучшить метрологические характеристики ионоселективного электрода. Поэтому были изготовлены ионоселективные электроды в двух вариантах 1) классический (с внутренним электродом сравнения и ионоселективной мембраной) и 2) с трансдюсером состава: поливинилхлорид: дибутилфталат: полианилин в соотношении (40:35:25). Трансдюсер находился между ионоселективной мембраной и токоотводом. Исследование электродных функций полученных электродов показало, что оба они имеют крутизну

электродной функции в пределах 35 мВ/рС, соответствует теоретическим значениям, минимально определяемая концентрация 1-5 (рС) , диапазон которой является достаточным для большинства практических измерений. Время жизни электрода с трансдьюсером значительно выше чем у обычного.

Синтез и исследование комплексов меди(II) с анионами цефалоспоринов

Белова И.С. (студент, 4 курс)

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

Путем взаимодействия водных растворов хлорида меди(II) и натриевых солей цефалоспориновых антибиотиков цефазолина (НСzl), цефотаксима (НСxm) и цефтриаксона (H₂Ctx) и получены в виде осадков и исследованы их внутрикомплексные соли с Cu(II). Состав образцов определен методами электронно-зондового анализа с помощью энергодисперсионного спектрометра INCA Energy 350, используемого в качестве аналитической приставки к растровому электронному микроскопу JEOL JSM-6610LV и синхронного термического анализа на установке Netzsch STA 449 F3 Jupiter. Исследование методом ИК спектроскопии на приборе Bruker Equinox 55 показало смещение полос валентных колебаний $\nu(\text{C}=\text{O})$ амидной и бета-лактамной групп и $\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)_{\text{as}}$ карбоксилатной группы в сторону более высоких частот по сравнению со спектром соответствующей натриевой соли антибиотика, что можно расценивать как координацию этих групп с Cu(II).

Образец	$\nu(\text{C}=\text{O})$ β -лактам	$\nu(\text{C}=\text{O})$ амид	$\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)_{\text{as}}$
<i>NaCzl·H₂O</i>	1761	1680	1605
<i>Cu(Czl)₂·2H₂O</i>	1765	1684	1606
<i>NaCxm·H₂O</i>	1759	1647	1612
<i>Cu(Cxm)₂·4H₂O</i>	1769	1674	1616
<i>Na₂Ctx·4H₂O</i>	1740	1649	1610
<i>CuCtx·4H₂O</i>	1767	1668	1620

Эксперименты выполнены на приборах отделения физико-химического анализа и отделения спектроскопии Тверского регионального межведомственного центра коллективного пользования.

Термический анализ ацетилсалициловой кислоты

Василенко П.С. (магистрант, 2 курс)

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

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

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

Таблица 1

Температуры плавления ацетилсалициловой кислоты

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

Список литературы

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

ИК идентификация оптических изомеров глутаминовой кислоты

Веселова К.А. (студент, 5 курс)

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

Особенности структуры оптических изомеров аминокислот обуславливают их роль в живом организме и являются определяющим фактором их функциональности в биологических процессах. В связи с этим актуальными являются пути установления индивидуальности изомеров.

С помощью ИК спектров нами предпринята попытка различить D - и L-изомеры глутаминовой кислоты.

При сравнении ИК спектров порошкообразных L-глутаминовой кислоты и D,L – глутаминовой кислоты фирмы «Reanal» (Венгрия) было установлено, что в твердом состоянии они имеют бетаиновую структуру. Это подтверждается полосой поглощения, присутствующей в спектрах обоих изомеров при 1615 см^{-1} . Более выраженная полоса поглощения при 1376 см^{-1} у L-изомера подчеркивает наличие цвиттер-иона $^+\text{NH}_3\text{-CH}_2\text{COO}^-$ способного образовывать водородные связи. Наличие полосы поглощения при 1710 см^{-1} и двух полос поглощения при 3468 см^{-1} и 3572 см^{-1} в D-изомере свидетельствуют о том, что в его составе присутствует первичная аминогруппа и карбоксильная группа в недиссоциированной форме, тогда как у L-изомера указанные полосы поглощения исчезают. Это может быть в том случае, когда образуется

замкнутый цикл за счет ионизированной α -карбоксильной группы и протонированной аминогруппы за счет образования внутримолекулярных водородных связей через молекулы воды [1].

Список литературы

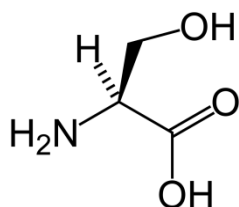
1. Храмов. В.П. Комплексоны редкоземельных элементов. Изд. Саратовского университета. 1974. С. 31.

Изучение взаимодействия L-серина с ионами Ag^{2+}

Выродова В. О. (студент, 4 курс)

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

В настоящее время хорошо известна высокая антимикробная активность серебра в форме катионов и наночастиц. Наряду с давно применяемым водным раствором AgNO_3 в медицинскую практику внедряются мази и кремы, содержащие комплексные соединения серебра(I) с полимерными и мономерными лигандами. Идет активный поиск новых перспективных для применения в медицине препаратов на основе серебряных комплексов биолигандов. Серин - гидроксиаминокислота, существует в виде двух оптических изомеров — L и D. L-серин участвует в построении почти всех природных белков, а также в образовании активных центров ряда ферментов (эстераз, пептидгидролаз), обеспечивая их функцию.



$$pK_a(\text{COOH}) = 2,21$$

$$pK_a(\text{NH}_2) = 9,15$$

Комплексообразование исследовали рН-метрическим методом. Раствор для титрования готовили непосредственно перед титрованием, смешивая растворы L-серина и AgNO_3 в мольном соотношении $\text{Ag}^+ : \text{Ser} = 1 : 1$. В

качестве титранта использовали стандартный раствор NaOH $C = 0,047$ моль/л. В качестве электрода использовали комбинированный pH – электрод.

Для определения состава и устойчивости образующихся комплексов был проведен математический анализ результатов титрования с использованием специализированной программы расчета химических равновесий New DALSFЕК (КСМ Soft, 2000 г.).

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

Создание и исследование характеристик ионселективного электрода с откликом на никотиновую кислоту

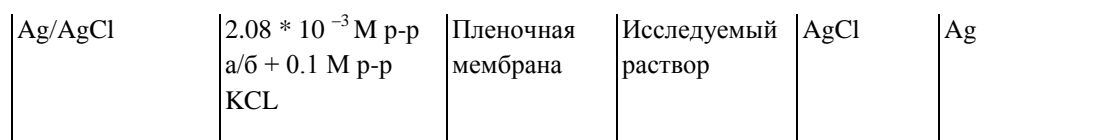
Грачева К.А. (магистрант, 2 курс)

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

Потенциометрические методы, в частности, с использованием ионселективных электродов (ИСЭ) выгодно отличаются простотой и экспрессностью анализа, однако применение этого метода для определения никотиновой кислоты не описано в литературе, поэтому целью настоящей работы явилось создание ИСЭ для определения последнего, изучение его характеристик и разработка методики ионометрического определения никотиновой кислоты в готовых лекарственных формах.

В работе использовали никотиновую кислоту фармакопейной чистоты, фосфорно-молибденовую (ФМК) и фосфорновольфрамовую (ФВК) кислоты ч.д.а., диоктилфталат (ДОФ) ч.д.а., поливинилхлорид (ПВХ) марки С-70 х.ч. Электродноактивные вещества (ЭАВ) получали осаждением никотиновой кислоты, в силу ее амфотерности, из водных растворов вышеуказанными гетерополикикислотами.

Пластифицированные мембраны имели следующий состав (в масс. %): ПВХ-35, ДОФ-60, ЭАВ-5. ИСЭ перед применением вымачивали в 0,05 М растворе никотиновой кислоты. Для определения электродных характеристик использовали электрохимическую ячейку:



Изготовленные электроды обладали хорошими метрологическими характеристиками. Интервал линейности электродной функции находится в промежутке 1-4 рС, крутизна электродной функции близка к теоретическому значению, время отклика составляло 5-10 с. Показано, что потенциал ИСЭ не изменяется в интервале рН 4 - 6, что делает этот интервал наиболее подходящим для определения никотиновой кислоты. Определение никотиновой кислоты в готовых лекарственных формах показало работоспособность созданного ИСЭ.

Список литературы

1. Е.М. Rakhmanko, V.V. Yegorov, A.L. Gilevich, Ion-Selektivelektroden. 1992. Р. 5-11
2. Корята И., Штулик К. Ионоселективные электроды. М.: Мир, 1989, 268 с.

Индикаторная бумага для экспресс-анализа содержания нитратов и нитритов

Гусева Д.А. (магистрант, 1 курс)

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

Индикаторная бумага для определения нитратов и нитритов рекомендуется для экспрессного определения содержания нитратов и нитритов в продуктах растениеводства, воде, пищевых продуктах, сточных водах [1]. Известные в литературе и применяемые в настоящее время составы для пропитки индикаторной бумаги обычно содержат канцерогенный реагент α -

нафтиламин, индикаторная бумага не подлежит длительному хранению и сложна в изготовлении [2]. Индикаторная бумага изготавливается двух видов: для определения суммарного содержания нитратов и нитритов; для определения содержания нитритов. Диапазон определяемых концентраций по нитратам составляет 20-1000 мг/дм³ (мг/кг), по нитритам - 2,5-800 мг/дм³ (мг/кг) [3]. Срок хранения бумаги в плотно закрытой таре и тёмном месте более двух лет. Экстрагирование окрашенного азосоединения с хроматографической бумаги позволяет оценивать присутствие нитрит - ионов не только качественно, но и количественно фотометрическим методом по уравнению определения содержания нитрит - ионов:

$$C = 0,55*(A-0,15), \text{ моль/дм}^3, \text{ где } A - \text{оптическая плотность раствора.}$$

Список литературы

1. Золотов Ю. А., В. М. Иванов, В. Г. Амелин// Химические тест - методы анализа. М.: Едиториал, УКСС, 2002. - 304 с.
2. ГОСТ 26929-94. Сырьё и продукты пищевые. Подготовка проб. Минерализация для определения содержания токсичных элементов. М.: Изд-во стандартов, 1996. -14 с.
3. Заявка на полезную модель № 2015122876 от 16.06.2015г. //Индикаторная бумага/ Гусева Д.А., Никольский В.М., Логинова Е.С.

Комплексообразование борной кислоты с комплексонами, производными янтарной кислоты

Дремлева О.Ю. (магистрант, 2 курс)

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

С целью изучения процессов комплексообразования бора с экологически безопасными комплексонами нами были синтезированы комплексы IDS и EDDS с борной кислотой, проведены исследования водных систем комплексон – борная кислота.

Экспериментальные данные обрабатывали с помощью универсальной компьютерной программы AUTOEQUIL [1]. При расчетах использовали значения констант диссоциации кислот, полученные нами ранее в тех же условиях [2]. Обнаруженные комплексные формы и значения логарифмов констант их устойчивости приведены в табл. 1.

Таблица 1

Логарифмы констант устойчивости комплексонов с бором в системах $B(OH)_3$ – КПЯК – H_2O при 298 К и $I = 0,1$ в среде KNO_3

Комплексная форма	$B(OH)_3L^4$	$B(OH)_3HL^3-$
ИДЯК	$4.85 \pm 0,06$	$13.31 \pm 0,12$
ЭДДЯК	$3,94 \pm 0,01$	-

Одинаковый порядок констант устойчивости боратных комплексов для ЭДДЯК и ИДЯК говорит о схожем строении соединений и одинаковой дентатности лигандов.

Список литературы

1. Евсеев А. М., Николаева Л. С. Математическое моделирование химических равновесий. М.: Изд-во МГУ, 1988. 192 с.
2. Толкачева Л.Н. Концентрационные и термодинамические характеристики комплексообразования Al^{3+} с этилендиамин-N,N'-диянтарной кислотой в водных растворах // Современные проблемы науки и образования.- 2011.- № 3; (URL: www.science-education.ru/97-4710)

Влияние рН на оптические свойства полианилиновой пленки

Иванова В.Н. (магистрант, 2 курс)

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

Известно, что полианилин под действием изменяющегося рН среды может изменять свою структуру, что сказывается на ряде его физико-химических свойств. Величина рН оказывает особенно сильное влияние на

оптические свойства полианилина. Поэтому целью настоящей работы было изучение влияния рН среды на оптические свойства полианилиновой пленки.

Полианилин – полимер, который практически не растворяется в обычных органических растворителях и не плавится, поэтому получить пленку полианилина пригодную для оптических исследований традиционными способами невозможно. Наиболее хорошие результаты получаются, если использовать метод электрохимического синтеза, но в этом случае необходимо, чтобы подложка была прозрачна, в исследуемом диапазоне длин волн. Для нашей работы в качестве подложки мы использовали пленку ПЭТФ с нанесенным на его поверхность слоем электропроводного оксида олова. Электрохимический синтез осуществляли по традиционной методике. Из раствора, содержащего 1М HCl и 0,2М анилина гидрохлорида в потенциостатическом режиме с потенциалом 1100 мВ. В результате была получена равномерная пленка полианилина. Изготовленный таким образом образец использовался для оптических исследований. Предварительные эксперименты показали, что наибольшее изменение происходит при $\lambda = 840$.

Исследования показали, что оптическая плотность линейно зависит от величины рН. Преимущества изготовленного нами сенсора заключается в том, что электропроводная подложка позволяет управлять начальной степенью окисления полианилиновой пленки, следовательно, и ее оптическими свойствами. Найденные закономерности позволяют разрабатывать универсальные рН сенсоры пригодные для анализа водных сред.

Количественный анализ жидких лекарственных форм методом рефрактометрии

Исаева А. А.(студент, 4 курс)

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

В данной работе проводилось количественное определение содержания глюкозы в препаратах «Раствор глюкозы №10» двух фирм-производителей: «Solopharm» и «ДАЛЬХИМФАРМ». Анализ проводился с помощью

рефрактометра типа Аббе ИРФ-454 Б2М. Так как в исследуемых растворах глюкозы, в соответствии с прописью, содержится хлорид натрия и хлороводородная кислота, которые вносят определенный вклад в показатель преломления раствора, их количественное определение проводилось методом аргентометрического титрования в присутствии индикатора бромфенолового синего [1]. Фактор преломления раствора хлорида натрия определялся с помощью рефрактометрических таблиц [2] по содержанию хлорид-ионов и составил 0,000061.

Результаты анализа исследуемых растворов фирм-производителей «Solopharm» и «ДАЛЬХИМФАРМ» показали, что содержание глюкозы в составило 39,53 и 39,75%, соответственно, а отклонения концентрации от обозначенного в прописях составили менее 1%. Таким образом, концентрации веществ в растворах глюкозы производителей «Solopharm» и «ДАЛЬХИМФАРМ» соответствуют заявленным в прописях, а сами препараты отвечают требованиям Государственной Фармакопеи РФ.

Список литературы

1. Радион, Е. В. Классические методы анализа: практическое применение. Минск : БГТУ, 2013. С. 76.
2. ГОСТ 50546-93. Сироп из глюкозы. Определение содержания сухого вещества с использованием показателя преломления. Рефрактометрический метод.

Полианилиновый газовый сенсор на NO₂ резистивного типа

Кустарев Б.А. (студент, 5 курс)

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

На основании литературных данных, можно считать, что полианилин (ПАНИ) может быть использован в качестве рабочего тела при создании газовых сенсоров. При чём, учитывая, что электропроводность полианилина

существенно зависит от его степени допирования, можно предположить, что это соединение наиболее эффективно будет реагировать на газы кислотной природы [1].

Для подтверждения этого, мы решили проверить отклик датчика на содержание NO_2 в воздухе. Для этого мы изготовили сенсор, который представлял собой гребёнку из золотых электродов, поверх которой был нанесён слой полианилина.

Для нанесения ПАНИ на заготовку использовали метод электрохимического синтеза при контролируемом токе в режиме циклической вольтамперометрии [3].

Эксперименты по изучению свойств сенсора проводили в герметичной камере, описанной [1].

Запись результатов измерения электросопротивления сенсора производили при помощи тестера, соединённого с компьютером [4].

Важным параметром любого сенсора является рабочий диапазон температур.

Список литературы

1. Рясенский С.С. Лившиц Е.С. Газовый сенсор на аммиак // Вестник ТвГУ сер. Химия 2009 № 9. С. 35-40
2. Карякин Ю.В., Ангелов И.И. Чистые химические вещества. М.: Химия, 1974, 407 с.
3. С.С. Рясенский, И.И. Рыбаков, Б.А. Кустарев Газовый сенсор на HCl HCl //Вестник ТвГУ. Серия Химия 2014 № 2. С. 5–9
4. С.С. Рясенский Простой цифровой самописец// Вестник ТвГУ сер. Химия 2009 № 9. С. 41

Синтез и исследование комплексов кобальта(II) с анионами цефалоспоринов

Лукиенко М.Ю. (студент, 4 курс)

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

Путем взаимодействия водных растворов хлорида кобальта(II) и натриевых солей цефалоспориновых антибиотиков цефазолина (HCzI), цефотаксима (HCxm) и цефтриаксона (H_2Ctx) и получены в виде осадков розового цвета и исследованы их внутрикомплексные соли с Co(II) . Состав образцов определен методами электронно-зондового анализа с помощью энергодисперсионного спектрометра INCA Energy 350, используемого в качестве аналитической приставки к растровому электронному микроскопу JEOL JSM-6610LV и синхронного термического анализа на установке Netzsch STA 449 F3 Jupiter. Исследование методом ИК спектроскопии на приборе Bruker Equinox 55 показало смещение полос валентных колебаний $\nu(\text{C}=\text{O})$ амидной и бета-лактамной групп и $\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)_{\text{as}}$ карбоксилатной группы в сторону более высоких частот по сравнению со спектром соответствующей натриевой соли антибиотика, что можно расценивать как координацию этих групп с Co(II) .

Образец	$\nu(\text{C}=\text{O})$ β -лактам	$\nu(\text{C}=\text{O})$ амид	$\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)_{\text{as}}$
$\text{NaCzI} \cdot \text{H}_2\text{O}$	1761	1680	1605
$\text{Co(CzI)}_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	1770	1691	1630
$\text{NaCxm} \cdot \text{H}_2\text{O}$	1759	1647	1612
$\text{Co(Cxm)}_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	1768	1672	1618
$\text{Na}_2\text{Ctx} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	1740	1649	1610
$\text{CoCtx} \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	1765	1668	1620

Эксперименты выполнены на приборах отделения физико-химического анализа и отделения спектроскопии Тверского регионального межведомственного центра коллективного пользования.

Твердоконтактный ионоселективный электрод с откликом на доксициклин

Лютова Д. В. (студент, 4 курс)

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

Целью настоящей работы было создание ионоселективного электрода с откликом на доксициклин.

При создании электрода мы изготовили ионоселективную мембрану, содержащую поливинилхлорид, дибутилфталат и электрод активное вещество в соотношении 5:40:55. Электрод активное вещество представляет собой ионный ассоциат катиона доксициклина и молибдодокремниевой кислоты. Этот ассоциат получили путем взаимодействия доксициклина гидрохлорида и молибдодокислоты в водном растворе при эквимолярном соотношении компонентов. Электрод активное вещество выпадало в виде труднорастворимого осадка, который несколько раз промывали водой, высушивали при комнатной температуре. Затем использовали этот осадок для изготовления электрода.

Известно, что использование ионно-электронного трансдьюсера вместо внутреннего электрода сравнения позволяет существенно улучшить метрологические характеристики ионоселективного электрода. Поэтому мы изготовили ионоселективный электрод в двух вариантах: с ионно-электронным трансдьюсером и классический (с внутренним электродом сравнения и ионоселективной мембраной). Ионно-электронный трансдьюсер представлял собой пластифицированную мембрану, состоящую из поливинилхлорида, дибутилфталата и полианилина в соотношении 25:40:35. Ионно-электронный трансдьюсер находился между ионоселективной мембраной и токоотводом. Исследование электродных функций подготовленных электродов показало, что оба они имеют крутизну электродной функции 59 mV/pC , что соответствует теоретическим значениям. При этом диапазон линейности составляет 1-6. Этот

диапазон подходит для большинства измерений. Интересно, что время отклика у электродов с трансдьюсером значительно меньше, чем традиционного электрода. Время жизни электрода с трансдьюсером намного выше, чем классического электрода и составляет 8-9 месяцев, а классический переставал работать уже через 4 месяца. С точки зрения технологии предпочтительней изготовление ионоселективного электрода с трансдьюсером, так как в данной конструкции нет драгоценных металлов и внутреннего раствора. Поэтому в сочетании с дешевой и доступностью материалов для изготовления трансдьюсера, этот электрод становится более перспективным.

Эффективность работы электрода была подтверждена при анализе готовой лекарственной формы доксицилина гидрохлорида (производитель «Фармарус»). Анализ проводили методом прямой потенциометрии при использовании изготовленных электродов и титровали раствором нитрата серебра с серебряным индикаторным электродом. Результаты анализа имеют хорошие соответствия. Поэтому можно считать, что цель работы достигнута.

Твердотельный ионоселективный электрод с откликом на либексин

Муравьева Т. А.(студент)

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

Чтобы определить содержание либексина предложен такой метод как кулонометрическое титрование, а также хроматографические и спектрофотометрические методы анализа. Однако применение кулонометрического метода анализа для контроля качества данного лекарственного средства является трудоемким и длительным, при этом требует предварительной стандартизации титранта. Хроматографические и спектрофотометрические методы эффективны, но дороги. В связи с этим представляет интерес применить для количественного определения

преноксдиазин гидрохлорида твердотельного ионоселективного электрода с откликом именно на этот препарат.

Для создания электрода изготовили ионоселективную мембрану, которая содержит в себе поливинилхлорид, дибутифталат и электрод активное вещество (ЭАВ). ЭАВ получили взаимодействием катиона либексина и молибдофосфорной кислоты в водном растворе при эквимолярном соотношении компонентов. При этом произошло выпадение труднорастворимого осадка, который несколько раз поместили в центрифугу для осаждения. После чего осадок высушили при комнатной температуре для дальнейшего использования при изготовлении электрода.

Итак, в ходе проведения анализа готовой лекарственной формы преноксдиазин гидрохлорида (либексина) методом прямой потенциометрии с использованием изготовленного электрода и методом потенциометрического титрования раствора нитрата серебра с серебряным индикаторным электродом получили результаты, которые имеют хорошие соответствия. Это доказывает эффективность работы ионоселективного электрода.

Исследование процессов комплексообразования в системах: катионы металла (медь, цинк) антиаритмический препарат (атенолол)

Некрасова Е. Н. (студент, 5 курс)

Багиров Т. Л. (ученик, 11 класс)

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

Антиаритмические препараты — группа лекарственных средств, применяющихся при разнообразных нарушениях сердечного ритма, таких как экстрасистолия, мерцательная аритмия, пароксизмальная тахикардия и др.

В настоящей работе была исследована возможность образования комплекса между антиаритмическим препаратом (атенолол) и катионами металла (медь, цинк). Ведь при приеме любого лекарства очень важно знать,

что оно не оказывает пагубное воздействие на организм наряду со своими лечебными свойствами.

Из лекарственного препарата было выделено активное вещество, которое было подвергнуто всестороннему изучению – термогравиметрический анализ, ИК-спектроскопия и элементный анализ для определения чистоты атенолола, также было проведено рН-метрическое титрование для и проведения сравнительного анализа моделей химических равновесий.

На основании полученных данных были рассчитаны физико-химические модели равновесий в системах: атенолол - Zn^{2+} и атенолол - Cu^{2+} , а также была подтверждена чистота исследуемого вещества.

Затем были выделены твердые комплексы атенолола с металлами, которые были исследованы методами ИК-спектроскопии и элементного анализа, которые подтвердили, что в полученном веществе присутствуют катионы металла (медь, цинк).

Из чего можно сделать вывод, что при приеме атенолола из организма человека выводятся медь и цинк, поэтому их следует дополнительно принимать во избежание появления их дефицита.

Анализ афобазола методом дифференциальной сканирующей калориметрии

Полыскина Д.Е. (студент, 5 курс)

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

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

Известно [1], что добавки, входящие в состав лекарственного препарата могут изменять температуру плавления. Добавки, имеющие более высокую

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

Список литературы

1. С. Б. Середенин, Ю. А. Бледнов, В. Л. Савельев и др.; Патент РФ № 2061686; Бюл. изобрет., № 16 (1996).
2. Аносова Е. Б. Пажаровзрывоопасность новых фармацевтических препаратов и продуктов их синтеза: дис. канд. техн. Наук (05.26.03 – пожарная и промышленная безопасность (химическая технология)) / Е. Б. Аносова. – М., 2009. – 177 с.

Разработка твердотельной универсальной электрохимической топливной ячейки для создания электрохимических сенсоров и топливных элементов

Радин А. С. (студент, 4 курс)

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

В настоящей работе была проведена разработка твердотельной универсальной электрохимической топливной ячейки для создания электрохимических сенсоров и топливных элементов. Существенными

недостатками современных электрохимических ячеек использующихся как газовом анализе, так и в топливных элементах является использование дорогих каталитически активных материалов – платины, палладия и других редких элементов, в сочетании с едкими жидкими и ядовитыми твердыми электролитами, а также с газоразделительными и ионными мембранами. Поэтому целью данной работы было создание универсальной электрохимической ячейки, применяющейся как в газовом анализе, так и в топливных элементах, без использования в ней: мембран, жидких электролитов, драгоценных металлов и других дорогих элементов, что позволило бы существенно удешевить ее стоимость. Данная задача была реализована за счет использования каталитически активного вещества класса неорганических гетерополикислот $H_6[P_2W_{18}O_{62}]$ – 18-вольфрамо-2-фосфорной кислоты типа Доусона. Ниже представлен график тестирования разработанной электрохимической ячейки в качестве электрохимического сенсора и топливного элемента:

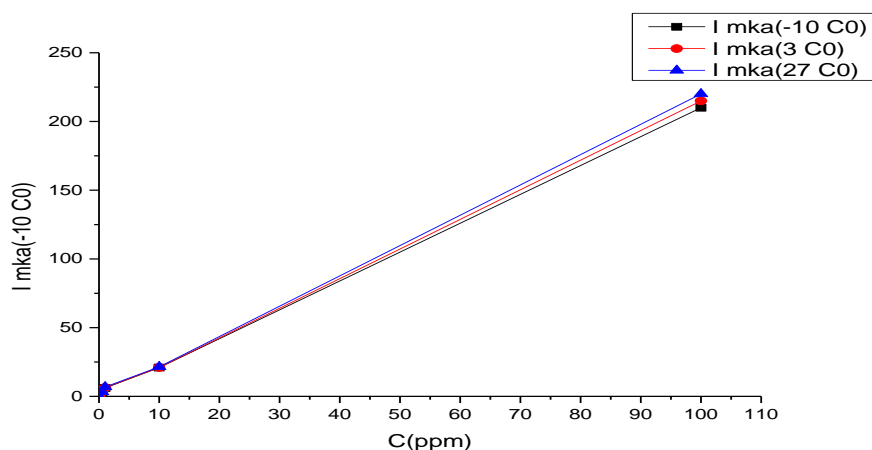


Рис. 1. Общий схематичный график зависимости силы тока в электрохимической ячейке от концентрации водорода и температуры. По оси ординат расположена сила тока в миллиамперах. По оси абсцисс концентрация водорода в ppm.

Газовый сенсор на основе полианилина с откликом на двуокись серы

Рыбаков И.И.(студент, 5 курс)

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

Контроль содержания паров SO_2 в воздухе имеет важное значение в экологическом и технологическом плане. Поэтому целью настоящей работы было создание резистивного газового сенсора с откликом на пары SO_2 на основе полианилина.

Электрохимический синтез проводили в электролите с концентрациями SO_2 1М и гидрохлориданилина 0,2М. Оба электрода выступали в качестве анода. При этом наблюдался рост плёнки полианилина, которая со временем замыкала оба электрода. Процесс контролировали с помощью микроскопа. После завершения электросинтеза, изготовленный сенсор промывали водой, и высушивали. Электросопротивление сенсора имело величину 0,714 кОм.

Изготовленный сенсор имеет быстрый отклик (1-2 сек.) на увеличение концентрации SO_2 . Однако при быстром уменьшении концентрации SO_2 , величина электросопротивления возвращалась к исходному значению очень медленно. Эта закономерность изображении на

Данный сенсор можно рассматривать как интегрально-пиковый, величина электросопротивления которого будет отражать максимальную концентрацию SO_2 в воздухе за определённый промежуток времени. Косвенным подтверждением предложенного механизма является тот факт, что если сенсор после его взаимодействия с парами SO_2 обработать газообразным NH_3 то электросопротивление резко повышается.

Важной характеристикой газового сенсора является его селективность в присутствии мешающих газов. Мы установили, что H_2S , CO , CO_2 при заведомо высоких концентрациях (около 1 об.%) практически не влияет на отклик изготовленного сенсора. Показана возможность изготовления газового сенсора на SO_2 на основе плёнки полианилина.

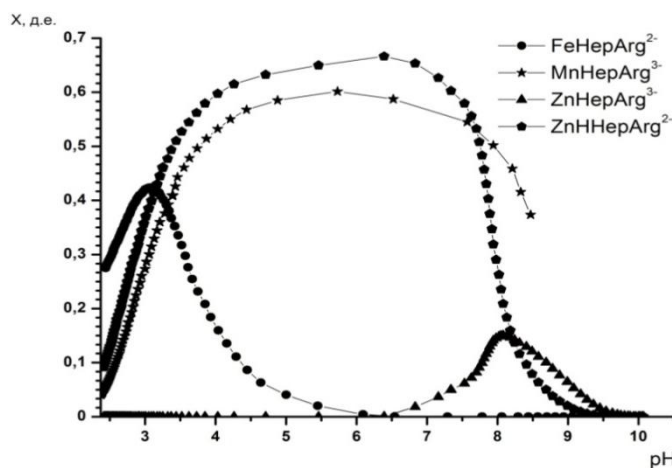
Выделение комплексных соединений, состоящих из металла, аргинина и гепарина, из их водных растворов

Скобин М.И., Крюков Т.В., Новикова В.В.,
Барина М.Н. (магистранты, 2 курс)

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

Гепарин способен связываться в тройные комплексы с катионами металлов и аминокислотами, что создает их дефицит в организме. Вследствие чего, выделение вышеописанных комплексных соединений, состоящих из металла (железо(III), марганец(II), цинк(II)), аргинина и гепарина, в твердом состоянии, с целью дальнейшего физико-химического исследования представляет значительный интерес.

На основе данных рН-метрического анализа было проведено математическое моделирование, результатом которого было построение концентрационных диаграмм распределения комплексных форм (FeHepArg^{2-} , MnHepArg^{3-} , ZnHepArg^{3-} , ZnNHepArg^{2-}) в исследуемых системах. По диаграмме на рисунке ниже были определены значения рН, при которых выходы комплексных форм были максимальны, после чего они были получены в твердом виде.



Для выделения комплексных форм (FeHepArg^{2-} , MnHepArg^{3-} , ZnHepArg^{3-} и ZnNHepArg^{2-}) к растворам добавляли ацетон в соотношении 1 : 5. После перемешивания образовывались бесцветные гелеобразные осадки в системах с цинком и марганцем и гелеобразный осадок оранжевого цвета в системе с железом, которые отделяли центрифугированием, промывали ацетоном и сушили в сушильном шкафу при 80 °С в течение 2 часов до постоянного веса.

Структура комплексов цефтазидима с ионами *d*-элементов по результатам компьютерное моделирование

Соколова Е.М. (студент, 5 курс)

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

Проведено компьютерное моделирование структуры комплексов аниона цефалоспоринового антибиотика цефтазидима Ctzd^- с катионами *d*-элементов: Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Cd^{2+} . Модели комплексов создавали в программе Maestro. Предварительную оптимизацию проводили в программе MacroModel методом молекулярной механики с использованием силового поля OPLS2005. Расчет был выполнен в приближении бесконечно разбавленного водного раствора. Далее была проведена оптимизация геометрии комплексов полуэмпирическим методом PM7 в программе MOPAC 2012. Для Ni^{2+} и Cu^{2+} наблюдается координация атомов кислорода обеих карбоксилатных групп, бета-лактамной группы и атома азота тиазольного цикла, для Co^{2+} , Zn^{2+} и Cd^{2+} – атомов кислорода карбоксилатных групп и бета-лактамной группы. Окончательная оптимизация моделей в приближении находящейся в вакууме одиночной молекулы выполнена в программе Jaguar методом DFT с использованием гибридного функционала B3LYP и набора базисных функций LACV3P**+-. Она не привела к принципиальным изменениям. На основании данных компьютерного моделирования можно предполагать, что Ni(II) и Cu(II) координируют анион Ctzd^- как тетрадентатный лиганд с замыканием хелатных циклов. В моделях комплексов для других исследованных систем координация с атомом азота отсутствует. Результаты компьютерного моделирования хорошо совпадают с полученными ранее экспериментальными данными. Методом рН-метрического титрования в системах $\text{Co}^{2+}-\text{Ctzd}^-$, $\text{Zn}^{2+}-\text{Ctzd}^-$ и $\text{Cd}^{2+}-\text{Ctzd}^-$ образования комплексов не обнаружено, а в системах $\text{Ni}^{2+}-\text{Ctzd}^-$ и $\text{Cu}^{2+}-\text{Ctzd}^-$ обнаружено образование комплексов средней устойчивости.

Рецептура губной помады

Сударикова Ю.Д. (студент, 4 курс)

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

Практически вся косметическая продукция, которой пользуются представительницы прекрасного пола, является токсичной..., например, было выявлено, что в губной помаде содержится свинец. Вредные химические вещества и тяжелые металлы, которые входят в состав косметических средств, наносят непоправимый ущерб коже, а также становятся причинами возникновения аллергических реакций и высыпаний на лице. Именно поэтому стоит быть аккуратными при выборе того или иного средства. Однако порой на упаковке практически ничего не написано и нет мер предосторожности, которые предупреждали бы о возможных последствиях. Было установлено, что 49 знаменитых косметических компаний по всему миру имеют продукцию, в составе которой были обнаружены вредные химические вещества [1].

Для связывания вредных веществ, в частности металлов, присутствующих в губной помаде, в ее рецептуру вводят комплексообразующие компоненты. Так есть рецептуры состав которых входят аминокислоты [2], этилендиаминтетрауксусная кислота (ЭДТА) [3]. Однако, аминокислоты проявляют невысокие комплексообразующие свойства, а ЭДТА в рецептуре помад неудобна тем, что практически не разлагается в условиях сбросов [4].

Нами предложена рецептура губной помады, в состав которой входят эффективный комплексообразователь, этилендиаминдиглутаровая кислота (ЭДДГК) [5], которая в условиях сбросов под действием солнечного света распадается на безопасные компоненты.

Эффективность предлагаемого решения определяется тем, что у введенного в рецептуру экологически безопасного комплексона устойчивость комплексов с тяжелыми металлами весьма высока, например, для комплексов с

цинком или кобальтом она превышает десять порядков, т.е. превышает устойчивость комплексов с глутаминовой кислотой в сто раз ($\lg K_{ZnL} = 10,48$; $\lg K_{CoL} = 10,76$ [6]).

Список литературы

1. <http://www.galya.ru/clubs/show.php?id=26659>
2. Патент РФ №1708341, опубл. 30.01.1992
3. <http://liderori.com/magazin-oriflame/pomade-20475.html>
4. Е.Н. Капарулина, Н.В. Доронина, В.А. Ежов, Ю.А. Троценко, *Прикл. биохимия и микробиология*, 2012, Т. 48, №4, С. 437
5. Гридчин С.Н., Никольский В.М., Толкачева Л.Н. // *Известия ВУЗов. Химия и химическая технология*, 2015, Т. 58, №2, С.11-13
6. Гридчин С.Н., Никольский В.М., Толкачева Л.Н. // *Журнал неорганической химии*, 2015, Т. 60, №3, С.438.

Твердоконтактный ионоселективный электрод для определения иона тетрациклина

Титова Е.Р. (студент, 4 курс)

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

Известно, что на многие лекарственные вещества возможно создать ионоселективные электроды. Поэтому целью настоящей работы было создание ионоселективного электрода с откликом на тетрациклин. При создании электрода мы изготавливали ионоселективную мембрану, содержащую ПВХ, дибутилфталат (ДБФ) и электрод активное вещество в соотношении 5:40:55. Электрод активное вещество – это ионный ассоциат катиона тетрациклина и молибдодокремниевой кислоты. Ассоциат был получен взаимодействием тетрациклина гидрохлорида и молибдодокремниевой кислоты в водном растворе при эквимолярном соотношении компонентов. Электрод активное вещество выпадало в виде труднорастворимого осадка, который несколько раз

промывали водой, высушивали при комнатной температуре и использовали для изготовления электрода. Мы изготовили ионоселективный электрод в двух вариантах: классический (с внутренним электродом сравнения и ионоселективной мембраной) и с ионно-электронным трансдьюсером. Ионно-электронный трансдьюсер – это пластифицированная мембрана, состоящая из ПВХ, ДБФ и полианилина в соотношении 25:40:35. Исследование электродных функций подготовленных электродов показало, что оба они имеют крутизну электродной функции 59 mV/pC, что соответствует теоретическим значениям. При этом диапазон линейности составляет 1-5. Время отклика у электродов с трансдьюсером значительно меньше, чем традиционного электрода. Время жизни электрода с трансдьюсером составляет 8-9 месяцев, а классического - 4 месяца. Дешевизна и доступность материалов при изготовлении трансдьюсера делает этот электрод более перспективным. Эффективность работы электрода была подтверждена при помощи анализа готовой лекарственной формой тетрациклина гидрохлорида. Анализ проводили методом прямой потенциометрии с использованием изготовленных электродов и методом потенциометрического титрования раствора нитрата серебра с серебряным индикаторным электродом. Результаты анализа имеют хорошие соответствия. Поэтому можно считать, что цель работы достигнута.

Влияния переменного электрического поля на скорость процессов сорбции редкоземельных элементов

Хивинцева Т.А. (студент, 5 курс)

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

Несмотря на значительные успехи в создании высокоэффективных методов определения различных веществ, включая и редкоземельные элементы, надежность всем этим методам придает предварительное концентрирование, являющееся практически первой и весьма важной стадией аналитической методики. Для концентрирования редкоземельных элементов (РЗЭ) как стадии их определения используются экстракция, соосаждение, сорбция ионитами, а

также сочетание этих приемов. Среди методов концентрирования наиболее простым является способ сорбционного концентрирования ионообменными смолами. С другой стороны, известно, что лимитирующей стадией процесса сорбции является установление динамического равновесия ионит – сорбируемый ион, которая определяется градиентной составляющей транспорта ионов к границе раздела фаз ионит-раствор. [1], [3]

Наряду с этим в работах [2] было показано, что при воздействии на систему переменным электрическим полем в окрестности ионитов возникают интенсивные симметричные течения. Было сделано предположение, что если использовать данный эффект в процессе концентрирования РЗЭ катионитами, то это может увеличить скорость концентрирования.

Были проведены исследования по исследованию скорости извлечения из растворов ионов РЗЭ : эрбия и ниобия катионитом КУ 2-8 в стационарных условиях и в условиях воздействия на систему переменным электрическим полем. Было показано, что, действительно, при воздействии переменным электрическим полем на систему катионит-раствор РЗЭ, скорость сорбции катионитом ионов РЗЭ увеличивается в 7 раз, что говорит о правильности сделанного предположения и указывает на возможность интенсификации процессов сорбции с помощью переменного электрического поля.

Список литературы

1. Мантров Г.И. Исследование процессов переноса в конденсированных средах на примерах различных модельных дисперсных систем Математические модели нелинейных возбуждений, переноса, динамики, управления в конденсированных системах и других средах: Тез. докл. Рос. науч. конф. с участием зарубеж. ученых. Тверь, 28-30 июня 1994 г. Тверь, 1994
2. Мантров Г.И. Исследование влияний электрических явлений второго рода на скорость ионно-обменных процессов. Физика и химия межфазных явлений: Сб. науч. тр., Тверь, 1998
3. Е.В. Сальникова, М.Л. Мурсалимова, А.В. Стряпков Методы концентрирования и разделения микроэлементов. Оренбург: ГОУ ОГУ, 2005. – 157 с.

СЕКЦИЯ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

М.В. Ломоносов и «нефтяное дело»

Астахова А.С., Астахов И.А. (студенты, 4 курс)

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

При изучении наследия М.В. Ломоносова в области гуманитарных и естественных наук как-то выпал вопрос о нефти. Вместе с тем М.В. Ломоносов в своих исследованиях значительное место отводил изучению полезных ископаемых, в частности нефти.

Имеются доказательства того, что Ломоносов приобретал нефть для исследовательских работ. В одном из его лабораторных журналов сохранилась запись: «...из аптеки 3 фунта нефти для анализа». Один из нефтяных препаратов в лаборатории Ломоносова имеет опись: «...масло каменное перегнанное», два других – характеристику: «белое», «красное». Таким образом, опись неопровержимо свидетельствует о том, что М.В. Ломоносов проводил в своей лаборатории перегонку нефти.

Во «Введении в истинную физическую химию» М.В. Ломоносов подробно описывает свои перегонные аппараты и приводит чертежи их устройства. Ломоносов был первым в мире ученым приложившим методы и данные лабораторного исследования физико-химических свойств нефти к вопросам ее геологии и заложившим тем самым фундамент создания и развития комплексной науки о нефти. В своем труде «Первые основания горной науки» (1742) Ломоносов много места отводит сведениям о горючих ископаемых. В книге «Слово о рождении металлов» он не только впервые определено сформулировал теорию органического происхождения нефти, но и установил общность происхождения нефти и природного асфальта. В сочинении «О слоях земных» Ломоносов еще более четко и определенно сформулировал теорию

органического происхождения нефти, изложил свои положения о миграции нефти и объяснил образования вторичных нефтяных месторождений.

Основные положения Ломоносова о генезисе нефтяных месторождений, о миграции нефти из мест ее образования в другие пласты земной коры имеют научно-практическое значение и в настоящее время.

Влияние температуры, времени и рН на содержание антибиотиков тетрациклиновой группы в молоке

Васильева С.В. (студент, 4 курс)

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

Полноценное и регулярное снабжение организма всеми необходимыми биологически значимыми элементами – витаминами, минеральными веществами и микроэлементами – играет важнейшую роль для поддержания здоровья и активности человека. Поступать они должны регулярно, в полном наборе и количествах, соответствующих физиологической потребности организма. Главным поставщиком витаминов и минеральных веществ является молоко.

Серьезную проблему для молочной промышленности представляет наличие остаточных количеств антибиотиков в молоке. Антибиотики тетрациклинового ряда применяются для лечения инфекционных заболеваний у животных, поэтому остаточные их количества могут встречаться в пищевых продуктах животного происхождения. Употребление в пищу продуктов, содержащих остаточные количества антибиотиков, негативно сказывается на организме человека, в связи с этим их содержание нормируется. Поэтому важнейшей задачей для молочной промышленности является инактивация антибиотиков в молоке. И необходим подбор оптимальных методов решения данной проблемы.

В настоящей работе представлены результаты исследования антибиотиков тетрациклиновой группы в молоке на способность инактивироваться при изменении различных факторов (рН среды, температуры, времени).

Синтез имидазолиевых ионных жидкостей и изучение их физико-химических свойств

Герасимова К. П. (студент, 5 курс)

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

Ионные жидкости (ИЖ) – это низкотемпературные расплавы органических солей, состоящие из объемных органических катионов и неорганических или органических анионов. ИЖ и их смеси с молекулярными жидкостями находят широкое применение в качестве каталитических сред, электролитов для батарей, суперконденсаторов и т.д. В связи с этим представляется актуальным проведение исследований физико-химических свойств ИЖ и их растворов различными физико-химическими методами.

В настоящей работе синтезированы ионные жидкости с катионом 1-бутил-3-алкилимидазолия и различными неорганическими анионами (Br^- , BF_4^- , PF_6^-) и изучены зависимости электропроводности (ЭП) ИЖ от концентрации и температуры, а также термическая стабильность на воздухе. Данными элементного анализа и ИК-спектроскопией подтверждены состав и структура соединений. Исследована термическая стабильность на воздухе в температурном интервале 25-500°C. Из сравнения термической стабильности гексафторфосфатов и тетрафторборатов 1-бутил-3-алкилимидазолия с термостабильностью бромидов следует, что все исследованные ИЖ по термической стабильности превосходят галоидные соли, которые разлагаются быстро в одну стадию в интервале температур 250-320°C с полной потерей массы. Изучена электропроводность растворов синтезированных соединений в

ацетонитриле. Рассчитаны константы ионной ассоциации, предельные молярные ЭП, а также энергия Гиббса ассоциации. 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.

Разработка химического метода защиты поверхностей от мхов и лишайников

Герасимова Н.Ю. (студент, 4 курс)

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

В настоящее время на рынке бактерицидных средств, выпускаемых в нашей стране не достаточно составов, которые позволяют защищать 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.

Четвертичные аммониевые соединения давно используют в различных областях благодаря тому, что сочетают в себе дезинфицирующие, антикоррозионные, гидрофобизирующие свойства, способны образовывать пленки на твердых поверхностях с отрицательным зарядом. Противомикробная активность четвертичных аммониевых солей зависит от типа заместителей у атома азота, длины углеводородной цепи радикала, степени его ненасыщенности и разветвленности, наличия различных функциональных групп. Максимальную активность проявляют соединения, которые содержат 10-16 атомов углерода в длинноцепочечном радикале, токсичность, наоборот, уменьшается по мере увеличения количества атомов углерода в радикале. Выпускаемый промышленностью разных стран хлорид бензалкония принадлежит к указанному классу соединений и представляет собой смесь продуктов замещения: содержит в своем составе помимо метилов, радикалы от

C₃ до C₁₆. Такие соединения входят в состав большинства современных клинически освоенных дезинфекционных и антисептических средств. 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 метода получения бензил, N, N- диметилдодециламмоний хлорида реакцией кватернизации хлористого бензила с N, N-диметилдодециламином.

Предварительно N, N-диметилдодециламин получали по модифицированной методике. В металлическую емкость из нержавеющей стали загружали при температуре 0°C 4,5 г додецила хлористого и 22 г гидрохлорида диметиламина. Емкость закрывали и нагревали в течение 0,5 ч. при 165°C. После окончания реакции смесь продуктов охлаждали до 0°C. В смесь аминов добавляли 1 г порошкообразной щелочи (NaOH). Продукт нагревали до 100°C. Полученный третичный амин в количестве 4,49 г отделяли деконтацией от соли (NaCl) и щелочи.

Далее для проведения реакции кватернизации додецилдиметиламин загружали в круглодонную колбу с обратным холодильником в количестве 0,08 моль в 30 мл абсолютного ацетона. Непрерывно перемешивая, приливали 0,088 моль бензила хлористого. Реакционную массу выдерживали при 50°C в течение 4 часов. Затем ацетон отгоняли и охлажденную реакционную массу обрабатывали абсолютным эфиром. Полученную соль очищали многократной перекристаллизацией из смеси этилацетата с этиловым спиртом. Выход продукта в виде кристаллов белого цвета составил 45%.

Термическую стабильность хлорида бензалкония изучали методом термогравиметрии. При исследовании термической стабильности бензил N,N-диметилдодециламмоний хлорида, выяснили, что он устойчив до 172°C и постепенно разлагается в интервале 300-500°C. Процесс термического разложения является многостадийным, о чем говорит перегиб на кривой потере массы.

Для создания защитного комплекса бактерицидного действия, в работе синтезировали пленкообразователь. Полиэфир был получен конденсацией этиленгликоля с малеиновым ангидридом. Для создание пленок с улучшенными механическими свойствами функциональность полиэфира регулировали частичной заменой малеинового ангидрида – фталевым ангидридом в соотношении 1:3. Исследование пленки полиэфира и пленок полиэфира с бензил N,N-диметилдодециламмоний хлоридом проводили с помощью электронной микроскопии.

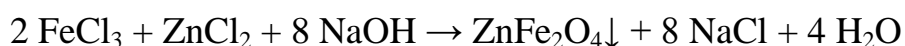
Получение и свойства ферритов на основе D-переходных металлов

Голубихина А.С. (студент, 4 курс)

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 присутствие ионов переходных металлов в составе сложных ферритов повышает устойчивость этих частиц к окислению. Вязкость и седиментационная устойчивость таких суспензий может увеличиваться в 100 раз при увеличении магнитного поля в отличие от магнитных жидкостей, где вязкость увеличивается на 10-30%.

В настоящей работе феррит цинка получали методом химической конденсации высокодисперсного магнетита. Реакция протекала по схеме:



При получении сложного феррита ионы двухвалентного железа Fe^{3+} были полностью замещены ионами цинка Zn^{2+} ($\text{Fe}^{3+}/\text{Zn}^{2+}=2/1$).

Для осаждения солей смешивали 2,2 г хлорида цинка и 5,4 г хлорида железа, растворяли в воде и доводили до объема 300 мл при температуре 40°C. Раствор гидроксида калия (5 г в 50 мл воды) при температуре 50°C приливали к раствору солей при интенсивном перемешивании, выпадал осадок черно-коричневого цвета. Раствор интенсивно перемешивали и давали отстояться.

Отстоявшуюся часть раствора в виде суспензии $ZnFe_2O_4$ удаляли с помощью разделительной воронки. Образующийся в ходе реакции хлорид калия удаляли после многократного промывания большим количеством дистиллированной воды. Образовавшиеся магнитные частицы феррита цинка ($ZnFe_2O_4$) помещали в раствор олеата натрия на 2 часа для прохождения процесса адсорбции, затем полученную суспензию отфильтровывали. Далее проводили загущение системы с помощью ПЭГ-115 (30%). Полученную систему изучали методами седиментации. С помощью метода электронной микроскопии получены электронные микрофотографии суспензии и определены размеры частиц, которые составили 10-15 нм.

Качественное определение арбутина в растительном сырье

Дрозд А.В. (студент, 4 курс)

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

В настоящее время препараты природного происхождения приобретают все больший вес в практической медицине. Одними из наиболее перспективных и часто используемых являются лекарственные растения, содержащие природные фенольные соединения.

Одним из основных представителей фенольных соединений является фенолгликозид арбутин. Арбутин обуславливает антимикробное, противовоспалительное, диуретическое действие и используется в косметологии для осветления кожи [1].

В данной работе был осуществлен подбор условий для качественного определения арбутина в растительном сырье. В качестве исходного материала, содержащего арбутин в достаточных количествах, использовали листья толокнянки и брусники, корневища бадана.

Для извлечения арбутина, использовали метод экстракции, были подобраны оптимальные условия для получения вытяжек. Известными

качественными реакциями было подтверждено наличие арбутина в полученных вытяжках.

Для идентификации арбутина был использован метод тонкослойной хроматографии. Были подобраны условия для хроматографического исследования арбутина в растительном сырье.

Анализ полученных хроматограмм подтвердил наличие арбутина в исследованных вытяжках.

Список литературы

1. Смылова О.А. Исследования по идентификации и определению арбутина в уролитическом растительном сборе / О.А. Смылова / Современная медицина: актуальные вопросы. – 2015. № 3 (39). – С. 2 – 3.

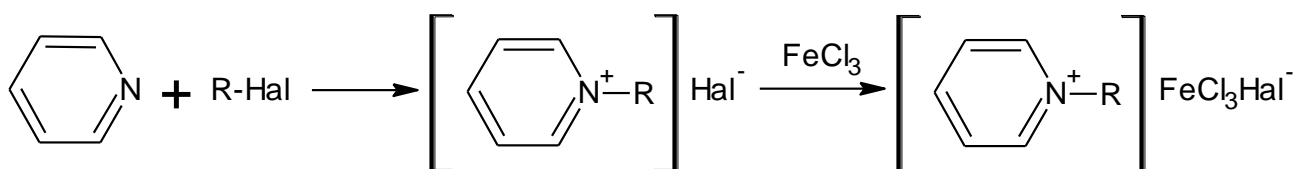
Синтез и спектральные характеристики ионных жидкостей на основе N-алкилпиридиния с железосодержащими анионами

Комаров Р.С. (студент, 4 курс)

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

Комплексы тетрагалогенферрат (III) аниона стабилизированные органическими азотсодержащими катионами 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. Среди этих комплексов тетрагалогенферратные соли особенно привлекательны и имеют преимущества для образования магнитных ИЖ ввиду их более низкой стоимости.

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. Ионные жидкости получены из солей N-алкилпиридиния путем их взаимодействия с хлоридом железа (III). В свою очередь пиридиниевые соли синтезированы нами по реакции кватернизации пиридина различными алкилгалогенидами (схема).



где R: CH₃; C₄H₉; C₈H₁₇; C₁₀H₂₁; C₁₂H₂₅.

Hal: Br⁻, Cl⁻, I⁻.

Все синтезированные ионные жидкости представляли собой темно-коричневые вязкие жидкости растворимые в воде и полярных органических растворителях. Структура полученных соединений подтверждена данными ИК-спектроскопии и спектроскопии в видимой области.

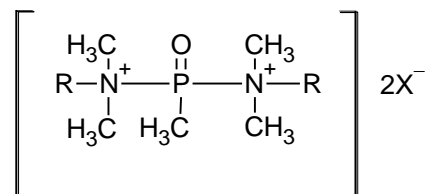
Взаимодействие бис-(N,N-диметиламида)метилфосфоновой кислоты с алкилгалогенидами

Кротова Н.И. (магистрант, 2 курс)

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

N,N,N,N-тетраметиламидметилфосфоновой кислоты, по сравнению с алифатическими амидами, может вступать в реакцию кватернизации с алкилгалогенидами образуя бис-четвертичные соли. При наличии в структуре соли длинноцепочечных радикалов эти соединения представляют собой перспективные поверхностно-активные вещества (ПАВ) поскольку в структуре соли одновременно присутствует атом фосфора и азота. Кроме того эти соединения могут быть исследованы в качестве ингибиторов кислотной коррозии черных металлов.

В работе представлены результаты по синтезу *бис*-четвертичных солей и исследованию их в качестве ингибиторов кислотной коррозии черных металлов. Соединения общей формулы получены взаимодействием *бис*-(N,N-диметиламида)метилфосфоновой кислоты с алкилгалогенидами в соотношении 1:2,1 соответственно при кипячении 7-9 часов:



где R = CH₃, C₈H₁₇, C₁₂H₂₅, C₁₆H₃₃; X = Br, I.

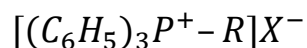
Состав и строение соединений подтверждено данными элементного анализа и ИК-спектроскопии. Все полученные соединения были исследованы в качестве ингибиторов коррозии в 15% водном растворе серной кислоты; концентрация соли составляла 0,1% масс. Показано, что все исследованные соединения обладают защитными свойствами и могут быть рекомендованы к применению.

Синтез четвертичных солей трифенилфосфония

Кулагин А. С. (студент, 4 курс)

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

В настоящей работе осуществлен синтез четвертичных фосфониевых солей на (ЧФС) основе трифенилфосфина, имеющих общую формулу:



где R – углеводородный радикал; X – галоген.

Интерес к ЧФС обусловлен наличием у них ряда специфических свойств: возможность синтеза ионных жидкостей с заданными свойствами; высокая термическая стабильность по сравнению с аналогичными аммониевыми солями; эффективное использование ЧФС в качестве

катализаторов межфазных реакций; биологическая активность ЧФС с высшими алкильными радикалами.

Методы исследования синтезированных ЧФС: установление растворимости ЧФС в различных растворителях; хроматография в тонком слое; ИК-спектроскопия; определение термической стабильности; проведение качественных реакций.

Список литературы

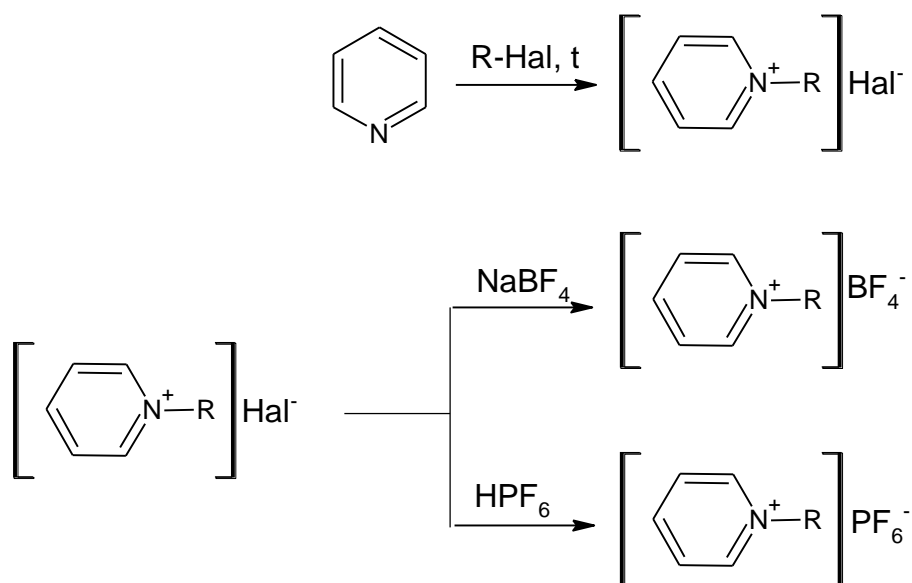
1. Галкина И. В. Направленный синтез физиологически активных веществ в ряду функционализированных четвертичных фосфониевых солей и их металлокомплексов: дис. д.х.н. Казан. гос. технол. ун-т, Казань, 2010.

Синтез и свойства тетрафторборатов и гексафтофосфатов N-алкилпиридиния

Куликов М.Д. (студент, 5 курс)
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Журавлев О.Е.

Гексафторфосфаты и тетрафторбораты четвертичного аммония, диалкилимидазолия и N-алкилпиридиния принадлежат к классу гидрофобных низкотемпературных ионных жидкостей (ИЖ). Устойчивость и химическая инертность этих органических соединений наряду с коммерческой доступностью в значительной степени способствовала развитию исследований в области синтеза, катализа и др. областях органической химии.

В настоящей работе были получены ионные жидкости на основе солей N-алкилпиридиния (схема) и установлено влияние структуры катиона и аниона на электропроводность ЭП их растворов в ацетонитриле.



где R: CH₃, C₄H₉, C₆H₁₃, C₈H₁₇, C₁₀H₂₁, C₁₂H₂₅, C₁₆H₃₃

Hal: Cl⁻, Br⁻, I⁻

Показано, что зависимость удельной электропроводности от концентрации растворов изученных ионных жидкостей схожа с зависимостью ЭП водных растворов сильных электролитов. Найдена зависимость эквивалентной электропроводности от концентрации. Установлено, что на эквивалентную ЭП преобладающее влияние оказывает природа и структура катиона.

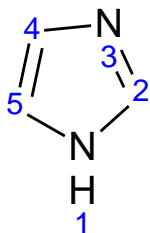
Синтез бис-четвертичной соли N-метилимидазолия

Мухина М.А. (студент, 3 курс)

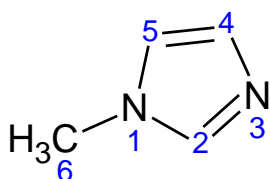
Научный руководитель: профессор, д.х.н. Ворончихина Л.И.

Бис-четвертичные (димерные) соли аминов на данный момент являются предметом многочисленных исследований. Бис-четвертичных солей имидазолия (ароматического амина) известно немного, но они могут представлять определенный интерес в химии ионных жидкостей. Они примечательны тем, что могут использоваться также в качестве модификаторов поверхности, быть антистатиками, ингибиторами коррозии благодаря своим свойствам: высокий дипольный момент, наличие заряда и способность образовывать комплексы с металлами.

Имидазол (глиоксалин, имидазол, 1,3-диазол), мол. в. 68,08 – твердый продукт в виде бесцветных кристаллов с моноклинной решеткой ($a=0,754$ нм, $b=0,544$ нм, $c=0,975$ нм, $\beta=177^{\circ}30'$); т. пл. 90°C , т. кип. 256°C ; хорошо растворим в воде, спирте, умеренно – в эфире, бензоле, плохо – в углеводородах. Имидазол обладает ароматическими свойствами.

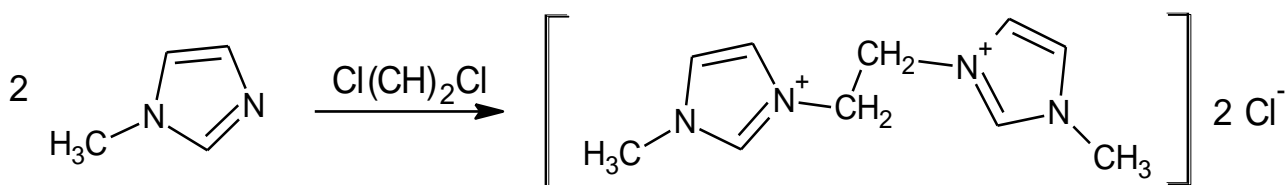


N-метилимидазол (1-метилимидазол) – ароматическое гетероциклическое соединение с общей формулой $\text{C}_4\text{H}_6\text{N}_2$. Это бесцветная жидкость; молекулярная масса 82,10; плотность $1,03$ г/см³; т. пл. -6°C , т. кип. 198°C .



Получается алкилированием имидазола в условиях межфазного катализа (стандартные условия по Макоше). В качестве катализатора использовались триэтилбензиламмоний хлорида (ТЭБАХ) и тетрабутиламмоний бромида (ТБА) в системе бензол-вода. На основе N-метилимидазола на сегодняшний день получено большое количество разнообразных ионных жидкостей, являющихся моносолями.

В настоящей работе осуществлен синтез 1,2-бис(N-метилимидазолий)дихлорида взаимодействием свежеперегнанного N-метилимидазола в ацетоне и диэтилхлорида по схеме:



В колбу с обратным холодильником поместили вышеназванные реагенты. Реакционную смесь кипятили в течение 3-4 часов, охладили и оставили в холодильнике до выпадения кристаллов. Выпавшие кристаллы отфильтровали, промыли сухим холодным эфиром и перекристаллизовали из смеси спирт-этилацетат (1:1). Продукт реакции (без кристаллизации) представляет собой вязкую жидкость (т. кип. $50-55^{\circ}\text{C}$), а перекристаллизованный – белое кристаллическое вещество (т. пл. $70-75^{\circ}\text{C}$), при

комнатной температуре растворимые в воде, спирте и ацетоне и не растворимые в эфире. Выход составил ~60%. Строение синтезированного соединения было подтверждено ИК-спектрами. Для идентификации полученной бис-четвертичной соли провели пробу Бейльштейна. Соль дала положительную реакцию.

Список литературы

1. Эльдерфилд Р. Гетероциклические соединения: Том 5 / Р. Эльдерфилд – М.: Изд-во иностранной литературы, 1961. – 602 с.
2. Вейганд-Хильгетаг. Методы эксперимента в органической химии / Вейганд-Хильгетаг. – М.: «Химия», 1968. – 944 с.
3. Пожарский А. Ф. Теоретические основы химии гетероциклов / А. Ф. Пожарский. – М.: «Химия», 1985. – 279 с.
4. Зигидуллин Р. Н., Рахманкулов Д. Л., Рысаев У. Ш. Многоосновные амины. Синтез производных 1,2-имидазолина // Башкирский химический журнал. – 2007. - №4. – С. 21-38.
5. Свойства органических соединений: Справочник. – Под ред. Потехина А. А. – Л.: «Химия», 1984. – С. 210-211.
6. <http://ru.wikipedia.org>
7. <http://dic.academic.ru>

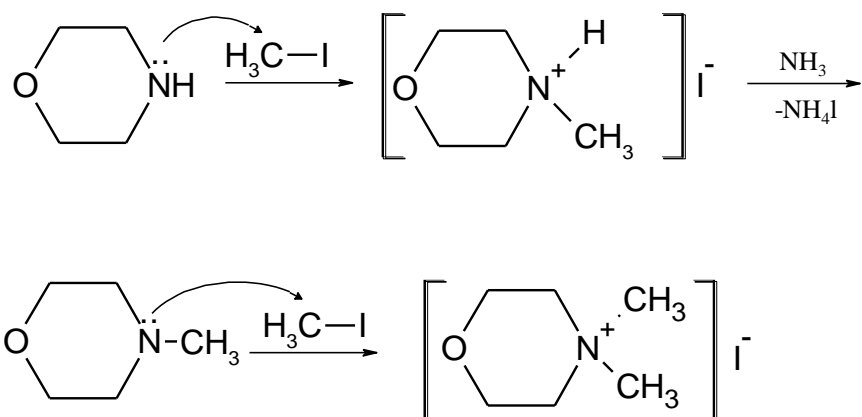
Синтез производных N-алкилморфолина

Орликова Ю.А. (магистрант, 2 курс)

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

Среди насыщенных гетероциклических аминов с несколькими гетероатомами, тетрагидро-1,4-оксазин (морфолин) занимает особое положение, поскольку является одновременно вторичным амином и циклическим эфиром. Самый распространенный метод получения третичных

аминов из вторичных, а третичных в четвертичные соли – это реакция алкилирования.



В данном сообщении представлены результаты по получению аминов с функциональными группами в α -положении (диморфолино *n*-[(N,N-диметиламино)фенил]метана).

Соединение получали по видоизмененной методике предложенной Вейганд-Хильгетаг, конденсацией морфолина и бензальдегида. Видоизменение касаются того, что в реакцию было добавлено 0,02 моль *n*-диметиламинобензальдегида и 0,4 моль морфолина. Конденсация протекала гладко и с количественным выходом. На основе *n*-диметиламинобензальдегида были получены бис-четвертичные соли взаимодействием с иодистым метилом; структура соединения подтверждена данными ИК-спектров, тонкослойной хроматографией, температурой плавления и растворимостью.

Синтез и свойства ионные жидкостей на основе

N-алкилоксикарбонилметил- β -пиколиния

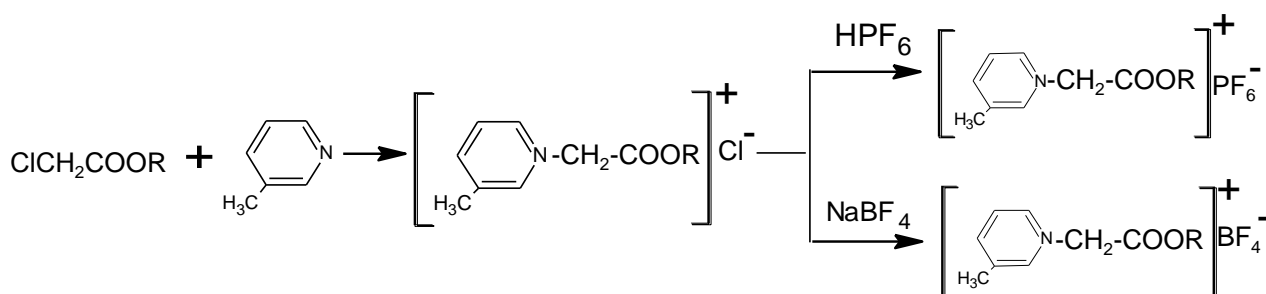
Постнова О.И. (магистрант, 2 курс)

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

В настоящее время одним из самых развивающихся направлений в химии – является химия ионных жидкостей (ИЖ). Учитывая, что в некоторых процессах органической химии, приходится использовать ионные жидкости при повышенных температурах важным становится вопрос относительно их

стабильности. Также ионные жидкости с длинноцепочечными радикалами могут обладают поверхностно-активными свойствами.

Поэтому целью данной работы было исследования термической стабильности, поверхностно-активных свойств и электропроводности гексафторфосфатов и тетрафторборатов β -пиколиния. Гексафторфосфаты и тетрафторбораты были получены из хлоридов β -пиколиния, путем метатезиса галогенид-аниона на PF_6^- и BF_4^- соответственно. Исходные хлориды были синтезированы по реакции кватернизации β -пиколина сложными эфирами α -хлоруксусной кислоты (схема).



где $\text{R}=\text{C}_4\text{H}_9, \text{C}_6\text{H}_{13}, \text{C}_8\text{H}_{17}, \text{C}_{10}\text{H}_{21}$

Изучена термическая стабильность на воздухе синтезированных тетрафторборатов и гексафторфосфатов. Для сравнения была изучена термическая стабильность исходных хлоридов пиколиния. Изучена электропроводность и поверхностное натяжение растворов синтезированных соединений.

Коллоидный синтез нанокристаллов сульфида цинка в среде ионной жидкости

Пресняков И.А. (магистрант, 2 курс)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Журавлев 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, т. е. везде, где требуются варьируемые, перестраиваемые по длине волны оптические свойства.

В работе предложен способ синтеза наночастиц сульфида цинка в среде ионной жидкости – N-децилпиридиний тетрафторборате и изучено влияние концентрации реагентов и ультразвуковой обработки на размеры наночастиц. Размеры наночастиц сульфида цинка в золе определяли методом динамического светорассеяния (ДСР), сканирующей зондовой микроскопии и УФ-спектроскопии.

Установлено, что проведение синтеза в ионной жидкости ведет к образованию наночастиц со средними размерами 7-9 нм в отличие от синтеза в водной среде (более 34 нм). При воздействии УЗ происходит уменьшение среднего размера наночастиц с 7-8 до 2-3 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых кандидатов наук (грант № 14.Z56.15.4358-МК)

Неионогенные ПАВ на основе природных кислот

Прохорова А.О. (магистрант, 2 курс)

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

Основным достоинством неионогенных поверхностно-активных веществ (НПАВ) является благоприятное действие на кожу и малое пенообразование в водных растворах. НПАВ на основе глицерина, пентаэритрита или сахарозы являются биоразлагаемыми в природе

поверхностно-активными веществами [1]. В связи с чем получение и исследование свойств таких соединений представляется очень интересным и важным. Исследование посвящено синтезу неионогенных ПАВ на основе лимонной и янтарной кислот и изучению некоторых свойств. По химической природе это сложные эфиры трехатомного спирта глицерина, структурными компонентами которых являются остатки кислот различного строения – лимонной и янтарной.

Методом азеотропной этерификации получены цитрил- и оксалилглицериды взаимодействием стехиометрических количеств лимонной и янтарной кислот и глицерина. Полученные соединения очищали перекристаллизацией из смеси спирт – этилацетат в соотношении 1:1. Определяли температуры плавления и растворимость синтезированных веществ. Полученные соединения представляют собой вязкие вещества кремовой и темно-кремовой окраски. Определены значения температур плавления синтезированных веществ, которые лежат в интервале – оксалилглицерид – 75-80°C, цитрилглицерид – 98-105°C. Возможно, «растянутые» температуры плавления говорят о недостаточной очистке синтезированных ПАВ. Для идентификации структуры синтезированных соединений проведено спектральное исследование.

Список литературы

1. Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных растворах. /К. Холмберг, Б. Йенссон, Б. Кронберг, Б. Линдман. М.: Мир; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. 528с.

«Отгадай элемент!»

Решетова А.С. (студент, 3 курс)

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

Для того чтобы не уставать от требований времени, нам необходимо стать Homo Ludens – человеком играющим: внедрять в процесс обучения игровое моделирование (ИМ). Оно позволяет создавать психологически комфортную среду, обеспечивающую творческую свободу, возможность самому выбирать образовательные технологии. Чтобы успевать за современными методами обучения, мы изучаем игровые технологии. Столь интересные подходы вдохновили меня на создание этой творческой работы.

<i>Есть в химии распространенный элемент,</i>	<i>Он кислородом окисляется легко,</i>
<i>Встречается он в жизни повседневной;</i>	<i>И с щелочами он не прочь вступить в атаку.</i>
<i>Он в пище как особый компонент,</i>	<i>И с кислотой он дружит серной, и с водой,</i>
<i>А также вред наносит он неимоверный.</i>	<i>Но никогда не будет дружен с аммиаком!</i>
<i>Светиться вещи заставляет в темноте,</i>	<i>И сам он тоже образует кислоту,</i>
<i>Надёжно укрепляет наши кости.</i>	<i>А газ, что образует с водородом - ядный.</i>
<i>Он в рыбе есть в особой полноте</i>	<i>Свечение газ тот испускает в темноту,</i>
<i>И содержание своё он отражает в росте.</i>	<i>И запах не весьма приятный.</i>
<i>Он в химии типичный неметалл,</i>	<i>Итак, давайте подведём итог</i>
<i>Характер проявляет он кислотный.</i>	<i>И угадаем, прочитывая эти строки,</i>
<i>И в формуле он пишется как буква Р;</i>	<i>Что загадал вам педагог,</i>
<i>По цвету он бывает «светлый», «темный».</i>	<i>И результат запишем на уроке.</i>

Синтез N-алкилпиридиний тозилатов

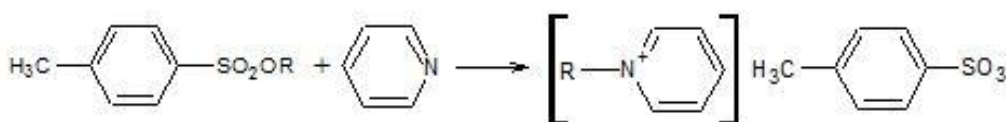
Русакова Е.И. (студент, 5 курс)

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

Технический прогресс в России и за рубежом обуславливает рост производства поверхностно-активных веществ. Четвертичные аммониевые соли - один из наиболее интересных для исследования и перспективных для

применения классов поверхностно-активных веществ (ПАВ). Они являются основными представителями катионных ПАВ. Четвертичные соли так же эффективные катализаторы гетерогенных процессов (межфазный катализ), антистатики, они обладают также целым рядом других ценных свойств, обеспечивающих многочисленные пути использования. Пиридиновые производные входят в состав многих антимикробных препаратов, физиологически активных веществ, антиоксидантов, стабилизаторов полимерных материалов и поверхностно-активных веществ.

В данной работе осуществлён синтез N-алкилпиридиний тозилата по схеме:



где $\text{R} = \text{C}_{14}\text{H}_{29}$.

Для синтеза N-тетрадецилпиридиний тозилата использовали следующий метод, заключающийся в нагревании на водяной бане смеси из тетрадецилтозилата и пиридина при температуре 70-80 °С в течении 6 часов.

Полученный продукт после промывают диэтиловым эфиром, отфильтровывают на фильтре Шотта и сушат в эксикаторе над хлористым кальцием. N-тетрадецилпиридиний тозилат представляет собой белое кристаллическое вещество с $T_{\text{пл}} = 91,5 - 93^\circ\text{C}$. Состав и структура полученного соединения подтверждены данными ИК-спектроскопии. Измерено поверхностное натяжение водных растворов полученного соединения.

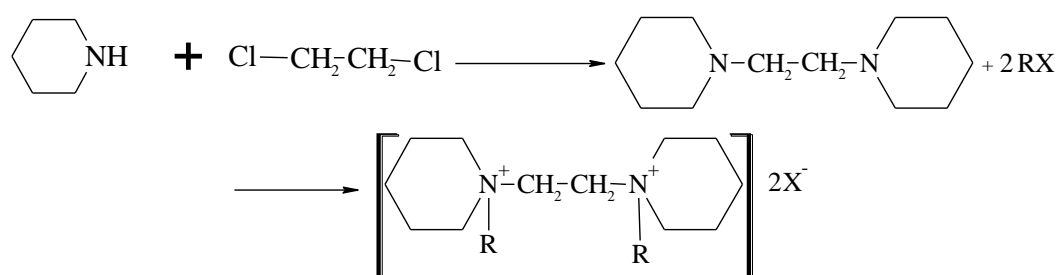
Соли бис-пиперидиния как ингибиторы коррозии в кислых средах.

Рыбаков Е. В. (магистрант, 2 курс)

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

В современном мире остро стоит вопрос об использовании ингибиторов коррозии, хорошо защищающих от агрессивной среды металлические

конструкции. Объектом исследования в данной работе был гетероциклический амин – пиперидин. Пиперидин является типичным представителем гетероциклических неароматических вторичных аминов, является довольно сильным основанием. Производные пиперидина, содержащиеся в различных органических соединениях проявляют высокую физиологическую активность, используются в медицинской практике, входят в состав алкалоидов и некоторые его производные являются весьма перспективными ингибиторами коррозии металлов. В данном исследовании использовались четвертичные соли пиперидиния полученные по схеме, приведенной ниже:



Где R=C₁₆H₃₃; C₁₂H₂₅; C₄H₉; CH₂-CH=CH₂; CH₂-C₆H₅; X = Cl; Br; J.

Соединения охарактеризовано данными ИК-спектроскопии, тонкослойной хроматографии

В настоящей работе были проверены в качестве ингибиторов коррозии четвертичные соли пиперидиния, имеющие разные группы заместителей у атома азота. Наиболее хорошо себя показала соль, имеющая у атома азота гексадеканиловый радикал.

Синтез и поверхностно-активные свойства алкилполиглизозидов

Сергеева А. И. (студент, 4 курс)

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

В настоящее время отмечается большой интерес к исследованию алкилполиглизозидов (АПГ) в связи с перспективами их широкого использования. Главная притягательность АПГ заключается в их благоприятных экологических свойствах: они нетоксичны для водоемов и

характеризуются высокими скоростями биоразложения. АПГ проявляют хорошие очищающие и моющие свойства. В дополнении ко всему алкилполигликозиды оказывают мягкое действие на кожу, что делает эти неионогенные поверхностно-активные вещества очень привлекательными для получения продуктов личной гигиены и косметологии. Данный продукт хорошо совместим с катионными антисептиками, эффективен в отношении патогенной микрофлоры, имеет улучшенный вкус и не имеет послевкуся.

В настоящей работе алкилполигликозиды с C_{10} , C_{12} получали по модифицированной методике:

В трехгорлую колбу, объемом 250 мл, помещали 0,7 моль децилового или додецилового 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-толуолсульфо кислоту) и 0,5 моль тонко измельченной безводной глюкозы. Создавали в системе вакуум (остаточное давление 10-20 мм рт.ст.) и вели процесс при температуре 90-100 °С в течение 3-4 часов при интенсивном перемешивании реакционной массы до полного удаления реакционной воды. По окончании процесса катализатор нейтрализовали гидроксидом натрия.

Полученные децил- и додецилполигликозиды в виде вязкой прозрачной массы исследованы методом ИК-спектроскопии и анализированы как неионогенные поверхностно-активные вещества.

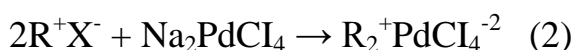
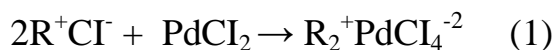
Синтез и свойства тетрахлорпалладатов четвертичного аммония и пиридиния

Сергеева И.В. (магистрант, 2 курс)

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

Данная работа посвящена получению и изучению свойств поверхностно-активных комплексов на основе четвертичных солей аммония,

пиридиния и тетрахлорпалладата натрия. Соединения общей формулы R_2PdCl_4 синтезировали двумя способами: твердофазным синтезом (1) и реакцией метатезиса между четвертичными солями аммония, пиридиния и тетрахлорпалладатом натрия Na_2PdCl_4 в водно-спиртовом растворе (2) по схемам:



где R: $C_{16}H_{33}N(CH_3)_3$; $C_{16}H_{33}NC_5H_5$; $C_{10}H_{21}NC_5H_5$; $(C_2H_5)_3NCH_2C_6H_5$;

$(C_2H_5)_3NC_3H_7$; $C_4H_9NC_5H_5$; $C_4H_9NC_5H_4CH_3$.

X: Cl; Br; J.

Реакция метатезиса протекала при комнатной температуре в течение нескольких минут. Полученные вещества представляют собой блестящие кристаллы коричневого цвета, хорошо растворимые в спирте, несколько хуже в ацетоне и воде с $T_{пл}$ от 85 до 190 °С. Спектры в видимой области полученных комплексных солей сравнимы со спектром Na_2PdCl_4 и имеют две характерные полосы тетрахлорпалладат аниона при 325, 440 нм. Изучена термическая стабильность на воздухе. Показано, что все соединения, независимо от длины алкильного радикала, устойчивы до 240 °С, разлагаются в две стадии, однако массовые потери в интервале разложения различны. Изучена возможность применения полученных соединений в качестве активаторов поверхности в химической металлизации.

Синтез ионных жидкостей на основе четвертичных солей аммония

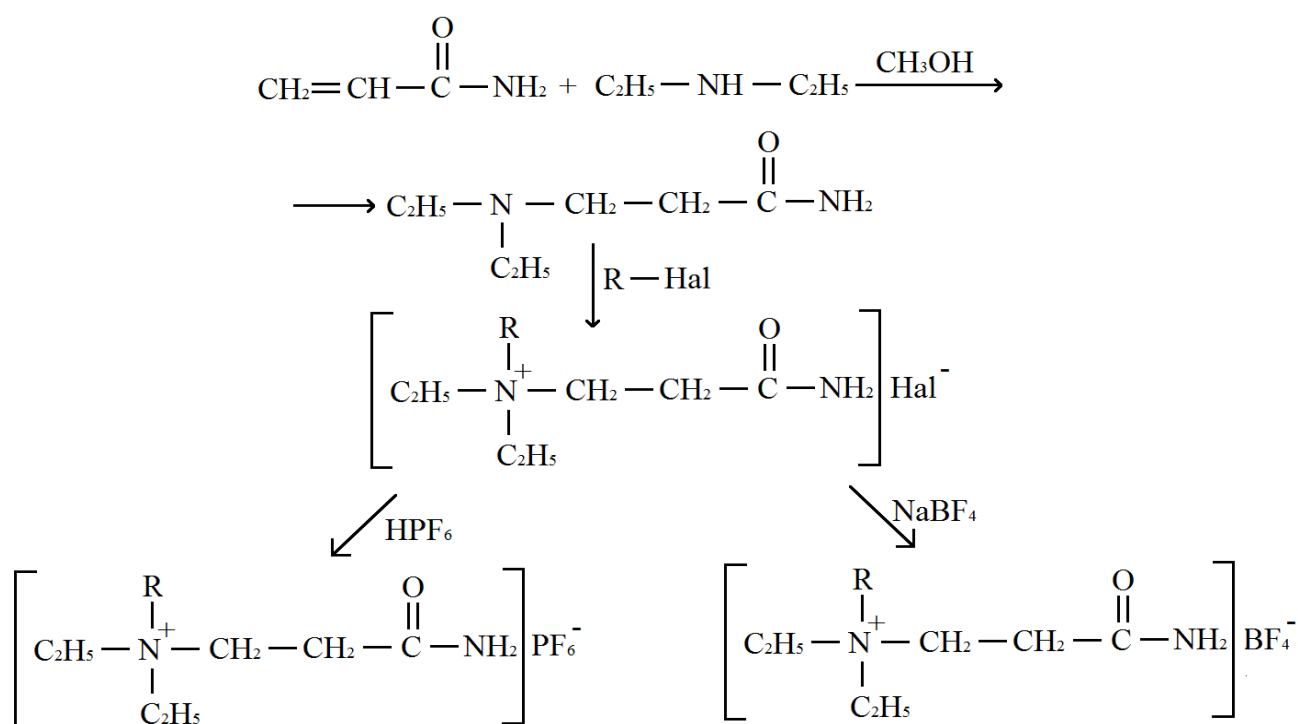
Смирнов Е.И. (студент, 5 курс)

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

Ионные жидкости – это жидкости, содержащие только ионы. Ионной жидкостью можно назвать любую расплавленную соль. В настоящее время под термином «ионная жидкость» часто подразумевают соль, температура

плавления которой ниже температуры кипения воды, то есть ниже 100 °С. Ионные жидкости нашли широкое применение в промышленности. К примеру ионные жидкости снижают горючесть полимеров, что позволяет применять их в качестве огнезащитного средства. Смешением ионной жидкости с желатином получают «ионное желе» или ионный гель, который может быть использован в фармакологии для доставки лекарств к необходимым органам, в биосенсорах и в качестве электролитов.

В настоящей работе были получены новые ионные жидкости на основе четвертичных солей аммония (схема). В качестве субстратов были выбраны N,N-метилен-бис-акриламид и акриламид, а в качестве реагента диэтиламин.



R: C₄H₉, CH₂C₆H₅.

Hal: Br, Cl.

Исследование динамики окисления липидов растительного происхождения

Соколов М.Н. (магистрант, 2 курс)

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

К липидам относят природные органические соединения, не растворимые в воде, но растворимые в органических растворителях, способные утилизироваться живыми организмами. Одна из групп простых липидов - жиры, принадлежит к сложным эфирам многоатомных спиртов с высшими кислотами. Например, растительное масло, употребляется в пищевом, промышленном производстве, применяется в технике. В состав масел входят ацилы высших предельных и непредельных карбоновых кислот, являющиеся составной частью липидов, которые подвергаются деструкции при нагревании. В связи с чем, исследование динамики окисления липидной фазы в процессе длительного нагревания, приводящих к образованию продуктов окисления, представляет значительный интерес и является целью представленной работы.

Процессы деструкции масла контролировались с помощью определения кислотного, эфирного, перекисного и альдегидного чисел по известным методикам. Гравиметрическим методом определяли количество оксикислот. Растительное масло подвергалось нагреванию в течение 24, 48 и 72 часов. Анализ полученных данных показал, что разрушению подвергаются как сложноэфирные группы, причем доля свободных жирных кислот возрастает (значения кислотного числа возрастают, а эфирного – падают), так и фрагменты кислотных остатков, содержащих предельные и непредельные связи (значения перекисного и альдегидного чисел возрастают). Длительное нагревание приводит к нарастанию концентрации перекисных соединений с дальнейшим образованием альдегидов и оксикислот, концентрации которых постоянно растут. Окислительная деструкция приводит к значительному понижению качества масла, что в конечном итоге отрицательно сказывается на его физиологических свойствах. Процессы окисления и деструкции приводят к старению масла и невозможности применения его в пищу.

Синтез и свойства бис – четвертичных аммониевых солей, обладающих поверхностно–активными свойствами

Тимофеева Е.Н. (студент, 5 курс)

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

Поверхностно-активные вещества (ПАВ) в настоящее время являются объектом многочисленных исследований. Большой интерес возникает к бис - четвертичным аммониевым солям, обусловленный наличием специфических свойств: высокая эффективность, низкие значения концентрации мицеллообразования (ККМ) и поверхностного натяжения.

Бис – четвертичные аммониевые соли образуют везикулы и жидкокристаллические фазы в широкой области концентраций, это свойство перспективно для практического использования. Примером может служить изготовление мезопористых молекулярных сит, в качестве темплат, получение материалов кубической структуры с заданными размерами пор.

В настоящей работе представлены результаты по направленному синтезу катионных бис - четвертичных аммониевых солей с разной длиной углеводородного радикала на основе N,N,N,N - тетраметилэтилендиамина и галогенопроизводных по следующей схеме:



Где R= C₄H₉, C₆H₁₃, C₇H₁₅, C₉H₁₉, C₁₀H₂₁, C₁₂H₂₅, C₁₆H₃₃; X= Br, I.

Полученные продукты представляют собой белые кристаллические вещества, применяемые в качестве модификаторов отрицательно заряженных поверхностей частиц дисперсных систем и смазочные агенты. Состав и структура соединений подтверждены данными ИК – спектроскопии.

Измерено поверхностное натяжение водных растворов солей. Определена поверхностная активность и значения ККМ.

Список литературы

1. Холмберг К. Поверхностно – активные вещества и полимеры в водных растворах/К.Холмберг, Б.Йёнссон и др.; Пер. с англ. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2010. – С. 227.

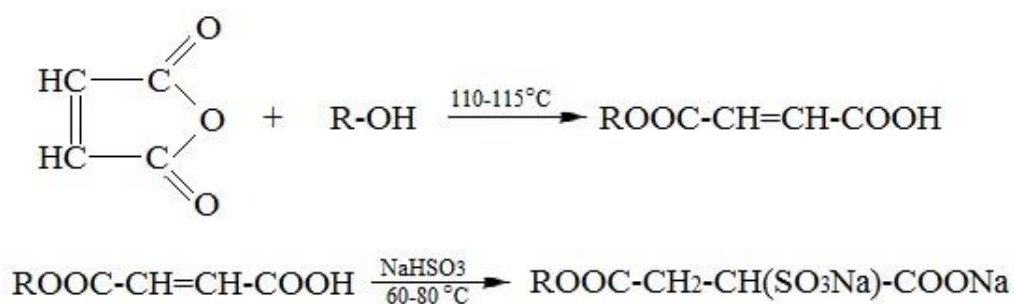
Синтез поверхностно-активных веществ на основе малеинового ангидрида и исследование их свойств

Титова Т.Н. (студент, 5 курс)

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

Среди анионных поверхностно-активных веществ (АПАВ) выделяются своими свойствами алкилсульфосукцинаты. Они являются высокоэффективными смачивателями, эмульгаторами, пенообразователями и пеногасителями; отличаются нетоксичностью и хорошей биоразлагаемостью. Неионогенные поверхностно-активные вещества (НПАВ) – хорошие стабилизаторы дисперсных систем, доступные моющие средства, эффективные средства для снятия электростатических зарядов с волокна и т.д.

В настоящей работе осуществлен синтез алкилсульфосукцинатов на основе малеинового ангидрида и гидроксилсодержащих соединений: октанол-1, додеканол-1 и полиэтиленгликоль ПЭГ-115. Синтез сульфосукцинатов проводили в две стадии: ацилирование спиртов малеиновым ангидридом и сульфирование полученных алкилмалеинатов гидросульфитом натрия по схеме:



где R = C₈H₁₇, C₁₂H₂₅, (-CH₂CH₂O-)_nH

Полученные соединения представляют собой белые порошкообразные или пастообразные вещества с желтоватым оттенком. Для синтезированных

веществ были определены физико-химические константы: растворимость и температура плавления, исследованы коллоидно-химические свойства их водных растворов.

Влияние природы растворителя на экстракцию терпеновых соединений из гвоздики

Цветкова Т. В. (студент, 4 курс)

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

В настоящей работе осуществлена экстракция терпеновых соединений из воздушно-измельченного сырья гвоздики пряной (*Syzygium aromaticum*). Основными компонентами данного класса соединений являются – эвгенол (более 70 %), ацетат эвгенола (до 13 %), кариофиллен (5-12 %).

Интерес к терпеновым соединениям обусловлен наличием у них ряда фармакологических свойств – бактерицидных, противогрибковых, обезболивающих, спазмолитических, ранозаживляющих.

Природа используемого растворителя достаточно сильно влияет на полноту и избирательность экстракции терпеновых соединений из гвоздики. При одной и той же концентрации растворителя и сырья значение коэффициентов распределения (K_D) могут различаться на несколько порядков.

В данной работе исследовалось влияние растворителей с различной диэлектрической проницаемостью на экстракцию терпеновых соединений из гвоздики. В качестве растворителей использовались: н-гексан, этилацетат, бензол, этиловый спирт и хлороформ.

Методы исследования качественного и количественного состава смеси полученных терпеновых соединений: тонкослойная хроматография; ИК-спектроскопия; УФ-спектроскопия.

Список литературы

1. Д.И. Писарев, Новиков О.О. Методы анализа и выделения эфирных масел // Научные ведомости Белгородского государственного университета. Серия: Медицина. Фармация, 2012. № 10-2 (129)

СЕКЦИЯ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Роль инициатора в процессах гелеобразования низкоконцентрированных водных растворов, содержащих L-цистеин и ацетат серебра

Аверкин Д.В. (студент, 3 курс)

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

Гидрогели на основе L-цистеина и серебра являются перспективной матрицей с точки зрения разработки новых медицинских препаратов благодаря биологической активности компонентов системы и их высокой биосовместимости. В связи с этим актуальной задачей является подбор оптимальных условий получения гидрогелей с заданными характеристиками. Цель настоящей работы – оценить влияние инициатора на процесс гелеобразования водных растворов L-цистеина и ацетата серебра.

В результате добавления различных электролитов (инициаторов гелеобразования) были получены гели водных растворов аминокислоты L-цистеина и ацетата серебра. Условия гелеобразования изучены с помощью различных физико-химических методов анализа. Так, по данным ДСР определено распределение частиц по размерам, а также их средний размер. С помощью вязкозиметрических исследований оценена динамическая вязкость чистого ЦСР по сравнению с динамической вязкостью воды в тех же условиях. Измерение дзета-потенциала ЦСР показало, что его значение является достаточно стабильным для системы и в среднем равно +60 мВ. Добавление электролита вызывает изменение заряда системы.

Таким образом, как показали экспериментальные данные, гелеобразование на основе низкоконцентрированных водных растворов, содержащих L-цистеин и ацетат серебра, является сложным, многостадийным процессом, зависящим от строения и концентрации соли-инициатора, а также от индивидуальных особенностей катионной и анионной групп, входящих в состав электролита.

Супрамолекулярные гели на основе L-цистеина и ацетата серебра

Адамян А.Н. (студент, 3 курс)

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

Известно, что L-цистеин образует гидрогели с некоторыми солями серебра (AgNO_3 , AgNO_2). Поскольку L-цистеин обладает широким спектром фармакологического действия, а серебро характеризуется лечебными свойствами, то проблемы синтеза, изучения и применения супрамолекулярных гелеобразующих систем на их основе вызывают повышенный интерес. Целью данной работы являлось исследование процесса и условий образования супрамолекулярных гелей на основе L-цистеина и ацетата серебра. Гелеобразование наблюдалось в низкокцентрированных водных растворах (3,0 мМ) в системе L-цистеин – ацетат серебра. С помощью различных физико-химических методов (Фурье-ИК, УФ спектроскопии, ДСР, рН-метрии) изучены условия образования гелей и их строение. Скорость формирования гелеобразующего раствора зависит от концентрации компонентов, их соотношения, температуры. В качестве инициаторов гелеобразования использовали хлориды и сульфаты металлов (Na^+ , Mg^{2+} , Zn^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Mn^{2+} , Cu^{2+} и NH_4^+). Согласно данным УФ спектроскопии в спектрах водных систем на основе L-цистеина и ацетата серебра появляются две полосы поглощения с максимумами ~ 314 и 394 нм, что связано с образованием супрамолекулярных цепочек $[-\text{Ag}-\text{S}(\text{Cys})-]_n$. При добавлении в смесь определенного количества хлорида любого металла в спектре исчезают полосы поглощения 314 и 391 нм, но появляется полоса поглощения 364 нм, в то время как сульфаты металлов в спектре изменений практически не вызывают. Данные ИК спектроскопии подтверждают различный механизм формирования гелей в присутствии сульфатов и хлоридов металлов. Таким образом, гелеобразование является сложным, многостадийным процессом, включающим образование в системе

молекул меркаптида серебра, формирование из них супрамолекулярных цепочек и пространственной гель-сетки при добавлении электролита.

Влияние антропогенных факторов на химический состав крапивы двудомной

Аксенов А.А. (студент, 4 курс)

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

В настоящее время существенно увеличился спрос на препараты растительного происхождения, которые содержат биологически активные вещества, такие как флавоноиды, эфирные масла и др. Растения, в том числе лекарственные, способны накапливать из окружающей среды вещества различной природы, поэтому важным этапом производства лекарственных препаратов является анализ растительного сырья. В связи с этим анализ изменений химического состава растений (лекарственных или биоиндикаторных), происходящих под воздействием антропогенного фактора, является актуальной задачей для оценки качества лекарственного сырья или уровня экологической обстановки. Цель работы – изучение влияния промышленных загрязнений на химический состав крапивы двудомной методами Фурье-ИК и УФ спектроскопии. В качестве объектов исследования были выбраны образцы крапивы двудомной (листья), собранные в г. Санаин республики Армения, пос. Шаховская Московской области, а также в г. Твери в местах с различной антропогенной нагрузкой.

Анализ спектральных данных показал, что химический состав крапивы двудомной чувствителен к влиянию промышленных загрязнений. ИК спектры образцов из разных мест сбора отличаются по интенсивности и положению максимумов полос поглощения в области валентных и деформационных колебаний. В УФ спектрах водных и спиртовых экстрактов образцов наблюдаются существенные различия.

Таким образом, с помощью спектральных методов установлено, что химический состав крапивы двудомной изменяется под воздействием промышленных загрязнений. Данный факт необходимо учитывать при сборе лекарственного сырья, с одной стороны, и при оценке степени загрязнения окружающей среды с другой.

Исследование реологических свойств цистеин-серебряных гидрогелей на основе хлоридов металлов

Андрианова Я.В. (аспирант, 3 год обучения)

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

Гидрогели, исследуемые в данной работе, представляют собой взаимодействие аминокислоты L-цистеина, нитрата серебра и электролита – инициатора гелеобразования. Важную роль в изучении процессов самоорганизации в цистеин-серебряном растворе (ЦСР) играют реологические методы. Цель работы – изучение процесса самоорганизации в ЦСР и гидрогелях на его основе, проведение реологических исследований методами вискозиметрии, динамического светорассеяния (ДСР) и измерения электропроводности в системе.

ЦСР получали при смешивании водных растворов L-цистеина и AgNO_3 ($C=0,03 \text{ M}$) при молярном соотношении (1.00:1.27). В качестве электролитов использовали хлориды металлов: Na^+ , Co^{+2} , Ni^{+2} , Mg^{+2} , Mn^{+2} , Zn^{2+} , Cu^{2+} . В ходе исследований удалось оценить прочностные свойства гидрогелей с разными инициаторами и определить диапазоны концентраций компонентов. Методом вибрационной вискозиметрии проведены количественные измерения вязкости гидрогелей, установлено соответствие между прочностными и реологическими свойствами системы. Также установлено соответствие между процессами самоорганизации и падением значений электропроводности в системе. Полученные данные свидетельствуют о росте размеров фрактальных кластеров из супрамолекулярных цепей меркаптида серебра в ходе созревания ЦСР и

образовании пространственной геле-сетки при введении хлоридов металлов. Результаты метода ДСР свидетельствуют о росте размеров кластеров из олигомерных цепей в ходе «созревания» ЦСР и процесса гелеобразования.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства Науки РФ в рамках выполнения государственных работ в сфере науч. деятельности (проект №4.1325.2014/К), гос. задания "Обеспечение проведения научных исследований" на базе ЦКП ТвГУ и программы У.М.Н.И.К. (гос. контракт №5334ГУ1/2014 от 24.03.15).

Энергетические характеристики тиоспиртов

Белова А.А. (студент, 4 курс)

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

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

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

$$P_{c_n H_{2n+1} SH} = h_{cc} p_{c-c} + h_{cs} p_{c-s} + h_{cn} p_{c-n} + h_{cn} p_{s-n} + x_{cc1} \Gamma_{cc} + x_{cs1} \Gamma_{cs} + x_{ccc1} \Delta_{ccc} + x_{ccs1} \Delta_{ccs} + x_{cc2} \tau_{cc} + x_{cs2} \tau_{cs}$$

Так как в результате нехватки экспериментальных данных получилась система с линейнозависимыми столбцами, то параметры p_{c-c} , p_{c-s} , $h_{cn} p_{c-n}$, и p_{s-n} были заменены на параметр a .

Здесь $a = p_{c-c} + p_{c-s} + p_{c-n} + p_{s-n}$.

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

1. Энергии разрыва связей D_{298} в выбранных соединениях изменяются в широких пределах. Например (в кДж/моль [1]):

	HS – CH ₂ CH ₃	HSCH ₂ –H	CH ₃ CH ₂ – CH ₂ SH
D ₂₉₈	307,9±2,1	392,9±8,4	338,5±10,0

2. Энергии разрыва связей D₂₉₈ в тиоспиртах увеличиваются при появлении фенольной группы и уменьшаются при появлении цикла в цепи молекулы. Например (в кДж/моль [1]):

	C ₆ H ₁₃ –CH ₂ SH	C ₆ H ₅ –CH ₂ SH
D ₂₉₈	335,6±10,5	389,9±10,5

Список литературы

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

Аддитивные схемы расчета свойств X-замещенных этана

Виноградов В.С. (магистрант, 1 курс)

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

Аддитивные схемы расчета свойств веществ составляются на основе небольшого количества опытных данных и позволяют расчетными методами определить свойства других соединений. При использовании данной аддитивные схемы рассчитаны различные параметры для X-замещенных этана. Для метил – замещенных этана: энтальпия образования (кДж/моль), для хлор - замещенных этана : энтропия, теплоемкость и стандартная энергия Гиббса (ΔG_{298}^0). Расчеты произведены с помощью метода наименьших квадратов (МНК), полученные значения параметров сравнены с опытными данными.

Расчёт теплоёмкости и энтропии (в Дж/моль·К), энергии Гиббса (в кДж/моль) хлорзамещённых этана :

Замещённые этана X=Cl	C _p ^o (г. 298, К) (в Дж/моль·К)		S ^o (г. 298, К) (в Дж/моль·К)		ΔG ^o (г. 298, К) (в Дж/моль·К)	
	Опыт	Расчёт	Опыт	Расчёт	Опыт	Расчёт
CH ₃ -CH ₃	52,68±0,17	52,8	229,49±0,42	226,69	-32,93	-31,45
CH ₃ -CH ₂ X	62,8±0,4	62,7	276,10±0,33	280,1	-60,00	-61,79
CH ₃ -CHX ₂	76,1±0,8	75,4	304,6±0,8	306,7	-73,09	-76,30
CH ₃ -CX ₃	92,9±1,7	94,0	322,6±3,8	321,7	-73,85	-75,00
CH ₂ X-CH ₂ X	78,7±1,3	82,1	309,2±1,3	308,7	-77,49	-77,78
CH ₂ X-CHX ₂	89,1±0,4	89,5	337,2±1,7	336,5	-85,56	-77,96
CH ₂ X-CX ₃	102,9±0,4	101,6	356,1±1,3	355,4	-66,65	-62,32
CHX ₂ -CHX ₂	---	98,9	---	361,6	---	-63,80
CHX ₂ -CX ₃	---	117,3	---	379,9	---	33,82
CX ₃ -CX ₃	---	137,6	---	397,9	---	10,50

Список литературы

1. Колесов В.П., Папина Т.С. Термохимия галоген - замещенных этана // Успехи химии , 1983. Т.52, № 5 . С. 754 - 776.
2. Яровой С.С. Методы расчета физико-химических свойств углеводородов. М : Химия, 1978. 256 с.

Корреляции «структура-свойство» нитроалканов.

Топологический подход

Волкова Е.А. (студент, 5 курс)

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

Целью настоящей работы является теоретико-графовое изучение корреляций “структура – свойство” нитроалканов.

В работе был проведен отбор топологических индексов (ТИ) с учётом их дискриминирующей способности, установлена аналитическая зависимость $P =$

$f(\text{ТИ})$ отвечающая наиболее тесной корреляционной связи между некоторыми термодинамическими свойствами и ТИ.

В работе рассмотрено построение таких индексов как: число путей длины l p_l , число троек смежных рёбер R , индекс Винера $W = \sum_{i=1}^n d_{ii} + \left(\frac{1}{2}\right) \sum_{i,j=1}^n d_{ij}$ (d_{ii}, d_{ij} - элементы матрицы расстояний), число $W' = \sum_{i=1}^n (d_{ii})^2 + \left(\frac{1}{2}\right) \sum_{i,j=1}^n (d_{ij})^2$ и др.

Также в работе обсуждены возможности теоретико-графового подхода в построении аддитивных схем расчёта и прогнозирования нитроалканов.

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

В ходе работы построены и проанализированы графические зависимости "Свойство - номер изомера" и "ТИ - номер изомера" "Свойство P - ТИ". Найдено, что в одних случаях наблюдается симбатное изменение свойства P и топологического индекса, это свидетельствует о хорошей корреляции между P и ТИ. В других случаях такой корреляции нет. С увеличением числа изомеров корреляции между свойством P и ТИ усложняются и для адекватного описания каждого свойства лучше всего подбирать свой индекс.

Энергии разрыва связи в кетонах

Ершова Я.Н. (студент, 4 курс)

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

Экспериментальные сведения по энергиям разрыва связей в предельных кетонах скудны и порой разноречивы. Поэтому важное значение имеет развитие расчетных методов и получение с помощью этих методов новой информации.

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций “структура-энергия разрыва связи” в кетонах.

Анализ числовых данных по энергиям разрыва связей, позволяет выявить определенные закономерности.

1. Энергии разрыва связей D_{298} в выбранных соединениях изменяются в широких пределах. Например (в кДж/моль [1]):

	$\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{-H}$	$\text{H-CH}_2\text{COCH}_2\text{CH}_3$	$\text{CH}_3\text{-COCH}_3$
D_{298}	$401,7 \pm 9,2$	$386,2 \pm 7,1$	$351,9 \pm 2,1$

2. С увеличением длины цепи энергия разрыва связей уменьшается. Например (в кДж/моль [1]):

	$\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{-H}$	$\text{H-CH}_2\text{COCH}_2\text{CH}_3$
D_{298}	$401,7 \pm 9,2$	$386,2 \pm 7,1$

и т.д.

В работе проведены численные расчеты по энергиям разрыва связей выбранных соединений, согласующиеся с экспериментом.

В работе также проанализированы графические зависимости свойство вещества - степень замещения l . Найдено, что эти зависимости в общем случае нелинейны, линии замещения на одну и ту же группу симбатны между собой.

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

Корреляции структура – свойство алкинов

Жерихова А.М. (магистрант, 2 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 алкинах.

Для этого в работе проведена оценка состояния численных данных по термодинамическим свойствам алкинов, выведены расчётные схемы в разных приближениях. Так для алкинов в третьем приближении получаем:

$$P_{C_n H_{2n-2}} = p_{C\equiv} + (n-2)p_{C-C} + (2n-2)p_{C-H} + x_{CC1} \Gamma_{CC}^* + x_{CC2}^* \Gamma_{CC}^* + \\ + x_{CCC1} \Delta_{CCC} + x_{CC2} \tau_{CC} + x_{CC2}^* \tau_{CC}^* + x_{CC3} \omega_{CC} + x_{CC3}^* \omega_{CC}^*$$

где Γ_{CC}^* , τ_{CC}^* , ω_{CC}^* – эффективные взаимодействия соответственно пар атомов С через один атом, два, три атома во фрагментах $C\equiv C-C$, $C\equiv C-C-C$, $C\equiv C-C-C-C$; Δ_{CCC} – эффективный вклад взаимодействия тройки атомов С около одного и того же скелетного атома; $p_{C\equiv}$, p_{C-C} и p_{C-H} – соответственно вклады связи $C\equiv C$, $C-C$ и $C-H$ и т.д.

Так как в результате нехватки экспериментальных данных получилась система с линейнозависимыми столбцами, то параметр p_{C-H} , пропадает, а параметры p_{C-C} и $p_{C\equiv C}$ были заменены на параметр a .

$$\text{Где } a = p_{C-C} + p_{C\equiv C}.$$

В работе проведены численные расчёты некоторых термодинамических свойств ряда алкинов с числом атомов С от 2 до 9, согласующиеся с экспериментом. Получены новые данные (ранее неизвестные значения свойств).

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

Моделирование гексагональной фазы расплавов диблочных сополимеров методом диссипативной динамики частиц

Ильина Н.В. (магистрант, 2 курс)

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

В настоящее время разрабатывается много новых параллельных алгоритмов для крупномасштабного 3D моделирования взаимодействия в блок-сополимерах с гибкими и жесткими блоками. Однако, блочные сополимеры с

жесткими блоками изучены недостаточно, т.к. данное взаимодействие приводит к появлению новых самоорганизующихся структур. Так, в работе [1] с помощью компьютерного моделирования методом самосогласованного среднего поля была обнаружена морфология гексагонально расположенных хиральных цилиндров.

Для исследования такой морфологии в расплавах диблок-сополимеров с блоками разной жесткости мы применили метод иной метод моделирования, основанный на взаимодействиях «частиц-частица» – метод диссипативной динамики частиц. В ходе расчетов определили минимальные значения параметров несовместимости для гексагональной фазы. Данная морфология, построенная из жестких блоков, имеет нематический тип упорядочения. Расчет параметра порядка был проведен для отдельных доменов. Компьютерное моделирование показало, что, образуемая в цилиндрических фазах, хиральность незаметна невооруженным взглядом. Также были рассчитаны индексы хиральности и построены графики парной корреляционной функции и структурного фактора.

1. Криксин Ю.А., TungS.-H., Халатур П.Г., Хохлов А.Р. Спонтанное возникновение хиральности в расплаве диблок-сополимеров с жесткими и гибкими блоками // Высокомолекулярные соединения. 2013, Серия С. Т.55, №7. с. 880–892.

Анализ влияния промышленных загрязнений на химический состав подорожника большого

Калинин А.И. (студент, 4 курс)

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

В последнее время увеличение количества промышленных предприятий приводит к существенному загрязнению почвы, воздуха. Растения способны накапливать из окружающей среды различные химические вещества, в том числе и токсичные. При неблагоприятных экологических условиях в них

повышается концентрация фенольных соединений. В связи с этим возникает необходимость анализа химического состава растений, используемых в качестве лекарственного сырья.

Целью работы является оценка влияния антропогенного загрязнения на химический состав и морфологию подорожника большого, собранного в различных местах (КСМ-2, Аптечный образец, СИБУР-ПЭТФ, п. Шаховская, Свалка)

Свежие измельченные листья подорожника применяются при ранениях, ушибах, ожогах, укусах насекомых как кровоостанавливающее средство. Подорожник обладает хорошим противовоспалительное свойством.

Для регистрации ИК спектров растения была использована стандартная методика приготовления таблеток с бромидом калия. Для Спектры регистрировали на Фурье-ИК спектрометре Vertex 70 ”фирмы “Bruker”

Были проанализированы водные, водно-спиртовые и спиртовые (96%) экстракты разных частей растения с целью определения содержания фенольных соединений.

Результаты проведенного исследования показали, что химический состав подорожника большого оказался чувствительным к воздействию загрязняющих веществ. Количество биологически активных веществ – фенольных соединений, определенных в образцах, зависит от места произрастания.

Энергетические характеристики замещённых бензола

Кринкина Е.А. (студент, 5 курс)

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

Целью настоящей работы является установление количественных корреляций “структура-свойство” в замещённых бензола.

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи: оценка и анализ экспериментальных данных по энергетически характеристикам исследуемых соединений; построение расчётных схем и

проведение численных расчетов; построение и анализ графических зависимостей “свойство – степень замещения”.

В работе проведён анализ числовых данных по энтальпии образования и энергиям разрыва связей в замещённых бензола, выявлены отдельные закономерности. Например:

1. С увеличением длины цепи энергия разрыва связей в замещённых бензола уменьшается, стремясь к некоторому пределу.
2. Энергии разрыва связи слабо зависят от строения группы R .
3. Величины D_{298} монотонно уменьшаются с ростом степени замещения.

и т.д.

В работе также проведены численные расчеты по энтальпии образования и энергиям разрыва связей выбранных соединений, согласующиеся с экспериментом (там, где можно сделать сопоставления).

В работе были проанализированы графические зависимости “Свойство – степень замещения”. Найдено, что эти зависимости в общем случае нелинейны, хотя линии замещения на одну и ту же группу не везде симбатны между собой.

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

Энергии разрыва связи в германийорганических соединениях

Крылов П.Н. (аспирант, 1 год обучения)

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

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

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи: оценка и анализ экспериментальных данных по энергиям разрыва связи в исследуемых соединениях; построение расчётных схем и проведение

численных расчетов; построение и анализ графических зависимостей “энергия разрыва связи – степень замещения”.

В результате проделанной работы проведена оценка состояния численных данных по энергиям разрыва связи в германийорганических соединениях, выявлены отдельные закономерности. Например:

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

Например (в кДж/моль [1]):

	$\text{GeH}_3\text{-H}$	$(\text{CH}_3)_3\text{Ge-H}$	$\text{GeH}_3\text{-GeH}_3$
D_{298}	$348,9 \pm 8,4$	364,0	$281,2 \pm 8,4$

2. С появлением в цепи молекулы фенольной группы D_{298} увеличивается.

Например (в кДж/моль [1]):

	$\text{GeH}_3\text{-H}$	$\text{PhH}_2\text{Ge-H}$
D_{298}	$348,9 \pm 8,4$	359,8

и т.д.

В работе также разобраны расчётные схемы, проведены по ним численные расчёты, согласующиеся с экспериментом, получены новые данные.

Список литературы

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

Корреляции «структура - свойство» одноатомных спиртов.

Топологический подход

Милорадова А.Н. (студент, 5 курс)

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

Целью настоящей работы является установление количественных корреляций “структура – свойство” в одноатомных спиртах.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

- анализ экспериментальных данных по исследуемым соединениям,

- подбор топологических индексов (ТИ) и построение расчётных схем
- проведение численных расчётов,
- построение и анализ графических зависимостей.

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

В работе были получены аналитические зависимости $P=f(\text{ТИ})$ наиболее точно коррелирующие с некоторыми термодинамическими свойствами одноатомных спиртов.

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

По полученным схемам проведён численный расчёт ряда термодинамических свойств одноатомных спиртов. Рассчитанные величины, в общем, согласуются с экспериментальными.

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

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

Гелеобразование в растворах L-цистеина и перхлората серебра

Савельев М.О. (студент, 4 курс)

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

L-цистеин – серосодержащая аминокислота, отвечающая за формирование вторичной и третичной структуры белков, играющая важную роль в обмене веществ, и выполняющая защитную функцию при связывании токсичных тяжелых металлов в живом организме. Цистеиновые комплексы выполняют разнообразные функции в медицине, биологии, поэтому их исследования представляют не только научный, но и практический интерес.

Авторами обнаружено гелеобразование в водных растворах на основе аминокислоты L-цистеин (3,0 мМ) и перхлората серебра. В работе изучены условия образования гелей, которые относятся к супрамолекулярным системам, и исследован механизм их образования с помощью различных физико-химических методов – УФ спектроскопии, динамического светорассеяния, вискозиметрии и рН-метрии.

Установлено, что в результате смешивания водных растворов исходных компонентов при условии избытка ионов серебра (1,5 – 1,83) образуется прозрачный раствор, вязкость которого возрастает во времени. Скорость формирования такого раствора зависит от соотношения исходных веществ, концентрации и температуры. Для образования гидрогелей необходимы электролиты, такие как сульфаты и хлориды металлов, в нашем случае использовались Na_2SO_4 , NaCl , CuCl_2 . Согласно спектральным данным в электронных спектрах исследуемых образцов наблюдается увеличение интенсивности поглощения двух полос с максимумами ≈ 320 и 397 нм, что связано с образованием супрамолекулярных цепочек. Методом ДСР обнаружено, что в данных системах образуются несколько групп агрегатов, которые формируют пространственную сетку при введении электролитов.

Моделирование гексагональной фазы в расплаве триблок-сополимеров

Селина Т.Ю. (магистрант, 2 год обучения)

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

В расплавах и концентрированных растворах блок-сополимеров в результате равновесной самоорганизации наблюдается образование структур с упорядоченными областями от нано- до микро- размера. Наличие гибких и жестких блоков сильно усложняет фазовое поведение блочных сополимеров. При этом решающее значение в формировании микроструктуры имеют несовместимость сегментов различной химической природы и наличие ориентационного взаимодействия между жесткими блоками.

В результате исследований таких систем были обнаружены интересные морфологии, среди которых особо следует выделить морфологию гексагонально упакованных цилиндров (Hex*), возникающую при понижении температуры в результате фазового перехода из обычной гексагональной фазы (Hex).

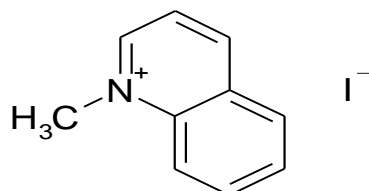
В настоящей работе для изучения данной морфологии использовался метод диссипативной динамики частиц, относящийся к мезоскопическим методам моделирования. Проведено компьютерное моделирование расплава триблок-сополимеров с блоками разной жесткости, определены значения энергетических параметров, при которых данная фаза устойчива. Показано, что образующаяся фаза построена из жестких блоков и имеет нематический тип упорядочения, однако в случае $f=0,33$ (f – объемная доля жестких блоков) упорядоченные области состояли из гибкоцепных блоков. Для количественной оценки степени закрутки микроструктур рассчитан индекс хиральности, а для отдельных доменов произведен расчет параметра порядка (по Френкелю). С помощью парных корреляционных функций оценен период полученных микроструктур.

Влияние полярности растворителя на электронные спектры

Смирнова Е.С. (студент)

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

Целью данной работы является исследование влияния полярности растворителя на электронные спектры 1-метилхинолиний йодида:



1-метилхинолиний йодид

Известно, что растворитель влияет на свойства растворенного вещества [1]. Обычно полярность растворителей истолковывается как наличие у его молекул дипольного момента.

В работе использовался метод электронной спектроскопии в УФ- и видимой области в интервале длин волн от 200 до 700 нм. В УФ-спектре 1-метилхинолиний йодид наблюдается две основные полосы поглощения. В области 225 Е-полоса, а в области 320 В-полоса.

В качестве растворителей использованы соединения с различной полярностью: вода, этанол, этилацетат, ацетонитрил, тетрагидрофуран и др.

Список литературы

1. Асланов Л.А., Захаров М.А. Абрамычева Н.Л. Ионные жидкости в ряду растворителей - М.: Изд-во МГУ, 2005г. с. 92.

Аддитивная схема расчета ΔG_{298}^0 X-замещенных бензола

Соколов А.В. (магистрант, 1 курс)

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

Построение аддитивных схем расчета свойств веществ на основе феноменологических методов позволяет решать задачи массового расчета, хотя и требуют для своего использования определенного количества исходных данных. На примере данных расчета стандартных энергий Гиббса (ΔG_{298}^0) метил замещенных бензола, полученных с помощью метода наименьших квадратов (МНК), и сравнения их с опытными данными показана работоспособность аддитивной схемы. Аддитивные схемы выполнены в различных приближениях.

Таблица 1

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

Бензол D_{6h}	Опыт	Расч.	Бензол D_{6h}	Опыт	Расч.
C_6H_6	129,7	129,7	1,2,3- $C_6H_3X_3$	124,6	124,6
C_6H_5X	122,0	122,0	1,2,4,5- $C_6H_4X_4$	119,5	119,5

пара- C_6X_2	121,1	121,1	1,2,3,5- C_6X_4	118,7	118,7
мета- C_6X_2	118,9	118,9	1,2,3,4- C_6X_4	123,4	123,4
орто- C_6X_2	122,1	122,1	C_6X_5	123,3	123,3
1,2,4- C_6X_3	116,9	116,9	C_6X_6	130,2	130,2
1,3,5- C_6X_3	144,7	144,7			

Список литературы

1. Татевский В.М. Химическое строение углеводородов и закономерности в их физико-химических свойствах. – М.: МГУ, 1953. – 316 с.
2. Татевский В.М. Строение молекул. – М.: Химия, 1977. – 512 с.
3. Татевский В.М., Папулов Ю.Г. Связь энергии образования молекулы из свободных атомов с ее строением// ЖФХ. – 1960. – 34, №2. С. 241-258, №3. – С. 490-504, №4. – С. 708-715.

Исследование пористости полимерных плёнок методом ИК спектроскопии

Федотов П.А. (студент, 4 курс)

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

В настоящее время пористые полимерные материалы нашли широкое применение в разных областях. Метод ИК спектроскопии позволяет определить общую пористость и диаметр пор в трековых мембранах и других типах пористых материалов. Целью настоящей работы является изучение влияния диаметра и концентрации сквозных отверстий (пор) в полимерной плёнке на характер ИК спектра в среднем диапазоне частот. Объектом исследования служили промышленные плёнки полиэтилена (ПЭ) толщиной 90 мкм. С помощью металлической иглы в пленке ПЭ проделывались сквозные отверстия. Поверхностную плотность отверстий (при среднем значении их диаметра в 135мкм) анализировали с помощью метода оптической микроскопии. В ходе эксперимента было установлено, что с увеличением поверхностной плотности пор (C , % – отношение общей площади пор на единице площади к единице

площади плёнки) уменьшается экстинкция (ε_A^{730}) ИК полосы поглощения на частоте 730 см^{-1} примерно по линейному закону (рисунок 1).

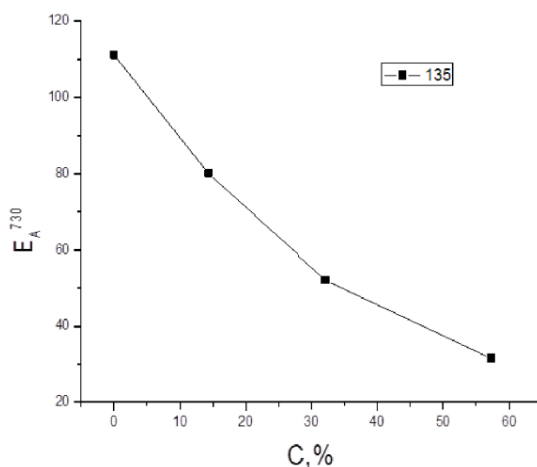


Рис. 1. Уменьшение экстинкция (ε_A^{730}) ИК полосы поглощения на частоте 730 см^{-1}

Уменьшение величины экстинкции однозначно связано с ростом общей пористости плёнки. Это даёт возможность использовать полученную зависимость для спектроскопического определения поверхностной плотности пор в данном образце.

Энергетические характеристики галогензамещённых алканов

Храброва Л.А. (студент, 5 курс)

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

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

В работе рассмотрены аддитивные методы и схемы расчёта; дана их классификация, охарактеризовано соподчинение.

В работе также проведена оценка состояния численных данных по энтальпии образования и энергиям разрыва связей галогензамещённых алканов, выявлены отдельные закономерности. Например:

1. Энергии разрыва связей D_{298} в выбранных соединениях изменяются в широких пределах. Ср. D_{298} (в кДж/моль) [1]:

$\text{CH}_3\text{--CH}_3$	$\text{CF}_3\text{--CF}_3$	$\text{CCl}_3\text{--CCl}_3$
$377,4 \pm 0,8$	$413,0 \pm 5,0$	$285,8 \pm 6,3$

2. Энергетические различия между поворотными изомерами малы. Так, разности энергий *гош*- и *транс*-конформеров молекулы $\text{CH}_2\text{X--CH}_2\text{X}$ (в кДж/моль) в газовой фазе составляет: 3,4-3,8 ($\text{X} = \text{CH}_3$), -1,3 ($\text{X} = \text{F}$), 4,8 ($\text{X} = \text{Cl}$), 6,7 ($\text{X} = \text{Br}$), 10,5 ($\text{X} = \text{I}$) и т.д.

В работе были также проанализированы графические зависимости “Свойство – степень замещения”. Найдено, что эти зависимости в общем случае нелинейны, хотя линии замещения на одну и ту же группу симбатны между собой.

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

Список литературы

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

Компьютерное моделирование методом молекулярной динамики ионной жидкости

Эрендженова А.А. (студент, 5 курс)

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

В настоящее время большое внимание уделяется исследованию свойств ионных жидкостей. Широкое применение находят ионные жидкости на основе производных имидазолия, они имеют низкую температуру плавления и

являются устойчивыми соединениями в широком температурном интервале. Ионные жидкости этого типа используются в супер конденсаторах и литиевых аккумуляторах. В качестве объекта исследования нами был выбран 1-бутил-3-метилимидазолий тетрафторборат.

Несмотря на широкое использование в промышленности ионных жидкостей полноатомное моделирование выполнено для ограниченного числа соединений этого типа, что связано с трудностью корректного учета электростатических взаимодействий и отсутствием во многих валентно-силовых полях параметризации для атома бора. Нами было выбрано валентно-силовое поле DREIDING, в котором имеется параметризация для атома бора, однако заряды для ионных структур в этом поле (как впрочем и в большинстве других полей) присваиваются некорректные. Нами был выполнен квантово-химический расчет с полной оптимизацией геометрии в пакете Гауссиан-03 методом DFT в базисе 6-311++ G(3df,3pd). Заряды на атомах брались по Бейдеру с использованием процедуры AIMALL. Для моделирования методом молекулярной динамики использовались координаты полученные в квантово-химическом расчете. На начальном этапе была создана система из 2000 молекул 1-бутил-3-метилимидазолий тетрафторбората с плотностью 0.5 г/см^3 (плотность при температуре 30°C $1,16 \text{ г/см}^3$), которая сжималась в ансамбле NPT до постоянного значения. В полученной системе рассчитаны парные корреляционные функции плотности.

СЕКЦИЯ «ЮНЫЙ ХИМИК»

Альбумины

Косарская Дарья (Академическая гимназия ТвГУ, 9 класс)

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

Альбумины — простые растворимые в воде белки, умеренно растворимые в концентрированных растворах соли и свёртывающиеся при нагревании.

Сывороточный альбумин синтезируется в печени и составляет большую часть среди всех сывороточных белков. Альбумин, содержащийся в крови человека, называется человеческий сывороточный альбумин, он составляет около 55 % от всех белков, содержащихся в плазме крови. Общая площадь поверхности множества мелких молекул сывороточного альбумина очень велика, поэтому они особенно хорошо подходят для выполнения функции переносчиков многих транспортируемых кровью и плохо растворимых в воде веществ. К веществам, связываемым сывороточным альбумином, относятся билирубин, уробилин, некоторые экзогенные вещества — пенициллин, сульфамиды, некоторые лекарства, такие как варфарин, фенобутозон и т. д. Одна молекула альбумина может одновременно связать 25-50 молекул билирубина. По этой причине сывороточный альбумин иногда называют «молекулы-такси».

Наиболее широко используются человеческий сывороточный альбумин и бычий сывороточный альбумин, часто применяемый в медицинских и молекулярно-биологических лабораториях. Яичный, молочный, сывороточный альбумины применяются в кондитерском и текстильном производстве, в фармации и медицине. Молочный альбумин составляет основу итальянского молочного продукта рикотта и его аналогов у других народов. По методу академика Б. Патона альбумин применяется в качестве сварочного материала в хирургических операциях, по методике плазменной сварки живых тканей кишечника и желудка человека. Яичный альбумин так же используются в некоторых способах фотопечати.

Применение сложных эфиров

Кравцова Анна (Академическая гимназия ТвГУ, 11 класс)

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

Сложные эфиры – функциональные производные карбоновых кислот, в молекулах которых гидроксильная группа ($-\text{OH}$) замещена на остаток спирта ($-\text{OR}$). Сложные эфиры широко применяют в промышленности в качестве растворителей, ароматизаторов и пластификаторов, также их используют в парфюмерии и в медицине. Когда число атомов C в исходных карбоновой кислоте и спирте не превышает 6–8, соответствующие сложные эфиры представляют собой бесцветные маслянистые жидкости, чаще всего с фруктовым запахом. Они составляют группу фруктовых эфиров. Если в образовании сложного эфира участвует ароматический спирт (содержащий ароматическое ядро), то такие соединения обладают, как правило, не фруктовым, а цветочным запахом. Все соединения этой группы практически нерастворимы в воде, но легко растворимы в большинстве органических растворителей. Интересны эти соединения широким спектром приятных ароматов, некоторые из них вначале были выделены из растений, а позже синтезированы искусственно. Амилацетат («банановое масло») широко применяется как растворитель для лаков, поскольку он испаряется медленнее, чем этилацетат. Сложные эфиры на основе низших спиртов и кислот используют в пищевой промышленности при создании фруктовых эссенций, а сложные эфиры на основе ароматических спиртов – в парфюмерной промышленности (бутилацетат – груша, этилбутират – абрикос, бензилацетат – жасмин, бутилбутират – ананас, этилизопентаноат – яблоко, этилбензоат – мята, бутилформиат – мята, пентилпентаноат – апельсин). Из восков изготавливают политуры, смазки, пропиточные составы для бумаги (вощенная бумага) и кожи, они входят и в состав косметических кремов и лекарственных мазей.

Научное издание

ХV НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
АСПИРАНТОВ И СТУДЕНТОВ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО
ФАКУЛЬТЕТА

25 мая 2016 года

Тверь

Тезисы докладов

Отпечатано с авторских оригиналов

Подписано в печать 24.05.2016. Формат 60x84 ¹/₁₆.

Усл. печ. л. 5,25. Тираж 100. Заказ № 217.

Редакционно-издательское управление

Тверского государственного университета

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

Тел. РИУ (4822) 35-60-63.