



Тверской
государственный
университет

ФОНД СОДЕЙСТВИЯ
ИННОВАЦИЯМ



XXVIII КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ



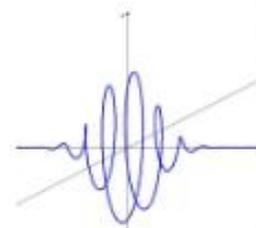
ТГСХА



Всероссийская научно-техническая
конференция молодых учёных

«Физика, химия и новые технологии»

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
Тверь, 2022



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

XXVIII КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ

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

31 марта - 1 апреля 2022 года

г. Тверь

Тезисы докладов

ТВЕРЬ 2022

УДК 54(082)
ББК Г.я431
К21

Ответственные за выпуск:

доктор химических наук П.М. Пахомов
кандидат химических наук Н.П. Русакова

К21

XXVIII Каргинские чтения: тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2022. – 184 с.

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

ISBN

© Тверской государственный
университет, 2022
© Авторы статей, 2022

ОГЛАВЛЕНИЕ:

115 ЛЕТ ВАЛЕНТИНУ АЛЕКСЕЕВИЧУ КАРГИНУ	16
1. Авлякулова Г., Шилова О.В. Влияние хелатированного бора на продуктивность корнеплодов	17
2. Адамян А.Н., Пахомов П.М., Хижняк С.Д. Процессы самоорганизации в цистеин-серебряном растворе под воздействием видимого и УФ излучения	18
3. Алябина Н.В., Феофанова М.А. Способ количественного определения аллантаина в дезинфицирующем средстве в присутствии молочной кислоты	19
4. Аннагелдиев М.А., Дегтева О.Б. Магнитные свойства и доменная структура квазибинарных соединений $YCO_{5-x}Cu_x$	20
5. Арефьев А.А., Журавлев О. Е. Изучение каталитической активности ионных жидкостей в алкилировании бензола дихлорметаном	21
6. Арзамасова А.Ю., Веролайн Н.В. Изучение свойств органических форсфатов в качестве огнезащитных добавок	22
7. Базулева В.А., Прутенская Е.А. Изучение физико-химических свойств белковых частиц из фасоли	23
8. Баранник А.А., Хижняк С.Д. Влияние концентрации нитрата серебра на гелеобразование в L-цистеин-KI водных системах	24
9. Баранова А.Е., Осовская И.И. Влияние растворов агара из красных морских водорослей на свойства поверхности ткани, кожи и бумаги	25
10. Бахвалова Е.С., Быков А.В., Никошвили Л.Ж. Одностадийный синтез высокопористых ароматических полимеров – перспективных носителей каталитических систем	26
11. Башкирова В.А., Королева Ю.С. Влияние фона минерального питания на продуктивность люцерны изменчивой	27
12. Белявский М.А., Кузнецова Ю.В. Скачкообразное изменение намагниченности на поверхности образца соединения $GdCo_4Cu$	28
13. Биткова В.В., Баранова Н.В. Нитритометрическое определение сульфаметоксазола в лекарственных препаратах	29

14. Богаченков Н.А., Пахомов П.М., Хижняк С.Д. Процесс мицеллообразования в водных растворах катионных и анионных ПАВ	30
15. Бойкова С.С., Русакова Н.П. Сравнение характеристик электронной плотности конформеров аспарагиновой кислоты	31
16. Болденкова М.С., Солнышкин А.В. Пьезоэлектрические и пироэлектрические свойства пленок поливинилиденфторида, изготовленных методом послойного наплавления нити	32
17. Бондарева Т.Д., Алексеев В.Г. Компьютерное моделирование структуры комплекса европия(III) с хлорином Еб	33
18. Будникова Е.А., Белая Н.И., Белый А.В. Синергическое действие глюкозы в бинарной композиции с галловой кислотой в реакциях радикального окисления	34
19. Бурштейн А.Л., Брославская М.Н. Особенности технологии и оформления бенто-тортов	35
20. Варзар А.А., Минина М.В. Исследование кислотно-основных равновесий в растворах цефазолина	36
21. Васильев А.Д., Иванова А.И. Влияние деформации на микроструктуру сплавов Гейслера	37
22. Васильева Д.В., Темникова С.А. Получение ацетондикарбоновой кислоты	38
23. Ватаманюк В.О., Пахомов П.М., Маркова А.И. Использование метода ИК спектроскопии для изучения пористых полимерных материалов	39
24. Велмурадов А., Шилова О.В. Формирование урожайности капусты белокочанной при использовании хелатированной меди (II)	40
25. Вересов С.А., Сдобняков Н.Ю. Сценарии структурообразования в тернарном наносплаве $Ti6Al4V$ при охлаждении	41
26. Веролайн В.А., Темникова С.А. Получение и исследование свойств амфотерных поверхностно-активных веществ на основе N,N-димилэтанолamina	42
27. Веселова А.В., Веролайн Н.В. Синтез алкилполигликозидов	43
28. Волков Д.О., Макаров В.В. Интерфейсный модуль на Raspberry Pi	44

29. Волкова А.В., Ожимкова Е.В. Исследование антиоксидантной активности экстрактов, полученных из отходов заготовки льна	45
30. Волкова В.М., Хижняк С.Д. Анализ наночастиц серебра, полученных с использованием водных экстрактов клена, с помощью спектральных методов	46
31. Воробьева А.О., Журавлёв О.Е. Синтез и свойства четвертичных солей N-алкилпиридиния с тетрахлорферрат-анионом	47
32. Галузин И.Р., Сдобняков Н.Ю. Стабильность/нестабильность биметаллических наночастиц Ni@Ag и Ag@Ni	48
33. Гальцова В.В., Веролайн Н.В. Микроэмульгирование толуола в водных растворах неионогенного поверхностно-активного вещества	49
34. Гешко В.В., Хижняк С.Д. Влияние концентрации нитрата серебра на образование наночастиц в водных экстрактах дуба черешчатого	50
35. Григорьев Р.Е., Сдобняков Н.Ю. Изучение энергетического спектра биметаллических наночастиц в процессе избирательной коррозии	51
36. Громов А.Н., Усанова З.И. Инновационная технология возделывания яровой пшеницы с применением некорневых подкормок комплексными удобрениями	52
37. Губская Е.М., Ожимкова Е.В., Филатова А.Е. Состояние современных ресурсосберегающих технологий конверсии растительной биомассы в изосорбид	53
38. Губская Е.М., Ожимкова Е.В., Филатова А.Е. Биотехнологические способы переработки лигноцеллюлозного сырья	54
39. Гугуцидзе К.А., Иванова А.И. Характеристики поверхности кристаллов германия и кремния при различных способах обработки	55
40. Данилова Д.А., Темникова С.А. Синтез димерных поверхностно-активных веществ на основе янтарной кислоты	56
41. Демьянов Г.В., Немов С.А. Структурные особенности экструдированных образцов (Sb,Bi)₂Te₃	57
42. Дорошенко И.Д., Хижняк С.Д. «Зеленый» синтез наночастиц серебра с использованием водных экстрактов мать-и-мачехи	58
43. Доянова Ю.Д., Карпенков А.Ю., Дунаева Г.Г. Исследование работы системы из дипольных магнитных цилиндров Хальбаха	59

44. Дунаева Г.Г., Карпенков А.Ю.
Анализ конфигурации доменной структуры монокристалла Nd₂Fe₁₄B на основе моделирования 60
45. Ежов В.П., Самсонов В.М.
Молекулярно-динамическое моделирование процесса образования германена из тонкого слоя кристаллического германия 61
46. Ермолаева А.А., Алексеев В.Г.
DFT расчёт энергии электронных орбиталей фталоцианина кобальта(II) 62
47. Ефимова Т.А., Пахомов П.М., Хижняк С.Д.
Получение мицелл из водных растворов ПАВ..... 63
48. Жевлакова Я.А., Веролайн Н.В.
Влияние высокочастотного электромагнитного поля на свойства поверхностно-активных веществ 64
49. Жохов И.С., Лагусева Е.И.
Определение удельной площади поверхности полиамида ПТ-33 и сополиамида 6ПТ-70 65
50. Зеников Г.Р., Хижняк С.Д., Пахомов П.М.
Влияние хитозана на гелеобразование в водных системах L-цистеин-нитрат серебра-сульфат меди 66
51. Зуева А.С., Баранова Н.В.
Титриметрический анализ аспирина разных производителей 67
52. Иванов В.В., Кислова И.Л.
Влияние подсветки на дисперсию диэлектрических характеристик в плёночных гетероструктурах Sn₂P₂S₆..... 68
53. Иванова А.А., Алексеев В.Г.
Компьютерное моделирование структуры этилендиаминтетраацетатоаквамагния 69
54. Капранов А.А., Белов А.Н.
Программно-аппаратный комплекс для наблюдения фазовых переходов жидких кристаллов 70
55. Караулова Д.А., Алексеев В.Г.
Спектрофотометрическое исследование комплексообразования меди(II) с этилендиамин-N,N-дипропионовой кислотой 71
56. Карелина К.С., Калугина О.Н., Малышкина О.В.
Исследование сегнетоэлектрической керамики титаната бария – кальция ... 72
57. Кибирева А.В., Парфенова М.Д., Зеленая А.Э.
Материальные балансы в системах Li,K,Pr||Cl, Li,K,Pu(Rb)||F 73
58. Кириллова Е.А., Усанова З.И., Смирнова И.Н.
Экологически безопасная технология возделывания топинамбура с применением некорневых подкормок комплексными удобрениями 74

59. Ковальчук К.М., Веролайн Н.В. Исследование влияния неионогенных ПАВ на значение и скорость седиментации суспензии ментола	75
60. Коверина В.О., Макаров В.В. Реализация драйвера параллельного интерфейса RGB для LCD экрана	76
61. Козликова Е.Е., Никольский В.М. Анализ содержания йода в морской капусте	77
62. Козлова Р.Р., Виноградова М.Г. Теоретико-графовый подход в исследовании корреляций «структура – теплоёмкость» гликолей	78
63. Комаров В.А., Белов А.Н., Орлов Ю.Д. Аппроксимация численных результатов радиофизических измерений в базисе функций матье	79
64. Корнев П.П., Осовская И.И. Содержание целлюлозы в стеблях крапивы двудомной ленинградской области	80
65. Кострова П.А., Павлов М.Н. Некоторые итоги спектрофотометрического изучения содержания фотосинтетических пигментов в лишайниках зеленых зон г.Твери	81
66. Кострова П.А., Павлов М.Н., Смирнова Т.И. Эффективность применения удобрений в технологии выращивания микрозелени руколы	82
67. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Орлов Ю.Д. Электронное строение молекул перфторалканов	83
68. Кравец О.Б., Баранова Н.В. Физико-химические методы анализа комбинированных лекарственных средств	84
69. Крюков Т.В., Феофанова М.А. Исследование твердого комплекса неодима методом сканирующей электронной микроскопии	85
70. Кудряшова Е.А., Егорова И.Ю. Получение азогидразонов на основе 2-гидроксипропановой кислоты	86
71. Курносков Ю.А., Семенова Е.М. Доменная структура редкоземельного интерметаллида TbFe₂	87
72. Кучурова А.К., Пахомов П.М., Хижняк С.Д. Гелеобразование в цистеин-серебряном растворе с участием поливинилпирролидона	88
73. Лебедев В.С., Белов А.Н. Удаленный доступ к установке регистрации актов попадания частиц в детектор	89

74. Лебедев И.И., Журавлев О.Е. Влияние растворителя на электропроводность растворов аммониевых ионных жидкостей	90
75. Макарова Е.А., Минина М.В. Компьютерное моделирование комплексных соединений ампициллина с лантаноидами	91
76. Малышев М.Д., Комаров П.В. Исследование механических свойств эпоксидного нанокompозита: мезомасштабное моделирование	92
77. Мамаев П.В., Белоцерковец Н.И. Влияние строения катиона тетраалкиламмониевых солей на электропроводность их водных растворов	93
78. Мананникова М.Д., Павлов А.С. Количественное определение железа в воде иваньковского водохранилища с помощью спектрометра атомно-абсорбционного «Квант-2»	94
79. Маркова А.И., Пахомов П.М., Хижняк С.Д. Спектроскопический метод для определения размера стандартных частиц полистирольного и полиметилметакрилатного латексов	95
80. Матус Я.А., Русакова Н.П., Орлов Ю.Д. Электронные характеристики α-аминоальдегидов, производных кислых α-аминокислот	96
81. Механников И.А., Хижняк С.Д. Эффект бромид и фторид анионов на процессы самосборки в L-цистеин- нитрат серебра системах	97
82. Митинев Е.С., Сдобняков Н.Ю. Закономерности структурных превращений в биметаллических наночастицах Pd-Pt	98
83. Михайлов С.П., Сульман М.Г., Долуда В.Ю. Влияние соотношения субстрат : катализатор в реакции восстановительного аминирования	99
84. Моисеева Е.Н., Брославская М.Н. Особенности технологии воздушно – ореховых тортов	100
85. Монжаренко М.А., Степачёва А.А. Получение высших алифатических спиртов для косметической промышленности	101
86. Москаленко А.Б., Виноградова М.Г. Топологические индексы и аддитивные схемы расчёта энтальпии образования карбоновых кислот	102
87. Назаренко А.В., Белов А.Н. Программный модуль обработки визуализации фазового перехода жидких кристаллов	103

88. Найдёнова Е.Е., Большакова Н.Н. Гистерезисные явления в медь- и хромсодержащих кристаллах триглицинсульфата	104
89. Небывалова К.К., Самсонов В.М. Оценка избыточной поверхностной и избыточной линейной энергии, а также энергии на вершинах для икосаэдрических наночастиц различных металлов	105
90. Немченко О.С., Брославская М.Н. Влияние процесса замораживания и дефростации на показатели качества пирога слоеного «Вульфовский»	106
91. Нефедова И.А., Русакова Н.П. Заряды групп белого стрептоцида и аминобензола	107
92. Низенко А.В., Белов А.Н. Аппаратно-измерительный комплекс для регистрации текстур жидких кристаллов при различных внешних электрических полях	108
93. Никитин П.А., Чалов К.В. Исследование каталитической термодеструкции сшитого полиэтилена	109
94. Никонова И.Н., Лагусева Е.И. Анализ жирноароматических полиамидов методом термогравиметрии	110
95. Оспельников Н.М., Барабанова Е.В. Влияния ионов железа и висмута на проводимость твердых растворов ниобата натрия	111
96. Павлова Д.Н., Большакова Н.Н. Диэлектрический гистерезис в медьсодержащих кристаллах триглицинсульфата	112
97. Парфенова М.Д., Воробьева В.П., Луцык В.И. Новые варианты влияния добавок на превращения железа	113
98. Петров В.Р., Аверкин Д.В., Вишневецкий Д.В. Микросферы на основе наночастиц Ag/α-Ag₂MoO₄/h-MoO₃: синтез и светочувствительные свойства	114
99. Пинюкова А.О., Быков А.В. Исследование процесса жидкофазного гидрирования аренов и их смесей в присутствии металлосодержащих каталитических систем, стабилизированных в ароматических полимерных сетках	115
100. Платонов И.А., Шилова О.В. Влияние хелатированной меди (II) на продуктивность разных сортов томатов	116
101. Платонов И.А., Шилова О.В., Смирнова Т.И. Применение молибденсодержащих соединений при выращивании гороха посевного	117
102. Платонов И.А., Шилова О.В. Эффективность применения хелатных соединений селена на луке-порее	118

103.Платонов И.А., Акимов А.А., Смирнова Т.И. Комплексный борат-этилендиаминдисукцинат как биостимулятор для гречихи	119
104.Просьяник Ю.А., Веролайн Н.В. Исследование пеногасящих свойств раствора кокамидопропил бетаина	120
105.Пшеничная А.К., Алексеев В.Г. DFT расчёт структуры трис(2-фенилпиридин)иридия	121
106.Ракунов П.А., Карпенков А.Ю. Исследование магнитокалорического и магнитообъемного эффектов соединений RCo₂ в области магнитных фазовых переходов	122
107.Рассказова Н.Ю., Журавлёв О.Е. Изучение процессов ассоциации ионных жидкостей в растворах ацетонитрила	123
108.Рихмайер А.М., Белов А.Н. Программный модуль вычисления корреляционного интеграла для итерационной последовательности	124
109.Рудометова А.С., Никольский В.М. Изучение физико-химических и термических свойств комплексонов, производных L-аспарагиновой кислоты	125
110.Рудченко Н.А., Воробьева В.П., Парфенова М.Д. Расшифровка разрезов Т-х-у диаграмм Cr(Al)-Sn-Zn	126
111.Русаков М.В., Хижняк С.Д. Влияние антропогенного фактора на синтез наночастиц серебра с помощью экстрактов листьев берёзы повислой	127
112.Савина О.Д., Шилова О.В. Изменение урожайности разных сортов картофеля при использовании хелатных соединений селена	128
113.Савина О.Д., Смирнова Т.И., Шилова О.В. Взаимодействие комплексонов и комплексоноватов с микроорганизмами	129
114.Саидов С.М., Павлов М.Н. Эффективность применения комплексных удобрений при выращивании капусты белокочанной	130
115.Саламатина Е.В., Никольский В.М. Термическая устойчивость комплексов некоторых 3d-металлов с L-изомером N-(карбоксиметил)глутаминовой кислоты	131
116.Саркисян В.К., Андрианова Я.В., Вишневецкий Д.В. Влияние кислотности среды на поведение и биоактивные свойства L-цистеин/AgNO₃ водного раствора	132
117.Свешников П.А., Иванова А.И. Сравнительный анализ микротвердости монокристаллов германия и кремния	133

118.Скобин М.И., Феофанова М.А. Физико-химические характеристики комплекса лютеция с гепарином	134
119.Слатинская О.В., Максимов Г.В. Оценка конформационного состояния гемоглобина и эритроцита при патологиях	135
120.Слободяник Н.В., Репин А.А., Белов А.Н. Апробация и тестирование программного модуля цифрового частотомера с интерактивным доступом	136
121.Смирнова И.В., Кудряшова Н.А. Физико-химический анализ масла сладко-сливочного	137
122.Смирнова К.А., Пахомов П.М. О прочности пленок, полученных из водных растворов L-цистеина, нитрата серебра и поливинилового спирта.....	138
123.Смирнова А.В., Межеумов И.Н., Пахомов П.М. Определение концентрации концевых групп в макромолекулах полиэтилена методом ИК спектроскопии.....	139
124.Соколов А.В., Пахомов П.М., Галицын В.П. Сверхвысокопрочные волокна из полиэтилена. Метод гель-формования .	140
125.Соловьева Е.Д., Виноградова М.Г. Атомно-абсорбционная спектроскопия в экологическом мониторинге рек г. Твери.....	141
126.Софронова Ю.И., Феофанова М.А., Евдокимов А.Н. Применение имидазолиновой соли для разделения азеотропной системы ацетон–метанол.....	142
127.Степанов В.С., Каплунов И.А. Оптические неоднородности в кристаллах парателлурита, выращенных из разного исходного вещества	143
128.Степанова П.А., Жмакин И.А. Концепт устройства для наполнения шприца и осуществления инъекций одной рукой	144
129.Стречень А.С., Семенова Е.М. Морфология поверхности интерметаллидов $Tb_{0,16}Ni_{0,84}Fe_{2-x}Co_x$ под влиянием механических напряжений	145
130.Стычинский Д.М., Хижняк С.Д. Влияние антропогенных факторов на образование наночастиц серебра в экстрактах хвои ели европейской	146
131.Сульман А.М., Гребенникова О.В. Мультиферментные системы	147
132.Суратова Е.С., Журавлев О.Е. Получение ионных жидкостей на основе четвертичных солей N-алкилпиридиния для их использования в синтезе наночастиц	148

133. Сурнина В.А., Веройлайн Н.В. Влияния растворителей и катализаторов на образование олигомера молочной кислоты	149
134. Сутугина К.А., Минина М.В. Исследование кислотно-основных равновесий в растворах цефуроксима	150
135. Сырова Е.М., Егорова И.Ю. Синтез аминокарбонилформазанов и комплексов на их основе	151
136. Тактаров А.А., Сдобняков Н.Ю. Изучение закономерностей поверхностной и структурной сегрегации в биметаллических наночастицах Ni-Pd	152
137. Тарабанова А.А., Егорова И.Ю. Получение и исследование свойств сукцинилглицерида	153
138. Тарабарина А.А., Ожимкова Е.В. Сравнение стандартных и экспресс-методов определения микробиологической чистоты инфузионных растворов	154
139. Тараскина М.Ю., Ворончихина Л.И. Синтез и свойства N-алкильных производных пиперидина	155
140. Тимофеева Е.В., Русакова Н.П., Орлов Ю.Д. Распределение электронной плотности амфетамина	156
141. Тупикина Е.П., Никошвили Л.Ж. Влияние типа полимера на поведение катализаторов кросс-сочетания Соногашира	157
142. Туреев И.В., Макаров В.В. О разработке компактного генератора сигнала произвольной формы на основе принципа прямого цифрового синтеза	158
143. Уварова С.С., Никольский В.М. Анализ мезима и панкреатина на содержание соединений элементов П-А подгруппы	159
144. Филимонова А.В., Ляхова М.Б. Процессы необратимого вращения вектора намагниченности в сплавах $Gd_{0,85}Zr_{0,15}(Co_{0,70}Cu_{0,09}Fe_{0,21})_z$	160
145. Фомина Е.А., Балданов В.Д., Зеленая А.Э. Метатектическое и перитектическое превращения марганца в тройной системе Cu-Mn-Ni	161
146. Хаитов А.К., Жмакин И.А. Разработка комбинированного винтового экстрактора корней зубов со съемными насадками и обратно-ударным механизмом действия	162
147. Ханмамедов Г.С., Шилова О.В. Эффективность применения агрогумата калия на дерново-подзолистой почве	163

148.Цветкова В.А., Вишневецкий Д.В. L-цистеин и N-ацетил-L-цистеин как биовосстановители для получения геля-спрея, содержащего кластеры и наночастицы серебра.....	164
149.Цветкова О.И., Критченков А.С. Новые плёнки на основе хитозана и кобальта(II).....	165
150.Цветкова П.А., Матвеева В.Г., Сальникова К.Е. Исследование каталитических свойств Ru-содержащих катализаторов с помощью процесса гидрирования фурфурола.....	166
151.Цилих А.Д., Солнышкин А.В., Сергеева О.Н. Влияние примесей тулия и марганца на распределение поляризации в монокристаллах ортованадата кальция	167
152.Шамарина К.А., Веролайн Н.В., Кузнецова Ю.В. Исследование модуля упругости полимера на установке сканирующего зондового микроскопа	168
153.Шамахов В.И., Рыжков Ю.А. Сравнение антиоксидантной активности полифенолов в различных сортах пива.....	169
154.Шарапова М.Д., Никошвили Л.Ж. Сравнение моно- и биметаллических палладиевых катализаторов на основе сверхсшитого полистирола в реакции жидкофазного гидрирования нитробензола.....	170
155.Шаронова С.В., Павлов М.Н., Смирнова Т.И. Сравнение биологической активности хелатов микроэлементов, полученных на основе разных комплексонов.....	171
156.Шаршавых А.А., Жмакин И.А. Система контроля состояния здоровья	172
157.Шачнева К.С., Баранова Н.В. Определение сульфаниламида в лекарственных препаратах	173
158.Шипилов С.С., Большакова Н.Н. Процессы переключения аланинсодержащих кристаллов триглицинсульфата.....	174
159.Ширялин И.М., Лагусева Е.И. Влияние строения термореактивного связующего на химическую стойкость и предел прочности на разрыв стеклопластика	175
160.Шкерина К.Н., Никошвили Л.Ж. Полианилин как основа создания магнитноразделяемых композитов	176
161.Шторих К.А., Ворончихина Л.И. Синтез четвертичных солей N-алкилморфолина.....	177
162.Шустова О.А., Солнышкин А.В., Сергеева О.Н. Сравнительный анализ электрофизических характеристик однослойных и двухслойных монокристаллических пластин нитрида алюминия.....	178

163.Щенухина А.С., Русакова Н.П., Туровцев В.В. Энергия групп трансизомеров метилового красного	179
164.Щербакова Д.В., Потапенкова Т.В., Вишневецкий Д.В. Концентрационный эффект в системе L-цистеин/AgNO₂/вода	180
165.Юлмасов Г.С., Журавлев О.Е. Пиридиновые ионные жидкости на основе металлсодержащих анионов....	181
166.Яковлева Е.С., Сульман А.М. Каскадные реакции с использованием мультиферментных систем	182
<i>Авторский указатель</i>	183

115 ЛЕТ ВАЛЕНТИНУ АЛЕКСЕЕВИЧУ КАРГИНУ



23 января 2022 г. исполнилось 115 лет со дня рождения выдающегося ученого Валентина Алексеевича Каргина.

Валентин Алексеевич Каргин: академик АН СССР (1953), Герой Социалистического Труда, лауреат Ленинской и четырех Государственных премий, награжден тремя орденами Ленина, двумя орденами Трудового Красного Знамени и многими медалями, дважды лауреат премия имени А.Н. Баха, один из основоположников науки о полимерах, координатор развития химической науки и индустрии в стране в 50–60-е годы прошлого века, создатель научной школы по физикохимии полимеров в России, основатель и главный редактор журнала «Высокомолекулярные соединения». Его учениками являются академики РАН В.А. Кабанов, Н.А. Платэ, Н.Ф. Бакеев, чл.-корр. РАН В.П. Шibaев, А.Б. Зезин, А.Л. Волынский, академик АН Украины Ю.С. Липатов, академик АН УзССР Х.У. Усманов, д.х.н. А.А. Тагер, В.П. Зубов, И.М. Паписов, С.Х. Факиров, Г.П. Андрианова, М.М. Иовлева и многие другие.

По архивным данным установлено, что род Каргиных имеет глубокие тверские корни. Большинство Каргиных служили ямщиками и проживали на окраине Твери. Отец Валентина Алексеевича Алексей Константинович окончил Тверское реальное училище. Свидетельство о рождении (семейный архив) также подтверждает, что Валентин Алексеевич родился в Твери.

Научная общественность г. Твери чтит память о своем выдающемся земляке. В городе на доме № 5 по улице Равенства (улица Академика Каргина) в память о В.А. Каргине, где прошли его детские годы, установлена мемориальная доска. Начиная с 1994 г. в Твери на базе ТвГУ ежегодно проводятся Каргинские чтения. Если первые чтения носили чисто мемориальный характер, то в настоящее время они превратились в солидную научную конференцию с международным участием. В рамках Каргинских чтений проводятся: пленарное заседание ученых-полимерщиков; Всероссийская конференция молодых ученых «Физика, химия и новые технологии»; секция краеведения; экскурсии по местам, связанным с деятельностью выдающихся ученых и работников культуры России.

УДК 541.49: 581.1

Авлякулова Гульзар

ВЛИЯНИЕ ХЕЛАТИРОВАННОГО БОРА НА ПРОДУКТИВНОСТЬ КОРНЕПЛОДОВ

Руководитель: Шилова О.В.

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь
Кафедра агрохимии и земледелия

Для обеспечения растений микроэлементами, а также в целях сохранения экологического равновесия вместо минеральных солей в современной сельскохозяйственной практике необходимо отдавать предпочтение органическим соединениям, содержащим как макро-, так и микроэлементы, жизненно важные для растительных организмов. Такими веществами следует считать биологически активные соединения (например, растворы борсодержащих хелатных комплексов с эффективными комплексонами). В связи с этим целью полевых исследований было сравнение эффективности растворов борной кислоты, боратного комплекса на основе ЭДДЯК (этилендиаминдиантарной кислоты) на разных фонах питания растений на свойства дерново-подзолистой почвы и урожайность корнеплодов.

Исследования проводились в 2021 году на экспериментальном участке кафедры агрохимии и земледелия Тверской ГСХА. Общая площадь участка – 300 м², площадь одной делянки – 3 м². Повторность опыта четырехкратная, расположение делянок – рендомизированное. В качестве опытных культур возделывались морковь сорта Нандрин и свекла столовая сорта Бордо. Схема опыта включала варианты с обработкой растений растворами хелатированного бора (В-ЭДДЯК) и взятых для сравнения растворов борной кислоты (Н₃ВО₃) и комплексона ЭДДЯК (этилендиаминдиантарной кислоты) по сравнению с контролем (Н₂О_{dest}). В качестве удобрений использовался агрогумат в дозах 1,5; 3 или 6 т/га. Растения дважды опрыскивали испытуемыми растворами с концентрацией 1,5 · 10⁻³ моль/л в объеме 100 мл/м².

Применение растворов биологически активных соединений как на неудобренном, так и на удобренном фонах питания растений, позволяет увеличить количество подвижных форм азота, фосфора и калия в почве по сравнению с контролем во все периоды определений (в среднем на 8 – 27%). Содержание подвижных форм элементов питания при использовании комплексоната бора (В-ЭДДЯК) на минеральном фоне незначительно уступало значениям других вариантов (в среднем на 2–4%), но позволило получить больший урожай корнеплодов. По отношению к контролю опрыскивание растений раствором боросодержащего хелата на неудобренном фоне позволяет увеличивать урожайность моркови на 17,5% и на 19,5% столовой свеклы, а совместное применение минеральных удобрений и раствора В-ЭДДЯК – на 46 и 49% соответственно. Кроме того, в корнеплодах увеличилось содержание витамина С. Наибольшим содержанием аскорбиновой кислоты в корнеплодах отличался вариант с обработкой борной кислотой на удобренном фоне (по моркови – 26 мг/100 г, по свекле – 24 мг/100 г), а наименьшим – вариант с использованием ЭДДЯК (22 и 19 мг/100 г соответственно).

УДК: 577.1:543.422.27

Адамян Анна Нориковна

ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ В ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОМ РАСТВОРЕ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ВИДИМОГО И УФ ИЗЛУЧЕНИЯ

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

Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

В последние годы интерес к процессам самоорганизации и гелеобразования, в которых участвуют малые молекулы, заметно усиливается. При сливании водных растворов L-цистеина и соли серебра в результате самоорганизации образуются супрамолекулы из молекул меркаптида серебра и формируется цистеин-серебряный раствор (ЦСР). Особый интерес представляет выяснение вопроса о том, как влияет видимое и УФ излучение на процесс самоорганизации в ЦСР, полученном с использованием различных солей серебра (нитрата, ацетата и нитрита серебра), что и являлось целью настоящей работы.

С помощью методов УФ спектроскопии, динамического светорассеяния (ДСР), электронной сканирующей микроскопии и элементного анализа установлено, что под действием видимого и УФ облучения в ЦСР происходит разрушение супрамолекулярных цепочек и переход ионной формы серебра в металлическую с образованием наночастиц серебра (НЧ_{Ag}), причем с ростом энергии облучения этот процесс происходил быстрее (видимое \Rightarrow УФ облучение). В УФ спектрах при этом наблюдается практически полное исчезновение полос поглощения 314 и 394 нм, и появление новых полос 405 и 460 нм, которые обусловлены плазмонным резонансом свободных электронов на поверхности образующихся НЧ_{Ag} различного размера. При длительном УФ облучении раствора происходило его помутнение, а затем выпадение коричневого осадка, состоящего из НЧ_{Ag} . Элементный анализ показал, что НЧ_{Ag} покрыты короной из молекул меркаптида серебра. Установлено, что более fotocувствительным к воздействию света является ЦСР с нитритом серебра. Анализ размеров НЧ_{Ag} с помощью метода ДСР в растворах, облученных в течение 1 часа, показал образование частиц двух типов со средним размером 25 и 60 нм, а при более длительном облучении – частиц со средним размером 40, 300 и 4000 нм. Установлено, что размер и стабильность НЧ_{Ag} зависят от величины pH. Метод синтеза НЧ_{Ag} под действием облучения может быть широко использован в биомедицинских целях.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №20-33-90096) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.

УДК 543.55

Алябина Наталья Васильевна

СПОСОБ КОЛИЧЕСТВЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ АЛЛАНТОИНА В ДЕЗИНФИЦИРУЮЩЕМ СРЕДСТВЕ В ПРИСУТСТВИИ МОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ

Научный руководитель: Феофанова М.А.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Аллантоин - производное аминокислоты аланин. Образуется при окислении мочевой кислоты. Обладает антиоксидантными, антимутагенными свойствами [1].

Известен способ количественного определения аллантоина с фенилгидразином. Недостатком указанного способа является то, что фенилгидразин является сильным ядом. [2]

Известен способ количественного определения аллантоина с использованием метода высокоэффективной жидкостной хроматографии. Недостатком указанного способа является длительность пробоподготовки и большое количество реактивов. [3]

Техническим результатом изобретения является разработка экспрессного, точного, экономически целесообразного способа методом потенциометрического титрования с платиновым электродом, позволяющего производить количественную оценку содержания аллантоина в дезинфицирующих средствах в присутствии молочной кислоты.

Сущность метода

Массу для испытания растворяют в воде и титруют потенциометрически раствором гидроксида натрия при использовании платинового и хлорсеребряного электродов. По окончании испытаний строили интегральную кривую титрования в координатах $E - V$ по экспериментальным точкам. Далее для точного нахождения точки эквивалентности являлось построение дифференциальной кривой в координатах $\Delta E/\Delta V - V$, которая при V_t э имеет острый максимум.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Международный научно-исследовательский журнал. Екатеринбург. - 2015. - №9 (40). Часть 4. - С. 83-85.
2. Способ количественного спектрофотометрического определения таурина и аллантоина при совместном присутствии в лекарственной форме гель [Текст]: пат. 2 652 355 Рос. Федерация: МПК G01N 33/15, G01N 21/25.
3. Способ получения аллантоина [Текст]: пат. 2 484 093 Рос. Федерация: МПК C07D 473/04.

УДК 537.62

Аннагелдиев Магсат Аннагелди оглы

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И ДОМЕННАЯ СТРУКТУРА КВАЗИБИНАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ $YCo_{5-x}Cu_x$

Руководитель: Дегтева О.Б.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Механизмом формирования высококоэрцитивного состояния в сплавах $R(Co, Cu)_5$ является задержка смещения доменных границ на дефектах и микронеоднородностях, образующихся в результате спинодального распада [1-2]. Структурные неоднородности представляют собой микроразмерные области, обогащенные и обедненные медью относительно среднего состава сплава. Размеры этих областей сопоставимы по величине с эффективной шириной доменной стенки и составляют несколько сотен ангстрем. Вариации концентрации меди приводят к локальным изменениям обменного параметра и констант магнитокристаллической анизотропии, следовательно, и к появлению значительных градиентов плотности энергии доменных границ. Выявить структурные неоднородности и оценить их размер невозможно с помощью рентгеновского микроанализа, так как метод позволяет определить химический состав на участках площадью не более $1\mu m^2$.

Проведены комплексные исследования микроструктуры, магнитных свойств и доменной структуры серии образцов сплавов $YCo_{5-x}Cu_x$ со структурой $CaCu_5$ при изменении концентрации меди в интервале $x=0-3,0$. Исследования микроструктуры и количественный анализ фазового состава образцов выполнялись на растровом электронном микроскопе (РЭМ) JEOL JSM-6610LV (Япония). Наблюдение и фотосъемка микроструктуры и доменной структуры осуществлялась на микроскопе NEOPHOT-30. Методом вибрационного магнитометра измерены кривые намагничивания и перемагничивания, температурные зависимости намагниченности насыщения, коэрцитивной силы в интервале температур 300 -1000 К для образцов всех составов. Получены зависимости коэрцитивной силы, температуры Кюри, поля анизотропии от концентрации меди при комнатной температуре. Обсуждены корреляции особенностей магнитных характеристик с микроструктурой сплавов $YCo_{5-x}Cu_x$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Chuang, Y.C.; Wu, C.H.; Chang, Y.C. Structure and magnetic properties of $Y(Co_{1-x}M_x)_5$ compounds. *J. LessCommon Met.* **1982**, 84, 201–213.
2. Téllez-Blanco, J.C.; Grössinger, R.; Sato Turtelli, R.; Estévez-Rams, E. Magnetic and Structural Properties of $YCo_{5-x}Cu_x$. *IEEE Trans. Magn.* **2000**, 36, 3333–3335.

УДК 547.631.1:544.478-03

Арефьев Александр Алексеевич

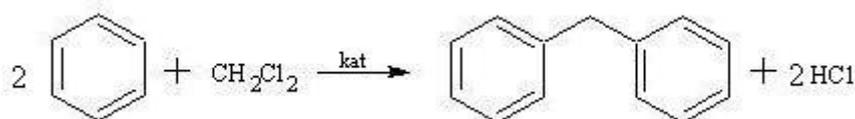
ИЗУЧЕНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ В АЛКИЛИРОВАНИИ БЕНЗОЛА ДИХЛОРМЕТАНОМ

Руководитель: Журавлев О.Е.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Ионные жидкости являются эффективными катализаторами многих процессов. Важное промышленное значение имеют реакции алкилирования ароматических соединений. В данных процессах ионные жидкости проявляющие кислотность по Льюису способны выступить в качестве замены классическим катализаторам.

Целью данной работы было сравнить каталитическую активность ионных жидкостей с классическими катализаторами – кислотами Льюиса. Модельной реакцией для изучения каталитической активности была выбрана реакция алкилирования бензола дихлорметаном:



Реакция проводилась при 65°C, реагенты были взяты в эквимольном соотношении и в соотношении 8:1. В качестве катализаторов использовались две ионные жидкости и классические кислоты Льюиса. Во всех случаях количество катализатора было постоянным и равнялось $8,01 \cdot 10^{-3}$ моль. Результаты представлены в таблице.

Таблица

Выход целевого продукта в зависимости от катализаторов и соотношения реагентов

Соотношение бензол:дихлорметан							
2:1				8:1			
Катализатор \ Время, ч	1,5	3	4,5	Катализатор \ Время, с	1,5	3	4,5
m (дифенилметан), г				m (дифенилметан), г			
AlCl ₃	2,691	1,945	1,945	AlCl ₃	1,456	1,5	1,538
FeCl ₃	0	0	0	Et ₃ NHCl·2AlCl ₃	0,611	0,819	1,104
Et ₃ NHCl·2FeCl ₃	0	0	0				
Et ₃ NHCl·2AlCl ₃	1,713	2,533	1,911				

Так же были рассчитаны конверсии бензола за изученные промежутки времени, построены кинетические кривые, установлено, что реакции имеют наблюдаемый первый порядок.

УДК: 547

Арзамасова Анастасия Юрьевна

ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ОРГАНИЧЕСКИХ ФОРСФАТОВ В КАЧЕСТВЕ ОГНЕЗАЩИТНЫХ ДОБАВОК

Руководитель: Веролайн Н.В.

Тверской государственный университет
Кафедра органической и биоорганической химии

Органические фосфаты являются сложными эфирами фосфорной кислоты и спиртов, этоксиатов спиртов, этоксиатов алкилфенолов эфиров этоксилированных аминов.

Отличительной особенностью фосфатов является их высокая огнестойкость. Температура воспламенения многих фосфатов выше 600°C , они медленно горят в пламени, не поддерживая горение и не распространяя пламя. Фосфаты обладают достаточной термической и окислительной стабильностью, высокой смазочной способностью, хорошими вязкостно-температурными свойствами.

При изучении методов синтеза органических фосфатов выяснили, что наиболее доступным лабораторным методом получения является синтез на основе одно- или двухосновных спиртов и оксида фосфора P_2O_5 .

Данный метод мы использовали в работе. В качестве первого компонента взяли 1,4-бутандиол (3 моль) и провели реакцию с безводным P_2O_5 (2 моль) при температуре 45°C и выдержали в течение 4-х часов. Для подтверждения огнезащитных свойств нанесли полученные вещества на легковоспламеняющийся предмет, на лист бумаги. Перед началом эксперимента нагревали небольшое количество вещества и затем нанесли на воспламеняющуюся поверхность. Полученные фосфорорганические вещества представляют собой однокомпонентный продукт, отверждающийся при нагревании, который обеспечивает защиту от огня воспламеняющегося субстрата при нанесении их на указанный субстрат.



Рис.1. Результат исследования органических фосфатов

УДК 54.056, 577.15, 577.29

Базулева Виктория Александровна

ИЗУЧЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ БЕЛКОВЫХ ЧАСТИЦ ИЗ ФАСОЛИ

Руководитель: Прутенская Е.А.

Тверской государственный технический университет, г. Тверь
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

В данной работе проводились физико-химические исследования белковых частиц, полученных из фасоли. Использовали различные методики выделения и концентрирования: фильтрование, центрифугирование, диализ, ультразвук. Экстракция в ультразвуковом поле увеличила выход белковых веществ. Также ультразвук способствовал разрушению крахмальных соединений до олигосахаридных остатков, тем самым давая возможность использовать крахмальный жмых в дальнейшей переработке. Было выяснено, что при обработке ультразвуком изменяется размер белковых молекул с 620 нм до 380 нм, что приводит к увеличению ингибиторной активности по отношению к панкреатической амилазе с 5 ед/г до 25 ед/г. Также были исследованы колебательные спектры белковых молекул из фасоли, спектры регистрировались при комнатных условиях.

Получая белковые вещества с использованием ультразвука и без него, мы выяснили, что присутствует карбоксильный анион ($1590 - 1600 \text{ см}^{-1}$) и в зависимости от обработки на него приходят либо ионы Na^+ (без ультразвука), либо гидрофосфатные группировки Р-О-Н в области $\sim 1050 \text{ см}^{-1}$ (при обработке ультразвуком). Больше свободных аминокислот образуется при ультразвуке, то есть появляются группы NH_3 ($\sim 3280 \text{ см}^{-1}$), а также наблюдалось увеличение количества метильных групп CH_3 ($\sim 2900 \text{ см}^{-1}$).

Проведя термогравиметрический анализ было выяснено, что изменение массы образцов, полученных в ультразвуковом поле и без него изменяются практически одинаково при температурах $150-200^\circ\text{C}$, 240°C . Это может свидетельствовать о чувствительности в области высоких температур. При 380°C образец, полученный буферной экстракцией, потерял 16% массы, образец, полученный в УЗ-поле не изменился. Возможно, произошли последовательное отщепление аминокислотных групп и агрегация протеиновых частиц. Далее фазовый переход наблюдался при 500°C , где образцы потеряли 20-21% (полученные ультразвуком) и 4,8% (полученные без ультразвука). Это изменение может говорить об удалении липидных фракций из общей массы белка.

УДК: 541.49:615.33

Баранник Александр Андреевич

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ НИТРАТА СЕРЕБРА НА ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЕ В L-ЦИСТЕИН-КИ ВОДНЫХ СИСТЕМАХ

Руководитель: Хижняк С.Д.

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Гидрогели на основе низкомолекулярных соединений (аминокислот) привлекают повышенное внимание исследователей как перспективные материалы для биомедицинского применения. Гелеобразование в таких системах может быть инициировано введением электролита, изменением pH, температуры, облучением и др. Целью данной работы является изучение влияния концентрации нитрата серебра на гелеобразование в водных системах аминокислоты L-цистеин (L-Cys) и иодида калия.

Образцы для исследования были получены одностадийным методом – путем смешения водных растворов всех компонентов в определенной последовательности. Соотношение молярных концентраций Ag^+/Cys изменяли в интервале 1,5–2,0, концентрация L-цистеина в гель-образцах составляла 3,0 мМ, при этом концентрация KI равна 0,75 мМ.

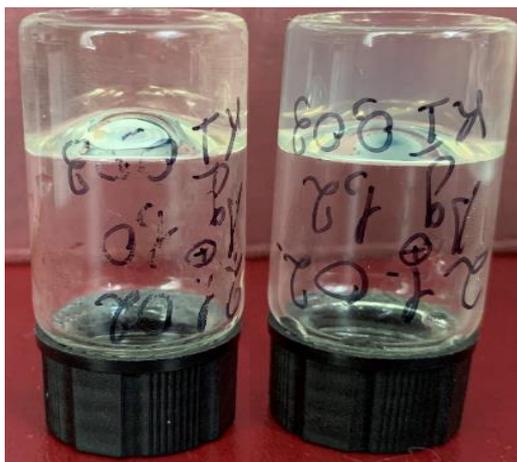


Рис.:

L-Cys- $AgNO_3$ -KI Гидрогели с
соотношением Ag^+/Cys : 1,7 / 2,0
(слева направо)

В результате исследований было установлено, что вязкость гидрогелей и их стабильность во времени определяется содержанием $AgNO_3$. Исследование методом ДСР показало, что в образцах регистрируются агрегаты, гидро-динамический радиус которых зависит от концентрации нитрата серебра. Согласно данным УФ спектроскопии в спектрах образцов наблюдается поглощение в области ~343-363 и ~400-406 нм, что может быть связано с формированием кластерных цепочек и наночастиц серебра (НЧС). Образование НЧС в гидрогелях

подтверждается результатами просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии.

Данная работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии центра коллективного пользования ТвГУ.

УДК: 678.555

Баранова Анна Евгеньевна

ВЛИЯНИЕ РАСТВОРОВ АГАРА ИЗ КРАСНЫХ МОРСКИХ ВОДОРОСЛЕЙ НА СВОЙСТВА ПОВЕРХНОСТИ ТКАНИ, КОЖИ И БУМАГИ

Руководитель: Осовская И.И.

Санкт-Петербургский государственный университет
промышленных технологий и дизайна
Высшая школа технологии и энергетики, г. Санкт-Петербург
Кафедра физической и коллоидной химии

Широкое применение агара обусловлено особыми гелеобразующими свойствами, которые отсутствуют в других фикоколлоидах: камеди или желатине. Эти свойства позволяют успешно использовать агар в пищевой, медицинской и микробиологической промышленности [1]. Целью данной работы является исследование влияния раствора агар-агара из красных морских водорослей на свойства тканей, кожи и бумаги. В ранее опубликованной работе [2] изучены основные физико-химические свойства агара (набухание и вязкость в воде в широком диапазоне рН и температур). Пленкообразующая способность позволяет использовать его в качестве покрытия для придания новых свойств волокнистым и бумажным материалам.

В качестве образцов использовали искусственную кожу следующего состава: 15% полиэфирное волокно, 60% полиуретан и 25% хлопок, лист типографской бумаги и сукно ткани составом 70% шерсть и 30% полиэстер; покрывали свежеприготовленным водным раствором 1%-го агара. Покрытые раствором образцы сушились на воздухе в течение 24 часов при комнатной температуре.

Установлено улучшение свойств исследуемых образцов: снижение сминаемости ткани (визуально), проявление рисунка кожи и улучшение блеска ткани - 77% (блескомер ФБ-2). Влияние покрытия бумаги 1%-ым раствором агара улучшают клеящие свойства бумаги с бумагой, бумаги с картоном; выдерживают испытания на расслаивание.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. ARMISÉN.R. (1991) «Agar and Agarose biotechnological applications». Hydrobiology, 221; pp. 159-166.
2. Баранова А.Е., Осовская И.И. Физико-химические свойства агара из красных водорослей. Новые полимерные композиционные материалы. Микитаевские чтения [Текст]: Материалы XVII Международной научно-практической конференции. – Нальчик: Издательство «Принт Центр», 2021. – 280 с. – С.17.

УДК: 691.175

Бахвалова Елена Сергеевна

ОДНОСТАДИЙНЫЙ СИНТЕЗ ВЫСОКОПОРИСТЫХ АРОМАТИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРОВ – ПЕРСПЕКТИВНЫХ НОСИТЕЛЕЙ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Руководители: Быков А.В., Никошвили Л.Ж.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Региональный технологический центр

Создание и изучение высокопористых ароматических полимеров – общемировая тенденция в области каталитического дизайна [1]. Поиск новых активных и стабильных полимерных катализаторов особенно актуален для процессов кросс-сочетания, широко применяющихся для получения фармацевтических препаратов и других сложных органических соединений. Данная работа посвящена разработке одностадийного синтеза высокопористых полимерных материалов, являющихся эффективными инструментами для стабилизации каталитически активных форм палладия. В основе синтеза ароматических полимеров лежит применение метилаля в качестве сшивающего агента, а также безводного хлорида железа в качестве катализатора сшивания. Варьирование типа мономеров и их соотношения позволяет контролировать пористость полученного полимерного материала, что в свою очередь влияет на морфологию и распределение каталитически активной фазы.

Было синтезировано несколько сшитых ароматических полимеров, а также палладий содержащих (порядка 1 мас.% Pd) катализаторов на их основе. Тестирование полученных образцов каталитических систем проводилось в модельной реакции кросс-сочетания Сузуки между 4-броманизолом и фенилбороновой кислотой. Было показано, что в мягких условиях реакции (температура 60°C, растворитель – смесь этанол-вода, атмосфера – воздух) конверсия 4-броманизола достигает значений более 95% за время реакции менее 60 мин с высокой селективностью по целевому продукту (4-метоксибифенилу).

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда
(проект № 20-19-00386).*

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Tan L. Hypercrosslinked porous polymer materials: design, synthesis, and applications Chem. Soc. Rev., 2017, 46, 3322-3356.

УДК 631.81:633.31

Башкирова Валерия Александровна

ВЛИЯНИЕ ФОНА МИНЕРАЛЬНОГО ПИТАНИЯ НА ПРОДУКТИВНОСТЬ ЛЮЦЕРНЫ ИЗМЕНЧИВОЙ

Руководитель: Королева Ю.С.

ФГБОУ ВО Тверская ГСХА, г. Тверь

Кафедра растениеводства и технологий переработки льна

Люцерна изменчивая используется в кормовых целях в зеленом виде или для заготовки кормов. Как и все многолетние травы она хорошо отзывается на внесение удобрений и некорневые подкормки.

Исследования проводились в Тверской ГСХА с целью изучения влияния фонов минерального питания и биологически активных веществ на продуктивность люцерны изменчивой. Объектом исследований являлся сорт Вега 87. В опытах соблюдали рекомендованную технологию возделывания многолетних трав при разбросном способе посева. Повторность 4-кратная. Площадь делянки 15 м². Размещение вариантов – рендомизированное.

Таблица 1 – Урожайность люцерны изменчивой, ц/га

Фон минерального питания	Препарат	Урожайность, ц/га
Без удобрений (контроль)	Без подкормки (0)	100
	Гумат +7	110
	Акварин	115
В среднем по фону		108
НРК на урожайность 3 т корм. ед.	Без подкормки (0)	120
	Гумат +7	126
	Акварин	131
В среднем по фону		126
НРК на урожайность 6 т корм. ед.	Без подкормки (0)	135
	Гумат +7	138
	Акварин	140
В среднем по фону		138

Максимальная по опыту урожайность зеленой массы составила 140 ц/га при внесении НРК на 6 т корм. ед. с использованием внекорневой подкормки акварином. Минимальная урожайность отмечена на контроле– 100 ц/га. При внесении НРК на урожайность 3 т корм. ед. урожайность люцерны изменчивой составила 126 ц/га.

Таким образом, в условиях вегетационного периода 2021 года в первый год жизни люцерна изменчивая не сформировала запрограммированные уровни урожайности на всех фонах минерального питания.

УДК: 537.62

Белявский Михаил Андреевич

СКАЧКООБРАЗНОЕ ИЗМЕНЕНИЕ НАМАГНИЧЕННОСТИ НА ПОВЕРХНОСТИ ОБРАЗЦА СОЕДИНЕНИЯ $GdCo_4Cu$

Руководитель: Кузнецова Ю.В.

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

В работах [1-3] исследовано явление магнитного последствия серии образцов квазибинарных соединений $GdCo_{5-x}Cu_x$ после гомогенизирующих отжигов. Было обнаружено, что по мере увеличения содержания меди время релаксации увеличивается и эффект магнитного последствия проявляется более ярко, в отличие от соединения с $x=1$, где релаксационные процессы происходят скачкообразно.

Магнитная доменная структура (ДС) является важным индикатором магнитного и структурного состояния магнитотвердых материалов. В работе для исследований были отобраны образцы квазибинарного соединения $GdCo_4Cu$ после гомогенизирующего отжига 1 час при $750^\circ C$. Для образца удалось зафиксировать скачкообразное изменение намагниченности, время выдержки в постоянном магнитном поле близком к коэрцитивной силе составило 20, 10 и 5 секунд.

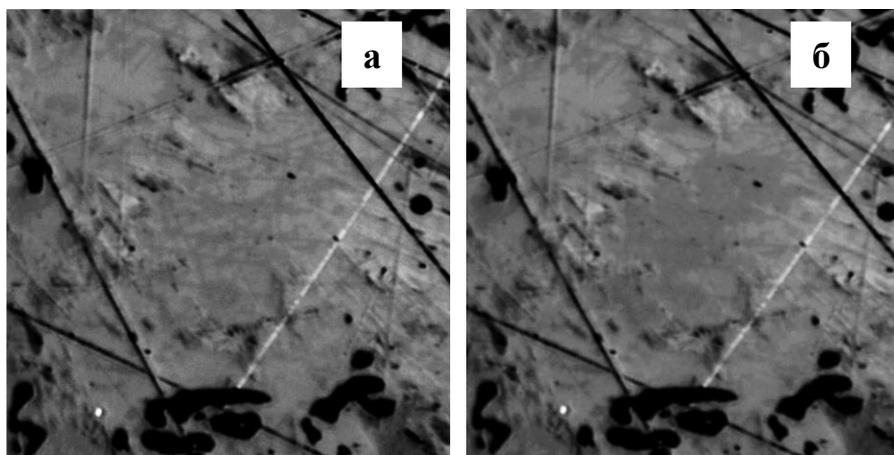


Рис.1 Микрофотографии доменной структуры поверхности образца $GdCo_4Cu$ (а), в поле близком к коэрцитивной силе после выдержки в течение 20 секунд (б).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Ермоленко А.С., Королев А.В., Рожда А.Ф. Механизм процессов перемангничивания квазибинарных редкоземельных соединений типа $R(Co_{1-x}Cu_x)_5$ // ФММ. 1976. Т.42. Вып.3. С.518–526.
2. Розентфельд Е.В., Ирхин Ю.П. О собственной коэрцитивной силе двухподрешеточных магнетиков//Физика твер. тела.1976.Т.18,№2,С.367-376.
3. Кузнецова Ю.В. Магнитные релаксационные процессы в редкоземельных интерметаллидах $R(Co,M)_5$ и $R-Zr-Co-Cu-Fe$ / Ю.В.

УДК 543:615.2.3

Биткова Виктория Викторовна

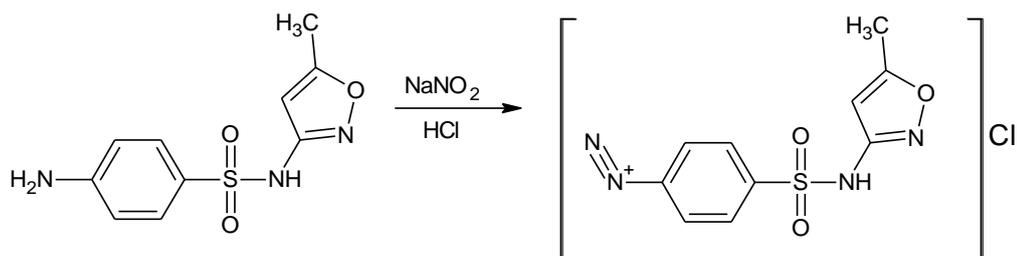
НИТРИТОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СУЛЬФАМЕТОКСАЗОЛА В ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТАХ

Руководитель: Баранова Н.В.

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», г. Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

Методом нитритометрии было определено количественное содержание сульфаметоксазола в лекарственных препаратах ко-тримаксазол и бисептол.

Для нитритометрического определения сульфаметоксазола точную навеску 0,20 г исследуемого препарата растворяли в смеси 10 мл воды и 10 мл хлористоводородной кислоты с концентрацией 8,3 %. Добавили дистиллированную воду до общего объема 80 мл, затем 1 г калия бромид и при постоянном перемешивании титровали 0,1 М раствором нитрита натрия [1]. Точку эквивалентности определяли по переходу окраски индикатора тропеолина ОО от малиновой к жёлтой. Реакция протекала по уравнению:



Результаты количественного содержания сульфаметоксазола в исследуемых лекарственных препаратах представлены в таблице 1. Данные значения получены из расчёта, что на 1 мл 0,1018н раствора NaNO_2 приходится 25,79 мг сульфаметоксазола.

Таблица 1.:

Результаты нитритометрического определения сульфаметоксазола

Бисептол АО «Адамед Фарма» (г.Пабянице, Польша)		Ко-тримаксазол ОАО "Фармстандарт- Лексредства" г. Курск, Россия)	
$m_{\text{теор}}, \text{Г}$	$m_{\text{пр}}, \text{Г}$	$m_{\text{теор}}, \text{Г}$	$m_{\text{пр}}, \text{Г}$
0,1181	0,1212	0,1356	0,1408

Проведенный анализ показывает соответствие содержания определяемого компонента заявленному и говорит о подлинности данных препаратов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Государственная фармакопея Российской Федерации. XIII изд. – Т. 1-3. – М.: 2015.

УДК: 541.49:615.33

Богаченков Никита Андреевич

ПРОЦЕСС МИЦЕЛООБРАЗОВАНИЯ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ КАТИОННЫХ И АНИОННЫХ ПАВ

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

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Медицинские возможности применения поверхностно-активных веществ (ПАВ) обусловлены их внедрением, как обязательных компонентов в современных препаратах и технологических процессах. Адресная доставка лекарств позволяет обеспечить преимущественное распределение вещества – терапевтического агента в том или ином органе. Решение проблем и развитие медицины с помощью добавления ПАВ в лекарства распространено и актуально. Целью данной работы являлось изучение процесса мицеллообразования в катионных и анионных ПАВ.

Для эксперимента были выбраны: Образец №1 – анионный ПАВ – четвертично аммониевые соединения (ЧАС) $C_9H_{19}Br$; Образец №2 – катионный ПАВ – лаурилсульфат натрия $C_{12}H_{25}SO_4Na$, $CH_3(CH_2)_{11}OSO_3Na$. Значения концентрации в водных растворах ПАВ варьировались в диапазоне: 1 образец – от $1 \cdot 10^{-2}$ моль/л до $0,0078125 \cdot 10^{-2}$ моль/л; 2 образец – от $0,025 \cdot 10^{-2}$ моль/л до $0,00078125 \cdot 10^{-2}$ моль/л. Для определения критической концентрации мицеллообразования (ККМ) использовался кондуктометрический метод. Измерение значений электропроводности осуществляли на кондуктометре Mettler Toledo Seven Go Pro.

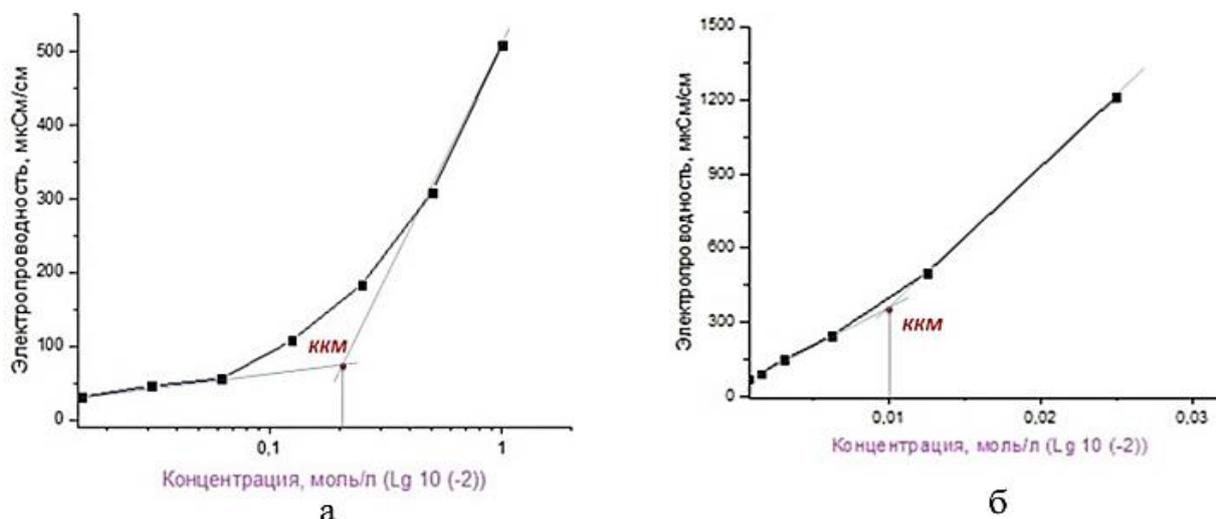


Рис. Зависимость электропроводности от концентрации 1 образец - а и 2 образец - б.

На Рис. представлены концентрационные зависимости электропроводности для двух типов ПАВ. Значение ККМ первого образца $\approx 0,2$, а второго образца $\approx 0,01$. Эти данные подтверждают наличие устойчивых мицелл в выбранных растворах. Разность значений ККМ между анионным и катионным ПАВ обусловлена тем, что вещества различно взаимодействуют с водой. Дальнейшая работа направлена на определение размеров и форм мицелл.

УДК: 544.132:544.169

Бойкова Софья Сергеевна

СРАВНЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ КОНФОРМЕРОВ АСПАРАГИНОВОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель: Русакова Н.П.

Тверской государственный университет
 Кафедра физической химии

Методом ВЗLYP получено распределение электронной плотности $\rho(r)$ двух конформеров *L*-стереоизомера аспарагиновой кислоты: I – в молекуле присутствует внутримолекулярное слабое взаимодействие (ВМСВ) – водородная связь N[⋯]H и II – ВМСВ нет (Рис.). С использованием «квантовой теории атомов в молекулах» [1] рассчитаны интегральные электронные характеристики (заряд $q(R)$, объем $V(R)$ и относительная энергия $\Delta E(R)$) групп COOH, CH, CH₂ и NH₂ (Таблица).

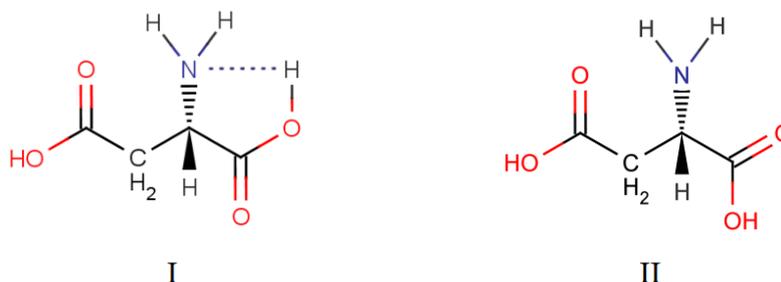


Рис.: Конформер аспарагиновой кислоты с внутримолекулярными водородными связями N[⋯]H – I, без слабых взаимодействий – II

Наиболее выгодным энергетически состоянием является конформер I, который обладает наименьшей полной электронной энергией (E_{total}). В структуре II параметр E_{total} выше на 9 кДж/моль.

Таблица.: Электронные характеристики групп* аспарагиновой кислоты.

	1COOH	CH ₂	CH	2COOH	NH ₂
$q(R)$, а.е.					
I	-0.114	0.108	0.424	-0.098	-0.320
II	-0.137	0.134	0.454	-0.161	-0.290
$\Delta E(R)$, кДж/моль					
I	20	0	0	0	0
II	-10	20	50	-80	50
$V(R)$, Å ³					
I	46.29	22.44	13.09	45.55	25.85
II	46.97	22.11	13.21	46.64	26.61

*Нумерация групп COOH по молекуле в порядке расположения слева направо

Наличие N[⋯]H в аспарагиновой кислоте I приводит к оттоку электронной плотности $\rho(r)$ с атома водорода 2COOH к азоту NH₂, что сопровождается самым малым $q(\text{NH}_2)$, $V(\text{NH}_2)$, $\Delta E(\text{NH}_2)$ (Таблица), высоким $q(2\text{COOH})$, малым $V(2\text{COOH})$, стабилизацией $\Delta E(2\text{COOH})$ среди I-II.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. М.: Мир. 2001. 528 с.

УДК: 537.9

Болденкова Мария Сергеевна

ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА, ИЗГОТОВЛЕННЫХ МЕТОДОМ ПОСЛОЙНОГО НАПЛАВЛЕНИЯ НИТИ

Руководитель: Солнышкин А.В.

Тверской государственный университет
Кафедра прикладной физики

Изучение пьезоэлектрической и электромеханической активности неоднородных полярных (в том числе сегнетоэлектрических) пленок является одним из важных направлений исследования гетерогенных структур [1]. Одним из оптимальных способов создания сегнетоэлектрических полимерных пленочных структур на основе поливинилиденфторида (PVDF) является метод послойного наплавления нити. Целью работы являлось исследование пьезоэлектрических и пьезоэлектрических свойств пленок PVDF, сформированных с использованием аддитивных технологий. Полученные образцы толщиной 20-30 мкм, были поляризованы электрическим полем коронного разряда. Измерение пьезоэлектрических характеристик проводились статическим методом на основе определения накапливаемого заряда в процессе механического воздействия на образец при прямом пьезоэффекте. Исследования пьезоэлектрических свойств выполнялись динамическим методом с использованием модулированного лазерного излучения. Результаты измерений пьезоэлектрического модуля d_{33} пленочных структур PVDF показали, что наибольшую электромеханическую активность имеют образцы, поляризованные при высоких температурах $T > 100^\circ\text{C}$, а именно $d_{33} = 20 \pm 2$ пКл \oplus Н $^{-1}$. Это свидетельствует о наибольшей остаточной поляризации в этих материалах по сравнению с пленками, поляризованными при меньших температурах. Исследования пьезоэлектрических свойств показали, что поляризованные образцы PVDF имеют значения пьезоэлектрического коэффициента $\ominus = (0,26 \pm 0,02) \oplus 10^{-4}$ Кл \oplus М $^{-2}$ К $^{-1}$ и показателя качества $\ominus/\Sigma = (3,3 \pm 0,1) \oplus 10^{-6}$ Кл \oplus М $^{-2}$ К $^{-1}$. Это значения являются близкими к величинам пьезоэлектрического коэффициента и пьезоэлектрического модуля для пленок PVDF, полученных методом кристаллизации из раствора или расплава с последующей ориентационной вытяжкой и приложением высоких электрических полей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Terekhova Yu.S. et al. // Modern Electronic Materials. 2021. V. 7. I. 1. P. 11-16.
Пкп

УДК 546.661

Бондарева Татьяна Дмитриевна

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ КОМПЛЕКСА ЕВРОПИЯ(III) С ХЛОРИНОМ Е6

Руководитель Алексеев В.Г.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

Комплекс европия(III) с хлорином е6 предложен в качестве фотосенсибилизатора для фотодинамической терапии онкологических заболеваний. Комплекс был изучен различными физико-химическими методами [1], однако структура его координационной сферы не была точно установлена. Целью данной работы было создание компьютерной модели комплекса для оценки координационных возможностей лиганда. Структура комплекса рассчитана методом DFT/PW6B95-D3/LACVP**++. Расчёт показал, что наиболее вероятным вариантом является координация лиганда через четыре атома азота порфиринового цикла и атом кислорода одной из карбоксилатных групп (рис.1).

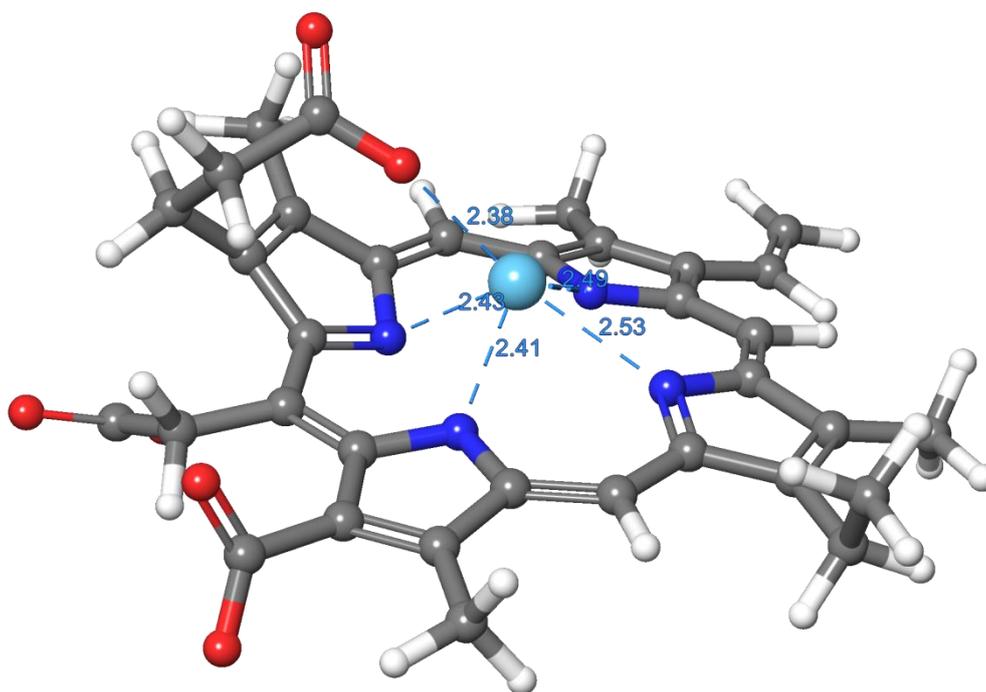


Рис.1. Изображение компьютерной модели комплекса Eu(III) с хлорином е6

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Стеблевская Н.И., Медкова М.А., Белобелецкая М.В. // Журнал неорганической химии. 2020. Т. 65. № 3. С. 327–333.

УДК 544.424.2

Будникова Екатерина Андреевна

СИНЕРГИЧЕСКОЕ ДЕЙСТВИЕ ГЛЮКОЗЫ В БИНАРНОЙ КОМПОЗИЦИИ С ГАЛЛОВОЙ КИСЛОТОЙ В РЕАКЦИЯХ РАДИКАЛЬНОГО ОКИСЛЕНИЯ

Руководители: Белая Н.И., Белый А.В.

Донецкий национальный университет, г. Донецк
Кафедра физической химии

В области исследования природных антиоксидантов особо актуальным является направление изучения синергизма в композициях биологически активных веществ, в частности, растительных фенолов как известных антиоксидантов с белками, фосфолипидами, сахарами.

Цель работы – изучение закономерностей окисления бинарной смеси галловой кислотой с глюкозой в реакции с гидразильным радикалом 2,2'-дифенил-1-пикрилгидразилом (DPPH^{*}) в неполярных средах (бензол, гексан) при T = 298±2 К методом фотоколориметрии.

Таблица.:

Величина синергического эффекта (SE) композиций галловой кислоты с глюкозой в реакции с DPPH^{*} в бензоле при T = 298±2 К

Состав бинарной композиции галловая кислота : глюкоза	SE, %
98 : 4	28,4
96 : 5	32,0
90 : 10	33,4
80 : 20	27,7
60 : 40	13,8
50 : 50	11,8
20 : 80	0

Установлено, что глюкоза по сравнению с галловой кислотой фактически не реагирует с радикалом, но при этом в определенной концентрации в смеси с кислотой способна усиливать ее антирадикальную активность (АРА), проявляя тем самым функции синергиста. Величину синергического эффекта (SE) оценивали по изменению АРА (времени полупревращения радикала DPPH^{*} на 50 %) смеси по сравнению с аддитивным действием галловой кислоты и глюкозы. Максимальное синергическое действие наблюдается при соотношении галловая кислота–глюкоза 90 : 10 %. При этом максимальный SE проявляется только в

области низких концентраций моносахарида и увеличивается от 33,4 % в бензоле до 51,8 % в гексане. Причиной синергизма являются межмолекулярные водородные комплексы галловой кислоты с глюкозой, которые более эффективно взаимодействуют с DPPH^{*}, чем исходные вещества. Их образование подтверждено методом ЯМР-спектроскопии в системе галловая кислота–глюкоза (10 : 1) в смеси CCl₄ : ДМСО-d₆ (90 об.% : 10 об.%) при T = 298 К.

УДК: 664.683.9

Бурштейн Аглая Львовна

ОСОБЕННОСТИ ТЕХНОЛОГИИ И ОФОРМЛЕНИЯ БЕНТО-ТОРТОВ

Руководитель: Брославская М.Н.

Тверской государственный университет
Кафедра Биохимии и биотехнологии

Бенто-торт – торт, рассчитанный на одного-двух человек. Бенто-торт удовлетворяет запросы современного потребителя [1]. Это: а) маленький размер, за счет которого бенто-торт удобен в транспортировке; б) потребитель не лишает себя атрибутов праздника, в случае соблюдения определенной диеты; в) однопорционный формат позволяет быстро съесть торт (его не придется хранить, а значит его употребят свежим; г) экологичность упаковки, которая прочна, функциональна и быстроразлагаема после выбрасывания; д) художественное оформление актуальное для многих поводов.

Технология производства бенто-торта схожа с технологией производства обычного торта [2]. Различие в размере: вместо тортов диаметром 18-20 см и весом в 1,5-2 кг, бенто-торты диаметром 10-15 см и весом 350-500 гр. Бенто-торты отличаются простотой украшения. При сборке бенто-тортов для начинки, выравнивания и декора используют один крем. Имея упрощенную технологию изготовления, бенто-торты соответствуют требованиям ОСТ 10-060-95 «Торты и пирожные. Технические условия».

Таблица 1.

Физико-химические показатели бенто-торта:

Наименование показателя	Для выпеченных полуфабрикатов и готовых изделий без отделки кремом после выпечки	Для отделочных полуфабрикатов	Соответствие
Массовая доля влаги, %	В соответствии с рецептурами с учетом допускаемых отклонений		Соответствует
Массовая доля общего сахара (по сахарозе) в пересчете на сухое вещество, %, не более	В соответствии с расчетным содержанием по рецептуре с допускаемыми отклонениями: минус 2,5	В соответствии с расчетным содержанием по рецептуре с допускаемыми отклонениями: минус 1,5	Соответствует

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. ОСТ 10-060-95 Торты и пирожные. Технические условия
2. Драгилев А.И. Основы кондитерского производства / Драгилев А.И., Маршалкин Г.А./ М.: ДеЛи Принт, 2005. - 532 с.

УДК

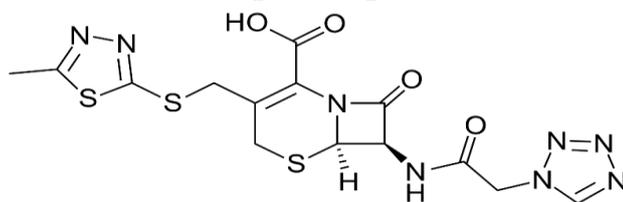
Варзар Анна Алексеевна

ИССЛЕДОВАНИЕ КИСЛОТНО-ОСНОВНЫХ РАВНОВЕСИЙ В РАСТВОРАХ ЦЕФАЗОЛИНА

Руководитель: Минина М.В.

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Цефазолин – цефалоспориновый антибиотик I поколения, обладающий широким спектром действия. Относится к антибиотикам кислотного типа. В настоящее время цефазолин широко используется в медицинской практике. В то же время продолжается изучение его взаимодействия с металлами, а также поиск новых экспрессных методов определения цефазолина в биологических жидкостях, продуктах питания. Поэтому исследование кислотно-основных свойств, а также уточнение констант протонирования является важной задачей.



Потенциометрическим методом исследовали кислотно-основные равновесия в водном растворе цефазолина. Полученные кривые титрования антибиотика 0,05 М раствором HNO_3 на фоне 1 М KNO_3 были обработаны в программе моделирования химических равновесий New DALSFEK. Модель равновесий включала самоионизацию воды и протонирование аниона Czl^- : $\text{H}^+ + \text{Czl}^- \leftrightarrow \text{HCzl}$

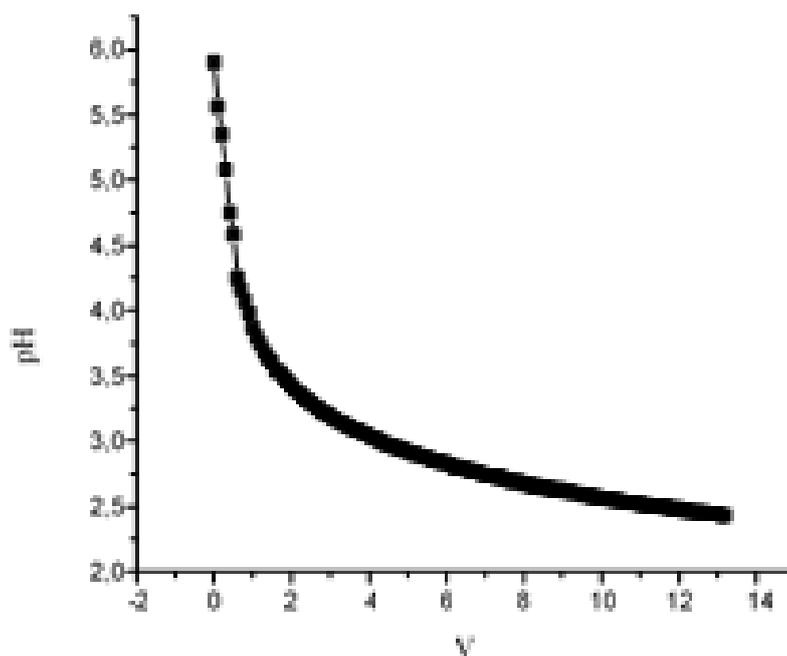


Рис.: Усредненная кривая титрования раствора цефазолина 0,05 М раствором HNO_3 на фоне 1 М KNO_3

По результатам расчета было получено уточненное значение константы протонирования аниона цефазолина: $pK_a=2,89$. Полученный результат хорошо согласуется с литературными данными.

УДК 537.632

Васильев Алексей Денисович

ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИИ НА МИКРОСТРУКТУРУ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА

Руководитель: Иванова А.И.

Тверской государственный университет
Кафедра прикладной физики

Сплавы Гейслера – перспективные функциональные материалы, обладающие уникальными свойствами: мартенситное превращение, ферромагнитный эффект памяти, магнитокалорический эффект [1].

В настоящей работе представлены результаты экспериментального исследования микроструктуры и магнитной доменной структуры поликристаллического сплава Гейслера системы Ni – Mn – Ga, подвергнутого деформационной обработке методом изотермическойковки. Эксперименты по выявлению структуры образца до и после деформации проведены методами оптической, сканирующей электронной и магнитно-силовой микроскопии (МСМ).

Полученные результаты свидетельствуют о наличии в исходном сплаве крупных зерен (70-150 мкм) с мартенситным рельефом, в деформированном состоянии возникает новая структура: вокруг крупных зерен в результате рекристаллизации, обусловленной деформацией, формируются мелкие зерна (5-10 мкм) (рис.1). Методом МСМ выявлены магнитные 180-градусные домены, непрерывные в пределах отдельных зерен, и пересекающие плоские параллельные друг другу границы мартенситных пластин.

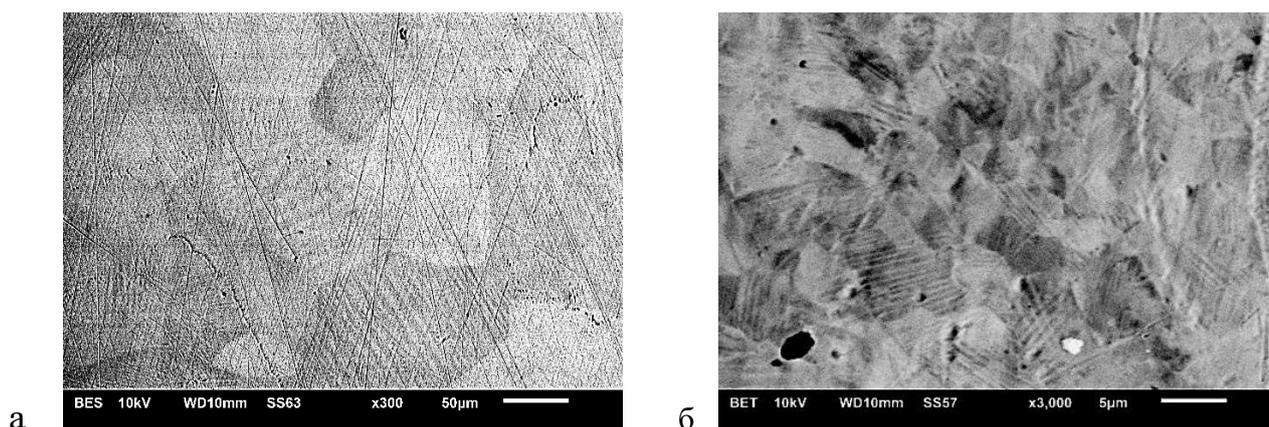


Рис.1 Микроструктура сплава до деформации (а), (х 300)
и после (б) (х 3000)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Гречишкин Р.М., Иванова А.И., Зигерт А.Д.. Магнитные свойства и доменная структура сплавов Гейслера: учеб пособие. Тверь: Твер.гос.ун-т. 2021. 92 с.

УДК: 54.052, 547.476.5

Васильева Дарья Владимировна

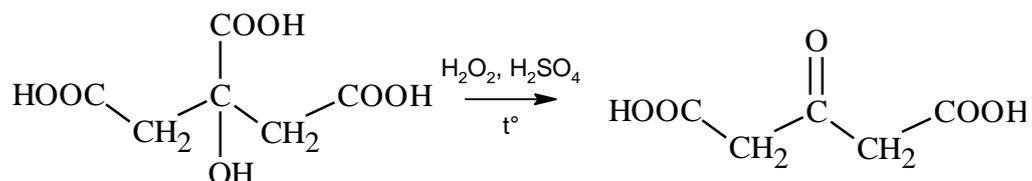
ПОЛУЧЕНИЕ АЦЕТОНИКАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель: Темникова С.А.

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Среди методов получения ацетондикарбоновой (β -кетоглутаровой) кислоты преобладает способ, основанный на окислении лимонной кислоты олеумом. Но в ходе реакции выделяется токсичный CO, а использование концентрированной серной кислоты сопровождается технологическим ущербом, возможны выделение SO₃, а также контакт с водой, приводящий к взрыву. Весь синтез осуществляется за 7–9 часов, при этом выход составляет 84–89% [1].

В данной работе был опробован новый способ получения β -кетоглутаровой кислоты окислением лимонной кислоты перекисью водорода в присутствии концентрированной серной кислоты в качестве катализатора по схеме:



Описанный метод предполагает сниженное влияние на окружающую среду, так как используемая концентрированная серная кислота берется в меньшем количестве. В качестве окислителя выступает перекись водорода, катализатором может служить не только 98%-ная серная кислота, но также фосфорная, соляная или смесь кислот, температурный режим варьируется от 50 до 100°C (в зависимости от соотношения реагентов), время синтеза составляет от 1 до 3 часов, при этом выход может достигать 97%, а чистота продукта – более 95%. Для выделения целевого продукта проводят отгонку воды в вакууме, чтобы предотвратить разложение кислоты. Была синтезирована ацетондикарбоновая кислота, идентификация проведена по температуре плавления. Полученная таким образом β -кетоглутаровая кислота пригодна для дальнейшего синтеза сложных эфиров [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Синтезы органических препаратов. Сб. 1. 1949. – М. – Ин. Лит. – 604 с.
2. Method for preparing 1,3-acetone dicarboxylic acid diester and an intermediate thereof by using citric acid to catalyze oxidization of hydrogen peroxide: pat. 103288629B PRC: IPC C07C51/373; C07C59/347; C07C67/08; C07C69/716 / Chen Yiwen, Chen Jingheng, Lin Sen, заявитель и патентообладатель Чунцинский ун-т почты и телекоммуникаций. – № 201310229871 заявл. 09.06.13, опубл. 11.09.13. – 5 с.

УДК 544.778.3

Ватаманюк Владимир Олегович

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ИК СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ПОРИСТЫХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Руководители: Пахомов П.М., Маркова А.И.

Тверской государственный университет, Тверь
Кафедра физической химии

В настоящее время пористые полимеры (пленки, мембраны, ксерогели и др.) широко используются в медицине, электронике, строительстве и других областях. Однако для изучения их строения и свойств часто используется методы, которые имеют множество недостатков – дорогое оборудование, обязательство повреждать образцы, работа с токсичными материалами (ртутная порометрия). Одним из примеров является оптическая и электронная микроскопия, требующая делать сколы и срезы на образцах, то есть подвергать деструкции, чтобы анализировать их объемную часть. Нами предлагается простой, доступный и эффективный спектроскопический метод, основанный на анализе упруго рассеянного света от частиц наполнителя или пор в матрице образца.

Целью данной работы является использование метода ИК спектроскопии для изучения морфологии пористых пленок полиэтилена (ПЭ), подвергнутых крейзингу [1].

В качестве образцов были использованы 6 пленок из ПЭ с разной степенью пористости, полученные методом крейзинга на кафедре высокомолекулярных соединений МГУ. Запись ИК спектров в режиме пропускания осуществляли на спектрометре «Vertex-70» фирмы Bruker. Общую пористость, а также средний размер пор и их распределение по размерам осуществляли в соответствии с методикой, разработанной ранее в лаборатории спектроскопии ЦКП ТвГУ [2]. В качестве контроля использовали метод сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Микроснимки поверхности образца получали с помощью микроскопа «JEOL JSM-6610LV» (Япония).

В ходе проведенных спектроскопических исследований оценена общая пористость образцов, средний размер пор и их распределение по размерам, что сложно осуществить любым другим методом. ИК спектроскопические данные хорошо согласуются с результатами метода СЭМ.

Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования ТвГУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Ярышева А.Ю., Багров Д.В., Рухля Е.Г. и др. // Высокомолек. Соед. Сер. А. 2012. Т. 54. №10. С. 1507-1515.
2. P. M. Pakhomov, M. N. Malanin, S. D. Khizhnyak. // Polymer Sci., 2005, V.47B, N 5-6, P. 194- 199.

УДК 541.49:581.1

Велмурадов Ашыр

ФОРМИРОВАНИЕ УРОЖАЙНОСТИ КАПУСТЫ БЕЛОКОЧАННОЙ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ХЕЛАТИРОВАННОЙ МЕДИ (II)

Руководитель: Шилова О.В.

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

С учетом дефицита меди в дерново-подзолистых почвах необходимо применять способы увеличения ее содержания, поскольку при недостатке меди снижается урожайность сельскохозяйственных культур и ухудшается качество растениеводческой продукции. Одним из эффективных приемов устранения дефицита элементов является использование микроэлементов в форме экологически безопасных хелатных комплексов с органическими лигандами – комплексонами. В связи с этим целью исследований стало изучение совместного действия удобрений и медьсодержащих соединений на свойства дерново-подзолистой почвы и урожайность капусты белокочанной. В почве опытного участка: $S_{\text{орг. вещ-ва}}$ – 2,0%, подвижных форм фосфора – 210 мг/кг почвы, калия – 110 мг/кг почвы; pH_{KCl} – 5,8. Общая площадь участка – 250 м², площадь одной делянки – 10 м². Повторность опыта трехкратная, расположение делянок – рендомизированное. Схема опыта включала: контроль (без удобрений и без опрыскивания растений), варианты с опрыскиванием растений растворами: сульфата меди (CuSO₄), ЭДДЯК, Cu-ЭДДЯК (комплексонатом меди) на разных фонах питания. Возделывали капусту позднеспелого сорта «Зимовка». Растения дважды опрыскивали испытуемыми растворами с концентрацией $2,0 \cdot 10^{-3}$ моль/л в объеме 100 мл/м². Применение агрогумата без исследуемых растворов позволило увеличить количество подвижных форм азота, фосфора и калия в почве по сравнению с остальными вариантами и контролем во все периоды определений (в среднем на 3–8%). Обработка растений растворами на разных фонах питания привела к изменениям количества фотосинтетических пигментов в листьях капусты. Максимальным суммарным количеством хлорофиллов *a* и *b* отличался вариант с Cu-ЭДДЯК на фоне агрогумата (128 мг/100 г листьев), а также с применением раствора сульфата меди на удобренном фоне – 90 мг/100 г листьев. Листья растений, обработанных Cu-ЭДДЯК на удобренном фоне, содержали больше каротиноидов по отношению к остальным вариантам на 0,6–2,5 мг/100 г листьев и на 4,5 мг/100 листьев по сравнению с контролем. Наибольшая урожайность и прибавка к контролю кочанов капусты по сравнению с контролем получены на варианте совместного применения медьсодержащего комплекса и агрогумата (5,4 кг/м² и 1,6 кг/м² соответственно). Максимальным содержанием аскорбиновой кислоты (46 мг/100 г кочанов) и прибавкой к контролю (30 мг/100 г кочанов) отличался вариант с агрогуматом и хелатированной медью.

УДК: 539.219.2 : 519.7

Вересов Сергей Александрович

СЦЕНАРИИ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ В ТЕРНАРНОМ НАНОСПЛАВЕ $Ti6Al4V$ ПРИ ОХЛАЖДЕНИИ

Руководитель: Сдобняков Н.Ю.

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

Известно, что структура наносплава $Ti6Al4V$ очень чувствительна к условиям охлаждения [1-3]. В развитие наших работ [1-3] мы продолжаем изучение возможных сценариев структурообразования (см. рис. 1 и 2). Установлено, что в обоих случаях имело место поверхностная сегрегация атомов Al ; степень упорядоченности конечной структуры в большей степени определяется скоростью охлаждения, чем тем температурой.

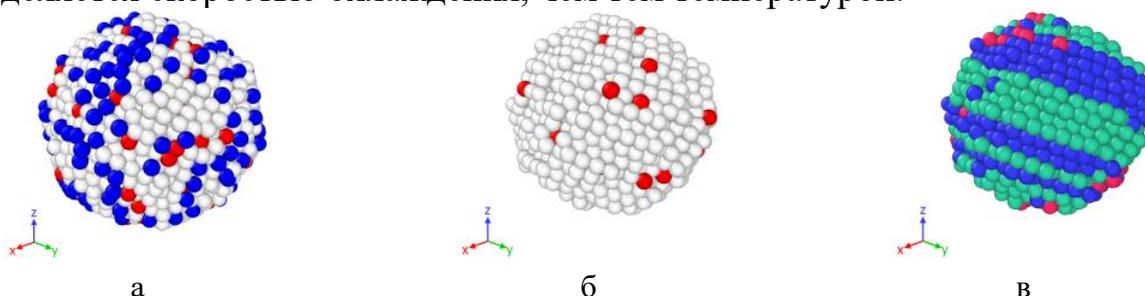


Рис. 1. Наночастица $Ti6Al4V$, полученная при охлаждении нанок капли до $T = 785$ К $dT / dt = 0,1$ ТК/с: а – оболочка наночастицы и б – ядро наночастицы, распределение атомов по химическим элементам (синий цвет – Al , белый цвет – Ti , красный цвет – V); в – ядро наночастицы, распределение атомов по типам кристаллического окружения (зелёный цвет – ГЦК, синий цвет – ОЦК, красный цвет – ГПУ, желтый цвет – ИК).

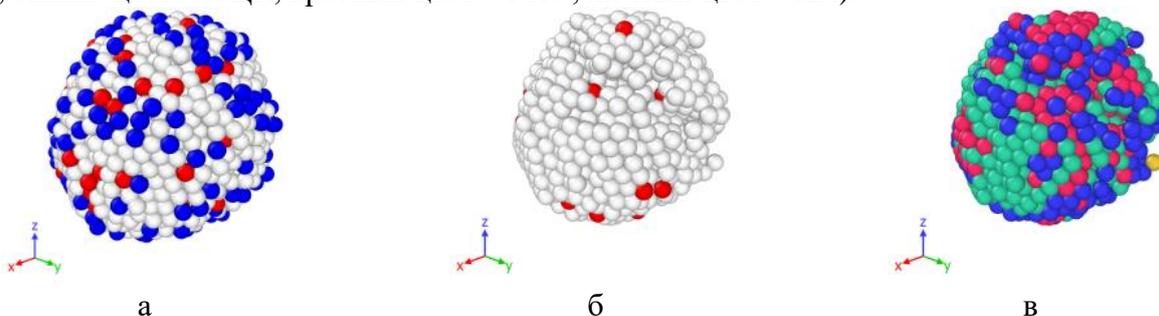


Рис. 2. Наночастица $Ti6Al4V$, полученная при охлаждении нанок капли до $T = 720$ К $dT / dt = 0,4$ ТК/с. Остальные обозначения совпадают с рис. 1.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Мясниченко В.С., Базулев А.Н., Ершов П.М. и др. // XII Международная научно-техническая конференция «Микро- и нанотехнологии в электронике»: материалы конференции. Нальчик: Изд-во КБГУ, 2021. С. 159-162.
2. Мясниченко В.С., Ершов П.М., Сдобняков Н.Ю. и др. // XI Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика»: сборник научных трудов. Великий Новгород: НовГУ, 2021. С. 180-181.
3. Sdobnyakov N.Yu., Samsonov V.M., Myasnichenko V.S. et al. // Journal of Physics: Conference Series. 2021. V. 2052. Art. № 012038. 4 p.

УДК 661.185.3

Веролайнен Виолетта Андреевна

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ АМФОТЕРНЫХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ НА ОСНОВЕ N,N-ДИМЕТИЛЭТАНОЛАМИНА

Руководитель: Темникова С.А.

Тверской государственный университет
Кафедра органической и биоорганической химии

Амфотерные поверхностно-активные вещества (ПАВ), отличаются мягким дерматологическим действием на кожные покровы, обладают высокой биоразлагаемостью, а также антимикробным действием [1]. Амфотерные ПАВ применяют в смесях для повышения эффективности и улучшения их свойств, например пенообразующей способности анионных поверхностно-активных веществ. Однако, ввиду трудностей методик производства их применение в различных областях крайне ограничено [2]. Целью данной работы является получение амфотерных поверхностно-активных веществ на основе N,N-диметилэтанолamina и исследование их коллоидно-химических свойств.

В работе синтез осуществляли в две стадии. Этерификацию N,N-диметилэтанолamina проводили декановой и додекановой кислотой при температуре 20°C. Полученные эфиры очищали перегонкой при давлении 10 мм. рт. ст. Далее проводили реакцию нуклеофильного замещения между полученными эфирами и монохлоруксусной кислотой.

Строение амфотерных ПАВ было подтверждено качественными реакциями на катион аммония и данными ИК-спектроскопии. ИК-спектры N-додеканоиноксиметил-N,N-диметиламмонийпропионата и N-деканоиноксиэтил-N,N-диметиламмонийпропионата содержат полосу валентных колебаний карбоксилат аниона равную 1560 см⁻¹.

Для полученных соединений были измерены удельная электропроводность, показатель преломления, поверхностное натяжение, определена эмульгирующая способность их водных растворов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Холмберг К., Йенссон Б., Кронберг Б., Линдман Б. Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных растворах/ Холмберг К.; под ред. Ямпольской Г.П. – М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2015. – 530 с.
2. Файнгольд С.И., Кууск А.Э., Кийк Х.Э. Химия анионных и амфолитных азотсодержащих поверхностно-активных веществ / Файнгольд С.И.; под. ред. Файнгольда С.И. – Таллин: «Валгус», 1984–289 с.

УДК: 661.1

Веселова Анна Владимировна

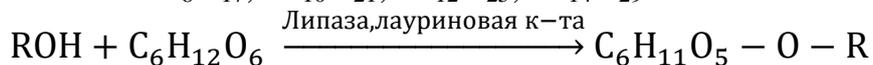
СИНТЕЗ АЛКИЛПОЛИГЛИКОЗИДОВ

Руководитель: Веролайнен Н.В.

Тверской государственный университет
Кафедра органической и биоорганической химии

Алкилгликозиды (АПГ) представляют собой неионогенные поверхностно-активные вещества, представляющие интерес для многих областей промышленности (косметика, продукты питания, моющие средства и т. д.). АПГ обладают хорошей межфазной активностью, способностью к эмульгированию, пенообразованию и смачиваемости.

АПГ получали в ходе реакции трансгликозилирования, катализируемой ферментной смесью (липаза и лауриновая кислота). В синтезе использовали спирты с радикалами $-C_8H_{17}$; $-C_{10}H_{21}$; $-C_{12}H_{25}$; $-C_{14}H_{29}$.



В трехгорлую колбу, объемом 250 мл, помещают 0,2 моль жирного спирта, смешанного с липазой, лауриновой кислотой и 0,1 моль глюкозы. Подсоединяют обратный холодильник и мешалку, процесс ведут в течение 48 часов при постоянном перемешивании, а температура составляет $50^\circ C$. По завершении процесса реакционной смеси дают отстояться 2-3 дня. После чего непрореагировавший спирт отделяют. Выход продуктов составил 50-55%.

Полученные соединения представляют собой желтоватые вязкие жидкости. Строение и состав полученных алкилполигликозидов были подтверждены данными ИК-спектроскопии.

Для синтезированных АПГ определены пенообразующая способность их водных растворов, критическая концентрация мицеллообразования, эмульгирующая способность. Также выявлено, что алкилполигликозиды обладают аномальной температурой помутнения (температура помутнения отсутствует), положительно влияют на пенообразующие свойства анионных поверхностно-активных веществ, позволяют значительно повысить высоту пены и стабилизировать ее.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Прохорова Г.В. Коллоидно-химические свойства смесей анионных ПАВ с алкилполигликозидами.: дис. ... на соискание ученой степени канд. хим. наук. - М., 2012. - 116 с.
2. AISHAN AHMAD; YEONG, S K; ROSNAH ISMAIL Synergistic effect between sodium lauryl sulphate and sodium lauryl ether sulphate with alkyl polyglycoside // Journal of Oil Palm Research. – 2007

УДК 537.632

Волков Данила Олегович

ИНТЕРФЕЙСНЫЙ МОДУЛЬ НА RASPBERRY PI

Руководитель: Макаров В.В.

Тверской государственной университет
Кафедра общей физики

Raspberry Pi (аппаратное обеспечение представлено на рис 1.а) – это одноплатный компьютер, размером с банковскую карту, на котором установлены микропроцессор, оперативная память, системы ввода-вывода, а также модули Wi-Fi, Bluetooth, с возможностью функционирования с датчиками, измерительной аппаратурой, другими компьютерами [1].

В настоящей работе был реализован и апробирован нижний уровень драйверов интерфейсов: GPIO, UART, SPI. На основе SPI реализован программный протокол обмена данными между Raspberry и модулем рефлектометра РД-мастер (внешний вид представлен на рис.1.б), установка и настройка необходимого для работы с интерфейсами GPIO, UART, SPI программного окружения.

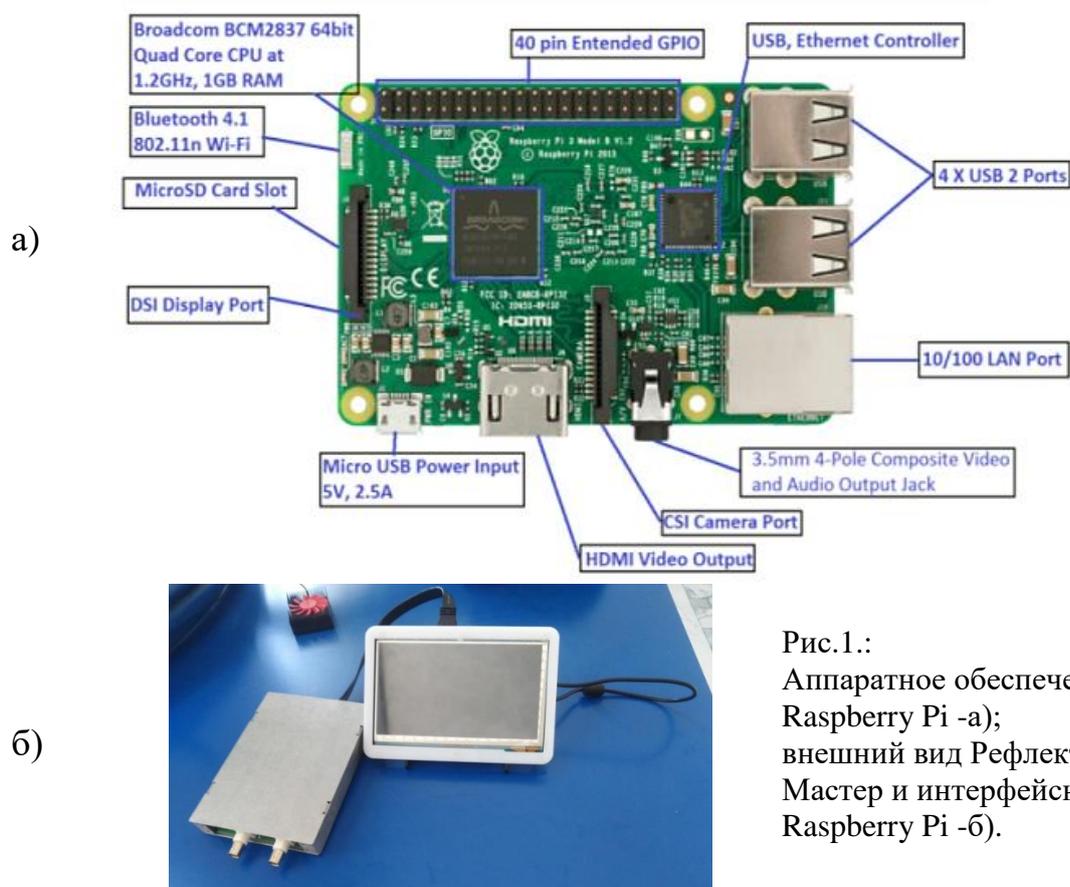


Рис.1.:
Аппаратное обеспечение
Raspberry Pi -а);
внешний вид Рефлектометра РД-
Мастер и интерфейсного модуля
Raspberry Pi -б).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Петин В.А., Микрокомпьютеры Raspberry Pi. Практическое руководство. — СПб.: БХВ-Петербург, 2015. — 240 с.: ил. — (Электроника)

УДК: 615.451

Волкова Анастасия Валерьевна

ИССЛЕДОВАНИЕ АНТИОКСИДАНТНОЙ АКТИВНОСТИ ЭКСТРАКТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ ОТХОДОВ ЗАГОТОВКИ ЛЬНА

Руководитель: Ожимкова Е.В.

Тверской государственный технический университет, г. Тверь
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Антиоксиданты – соединения, угнетающие развитие свободнорадикального окисления [1]. Существует большое разнообразие методов получения антиоксидантов. Наиболее распространенными являются химический и микробиологический синтез, а также экстракция из растительного сырья. При существующих технологиях заготовки и переработки сельскохозяйственного сырья образуется большое количество органических отходов. Такие отходы богаты разнообразными биологически активными соединениями, в том числе и антиоксидантами. Перспективность использования растительных отходов (РО) в качестве источника природных антиоксидантов заключается в том, что РО — возобновляемое сырье [2]. За последние 10 лет посевы льна масличного увеличились почти на 700 тыс. га, соответственно увеличилось количество вторичных отходов.

В ходе работы были проведены эксперименты по получению природных антиоксидантов из половы льна. В результате анализа полученных экспериментальных данных были определены оптимальные условия экстракции: гидромодуль 1:15 и продолжительность процесса $24 \pm 0,2$ часа. За это время обеспечивалась максимальная степень извлечения антиоксидантов. Экстракты, полученные из половы льна в указанных условиях, характеризовались весьма высокой антиоксидантной активностью (0,7 мг/мл в пересчете на кверцетин) и стабильностью при хранении. Полученные экстракты могут быть использованы для улучшения всхожести семян и последующего роста растений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Шаталов, Д.О. Антиоксиданты, как перспектива снижения заболеваний системы кровообращения, возникающих по причине ухудшающейся экологической обстановки/экология / Д.О. Шаталов, С.А. Кедик, И.С. Иванов, С.И. Бирюлин // Вестник МИТХТ. Серия: социально-гуманитарные науки и экология № 3, 2015 С.52-58.
2. Wen, C. Plant protein-derived antioxidant peptides: Isolation, identification, mechanism of action and application in food systems: A review / C. Wen, J. Zhang, H. Zhang, Y. Duan, H. Ma // Trends in Food Science & Technology. – 2020. - №105. – P.308-322.

УДК 615.322

Волкова Валерия Максимовна

АНАЛИЗ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА, ПОЛУЧЕННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВОДНЫХ ЭКСТРАКТОВ КЛЕНА, С ПОМОЩЬЮ СПЕКТРАЛЬНЫХ МЕТОДОВ

Руководитель: Хижняк С.Д.

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Особое оптическое поведение наночастиц серебра (НЧС) обусловлено взаимодействием их свободных электронов с падающим светом, при этом под действием переменного электрического поля свободные электроны НЧ коллективно колеблются на резонансной частоте. Это явление называется поверхностным плазмонным резонансом. НЧС по сравнению с другими металлическими наночастицами характеризуются сильным плазмонным взаимодействием со светом. Актуальность изучения плазмонной полосы НЧС вызвана тем, что это позволяет определить такие характеристики наночастиц как размер и концентрация.

В данной работе НЧС были получены с помощью зеленого синтеза с использованием водных экстрактов листьев клёна, собранных в июле 2021 г. в г. Феодосия, г. Кимры, дер. Полустово, г. Твери на Вагжановском переулке и в районе Мамулино. Методами анализа основных характеристик НЧ являются УФ спектроскопия и динамическое светорассеяние. Для оценки влияния концентрации Ag^+ на скорость образования наночастиц и их размеров были приготовлены три раствора, в которых варьировали соотношение: объем водного экстракта/ Ag^+ следующим образом: 1:0,5; 1:1; 1:2. Электронные спектры растворов регистрировали через 15 минут, 2 дня и неделю после приготовления. Установлено, что положение максимума полосы плазмонного резонанса (2-ой день) на прямую зависит от концентрации нитрата серебра: ~ 413, ~ 430, ~ 441 нм (1:0,5; 1:1; 1:2, соответственно). На спектрах наблюдается уширение полос поглощения и смещение максимума в сторону больших длин волн, известное, как красное смещение. Концентрация НЧС характеризуется величиной оптической плотности. Таким образом, анализ полосы плазмонного резонанса НЧС позволяет изучить не только кинетику образования наночастиц, оценить их размер, а также агрегационную устойчивость, но и получить информацию о содержании биоактивных веществ в образце, т.е. оценить экологический статус места его сбора.

Данная работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии центра коллективного пользования ТвГУ.

УДК: 547.821.3

Воробьева Анастасия Олеговна

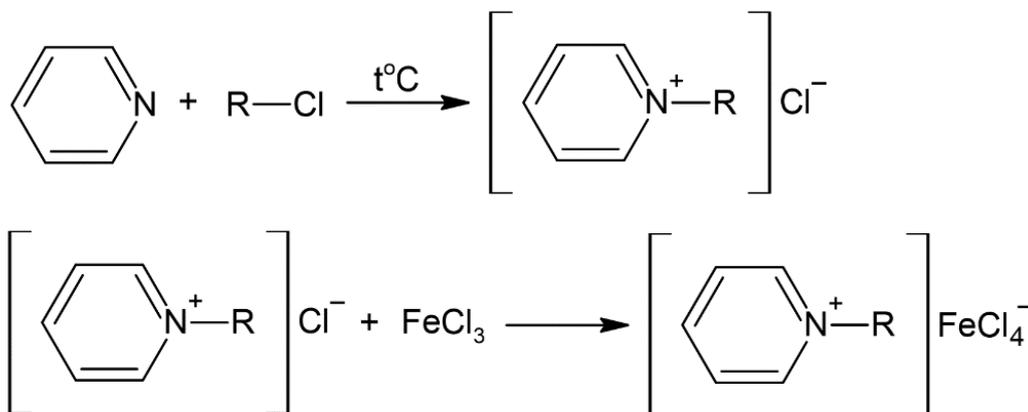
СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ N-АЛКИЛПИРИДИНИЯ С ТЕТРАХЛОРФЕРАТ-АНИОНОМ

Руководитель: Журавлев О.Е.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Металлсодержащие ионные жидкости (М-ИЖ) представляют собой уникальный подкласс ионных жидкостей (ИЖ), который обладает перспективным спектром возможностей, выходящим далеко за рамки того, что возможно для обычных ИЖ. М-ИЖ сочетают в себе преимущества обычных ИЖ и металлического катализа, позволяющие использовать их для новой химии. В настоящее время эти соли используются как катализаторы и реагенты во многих органических реакциях.

Целью данной работы является синтез ИЖ с катионом N-алкилпиридиния и тетрахлорферрат-анионом с различной длиной алкильных радикалов (фрагменты радикалов представлены на схеме) и исследование их свойств. Были синтезированы галогениды N-алкилпиридиния, по реакции кватернизации пиридина с алкилгалогенидами. На основе четвертичных солей были получены тетрахлорферраты N-алкилпиридиния, по реакции с хлоридом железа (III).



где R: $\text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$, C_4H_9 , $\text{C}_3\text{H}_6\text{CN}$, C_8H_{17} , $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$

Полученные М-ИЖ представляют собой порошки или жидкости коричневого или жёлтого цвета. Структуры полученных соединений подтверждены данными ИК-, УФ-спектроскопии и спектроскопии в видимой области. Рассмотрено влияние длины радикала на величину температуры плавления М-ИЖ, исследовано влияние структуры М-ИЖ на электропроводность их растворов в органических растворителях.

УДК 539.19 : 519.7

Галузин Иван Русланович

СТАБИЛЬНОСТЬ/НЕСТАБИЛЬНОСТЬ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ Ni@Ag И Ag@Ni

Руководитель: Сдобняков Н.Ю.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

Имеется исследование [1] о взаимосвязи между степенью стабильности/нестабильности наноструктур А(ядро)@В(оболочка) и спонтанной поверхностной сегрегацией одного из компонентов в бинарных наночастицах. Определенный практический интерес представляет внутренняя структура в системах Ni@Ag и Ag@Ni [2]. В данной работе в качестве объектов исследования взяты наночастицы Ni₁₅₀₀@Ag₁₅₀₀ и Ag₁₅₀₀@Ni₁₅₀₀ (см. рис. 1). В процессе молекулярно-динамического моделирования использовался потенциал сильной связи [3]. Для перекрестных параметров мы использовали, апробированное ранее [4], правило Лоренцо-Бертло. Установлено, что наночастицам Ni₁₅₀₀@Ag₁₅₀₀ и Ag₁₅₀₀@Ni₁₅₀₀ при нагревании до T=950 К соответствуют два принципиально разных сценария в процессе охлаждения. Установлено, что в системе Ni@Ag оболочка из Ag в процессе моделирования остается стабильной, отсутствует поверхностная сегрегация атомов ядра, состоящего из Ni. В тоже время ядро в системе Ag@Ni является нестабильным уже при температуре T= 540 К, т.е. начинает наблюдаться поверхностная сегрегация атомов серебра, по завершению которой системы Ni@Ag и Ag@Ni становятся практически идентичными.

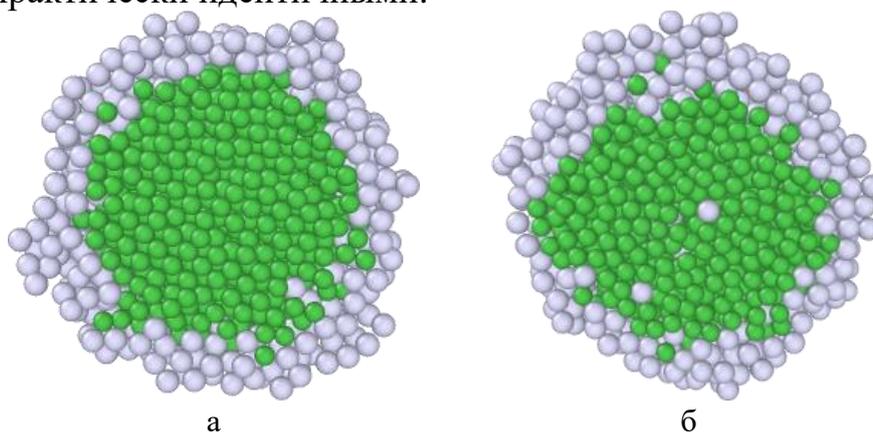


Рис. 1. Конечные конфигурации систем Ni₁₅₀₀@Ag₁₅₀₀ (слева) и Ag₁₅₀₀@Ni₁₅₀₀ (справа), полученные в процессе нагревания. Атомы Ag изображены светлыми шарами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Samsonov V.M. et al. // Applied Nanoscience. 2019. V. 9. I. 1. P. 119-133.
2. Bochicchio D. et al. // Journal of Physics: Condensed Matter. 2016. V. 28. P. 064005.
3. Cleri F., Rosato V. // Physical Review B. 1993. V. 48. I. 1. P. 22-33.
4. Сдобняков Н.Ю., Самсонов В.М., Колосов А.Ю. и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2019. Вып. 11. С. 520-534.

УДК 541.182.64:536.7

Гальцова Валерия Вячеславовна

МИКРОЭМУЛЬГИРОВАНИЕ ТОЛУОЛА В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ НЕИОНОГЕННОГО ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНОГО ВЕЩЕСТВА

Руководитель: Веролайнен Н.В.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической и биоорганической химии

Микроэмульсии представляют собой термодинамически агрегативно устойчивые дисперсные системы, которые обладают рядом уникальных свойств, такими как большая межфазная поверхность, низкое межфазное натяжение. Они находят широкое применение в химических и фармакологических процессах, используются в синтезе наночастиц, а также для повышения нефтеотдачи. Их изучение важно как с фундаментальной, так и с практической точек зрения.

Микроэмульсии обычно представляют собой многокомпонентные системы и содержат не менее четырёх компонентов. В литературе достаточно редко можно встретить исследования прямых трёхкомпонентных микроэмульсий. Это связано с ограниченными данными о термодинамических параметрах образования для трёхкомпонентных систем. Цель данной работы состоит в получении и исследовании прямых микроэмульсий на основе трёхкомпонентной системы Твин-80 – толуол – вода.

Проведено исследование влияния концентрации поверхностно-активного вещества на солюбилизующую способность. Для определения солюбилизационной ёмкости микроэмульсий использовали рефрактометрический метод. На основании полученных данных строили график зависимости солюбилизации от концентрации поверхностно-активного вещества. Исследования показали, что чем выше концентрация раствора, тем выше солюбилизующая способность Твин-80.



УДК 615.322

Гешко Владимир Владимирович

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ НИТРАТА СЕРЕБРА НА ОБРАЗОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ В ВОДНЫХ ЭКСТРАКТАХ ДУБА ЧЕРЕШЧАТОГО

Руководитель: Хижняк С.Д.

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Известны различные способы получения наночастиц серебра, при этом каждый из них имеет свои достоинства и недостатки. Наиболее предпочтительными в условиях загрязнения окружающей среды останутся методы «зеленой химии», благодаря которым наночастицы серебра (НЧС), а также других металлов – золота, диоксида титана, оксида цинка – можно получать с использованием водных экстрактов различных растений. Поскольку НЧС можно использовать в разных областях, таких как медицина, производство катализаторов, биосенсоров и так далее, актуальность разработки зеленых методов синтеза НЧС очевидна. Цель данной работы – исследование влияния концентрации нитрата серебра на синтез НЧС в водных экстрактах листьев дуба.

Листья дуба черешчатого были собраны в Центральном районе г. Твери (ул. Троицкая – «Белая троица», городской парк, колледж им. Коняева) в августе 2021 г. Основным экологическим поллютантом в этом районе является автотранспорт. НЧС синтезировали по зеленой технологии путем



Рис.:

Экстракты листьев, собранных на ул. Троицкой, через 1 день после добавления Ag^+ . Соотношение объемов экстракта и Ag^+ : 1/0,5; 1/1; 1/2

восстановления ионов серебра в водных экстрактах листьев дуба. Основными методами анализа наночастиц были УФ спектроскопия, динамическое светорассеяние (ДСР) и сканирующая электронная микроскопия (СЭМ).

В результате изучения процесса формирования НЧС с помощью УФ спектроскопии установлено, что концентрация наночастиц выше в образце, собранном на ул. Троицкой. В электронных спектрах этого образца наблюдается широкая полоса поглощения с максимумом в диапазоне ~400-430 нм. Именно на экстракте этого образца доказана прямая связь между концентрацией Ag^+ и размером формирующихся наночастиц.

Данная работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии центра коллективного пользования ТвГУ.

УДК 539.219.2 : 519.7

Григорьев Роман Евгеньевич

ИЗУЧЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ В ПРОЦЕССЕ ИЗБИРАТЕЛЬНОЙ КОРРОЗИИ

Руководитель: Сдобняков Н.Ю.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

Наночастицы (НЧ) на основе *Pt* представляют интерес из-за их более высокой реакционной способности по отношению к органическим молекулам, что делает их полезными для электрокатализа в топливных элементах. Результаты этих исследований свидетельствуют о том, что НЧ *Cu–Pt* легко синтезируются с возможностью регулировать размер и форму НЧ. При определенных условиях поверхность этих НЧ обычно подвергается процессу, известному как «dealloying» или избирательная коррозия (ИК) [1, 2]. Целью исследования являлось изучение эволюции энергетического спектра биметаллических НЧ *Cu–Pt* в процессе ИК. Использовались два альтернативных метода компьютерного моделирования: метод молекулярной динамики (МД) и метод Монте-Карло. В качестве потенциала межатомного взаимодействия использовался потенциал сильной связи [3]. На рис. 1 представлены мгновенные конфигурации для НЧ *Cu–Pt*, полученные при удалении 25% от исходного числа атомов $N_{tot} = 3000$. Анализ показывает, что метод МД предсказывает обогащение поверхностного слоя НЧ атомами с большей энергией.

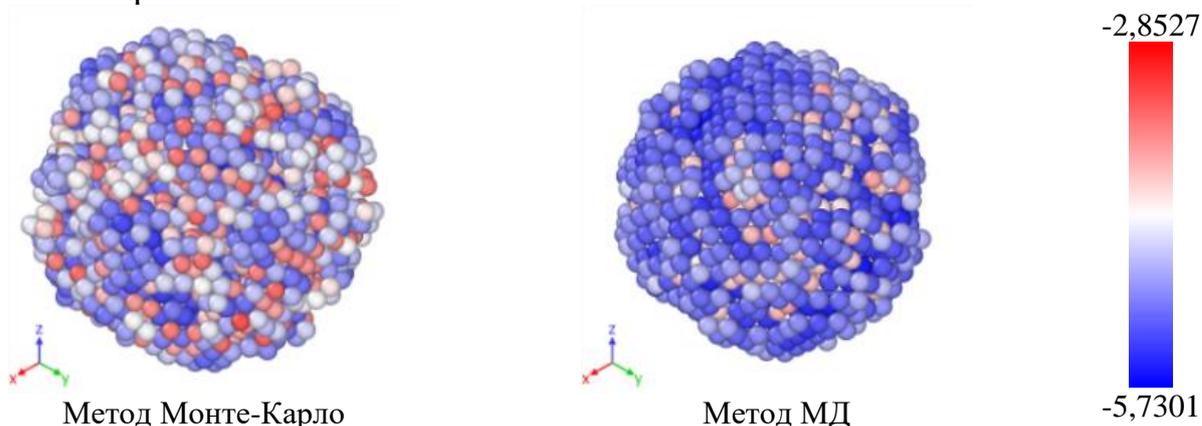


Рис. 1. Энергетический спектр биметаллических наночастиц *Cu–Pt* при $N_{del} = 750$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Мясниченко В.С., Самсонов В.М., Сдобняков Н.Ю. и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2019. Вып. 11. С. 487-499.
2. Sdobnyakov N.Yu., Samsonov V.M., Kolosov A.Yu. et al. // Journal of Physics: Conference Series. 2020. V. 1658. Art. № 012048. 6 p.
3. Cleri F., Rosato V. // Physical Review B. 1993. V. 48. I. 1. P. 22-33.

УДК : 633:11:631.559

Громов Александр Николаевич

ИННОВАЦИОННАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ВОЗДЕЛЫВАНИЯ ЯРОВОЙ ПШЕНИЦЫ С ПРИМЕНЕНИЕМ НЕКОРНЕВЫХ ПОДКОРМОК КОМПЛЕКСНЫМИ УДОБРЕНИЯМИ

Руководитель: Усанова З.И.

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г.Тверь
Кафедра агробиотехнологий, перерабатывающих производств и семеноводства

Яровая пшеница (*Triticum aestivum* L.) является главной культурой для производства хлеба в России. В Тверской области среди зерновых культур она занимает второе место по посевным площадям после овса, но превосходит его по урожайности на 3–4 ц/га. Дальнейшее повышение ее продуктивности возможно за счет внедрения новых сортов и совершенствования технологии возделывания. Поэтому цель работы – изучить особенности формирования урожайности трех сортов яровой пшеницы (Иволга, Злата, Иргина) при применении в технологии возделывания комплексных удобрений (Ультромаг комби, Акварин 5, Витанолл РК) в виде некорневых подкормок; выявить наиболее продуктивные сорта и варианты технологии, обеспечивающие получение запрограммированной урожайности (4,0 т/га), зерна высокого качества. Для этого в 2021г. провели исследования в трехфакторном полевом опыте, на хорошо окультуренной дерново-подзолистой легкосуглинистой почве в колхозе «Мир» Торжокского района Тверской области.

В результате выявлена высокая эффективность всех применяемых комплексных удобрений (таблица).

Таблица:

Урожайность сортов яровой пшеницы, ц/га

Комплексное удобрение (С)	Одна подкормка (В)		Две подкормки (В)			
	Сорта (фактор А)					
	Иволга	Иргина	Злата	Иволга	Иргина	Злата
Контроль, вода 300л/га	28,4	34,7	30,0	29,9	29,2	30,0
Ультромаг комби, 2 л/га	37,3	30,7	37,3	35,0	30,9	38,6
Акварин 5, 1кг/га	38,1	28,0	37,0	39,1	35,2	38,1
Витанолл РК, 1л/га	48,1	37,7	48,3	50,8	41,4	51,3
В среднем по В	38,0	32,8	38,2	38,7	34,0	39,5
НСР ₀₅ частных различий–3,1; по факт.С–2,1 ; по факт.В–1,6 ; по факт. А–2,8						

В большинстве вариантов получены достоверные прибавки урожая к контролю, больше, чем НСР₀₅. В среднем по сортам, прибавки от некорневых подкормок колебались при одном опрыскивании от 3,4 до 13,7 ц/га (11,0–44,2%), при двух – от 5,1 до 18,1 ц/га (17,2–60,9%). Наибольший прирост урожайности обеспечила подкормка полимерным удобрением Витанолл РК (44,2–60,9%). Лучшими сортами являются Иволга и Злата, а лучшими вариантами технологии – с некорневыми подкормками Витаноллом сортов Иволга и Злата.

УДК 544.4.032.7

Губская Елена Мечиславовна

СОСТОЯНИЕ СОВРЕМЕННЫХ РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ ТЕХНОЛОГИЙ КОНВЕРСИИ РАСТИТЕЛЬНОЙ БИОМАССЫ В ИЗОСОРБИД

Руководители: Ожимкова Е.В., Филатова А.Е.

Тверской государственный технический университет, г. Тверь
Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации

Одним из перспективных продуктов конверсии целлюлозы является изосорбид. Его используют при производстве разнообразных лекарственных средств, полимеров и химикатов. А производство изосорбида из натуральной целлюлозы является перспективной разработкой для синтеза полиамидов и биоразлагаемых полимеров, например, биоразлагаемого пластика, который разлагается под действием микроорганизмов на углекислый газ, метан, воду, биомассу и разнообразные неорганические соединения.

В исследованиях, которые были проведены ранее, рассматривают процесс гидрирования целлюлозы до изосорбида с использованием Ru/C, Pt/C, Pd/C катализаторов в кислой среде с использованием соляной и серной кислот [1,2]. Альтернативная работа [3] была проведена с использованием бифункциональных катализаторов на основе фосфатов ниобия, которые получили поверхностным гидротермальным методом, и были использованы для прямого превращения целлюлозы в изосорбид в водных условиях.

Из всех вышеперечисленных исследований следует, что катализатор Ru/C был наиболее активен в процессе гидрирования. Большинство исследований производства изосорбида проводилось из чистой целлюлозы и сахаров. Синтез изосорбида из лигноцеллюлозной биомассы мало изучен.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Jinxu Xi, Yu Zhang, Daqian Ding, et. all. Applied Catalysis A General 01. 2014. p. 108–115.
2. Op de Beeck B, Geboers J, Van de Vyver S, et. all. ChemSusChem.3. 2013. P.399.
3. Minyao He, Jiaying Guo, Xincheng Wang, et. all. New J. Chem.44. 2020. P. 10292-10299.

УДК 544.4.032.7

Губская Елена Мечиславовна

БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ СПОСОБЫ ПЕРЕАБОТКИ ЛИГНОЦЕЛЛЮЛОЗНОГО СЫРЬЯ

Руководители: Ожимкова Е.В., Филатова А.Е.

Тверской государственный технический университет, г. Тверь
Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации

Целлюлоза, гемицеллюлоза и лигнин, представляют собой средства накопления и хранения солнечной энергии, которая, следовательно, представляет собой источник энергии. Чтобы можно было использовать такие полимеры и другие ресурсы, такие как липиды и белки, их необходимо преобразовать в пригодную для использования форму.

Биополимеры, содержащиеся в лигноцеллюлозе, могут расщепляться большим количеством микроорганизмов, таких как бактерии, грибы, грибки базидий и т.д., в частности мицелиальные грибы, с использованием внеклеточных ферментов. К микроорганизмам в той или иной степени расщепляющие лигноцеллюлозу относятся: *Phanerochaete chrysosporium*, *Phlebia radiata*, *Trametes versicolor*, *Pleurotus ostreatus*, *Aspergillus niger*, *Fusarium oxysporum*, *Streptomyces sp.* и *Penicillium sp.* [1-3].

Из биомассы в настоящее время возможно получить широкий спектр химических веществ, востребованных промышленностью. Биотехнологические процессы в этом случае реализуются путем ферментации сахаров, получаемых из лигноцеллюлозы с применением физико-химических методов, либо обработкой ферментами гликозид-гидролазами, причем наиболее востребованными продуктами являются спирты и кислоты.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Aro, N. Transcriptional regulation of plant cell wall degradation by filamentous fungi / N. Aro, T. Pakula, M. Penttilä // FEMS Microbiology Reviews. - 2015. - №29. - P. 719-739.
2. Arab, H. Einfluss der Substrat-Vorbehandlung und der Prozessführung auf die Struktur, Zusammensetzung und Aktivität der Biozönose bei der Vergärung von Energiepflanzen (Mais und Gras) / H. Arab, B. Helmreich. // Schlussbericht, Technische Universität München. - 2008 - №36. - S.45-47.
3. Amon, T. Biogaserzeugung aus Energiepflanzen: Wirkung von Enzymen auf den Biogasertrag und die Abbaugeschwindigkeit. Abstract zum Final Report, Auftraggeber: Novozymes A/S Bagsvaerd [Электронный ресурс] / Т. Амон. – Электрон. дан. – 2013. – Режим доступа: https://forschung.boku.ac.at/fis/suchen.projekt_uebersicht?sprache_in=de&id_in=5221. Загл. с экрана.

УДК 548.75

Гугуцидзе Карина Автандиловна

ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛОВ ГЕРМАНИЯ И КРЕМНИЯ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ СПОСОБАХ ОБРАБОТКИ

Руководитель: Иванова А.И.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра прикладной физики

Высокое качество поверхности монокристаллов германия и кремния является одним из важнейших условий применения данных материалов в инфракрасной оптике, микроэлектронике и фотопреобразователях, шероховатость полированной поверхности оказывает заметные влияния на эксплуатационные характеристики этих поверхностей. Реальная поверхность кристаллического материала имеет сложный профиль, во многом определяемый методами обработки. Полировка является важной и завершающей операцией при изготовлении кристаллических образцов. Цель работы – оптимизация технологии полировки кристаллов германия и кремния, обеспечивающей минимальную шероховатость поверхности.

Исследуемые кристаллы германия и кремния n-типа были выращены способом Чохральского в направлении $\langle 111 \rangle$. Шлифовка осуществлялась порошками корунда М40-М10, технология полировки представлена в таблице. Аттестация поверхности проводилась методом оптической профилометрии: получены карты высот, определены основные параметры поверхности элементов (Таблица): среднее арифметическое отклонение профиля (R_a), высота неровностей профиля (R_z), максимальное отклонение шероховатости поверхности (R_{max}).

Таблица: Основные параметры поверхности элементов

	(Ge) Полировка на кремниевой подложке суспензией АСМ 1/0	(Ge) Полировка на смоле суспензией АМ 0,5/0	(Si) Полировка на кремниевой подложке суспензией АСМ 1/0	(Si) Полировка на смоле суспензией АМ 0.5/0
R_a , нм	3,2	2,7	5,1	4,3
R_z , нм	16,7	12,9	13,1	11,2
R_{max} , нм	23,2	14,7	18,2	17,5

Оптимальная для эксплуатации технически ценных монокристаллов германия и кремния микрогеометрия поверхности обеспечивается тонкой полировкой суспензией алмазного порошка АМ 0,5/0.

УДК: 661.743.2

Данилова Дарья Александровна

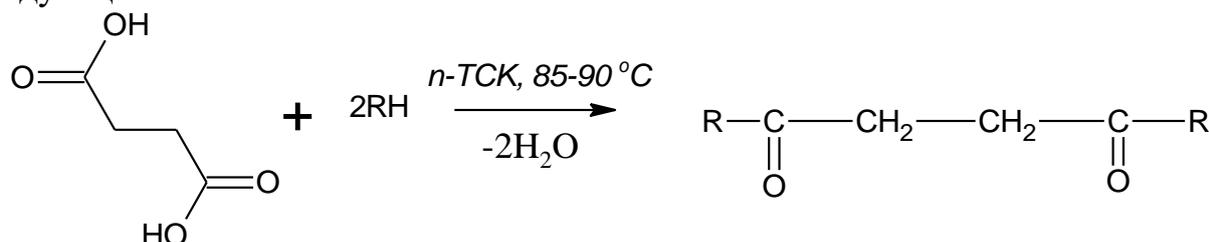
СИНТЕЗ ДИМЕРНЫХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ НА ОСНОВЕ ЯНТАРНОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель: Темникова С.А.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Димерные поверхностно-активные вещества (ПАВ) представляют собой молекулы, имеющие две углеводородные цепочки и две полярные головные группы, которые связаны между собой спейсерной группой (мостиком). По сравнению с обычными ПАВ димерные аналоги обладают рядом специфических свойств: низкими значениями критической концентрации мицеллообразования (ККМ) и температуры (точки) Крафта, высокой поверхностной активностью и солюбилизующей способностью.

Целью работы является синтез диэфиров на основе янтарной кислоты и неоиногенных ПАВ (ОП-10, неонол АФ-9,10). В качестве катализатора использовали *n*-толуолсульфокислоту (*n*-ТСК). Синтез осуществлён по следующей схеме:



где R = C₉H₁₉C₆H₄O(C₂H₄O)₁₀O- или C₉H₁₉C₆H₄O(C₂H₄O)₁₀-.

Строение синтезированных веществ подтверждено данными ИК-спектроскопии. Были исследованы коллоидно-химические свойства водных растворов исходных неоиногенных ПАВ и полученных димерных ПАВ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Е.А. Ломинога, К.С. Бурмистров, В.С. Гевод. Синтез димерных поверхностно - активных веществ на основе синтанола ДС-10 и адипиновой кислоты. Изв. вузов. Химия и хим. Технология. 2018, Т. 61. Вып.2, С.91-95.
2. R. Zana, J. Xia Gemini surfactants. Synthesis, interfacial and solutionphase behavior, and applications. Sur- factant Science Series – Marcel Dekker, 2004 – 331 p.

УДК 621.315.592

Демьянов Григорий Владимирович

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ЭКСТРУДИРОВАННЫХ ОБРАЗЦОВ $(\text{Sb,Bi})_2\text{Te}_3$

Руководитель: Немов С.А.

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург,
НОЦ «Исследование и моделирование материалов»

Многочисленные исследования термоЭДС экструдируемых образцов показывают типичную картину распределения термоэлектрических свойств по сечению [1]. Эта картина характеризуется тремя зонами (рис. 1).

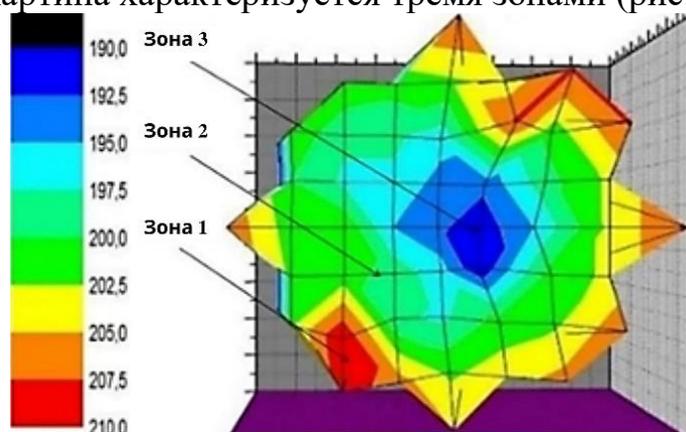


Рис. 1 Картина распределения термоЭДС по плоскости пластины (мкВ/К).

Рентгенофазовый анализ показал, что заготовка имеет структуру переменного состава на основе твердых растворов $\text{Sb}_2\text{Te}_3\text{-Bi}_2\text{Te}_3$. Внешняя поверхность образца (зона 1) на 75% состоит из фазы $\text{Bi}_{0,3}\text{Sb}_{1,7}\text{Te}_3$. В зоне 2 появляются рефлексы $\text{Bi}_{1,5}\text{Sb}_{0,5}\text{Te}_3$, а также фиксируются следы фазы Bi_8Te_9 . В центральной области прутка (зона 3) фаза Bi_8Te_9 проявляется в малых количествах. Соотношение фаз в зоне 3 приближено к $\text{Sb}_2\text{Te}_3/\text{Bi}_2\text{Te}_3=65/35$. Исследование фазового анализа установило взаимосвязь распределения термоЭДС образца с распределением фаз по сечению. Проведено моделирование экструзии в программе DEFORM. Важнейшим параметром в расчете является значения накопленной интенсивности деформации ϵ_i в очаге и на выходе. Они распределяются неоднородно. Такое распределение обусловлено высоким уровнем сдвиговых напряжений на границе раздела «пруток – инструмент», характеризующееся наличием значительных сил трения. Структура экструдируемого образца характеризуется неоднородным распределением термоЭДС по сечению, обусловленное неоднородностью напряженно-деформированного состояния.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Немов С.А., Андреева В.Д., Масликова Е.И., Мишин В.В., Шишов И.А., Демьянов Г.В. Особенности структуры термоэлектрических образцов, полученных экструзией // Сборник научных трудов «Нанопизика и Наноматериалы». - СПб.: Санкт-Петербургский горный университет, 2021. - С. 196-201.

УДК 615.322

Дорошенко Иван Дмитриевич

«ЗЕЛЕНый» СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВОДНЫХ ЭКСТРАКТОВ МАТЬ-И-МАЧЕХИ

Руководитель: Хижняк С.Д.

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Разработка новых методов получения наночастиц металлов с целью их дальнейшего использования в различных областях нанотехнологии вызывает большой интерес. Например, внимание исследователей привлекает возможность «зеленого» синтеза наночастиц серебра с применением экстрактов растений как альтернативы химических методов получения наночастиц. Метод «зеленого» синтеза экологически безопаснее, так как в нем не используются токсические соединения, и более экономичен.

Цель данной работы – синтез наночастиц серебра (НЧС) с помощью образцов лекарственного растения мать-и-мачехи, собранных в местах с различной антропогенной нагрузкой. Анализ содержания биоактивных веществ в исследуемых образцах и их способность восстанавливать ионы серебра с образованием НЧС были проведены методом УФ спектроскопии и сканирующей электронной микроскопии. Сбор растений был произведен 15 июля и 15 августа 2022 в трех различных районах города Твери (Парк Победы; микрорайон Мигалово; СНТ «Рябинки» - «фоновая зона).

Для проведения спектрального анализа листья растений были высушены, измельчены, приготовлены водные экстракты. Спектры регистрировали на спектрометре «Evolution Array» фирмы «Thermo Scientific» в кварцевой кювете с толщиной слоя 2 или 5 мм. Для синтеза наночастиц серебра (НЧС) в водные экстракты добавляли раствор нитрата серебра и регистрировали поглощение в видимом диапазоне.

В результате анализа экспериментальных данных было установлено, что водные экстракты, полученные из листьев растений, собранных в 2021 году, проявляют крайне слабую активность по восстановлению ионов серебра. Предполагаемой причиной может быть очень низкое содержание биоактивных веществ в образцах вследствие аномально жаркого лета 2021 года. Таким образом, синтез НЧС с использованием водных экстрактов различных растений может быть предложен как метод оценки экологического состояния окружающей среды. Для упрощения процедуры мониторинга предлагается использование свежесобранных растений.

Данная работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии центра коллективного пользования ТвГУ.

УДК 537.632

Доянова Юлия Дмитриевна¹

ИССЛЕДОВАНИЕ РАБОТЫ СИСТЕМЫ ИЗ ДИПОЛЬНЫХ МАГНИТНЫХ ЦИЛИНДРОВ ХАЛЬБАХА

Руководитель: Карпенков А.Ю.¹, Дунаева Г.Г.²

¹Тверской государственный университет, г. Тверь

²НИТУ МИСиС, г. Москва

Использование магнитной системы, выполненной по принципу цилиндров Хальбаха (рис. 1а), позволяет, вращая внутренний цилиндр (ротор) относительно внешнего (статор) изменять величину магнитного поля в зазоре [1]. В большинстве прототипов магнитных рефрижераторов используются двигатели, обеспечивающие вращение ротора с постоянной угловой скоростью, что приводит к тому, что время, в течение которого рабочее тело находится в размагниченном состоянии меньше, чем в намагниченном (серая кривая рис. 1б). Использование шаговых двигателей, с помощью которых возможно четко задавать временную зависимость угла поворота ротора по закону, описанного уравнением (1), позволяет решить эту проблему (черная кривая рис. 1б).

$$R(t, h) = t - \sin(t + a(h)/1.5 \cdot \sin(t)) \cdot a(h) \quad (1)$$

где $a(h)$ – функция от минимальной величины магнитного поля в зазоре системы при антипараллельной ориентации статора и ротора:

$$a(h) = -72,47h^5 + 258,72h^4 - 359,89h^3 + 253,75h^2 - 99,40h + 31,51 \text{ при } h \div 0 - 1,0 \text{ Тл}$$

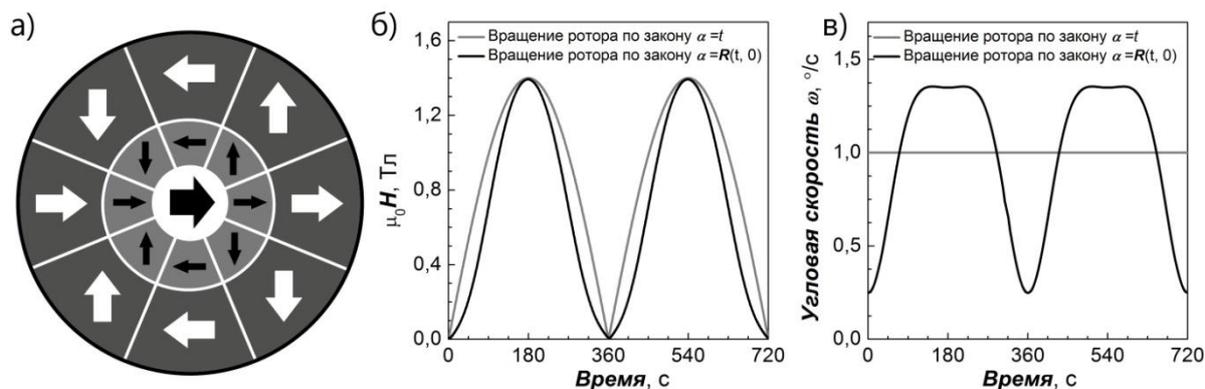


Рисунок 1: а) Схематическое изображение системы из дипольных магнитных цилиндров Хальбаха для одинаковой ориентации статора и ротора; временные зависимости величины поля в зазоре магнитной системы (б) и угловой скорости ротора (в) при вращении ротора с постоянной скоростью (серые кривые) и в случае, когда угол поворота ротора изменяется по закону $R(t, 0)$ (уравнение (1)) (черные кривые).

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 21-72-10147

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Kitanovski A., et. al. Magnetocaloric Energy Conversion : 2015, 471 с.

УДК: 537.622.4

Дунаева Галина Григорьевна

АНАЛИЗ КОНФИГУРАЦИИ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ МОНОКРИСТАЛЛА $Nd_2Fe_{14}B$ НА ОСНОВЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Руководитель: Карпенков А.Ю.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Основные представления о конфигурации доменной структуры ферромагнетиков сформировались в рамках теории микромагнетизма. На основе различных методов наблюдения доменной структуры были предложены модели, визуализирующие пространственное распределение областей магнитных доменов в объеме и на поверхности ферромагнитного кристалла.

Регистрация полей рассеяния над поверхностью исследуемого монокристалла выполнялась на атомно-силовом микроскопе Solver Next. В COMSOL Multiphysics создана 3d-модель доменной структуры исследуемого образца $Nd_2Fe_{14}B$.

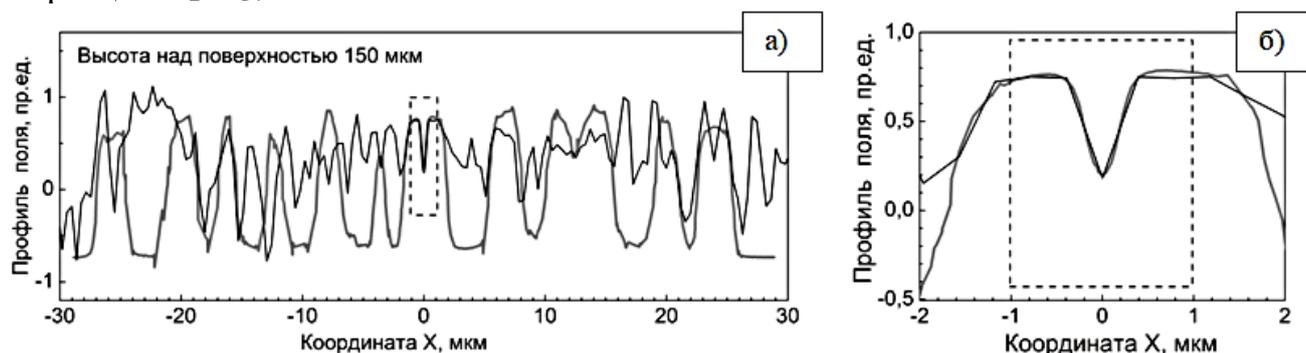


Рис.1 а) Сравнение профилей полей рассеяния двух доменов относительно максимального и минимального отклонения полученных сигналов (МСМ, моделирование в COMSOL Multiphysics) в приведенных единицах б) в увеличенном масштабе для объектов сравнения.

Сравнительный анализ профилей распределения полей рассеяния над поверхностью образца для доменов: 1) зарегистрированного на МСМ-изображении, с минимальным размером диаметра порядка 0,4-0,55 мкм, 2) смоделированного в рамках полученной модели поверхностной доменной структуры конуса с различными геометрическими параметрами (диаметр: 0,2-0,7 мкм, высота: 0,5-10 мкм) показал, что совпадение возможно для случая смоделированного домена в форме конуса с диаметром порядка 0,4 мкм и высотой 4-7 мкм.

УДК 539.19

Ежов Владислав Павлович

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ ГЕРМАНЕНА ИЗ ТОНКОГО СЛОЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ГЕРМАНИЯ

Руководитель: Самсонов В.М.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

Структура германена, т.е. аналога графена, обсуждалась с середины 1990-х годов [1], а её устойчивость была предсказана в теоретической работе 2009 года [2], согласно которой германен представляет собой двумерные изогнутые слои. В молекулярно-динамических экспериментах с использованием потенциала Терсоффа [3] мы наблюдали образование германена из бислоя германия. Начальная конфигурация системы: размер по горизонтали от -10 до +10 параметров решётки, по толщине 0.3 параметра решётки, что соответствует двум атомным слоям. В процессе релаксации при температуре 300 К бислой самопроизвольно переходит в моноатомный слой германена, хотя потенциал Терсоффа отвечает атомам германия с sp^3 -гибридизацией.

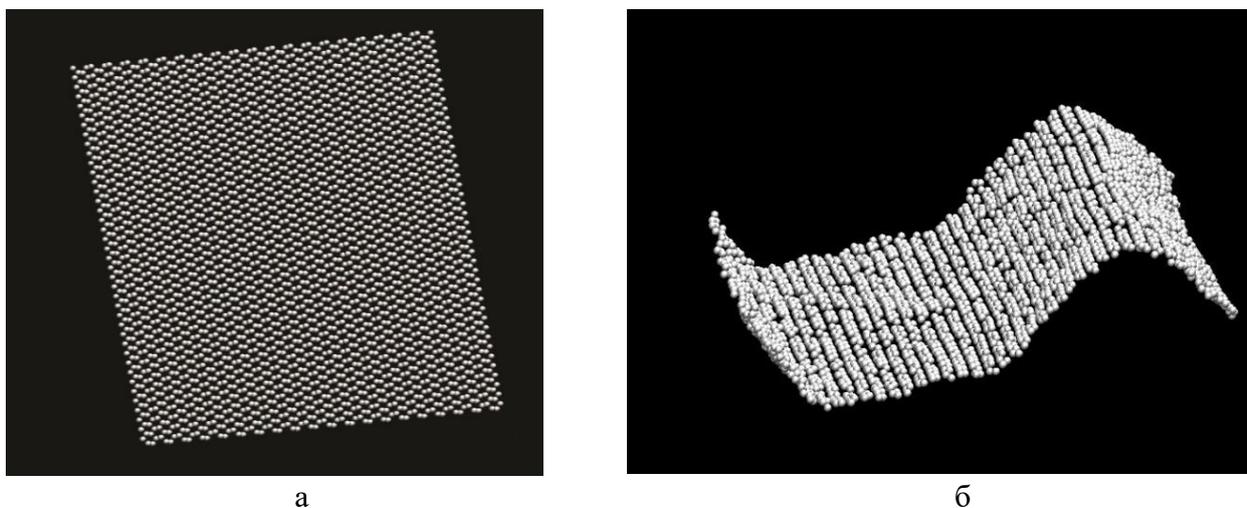


Рис. 1. Начальная конфигурации системы (а) и конфигурация системы после релаксации в течение 0.1 нс при $T = 300$ К (б).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Takeda K., Shiraishi K. // Physical Review B. 1994. V. 50. I. 20. P. 14916-14922.
2. Cahangirov S., Topsakal M., Aktürk E. // Physical Review Letters. 2009. V. 102. I. 23. P. 236804.
3. Tersoff J. // Physical Review B. 1988. V. 37. P. 6991-7000.

УДК 546.732

Ермолаева Анна Александровна

DFT РАСЧЁТ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОННЫХ ОРБИТАЛЕЙ ФТАЛОЦИАНИНА КОБАЛЬТА(II)

Руководитель: Алексеев В.Г.

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Фталоцианин кобальта (CoPc) используется во многих органических электронных устройствах, таких как светоизлучающие диоды (LED), органические фотогальванические элементы (OPV), органические полевые транзисторы (OFET) и химические датчики. В данной работе была поставлена задача подобрать функционал, обеспечивающий правильный расчёт энергии НОМО и LUMO молекулы фталоцианина кобальта(II) (рис.1). Геометрия молекулы CoPc рассчитана методом DFT / PW6B95-D3 / LACVP**++, длины и углы связей хорошо совпадают с экспериментальными данными. Результаты расчёта энергии НОМО и LUMO (рис. 2) представлены в таблице. Видно, что хорошее совпадение с экспериментальными данными обеспечивает использование meta-GGA функционала M11-L.

Таблица: Энергия электронных орбиталей фталоцианина кобальта

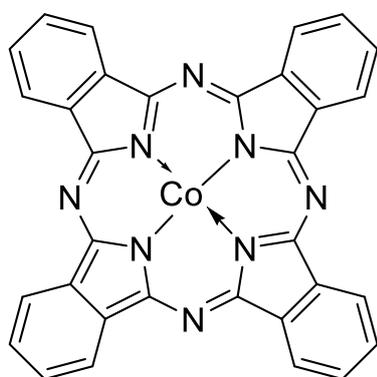
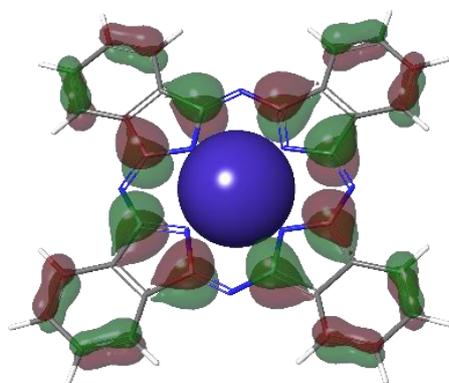
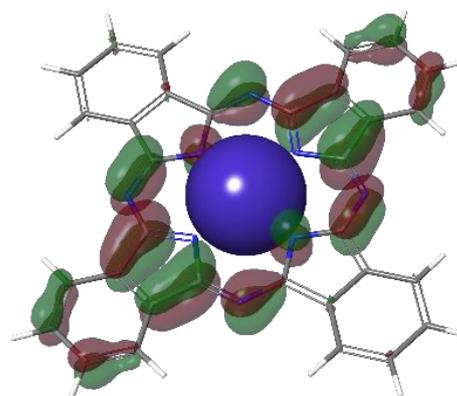


Рис.1. Структурная формула фталоцианина кобальта

Функционал	НОМО, eV	LUMO, eV	Eg, eV
Эксперимент	-5.0	-3.4	1.6
M11-L	-5.10	-3.60	1.50
TPSS	-4.40	-3.21	1.19
MN12-L	-4.33	-3.00	1.33
SCAN	-4.25	-3.20	1.05
PW6B95-D3	-5.37	-2.85	2.52
M05-2X-D3	-5.93	-2.40	3.53
M06-2X-D3	-5.92	-2.45	3.47
M06-L	-3.89	-3.14	0.75
OLYP-D3	-3.98	-3.05	0.93
ω B97X-D	-6.38	-1.65	4.73



НОМО



LUMO

Рис. 2. Изображение электронных орбиталей фталоцианина кобальта

УДК: 577.1:543.422.27

Ефимова Татьяна Алексеевна

ПОЛУЧЕНИЕ МИЦЕЛЛ ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ПАВ

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

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Адресная доставка лекарственных препаратов к больным органам является актуальной задачей. В последнее время проводятся активные исследования по использованию в качестве контейнеров для доставки лекарств мицелл. Мицеллы легко получить из водных растворов поверхностно-активных веществ (ПАВ). Однако при этом остается проблема безопасности ПАВ для организма, возможность капсуляции лекарств мицеллами, стимул-чувствительность мицелл и др. Целью данной работы являлось получение мицелл с использованием водных растворов катионных и анионных ПАВ.

Для эксперимента были выбраны: Образец №1 – анионный ПАВ – четвертично аммониевые соединения (ЧАС) $C_9H_{19}Br$; Образец №2 – катионный ПАВ – лаурилсульфат натрия $C_{12}H_{25}SO_4Na$, $CH_3(CH_2)_{11}OSO_3Na$. Значения концентрации в водных растворах ПАВ варьировались в диапазоне: 1 образец – от $1 \cdot 10^{-2}$ моль/л до $0,0078125 \cdot 10^{-2}$ моль/л; 2 образец – от $0,025 \cdot 10^{-2}$ моль/л до $0,00078125 \cdot 10^{-2}$ моль/л. Для определения критической концентрации мицеллообразования (ККМ) использовался кондуктометрический метод. Измерение значений электропроводности осуществляли на кондуктометре Mettler Toledo Seven Go Pro.

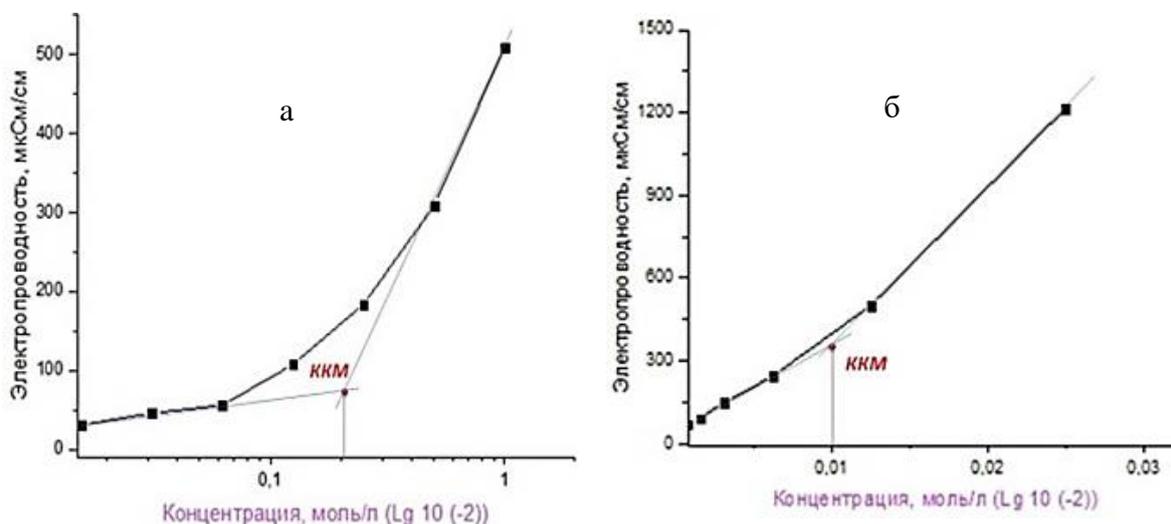


Рис. Зависимость электропроводности от концентрации 1 образец - а и 2 образец – б.

На рис. представлены концентрационные зависимости электропроводности для двух типов ПАВ, полученные с помощью программы Origin Lab. Значение ККМ первого образца $\approx 0,2$, а второго образца $\approx 0,01$. Эти данные подтверждают наличие устойчивых мицелл в выбранных растворах. Дальнейшие исследования будут направлены на использование методов турбидиметрии и динамического рассеяния света для анализа процесса мицеллообразования в водных растворах.

УДК 541.1

Жевлакова Яна Александровна

ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ НА СВОЙСТВА ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Руководитель: Веролайнен Н.В.

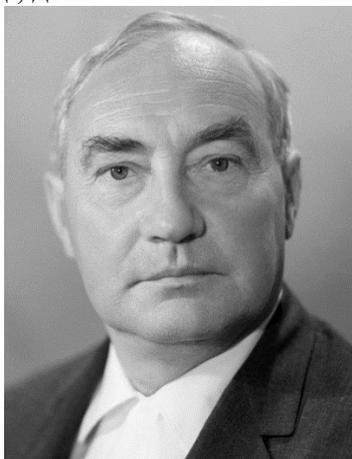
Тверской государственный университет
Кафедра органической и биоорганической химии

Цель данной работы — установление влияния высокочастотного (ВЧ) электромагнитного поля на физико-химические свойства растворов ПАВ и на процессы ассоциации в них при концентрациях ниже ККМ. В качестве ПАВ были выбраны АПАВ лаурилсульфоацетат натрия, КПАВ гексадецилтриметиламмоний хлорид и НПАВ моноэтаноламид олеиновой кислоты.

Воздействие ВЧ поля на растворы мицеллообразующих поверхностно-активных веществ приводит к инициированию процессов ассоциации ионов в мицеллы при существенно более низких концентрациях по сравнению с ККМ. Данный эффект наблюдается при бесконтактном наложении поля напряженностью 20–24 В/см в диапазоне частот 30–200 МГц. Установлено, что наибольшее снижение ККМ наблюдается после облучения раствора полем определенных частот, зависящих от природы ПАВ. Эффективность воздействия зависит также от времени и концентрации раствора. Предполагается, что мицеллообразование обусловлено изменением степени гидратации углеводородных радикалов и полярных групп ПАВ вследствие усиления диполь-дипольного взаимодействия между молекулами воды, а также увеличением вероятности ориентации ионов ПАВ, благоприятной для образования мицеллярных ассоциатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Вережников В.Н. Коллоидная химия поверхностно-активных веществ. Учебное пособие / В.Н. Вережников, И.И. Гермашева, М.Ю. Крысин. - М.: Лань, 2016. – 304 с.
2. Русанов А.И., Щёкин А.К. Мицеллообразование в растворах поверхностно-активных веществ: Монография. 2-е изд., доп. – СПб. Из-во: «Лань», 2016. – 612 с.



Академик
Каргин В.А.

УДК 539.217.1

Жохов Илья Сергеевич

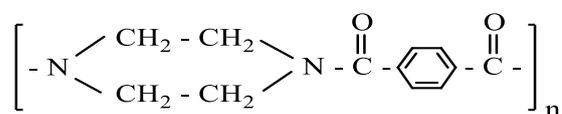
ОПРЕДЕЛЕНИЕ УДЕЛЬНОЙ ПЛОЩАДИ ПОВЕРХНОСТИ ПОЛИАМИДА ПТ-33 И СОПОЛИАМИДА 6ПТ-70

Руководитель: Лагушева Е.И.

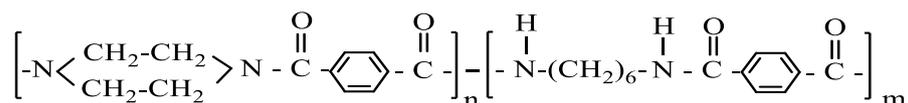
Тверской государственный технический университет, г. Тверь
Кафедра химии и технологии полимеров

Методом газожидкостной поликонденсации высокорреакционноспособных мономеров в пенном режиме получены различные жирно-ароматические полиамиды (в том числе фибриды). Для исследования выбраны пиперазинсодержащие полиамиды [1]:

– Полиамид ПТ-33:



– Сополиамид 6ПТ-70:



Исследования представленных выше полиамидов проводились с помощью анализатора пористости Beckman Coulter SA 3100 [2].

Результаты расчёта удельной площади поверхности полиамида ПТ-33 и сополиамида 6ПТ-70 представлены в таблице.

Таблица. Результаты расчета удельной площади поверхности

Модель расчёта	Удельная площадь поверхности, м ² /г	
	ПТ-33	6ПТ-70
t-метод Хэлси	0	0,286
Лэнгмюр	6,263	7,811
БЭТ	6,738	7,221

Таким образом, у полиамида ПТ-33 и сополиамида 6ПТ-70 площадь поверхности мезопор отличается несущественно. Это связано с менее плотным расположением пор, что увеличивает площадь внешней поверхности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Газожидкостная поликонденсация: монография / В.А. Никифоров и др., 2004. 268 с.
2. SA 3100, адсорбция, десорбция – Beckman Coulter [Электронный ресурс]. Режим доступа – <https://www.mybeckman.ru/particle-characterization/sa-3100>, свободный. – (Дата обращения 04.03.2022).

УДК 541.49:615.33

Зеников Герман Романович

ВЛИЯНИЕ ХИТОЗАНА НА ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЕ В ВОДНЫХ СИСТЕМАХ L-ЦИСТЕИН-НИТРАТ СЕРЕБРА-СУЛЬФАТ МЕДИ

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

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

В данной работе изучается гелеобразование в низко-концентрированных водных растворах серусодержащей аминокислоты L-цистеин (L-Cys), нитрата серебра, сульфата меди и низкомолекулярного хитозана (ХЗ). Биополимер ХЗ обладает рядом уникальных свойств, таких как биосовместимость, способность к биодеградации, нетоксичность, антимикробная активность, что расширяет спектр потенциального применения материалов на основе L-Cys-AgNO₃ систем.

Были исследованы две серии образцов, полученных двухстадийным методом. На первой стадии синтезируют цистеин-серебряный раствор (ЦСР), на второй – в ЦСР добавляют инициаторы гелеобразования – электролит (CuSO₄) и ХЗ. Для оценки гелеобразующей способности ХЗ использовали образцы, содержащие только CuSO₄. Отношение молярных концентраций L-Cys к ионам Ag⁺ в ЦСР составляет 1:1,27. Концентрацию электролита в образцах изменяли в интервале 0,2 - 1 мМ, а ХЗ – от 0,01 до 0,05 об.%.

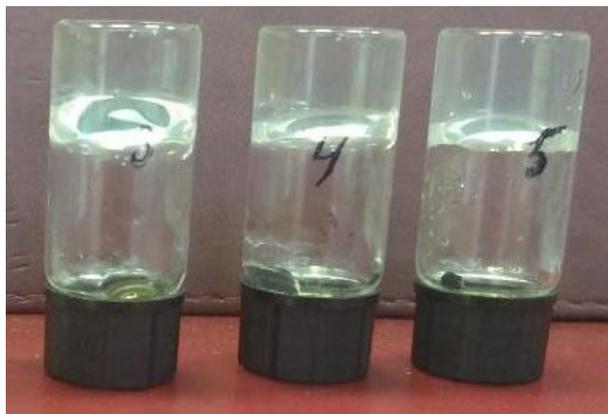


Рисунок. L-Cys-AgNO₃ образцы с различным содержанием ХЗ и CuSO₄ через 2 ч после синтеза

Установлено, что в определённом концентрационном диапазоне добавление ХЗ в систему L-Cys-AgNO₃-CuSO₄ способствует образованию более прочных гелей. Устойчивость гелей во времени тестировали путем переворачивания виал (рисунок) и измерением вязкости на вибровискозиметре. С помощью УФ спектроскопии и динамического

светорассеяния установлено, что добавление инициаторов гелеобразования в систему вызывает изменение электронной конфигурации цепочечных кластеров (-Ag-S(R)-)_n, где R – остаток L-Cys, их размеров, и, как следствие, формирование фрагментов гель-сетки.

Данная работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии центра коллективного пользования ТвГУ.

УДК 543.611

Зуева Алёна Сергеевна

ТИТРИМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ АСПИРИНА РАЗНЫХ ПРОИЗВОДИТЕЛЕЙ

Руководитель: Баранова Н.В.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

Одна из серьёзных проблем здравоохранения России в настоящее время – контроль качества лекарственных препаратов. Несоответствие заявленного и фактического количества активного вещества в выпускаемых формах могут повлечь за собой серьёзные последствия при лечении болезней.

В качестве объекта исследования был выбран аспирин четырёх различных производителей, содержащие ацетилсалициловую кислоту в качестве активного вещества. Количественное определение ацетилсалициловой кислоты проводили методами алкалиметрического и бромометрического титрования [1]. Результаты исследования приведены в таблице 1.

Таблица 1

Результаты количественного определения ацетилсалициловой кислоты

Метод количественного определения	Исследуемые образцы							
	АО «ПФК Обновление», Россия		ОАО «Фармстандарт- Лексредства», Россия		«Байер Биттерфельд ГмбХ», Германия		«ФП Оболенское», Россия	
	Теор. масса, мг	Практич. масса, мг	Теор. масса, мг	Практич. масса, мг	Теор. масса, мг	Практич. масса, мг	Теор. масса, мг	Практич. масса, мг
Алкалиметрический анализ	500,00	486,54	500,00	499,04	300,00	296,62	50,00	49,66
Бромометрический анализ	500,00	486,33	500,00	498,38	300,00	296,27	50,00	49,42

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Государственная фармакопея XIV. Ацетилсалициловая кислота. М: МЗ РФ, 2018. С.3413.

УДК 537.226.4

Иванов Владислав Владимирович

ВЛИЯНИЕ ПОДСВЕТКИ НА ДИСПЕРСИЮ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК В ПЛЁНОЧНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$

Руководитель: Кислова И.Л.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

В настоящее время большое внимание уделяется исследованию сегнетоэлектрических плёнок $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ [1]. Объекты исследования были получены методом вакуумного испарения в квазизамкнутом объеме. Образцы напылялись на алюминиевую подложку. Толщина пленок составляла от 0,75 мкм до 1,5 мкм, площади электродов – от $2 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2$ до $25 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2$. Из полученных данных (см. рис. 1 а) видно, что подсветка образцов приводит к росту значения $\text{tg} \delta$ во всём исследуемом частотном интервале. Кроме того, происходит увеличение диэлектрической проницаемости ϵ при низких частотах с подсветкой зеленым светом и красным светом (см. рис. 1 б). Наиболее значительные изменения $\text{tg} \delta$, испытывает в низкочастотной области от 25 до 10^4 Гц. В этой области частот повышенные значения $\text{tg} \delta$, как в отсутствии, так и при подсветке объясняется вкладом проводимости по постоянному току в диэлектрические свойства плёнок $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$. Наибольшие изменения $\text{tg} \delta$ испытывает при подсветке красным светом. В частотном диапазоне свыше 10^3 Гц наблюдается выраженный максимум тангенса угла диэлектрических потерь.

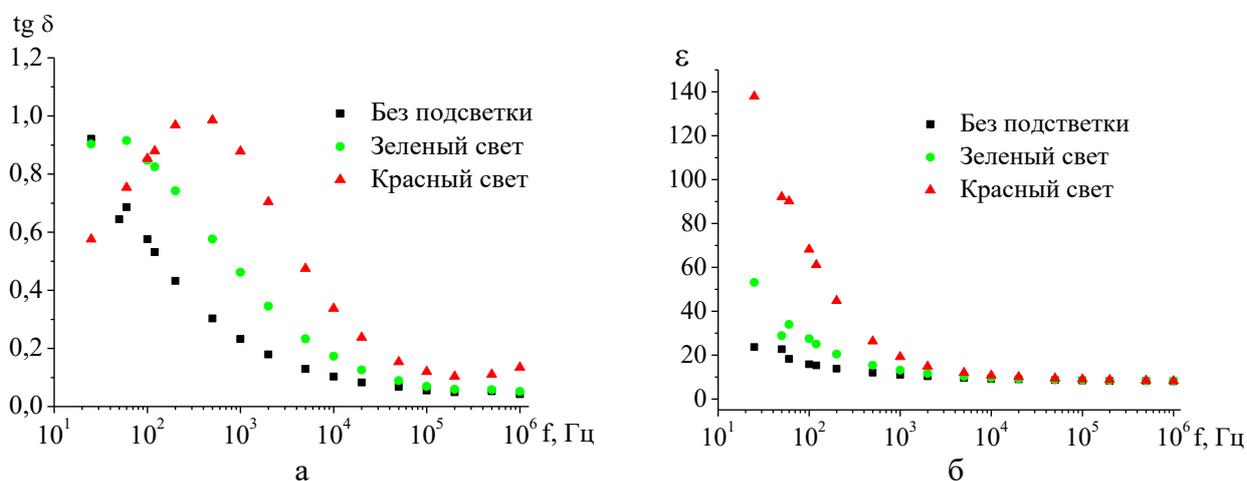


Рис. 1.

Влияние подсветки электромагнитным излучением с длинами волн $\lambda=532$ нм (зеленый свет) и $\lambda=650$ нм (красный свет) на изменение диэлектрического отклика в пленках SPS.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Li Y., Singh D.J. // Physical Review Materials. 2017. V. 1. I. 7. P. 075402.

УДК 546.46

Иванова Александра Андреевна

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ЭТИЛЕНДИАМИНТЕТРААЦЕТАТОАКВАМАГНИЯ

Руководитель: Алексеев В.Г.

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Структура комплекса $[\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})\text{edta}]^{2-}$ (рис.) рассчитана методом DFT с использованием базиса 6-31G**++ и различных hybrid-GGA функционалов, рекомендованных в работе [1]. Как видно из таблицы, результаты, наиболее близкие к экспериментальным данным [2] обеспечивает использование функционалов M05-2X-D3 и M06-2X-D3.

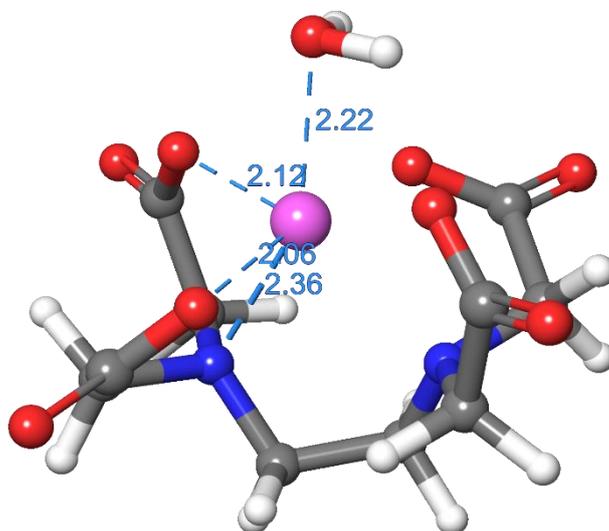


Рис. Изображение модели этилендиаминтетраацетатоаквамагния

Таблица: Длина химических связей в ангстремах

Связь	Эксперимент	B3LYP-D3	M05-2X-D3	M06-D3	M06-2X-D3	M06-HF
Mg–O (H ₂ O)	2.06	2.33	2.25	2.28	2.22	2.22
Mg–O	2.08	2.08	2.07	2.07	2.06	2.07
Mg–O	2.27	2.11	2.12	2.11	2.12	2.13
Mg–N	2.38	2.41	2.36	2.42	2.36	2.34

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

- Goerigk L., Hansen A., Bauer C., Ehrlich S., Najibi A., Grimme S. // Physical Chemistry Chemical Physics. 2017. Vol.48. P.32184.
- Stezowski J.J., Countryman R., Hoard J.L. // Inorganic Chemistry. 1973. Vol.12. № 8. P.1749–1754.

УДК 29.03.85

Капранов Артём Андреевич

ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ НАБЛЮДЕНИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

Руководитель: Белов А.Н.

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

В рамках реализации образовательных программ физического и технического профиля студенты выполняют лабораторный практикум по изучению физических свойств жидких кристаллов. Для многих лабораторных установок требуется модернизация с учетом современных подходов к физическому эксперименту и минимизации финансовых и материальных расходов.

Создан программно-аппаратный комплекс для наблюдения фазовых переходов жидких кристаллов. Программная компонента была написана в среде разработки LabVIEW [1, 2]. Аппаратная часть состоит из цифрового микроскопа USB Digital Microscope 20x-200x, датчика температуры МАХ6577, любого источника питания от 0В до 50В, ПК. Регистрация и дискретизация данных измерений осуществляется с помощью звуковой карты. Частота дискретизации и разрядность удовлетворяют требованиям проведения измерений. Микроскоп имеет следующие характеристики: разрешение в режиме фото и видео – от 160x120 до 2560x2048, ручная фокусировка от 10мм до 500мм, частота кадров – 30 к/с, увеличение от 20x до 200x, USB 2.0 интерфейс. Датчик температур имеет следующие характеристики: стандартный рабочий температурный диапазон от -40°C до +125°C, погрешность $\pm 0.5^\circ\text{C}$, маленький 6-контактный SOT23 корпус.

В настоящее время программно-аппаратный комплекс проходит тестирование и апробацию на физико-техническом факультете Тверского государственного университета.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Тревис Д. LabVIEW для всех; пер. с англ. Н.А. Клушин. М.: ДМК Пресс; ПриборКомплект, 2005. 544 с.
2. Васильев А.С., Лашманов О.Ю. Основы программирования в среде LabVIEW. СПб: Университет ИТМО, 2015. 82 с.



УДК 546.562

Караулова Дарья Александровна

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ МЕДИ(II) С ЭТИЛЕНДИАМИН-N,N-ДИПРОПИОНОВОЙ КИСЛОТОЙ

Руководитель: Алексеев В.Г.

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Спектрофотометрическим методом молярных отношений лиганда исследовано взаимодействие анионов комплексона асимметричного строения этилендиамин-N,N-ди-3-пропионовой кислоты (ас-ЭДДП) с ионами меди(II). Исследование проведено в водном растворе при pH = 10 на приборе СФ-2000 (рис.1). Показано, что ас-ЭДДП образует с Cu(II) в слабощелочной среде билигандные комплексы (рис. 2). Таким образом результаты СФ исследования полностью согласуются с результатами ранее проведенного потенциометрического исследования.

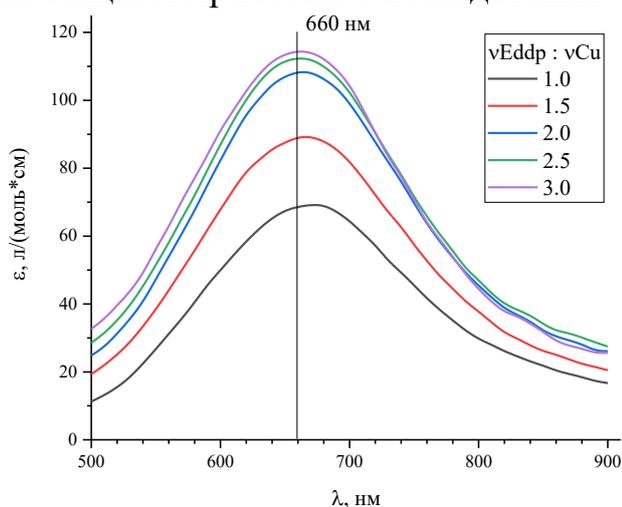


Рис.1.:
Спектры растворов, содержащих Cu(NO₃)₂ и ас-ЭДДП в различных молярных отношениях при pH = 10

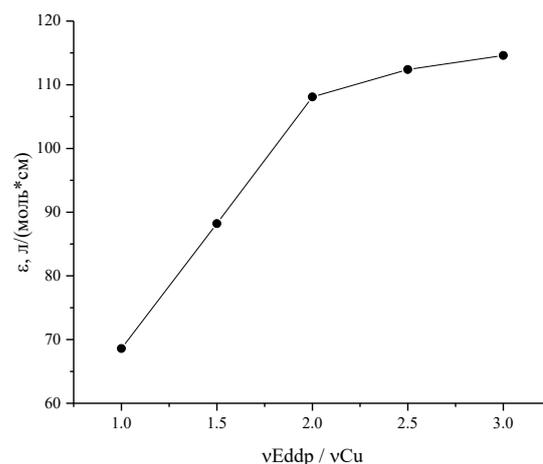


Рис. 2.:
Зависимость молярного коэффициента поглощения от соотношения ас-ЭДДП:Cu(II).

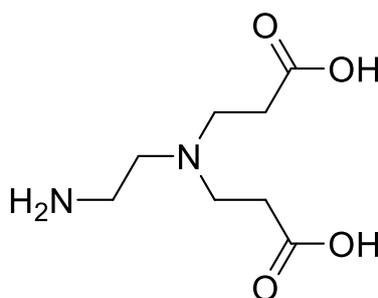


Рис.3. Структурная формула ас-ЭДДП

УДК: 548.57

Карелина Кристина Сергеевна

ИССЛЕДОВАНИЕ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ КЕРАМИКИ ТИТАНАТА БАРИЯ – КАЛЬЦИЯ

Руководитель: Калугина О.Н., Малышкина О.В.

ФГБОУ «Тверской государственный университет»

Кафедра прикладной физики

Керамика титаната бария $BaTiO_3$ (ТБ) – одна из первых сегнетоэлектрических керамик, полученная еще в середине прошлого века [1, 2]. В связи со сравнительно низкой температурой фазового перехода, по сравнению с температурой керамики цирконата – титаната свинца (ЦТС), для практического применения в качестве пьезоэлектрических преобразователей ее используют только в качестве добавки к системе ЦТС [3, 4]. Недостатком материала ЦТС является высокое содержание свинца, которое создает опасность при обработке, ограничивает применение, и представляет потенциальную экологическую опасность при утилизации. В последние годы, регулирующие органы во всем мире вводят строгие ограничения на использование свинца [5]. В связи с отсутствием бессвинцовых керамик, способных заменить свинецсодержащие на важнейших направлениях их применения, в настоящее время сделано исключение для пьезоэлектриков. Значительные исследования в области бессвинцовых альтернатив ЦТС начались более пятнадцати лет назад. Несмотря на значительные усилия в деле разработки таких материалов, предпринятые за последние 15 лет, равноценной замены материалу ЦТС в настоящее время еще не найдено. Проблема поиска альтернативы материалу ЦТС заставляет вернуться к уже изученным материалам, и путем модификации состава попытаться устранить те недостатки, которые в свое время помешали их широкому практическому применению в качестве пьезопреобразователей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Окадзаки, К. Технология керамических диэлектриков / К. Окадзаки; пер. с японского М.М. Богачихина, Л.Р. Зайонца. – М.: Энергия, 1976. – 336 с.
2. Смоленский, Г.А. Сегнетоэлектрические свойства твердых растворов станата бария в титанате бария / Г.А. Смоленский, В.А. Исупов. // Журнал технической физики. – 1954. – Т. 24. – № 8. – С. 1375-1386.
3. Advanced piezoelectric materials. Science and technology / ed. by K. Uchino. – Oxford, Cambridge, Philadelphia, New Delhi: Woodhead Publishing Limited, 2010. – 696 p.
4. Головнин, В.А. Физические основы, методы исследования и практическое применение пьезоматериалов / В.А. Головнин, И.А. Каплунов, Б.Б. Педько, О.В. Малышкина, А.А. Мовчикова. – М.: ТЕХНОСФЕРА, 2013. – 272 с.
5. Directive 2002/95/EC of the European Parliament and of the Council of 27 January 2003 on the restriction of the use of certain hazardous substances in electrical and electronic equipment // Official Journal of the European Union L 37. – 2003. – V. 46. – P. 19-23.

УДК: 544.344.015.3

Кибирева Арина Владимировна

МАТЕРИАЛЬНЫЕ БАЛАНСЫ В СИСТЕМАХ Li,K,Pr||Cl, Li,K,Pu(Rb)||F

Руководители: Парфенова М.Д., Зеленая А.Э.

Институт физического материаловедения СО РАН, г. Улан-Удэ
 Сектор компьютерного конструирования материалов

Рассмотрен один из вариантов построения фазовой диаграммы системы LiF-KF-RbF [1-3]. На рис. 1а,б показаны две поверхности смены типа трехфазной реакции в концентрационной проекции и в аксонометрии. Диаграмма вертикального материального баланса (рис. 1в) для центра масс G (0.16, 0.46, 0.48), отражает превращение перитектической $L+KF \rightarrow RbF$ ($L+B \rightarrow C$) реакции ($\Delta m_B < 0, \Delta m_L < 0, \Delta m_C > 0$) в эвтектическую $L \rightarrow KF+RbF$ ($L \rightarrow B+C$) реакцию ($\Delta m_B > 0, \Delta m_L < 0, \Delta m_C > 0$).

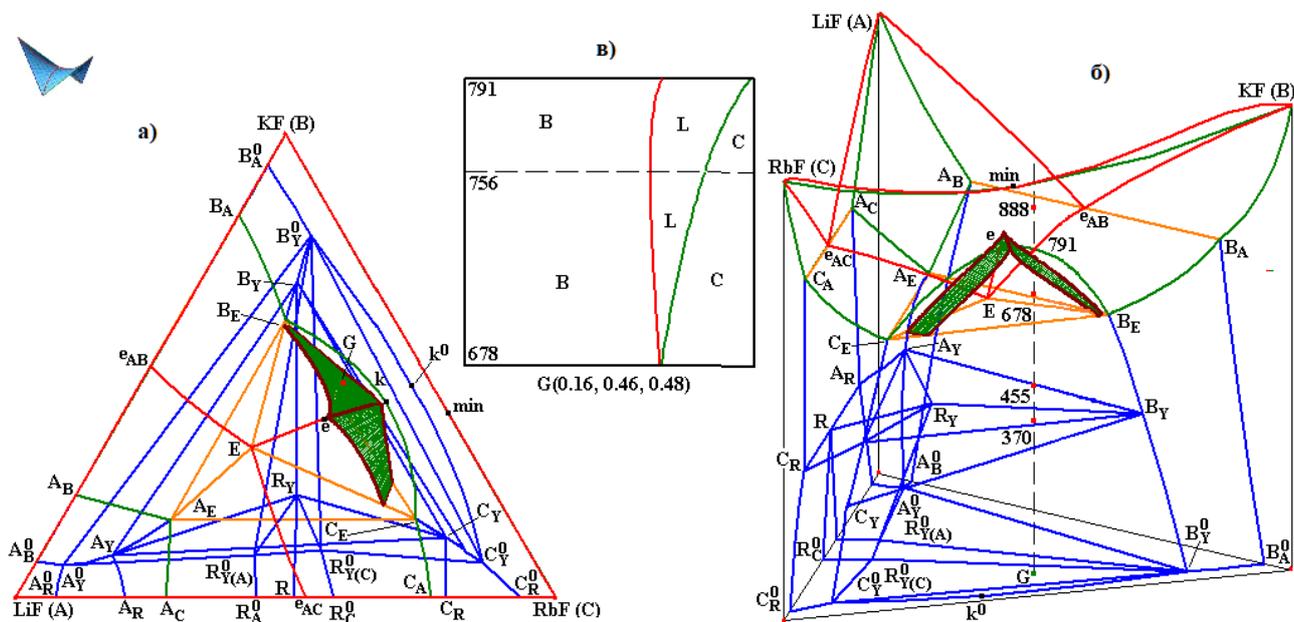


Рисунок 1. Смена типа трехфазной реакции в системе LiF-KF-RbF.

Исследование выполнено в соответствии с госзаданием ФГБУН ИФМ СО РАН на 2021-2023 гг. (проект № 0270-2021-0002).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Beneš O., Konings R.J.M. // J. Nucl. Mater. 2008. Vol. 377. P. 449–457.
2. Ghosh S., Ganesan R., Sridharan R., Gnanasekaran T. // Thermochemica Acta. 2017. Vol. 653. P. 16–26.
3. Vorob'eva V.P., Zelenaya A.E., Lutsyk V.I., Parfenova M.D. // Russ. J. Phys. Chem. 2022. V. 96. (в печати).

УДК 635,24

Кириллова Екатерина Алексеевна

ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ВОЗДЕЛЫВАНИЯ ТОПИНАМБУРА С ПРИМЕНЕНИЕМ НЕКОРНЕВЫХ ПОДКОРМОК КОМПЛЕКСНЫМИ УДОБРЕНИЯМИ

Руководители: Усанова З.И., Смирнова И.Н.

Тверская государственная сельскохозяйственная академия г. Тверь
Кафедра агробиотехнологий, перерабатывающих производств и семеноводства

Топинамбур (*Helianthus tuberosus L.*) – высокопродуктивная экологически пластичная культура многостороннего использования. Получение экологически чистой продукции для пищевых и лечебных целей требует разработки инновационных технологий с наименьшим применением минеральных удобрений и агрохимикатов. В литературе появились сведения о высокой роли комплексных удобрений в повышении урожайности и качества продукции клубнеплодов. В связи с этим нами проведены комплексные исследования в двухфакторном полевом опыте в 2021 году на дерново-подзолистой легкосуглинистой почве. Схема опыта представлена в таблице. Сорт топинамбура – Скороспелка. Технология возделывания – экологически безопасная. Подкормки при высоте растений 10–15 см и 40–50 см.

Таблица Урожайность топинамбура при некорневых подкормках, ц/га

Комплексные удобрения (В)	Одна подкормка (А)			Две подкормки (А)		
	ботва	клубни	сумма	ботва	клубни	сумма
Вода (контроль)	131,7	244,0	375	109,6	294,8	359,4
Акварин 3	208	357,8	566,7	185,1	347,8	532,8
Акварин 5	227,8	348,8	576,7	197,7	312,4	510,4
Фолирус Премиум	190,9	227,0	467,9	170,8	364,5	534,7
Гумат +7	235,4	316,8	522,3	250,5	425,7	676,2
В среднем	198,9	308,9	507,8	182,7	340,0	522,7
НСР ₀₅ : частных различий				31,9	37,5	69,4
По фактору А				22,5	26,5	49,0
По фактору В				14,3	16,8	31,1

В результате выявлено, что некорневые подкормки всеми видами комплексных удобрений повышают урожай ботвы и клубней топинамбура. Прибавки урожая достоверны, так как они больше, чем НСР₀₅. При одной подкормке наибольшие прибавки урожая клубней (46,7 и 43%) обеспечило опрыскивание Акварином 3 и Акварином 5. При двух подкормках самым эффективным оказалось удобрение Гумат+7, прибавка урожая клубней – 70,4%. В этом варианте получена максимальная урожайность в опыте: ботвы-250,5 ц/га, клубней-425,7 ц/га, суммы-676,2 ц/га. Повышение урожайности при некорневых подкормках обеспечено за счет улучшения фотосинтетической деятельности растений в агроценозах.

УДК 544.147.3

Ковальчук Ксения Михайловна

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ НЕИОНОГЕННЫХ ПАВ НА ЗНАЧЕНИЕ И СКОРОСТЬ СЕДИМЕНТАЦИИ СУСПЕНЗИИ МЕНТОЛА

Руководитель: Веролайн Н.В.

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

В настоящей работе для исследования особенностей седиментационной устойчивости суспензии ментола в качестве стабилизирующих компонентов были выбраны твин-80, сорбитан моноолеат SPAN-80, додецилсульфат натрия и синтанол ДС-10.

Седиментационный анализ полученных суспензий состоял в наблюдении во времени за движением границы осветления растворов, находящихся в цилиндре одинакового диаметра и одинаковой высоты. Измеряя расстояние в мм, на которое сместилась граница осветления за определенное время, можно определить скорость седиментации дисперсной системы. На основании измеренных значений расстояния, на которое сместилась граница осветления (S), и общей высоты столба дисперсии в цилиндре H=50 мм были рассчитаны значения седиментации за весь период наблюдения (10 суток) для каждой системы в процентах, как отношение $(S/H) \cdot 100\%$.

Таблица:

Значение седиментации (%) для суспензий ментола с различными ПАВ: 1 – твин-80; 2 – синтанол ДС-10; 3 – додецилсульфат натрия; 4 – сорбитан моноолеат SPAN-80.

№ раствора	$(S/H) \cdot 100\%$
1	20,1
2	15,7
3	10,2
4	7,4

Скорость седиментации дисперсной фазы описывали тангенсом угла наклона. Максимальное значение 0,85 мм/сут. имеет дисперсия с твином-80 в качестве стабилизатора коллоидной системы. Минимальное значение имеет суспензия с сорбитаном моноолеатом SPAN-80. Вторым по стабилизирующей активности выступает синтанол ДС-10 (скорость седиментации на выбранном участке 0,63 мм/сут.). Затем следует суспензия додецилсульфата натрия (скорость седиментации 0,30 мм/сут.).

Частицы молекулы сорбитана моноолеата SPAN-80 затрудняют агрегацию частиц гидрофобного вещества, поэтому значение и скорость седиментации для данного стабилизатора являются наименьшими.

УДК: 004.454

Коверина Валерия Олеговна

РЕАЛИЗАЦИЯ ДРАЙВЕРА ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ИНТЕРФЕЙСА RGB ДЛЯ LCD ЭКРАНА

Руководитель: Макаров В.В.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

При разработке современных потребительских, торговых и промышленных устройств производители все чаще сталкиваются с задачей графического отображения информации. Это касается как различных бортовых компьютеров, портативных устройств, так и панелей управления и всевозможных счетчиков. Еще десятилетие назад для большинства задач было вполне достаточно использовать во встраиваемых устройствах сегментные или знакосинтезирующие дисплеи. Однако в результате быстрого развития потребительской электроники, а также благодаря удешевлению технологии производства с каждым годом растет спрос на графические дисплеи, увеличиваются диагонали экранов, уделяется большое внимание качеству интерфейса – его плавности, удобству, скорости отклика.

В рамках данной работы был разработан драйвер параллельного интерфейса RGB жидкокристаллического экрана TFT Innolux AT050TN22 для микроконтроллера LPC1788 (на рис. 1 представлен внешний вид микроконтроллера LPC1788 - а и экрана Innolux AT050TN22 - б). Для решения поставленной задачи были реализованы: программная конфигурация RGB драйвера LCD в микроконтроллере LPC1788; препроцессорный функционал, позволяющий менять ориентацию изображения; механизм двойной буферизации, позволяющий избавиться от случаев вывода на экран недорисованного изображения. Кроме того, проведена инициализация блока памяти контроллера, отвечающая за хранение 512-байтовой цветовой палитры LCD, что позволило минимизировать затраты оперативной памяти.



а



б

Рис. 1. Внешний вид устройств: а – LPC1788 ,б – Innolux AT050TN22.

УДК 543.243.1

Козликова Елена Евгеньевна

АНАЛИЗ СОДЕРЖАНИЯ ЙОДА В МОРСКОЙ КАПУСТЕ

Руководитель: Никольский В.М.

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

Человечество всегда стремилось найти средства, способные продлить молодость, долголетие. Одним из источников здоровья, ценнейшим кладом полезных натуральных компонентов считаются бурые водоросли (морская капуста). В России морская капуста растет на Дальнем Востоке. В частности, Охотское море считается одной из богатейших плантаций морской капусты во всем мире. В странах Востока эту уникальную водоросль выращивают в искусственных условиях.

Морская капуста имеет уникальный сбалансированный состав и содержит важнейшие для организма витамины, минералы, микроэлементы. Среди них важнейшим считается йод. Благодаря его биологическому происхождению йод из морской капусты эффективно усваивается организмом. Этот химический элемент очень востребован человеком, однако, его избыточное поступление в организм чревато негативными последствиями. Если другие вещества (в случае переизбытка) выводятся из организма естественным путем, то с йодом этого не происходит. Он постепенно накапливается и вызывает гипотериоз (синдром снижения уровня гормонов щитовидной железы), поскольку суточная потребность человека в йоде не превышает 200 мкг, в то время как в одной чайной ложке сухого порошка из водоросли его может быть в десять раз больше (до 2000 мкг).

Чтобы морская капуста, как пищевая добавка, приносила пользу и не вызвала функционального расстройства, необходимо тщательно контролировать в ней содержание йода. В нашем эксперименте содержание йода определяли в аптечной (сухой) морской капусте (российский производитель ЗАО Ст.-Медиафарм) и в магазинной морской капусте (сухой) NoriChips (российского бренда SenSoy). В результате мы получили данные: аптечная морская капуста – 247,6 мг I на 100 г продукта; NoriChips – 216 мг I на 100 г. Эти данные соответствуют справочным материалам: аптечная морская капуста (сухая) от 200–250 мг/100 г; магазинная морская капуста (сухая) 50–220 мг/100 г [1].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Где очень много йода? // Медицинский справочник: электронный справочник. URL: <https://med-tutorial.ru/med-article/37-zdorove-pravilnoe-pitanie/gde-ocen-mnogo-ioda> (дата обращения (13.02.2022))

УДК 541.6

Козлова Рада Романовна

ТЕОРЕТИКО-ГРАФОВЫЙ ПОДХОД В ИССЛЕДОВАНИИ КОРРЕЛЯЦИЙ «СТРУКТУРА – ТЕПЛОЁМКОСТЬ» ГЛИКОЛЕЙ

Руководитель: Виноградова М.Г.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Экспериментальных сведений по корреляции «структура– свойство» немного, в том числе и для гликолей. Именно поэтому актуальной задачей современной химии является установление связи между строением соединений и их свойствами. Решение этой задачи даже для одного класса соединений значительно расширяет возможности теоретической химии.

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций «структура-теплоёмкость» в двухатомных спиртах. В работе применяются методы теории графов и линейной алгебры, методы статистической обработки данных и методы регрессионного анализа, метод наименьших квадратов (МНК).

Для достижения поставленной цели были построены расчетные схемы в разных приближениях. Так в третьем приближении для гликолей имеем:

$$P_{C_nH_{2n+2}O_2} = p_1b + p_1'b' + p_2\Gamma_{CC} + p_2'\Gamma_{CO} + p_2''\Gamma_{OO} + R\Delta_{CCC} + \\ + R'\Delta_{CCO} + R''\Delta_{COO} + p_3\tau_{CC} + p_3'\tau_{CO} + p_3''\tau_{OO} + p_4\omega_{CC} + p_4'\omega_{CO} + p_4''\omega_{OO}$$

Здесь p_1, p_2, p_3, p_4 – соответственно такие индексы как число путей длины один, два, три; R – число троек смежных рёбер; b, Γ_{CC} – соответствующие параметры. Так как в результате нехватки экспериментальных данных получилась система с линейнозависимыми столбцами, то параметры $\Gamma_{CC}, \Gamma_{OO}, \Delta_{CCO}, \Delta_{CCC}, \tau_{CC}, \tau_{OO}, \omega_{CC}, \omega_{OO}$ пропадают, а параметры b и b' были заменены на параметр $a = p_1b + p_1'b'$.

По данной схеме проведены численные расчёты C_p^0 (ж, 298 К) гликолей. Получены новые данные, согласующиеся с экспериментом [1].

Таблица:

Результаты расчета C_p^0 (ж, 298 К) гликолей в третьем приближении (в Дж/мольК)

Значения параметров оценки C_p^0 (ж, 298 К) и результаты расчёта	Параметр			
	a	Γ_{CO}	τ_{CO}	ω_{CO}
	118,236	-101,964	13,355	-106,191
$\bar{\varepsilon}$	2,1			
ε_{\max}	±3,0			

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Lange's Handbook of Chemistry / Editor: J.A. Dean. (15th Edition), McGraw-Hill. 1999. [Электронный ресурс]. — URL: <http://fptl.ru/biblioteka/spravo4niki/dean.pdf> (дата обращения: 20.12.21).

УДК 90.01.85

Комаров Владимир Андреевич

АППРОКСИМАЦИЯ ЧИСЛЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ РАДИОФИЗИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ В БАЗИСЕ ФУНКЦИЙ МАТЬЕ

Руководители: Белов А.Н. Орлов Ю.Д.

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

Одним из направлений совершенствования программно-аппаратных комплексов для радиофизических измерений является повешение эффективности алгоритмов обработки оцифрованных данных. Как правило, полученный массив точек аппроксимируется тригонометрическим рядом вида

$$f(x) = a_0 + \sum_{i=1}^N a_n \cos(\omega_i x) + \sum_{i=1}^M b_n \sin(\omega_i x). \quad (1)$$

Как правило, при использовании (1) для достижения необходимой точности достаточно ограничиться 10–15 слагаемыми.

В ряде задач более оптимальным для этой цели оказывается использование конечных сумм, использующих базис, составленный из функций Матье $ce_n(q, x)$ и $se_n(q, x)$ порядка n и зависящих от параметра q . Тогда, аналогом (1) служит конечная сумма вида

$$f(x) = A + \sum_{i=0}^N a_n ce_n(q, x) + \sum_{i=1}^M b_n se_n(q, x). \quad (2)$$

Особенностью аппроксимации (2) является наличие параметра q , варьирование [1] которого позволяет сократить количество слагаемых по сравнению с (1). Использование аппроксимации (2) с учетом характера прикладной задачи и физической природы измеряемых величин, обеспечивает меньшие вычислительные затраты и повышает эффективность работы программно-аппаратных комплексов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Цирулев А.Н. Потенциал и матричные элементы гамильтониана внутреннего вращения в молекулах в базисе функций Матье // Оптика и Спектроскопия, 2015, т. 119, № 2, с. 199–203



УДК 661.728.7

Корнев Павел Павлович

СОДЕРЖАНИЕ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ В СТЕБЛЯХ КРАПИВЫ ДВУДОМНОЙ ЛЕНИНГРАДСКОЙ ОБЛАСТИ

Руководитель: Осовская И.И.

Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна,
Высшая школа технологии и энергетики
Кафедра физической и коллоидной химии

Крапива двудомная - самый распространённый вид крапивы на территории России. Преимущества крапивы заключается в её обширной распространённости и устойчивости к различным типам климата. Препараты крапивы обладают широким спектром целебных свойств [1].

Целью данной работы является изучение содержания целлюлозы в стеблях крапивы двудомной. Известно содержание целлюлозы в листьях крапивы двудомной, которое составляет в среднем 40–45 % в зависимости от области распространения и периода цветения [2].

Содержание целлюлозы в стеблях крапивы определялось азотно-спиртовым методом [3]. Результаты представлены в таблице. Выявлено высокое содержание целлюлозы в стеблях крапивы.

Таблица:

Результаты опыта по определению содержания целлюлозы

Сырье	Масса воздушно-сухой навески стеблей m_0 , г	Влажность W , %	Масса абсолютно-сухой навески m_1 , г	Масса абсолютно-сухой навески после опыта m_2 , г	Содержание целлюлозы A , %
Стебли крапивы двудомной	1,5346	6,95	1,4279	0,7672	53,73

Работа поддержана персональным грантом Комитета по науке и высшей школе для студентов вузов, расположенных на территории Санкт-Петербурга в 2021 году «Влияние диспергирования на экстракцию биологически-активных веществ крапивы двудомной Ленинградской и Московской областей».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Корнев П.П., Осовская И.И. «Экстрагирование водно-спиртовой смесью биологически-активных веществ крапивы двудомной разных регионов» Сборник тезисов IX Межвузовской конференции-конкурса (с международным участием) научных работ студентов имени члена-корреспондента АН СССР Александра Александровича Яковкина, 18 ноября 2020 года. - СПб.: Типография «НОВБЫТХИМ», 2020. – 294 с.
2. Вершинин М.С. - [Электронный ресурс] / А.С. Вершинин. - Особенности получения целлюлозы из крапивы. – Режим доступа: <https://nauchkor.ru/uploads/documents/5ea34841ca23590001c810ae.pdf>, свободный.
3. Оболенская А. В., Ельницкая З. П., Леонович А. А. Лабораторные работы по химии древесины и целлюлозы: Учебное пособие для вузов. — М.: «Экология», 1991. — 320 с. ISBN5—7120—0264—7

УДК: 582.29

Кострова Полина Алексеевна

НЕКОТОРЫЕ ИТОГИ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОГО ИЗУЧЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ФОТОСИНТЕТИЧЕСКИХ ПИГМЕНТОВ В ЛИШАЙНИКАХ ЗЕЛЕННЫХ ЗОН Г.ТВЕРИ

Руководитель: Павлов М.Н.

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Одно из перспективных направлений использования лишайников - оценка состояния окружающей среды (лихеноиндикация). При этом применяют различные методы, в частности - физико-химические: Фурье-ИК спектральный анализ, атомно эмиссионная спектроскопия и др. Недостатки этих методов: дороговизна оборудования и сложность в подготовке материала. Более доступным является метод, позволяющий косвенно оценить степень загрязнения атмосферы по содержанию в слоевище фотосинтетических пигментов (хлорофиллов *a* и *b*, каротиноидов), которое зависит от уровня техногенного стресса организма лишайника, вызванного воздействием экотоксикантов.

Объекты исследований - образцы слоевищ лишайников широко распространенных видов: Гипогимния вздутая (*Hypogymnia physodes* (L.) Nyl.), Пармелия борозчатая (*Parmelia sulcata* Tayl.), Ксантория настенная (*Xanthoria parietina* (L.)). Места сбора образцов: памятники природы Сахаровский парк и Комсомольска роща, а также дополнительно - фоновая зона (ЦЛГПБЗ). Исследование содержания пигментов проводили спектрофотометрическим методом в ацетоновой вытяжке на спектрофотометре СФ-56. Лишайники при подготовке к анализам были очищены от механических примесей и просушены до воздушно сухого состояния.

Выявлено что, разные виды лишайников отличались неодинаковым содержанием в слоевище фотосинтетических пигментов. Наибольшее их содержание для всех мест сбора отмечено в талломах *H.physodes*, у которого было накоплено от 17,0 до 129,0 мг/100 г хлорофилла *a*, от 20,4 до 76,4 мг/100 г хлорофилла *b* и от 12,6 до 39,5 мг/100 г каротиноидов. Среди всех исследуемых точек сбора наибольшим содержанием хлорофиллов *a*, *b* и каротиноидов в слоевище *H.physodes* (соответственно 129,2; 76,4 и 39,5 мг/100 г), а также хлорофилла *a* в слоевище *P. sulcata* (49,0 мг/100 г) характеризовался ольшаник вблизи обочины дороги в памятнике природы Комсомольская роща. У всех лишайников видов *H. physodes* и *P. sulcata*, собранных в зеленых зонах г.Твери по сравнению с лишайниками из ЦЛГПБЗ отмечено повышение содержания хлорофила *a* на 77 - 660 %, хлорофилла *b* на 66 – 275 % и каротиноидов на 8 – 1654 %, что говорит о высоком уровне их техногенного стресса. В большей степени он проявляется в образцах лишайников вида *H. Physodes*.

УДК: 631.89:635.567:631.589

Кострова Полина Алексеевна

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ УДОБРЕНИЙ В ТЕХНОЛОГИИ ВЫРАЩИВАНИЯ МИКРОЗЕЛЕНИ РУКОЛЫ

Руководитель: Павлов М.Н., Смирнова Т.И.

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Микрозелень (Microgreens) - новая категория продуктов растительного происхождения, обладающая высокой концентрацией биологически активных веществ, а также возможностью круглогодичного выращивания за небольшие сроки (до 10 дней). С целью повышения продуктивности и качества продукции микрозелени нами были подобраны рецептуры комплексных удобрений на основе препаратов серии «Акварин», «Гумат+7» и Витамина С. Исследования проводились в феврале – марте 2021 года в лабораторных условиях Тверской ГСХА. Схема опыта включала варианты удобрений: 1. Вода (контроль); 2. Смесь удобрений «Акварин» и витамина С; 3. Гумат+7; 4. Смесь удобрений «Акварин», витамина С и Гумат+7. Использовали джутовый субстрат. Обработку водой и удобрениями проводили путем замачивания субстрата и полива растений (на 1 лоток - 50 мл/сутки). Объект исследований - индау посевная (рукола) (*Eruca sativa L.*), сорт Сицилия. Дозы удобрений рассчитывали исходя из требований микрозелени к элементам питания. Субстрат замачивали в смеси удобрений по вариантам опыта и раствора препарата «Фитоспорин-М». Густота посева семян - 0,034 г/см². Выращивание проводили при искусственном освещении (12-часовой световой день), учет урожая - методом полной срезки на 7-й день после посева.

Результаты опыта приедены в таблице.

Таблица:

Продуктивность и качество зеленой микрозелени руколы при обработке различными удобрениями

№	Вариант	Урожайность, кг/м ²	Содержание β – каротина, мкг/100 г микрозелени
1	Контроль (вода)	1,71	607
2	Акварин + Вит.С	2,09	634
3	Гумат + 7	2,14	587
4	Акварин + Вит.С+ Гумат+7	2,29	834
5	НСР ₀₅	0,13	-

Как показывают результаты исследования, смесь удобрений позволяет существенно повысить урожайность микрозелени. При этом совместное применение препаратов серии «Акварин», витамина С и Гумата+7 было эффективнее отдельного.

УДК: 544.169

Котомкин Алексей Викторович^{1,2}

ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ ПЕРФТОРАЛКАНОВ

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

¹ Тверской государственный университет, Тверь
Кафедра общей физики

² Тверской государственный медицинский университет, Тверь
Кафедра физики, математики и медицинской информатики

Равновесная геометрия и распределение электронной плотности молекул перфторалканов $\text{CF}_3-(\text{CF}_2)_n-\text{CF}_3$, где $0 \leq n \leq 5$, получены с помощью программы GAUSSIAN 03 методом B3LYP/6-311++G(3df,3pd) [1]. Заряды q , энергии E и объемы V «топологических» атомов вычислены в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» QTAIM [2] с использованием программы AIMALL [3] и суммированы в параметры функциональных групп $q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$. Погрешность расчёта парциальных зарядов составила не более 0,001 а.е. (1 а.е. заряда = $1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл), энергий – не более 10 кДж/моль, объемов – не более 0,01 Å^3 .

Стандартная (невозбужденная) группа CF_2 появляется в $\text{CF}_3-(\text{CF}_2)_n-\text{CF}_3$ при $n = 5$. Таким образом, индуктивное влияние концевых CF_3 распространяется в перфторалканах на две ближайшие к ним CF_2 . Сравнением $q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$ выделены величины электронных параметров переносимых групп (Таблица). Сопоставлением групповых зарядов $q(\text{CF}_2)$ и $q(\text{CF}_3)$ получено неравенство электроотрицательностей групп рассматриваемого ряда:

$$\chi(\text{CF}_2) < \chi(\text{CF}_3)$$

Таблица:

Параметры стандартных функциональных групп CF_3 и CF_2 , определенные по перфторалкану $\text{CF}_3-(\text{CF}_2)_5-\text{CF}_3$.

	$q(R)$, а.е.	$E(R)$, кДж/моль	$V(R)$, Å^3
CF_3	-0,006	-886880	47,76
CF_2	0,001	-624530	32,58

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 03 (Revision E 0.1 SMP). Gaussian Inc., Pittsburgh PA, 2007.
2. Бейдер Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория. М.: Мир, 2001. 532 с.
3. AIMAll (Version 11.09.18, Professional), Todd A. Keith, 2010 (<http://aim.tkgristmill.com>).

УДК 543:615.2.3

Кравец Ольга Богдановна

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА КОМБИНИРОВАННЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ

Руководитель: Баранова Н.В.

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», г. Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

Витамины и лекарственные препараты улучшают качество нашей жизни и укрепляют здоровье. Поэтому контроль определение подлинности состава лекарственного средства помогает определять их эффективность для человеческого организма.

Определено количественное содержание солей магния и висмута в лекарственном препарате «Викаир». «Викаир» – комбинированное лекарственное средство, оказывающее вяжущее, антацидное, слабительное и спазмолитическое средство. Карбонат магния, входящий в состав препарата, снижает кислотность желудочного сока, уменьшает активность пепсина. Нитрат висмута образует защитную пленку на слизистой оболочке желудка, оказывая противовоспалительное, бактерицидное средство.

Методом исследования был выбран титриметрический анализ. Раствор препарата титровали Трилоном Б в присутствии индикаторов ксиленолового оранжевого и эриохрома черного Т, соответственно. Результаты приведены в таблице 1.

Таблица 1

Результаты количественного определения содержания солей магния и висмута в препарате
«Викаир»

Объект исследования	Карбонат магния		Нитрат висмута	
	$m_{\text{теор}}$, Г	$m_{\text{пр}}$, Г	$m_{\text{теор}}$, Г	$m_{\text{пр}}$, Г
«Викаир», АО «Фармстандарт»	0,0104	0,0098	0,1739	0,0999

На основании результатов исследования можно сделать вывод о том, что масса соли магния соответствует заявленной массе согласно аннотации на лекарственный препарат. Однако количественное содержание нитрата висмута в 1,74 раза меньше заявленной производителем. Поэтому можно сделать вывод о несоответствии содержания определяемого компонента заявленному и, соответственно, о фальсификации препарата.

УДК 543.421/.424

Крюков Тимофей Владимирович

ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДОГО КОМПЛЕКСА НЕОДИМА МЕТОДОМ СКАНИРУЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

Руководитель: Феофанова М.А.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

Координационные соединения находят широкое применение во многих отраслях человеческой деятельности. Координационные соединения катионов редкоземельных элементов используются в качестве маркеров при исследовании различных биохимических процессов. Важной задачей для исследователей является изучение физико-химических свойств подобных металлокомплексов, участвующих в биологических процессах. В последние годы стала актуальной проблема поиска принципиально новых лекарственных препаратов, которые представляют собой металлокомплексы антибиотиков различной химической природы.

Для проведения эксперимента использовали натриевые соли цефазолина (NaCzl) производства компании «Деко» г. Москва. Комплексы были получены в виде осадков в результате взаимодействия в нейтральном водном растворе хлорида неодима и натриевой соли цефазолина в мольном соотношении 1:3, затем были высушены на воздухе при комнатной температуре.

Результаты идентификации полученного комплекса цефазолина с неодимом, осуществленной методом сканирующей электронной микроскопии (за исключением не определяемых этим методом атомов водорода) представлены в таблице.

Таблица: Результаты элементного анализа

С, %		N, %		O, %		S, %		Me, %	
теор.	эксп.	теор.	эксп.	теор.	эксп.	теор.	эксп.	теор.	эксп.
33.16	33.25	22.10	22.18	15.79	15.20	18.95	19.17	9.40	9.64
Вычисленная брутто-формула: $C_{42}NdN_{24}O_{15}S_9$									
Полученная брутто-формула: $C_{42}NdN_{24}O_{15}S_9$									

Полученные данные элементного анализа позволяют установить внутреннюю сферу элементарного комплекса, так как вода удаляется методом вакуумирования. По результатам электронно-зондовой микроскопии, установлено, что состав металлокомплекса отвечает мольному соотношению [металл] : [лиганд] равному 1:3.

УДК 547.556.9

Кудряшова Елена Андреевна

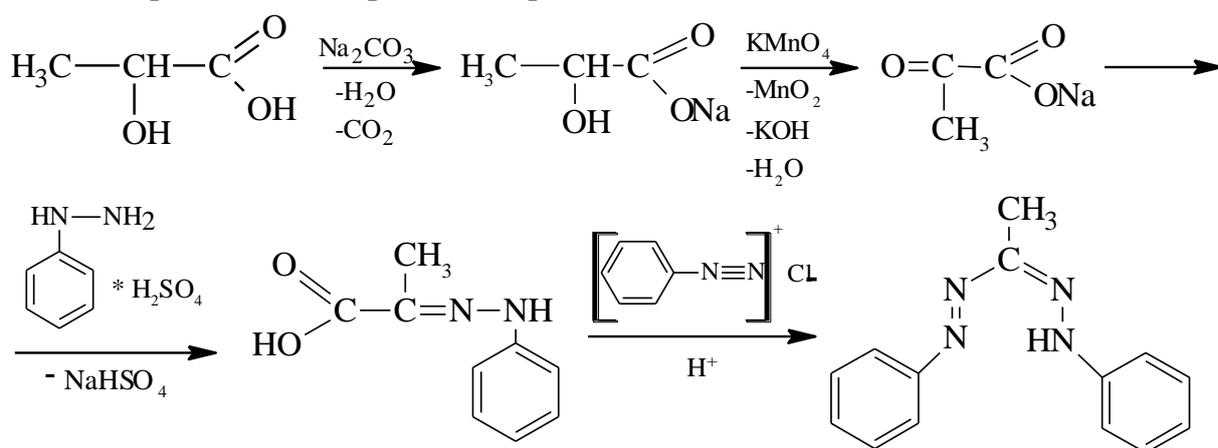
ПОЛУЧЕНИЕ АЗОГИДРАЗОНОВ НА ОСНОВЕ 2-ГИДРОКСИПРОПАНОВОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель: Егорова И.Ю.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Особенность строения азогидразонов - наличие в фармазановой цепи двух кратных связей и атома азота с неподелённой электронной парой обуславливает возможность образования единой сопряженной системы и их способность образовывать различные производные. Формазаны широко применяются как комплексообразователи, используются при изучении ферментативных процессов в клетках. С ионами переходных металлов формазаны образуют ярко окрашенные хелатные комплексы, которые применяются как свето- и термостойкие красители для полиэфирных и полиамидных волокон, а также шерсти. Представленная работа посвящена получению азогидразонов на основе 2-гидроксипропановой кислоты.

Методом синтеза формазанов является реакция азосочетания арилдиазониевых солей с гидразонами альдегидов и α -кетокислот, а также с соединениями, содержащими активированную электроакцепторными заместителями метиленовую группу, протекающим через образование соответствующих гидразонов. В данной работе окислением 2-гидроксипропановой (молочной) кислоты получена 2-оксипропановая (пировиноградная) кислота, из которой последовательным взаимодействием фенилгидразина и фенилдиазония хлорида синтезирован 1,5-дифенил-3-метилазогидразон. Схема реакции представлена ниже:



Определены температура плавления и растворимость полученного соединения, с помощью ИК-спектроскопического анализа подтверждено строение полученного азогидразона. Исследуется хелатирующая способность синтезированного 1,5-дифенил-3-метилазогидразона.

УДК: 537.622

Курносков Юрий Алексеевич

ДОМЕННАЯ СТРУКТУРА РЕДКОЗЕМЕЛЬНОГО ИНТЕРМЕТАЛЛИДА TbFe₂

Руководитель: Семенова Е.М.

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Соединение TbFe₂ при комнатной температуре характеризуется структурой фазы Лавеса (C15) и обладает высокой магнитострикцией [1, 2]. Целью данной работы является экспериментальное изучение магнитной доменной структуры этих соединений.

Синтез исходного сплава был выполнен методом индукционной плавки в атмосфере аргона. Микроструктура полученных слитков была образована двумя фазовыми составляющими: матрица TbFe₂ с включениями TbFe₃.

Исследование магнитной структуры поверхности проводилось на сканирующем зондовом микроскопе Solver Next (NT MDT) методом магнитно-силовой микроскопии (МСМ) с применением двухпроходного режима сканирования.

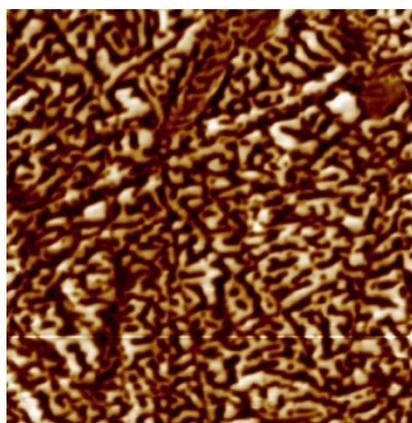


Рис.1. Доменная структура поверхности TbFe₂, выявленная методом МСМ.

На рис.1 представлено МСМ-изображение полей рассеяния доменной структуры на базисной плоскости образца TbFe₂. Видно, что конфигурация доменов поверхности является неупорядоченной. Это связано с тем, что в процессе подготовки поверхности на нее оказывается механическое воздействие алмазными пастами. Поскольку этот состав характеризуется высокими константами магнитострикции (до 10⁻³), то полировка поверхности приводит к стрикционным напряжениям поверхностного слоя и формирует неравновесную доменную структуру. Для устранения напряжений в поверхностном слое и выявления равновесной ДС применяется электрохимическая полировка.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Zaari H. et al. // Chinese Journal of Physics. – 2022. DOI: 10.1016/j.cjph.2021.10.050.
2. Buck S., Fähnle M. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 1999. V. 204. I. 1-2. P. L1-L4.

УДК 541.64:546.57

Кучурова Алена Константиновна

ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЕ В ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОМ РАСТВОРЕ С УЧАСТИЕМ ПОЛИВИНИЛПИРРОЛИДОНА

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

Тверской государственной университет, Тверь, Россия
Кафедра физической химии

Наноструктурированные материалы используются в медицине, электронике, фотонике и других областях. Около 20 лет назад нам удалось синтезировать супрамолекулярный гидрогель на основе низкоконцентрированного раствора (~0.01%) L-цистеина и нитрата серебра, а затем и с использованием других солей серебра (ацетат и нитрит). Был исследован процесс самоорганизации в цистеин-серебряном растворе (ЦСР), приводящий к образованию пространственной сетки геля, а также установлено, что гидрогели обладают высокими антибактериальными и цитотоксическими свойствами, то есть могут быть использованы для заживления ран, ожогов и лечения раковых заболеваний. Однако для создания пленочных и волокнистых материалов, используемых в медицине, целесообразно введение в ЦСР водорастворимых полимеров. Одним из таких полимеров является поливинилпирролидон (ПВП), который обладает способностью образовывать комплексы с ионами переходных металлов, связывать токсины и лекарственные вещества. Например, водно-солевой раствор ПВП используется для дезинтоксикации организма при различных патологических процессах.

Процесс взаимодействия и совместимости ЦСР с ПВП еще не изучен. Поэтому, целью работы является изучение процессов самоорганизации и гелеобразования в водном растворе ЦСР (L-цистеин и ацетат серебра) при добавлении ПВП и электролита (хлорид меди).

В работе использованы водные растворы ЦСР+CuCl₂+ПВП с концентрацией 0.5% при соотношении CuCl₂/ПВП 1/1 и объемами 0.0125, 0.0250, 0.0375. Установлено, что водные растворы ЦСР и ПВП хорошо совмещаются, а при объемах 0.0250 и 0.0375 формируется супрамолекулярный гель. Методами вибрационной вискозиметрии, УФ и ИК спектроскопии показано, что процесс самоорганизации проходит в две стадии. На 1-й стадии в течение 1 суток формируются супрамолекулярные цепочки из молекул меркаптида серебра, а на 2-й при добавлении CuCl₂ через 30 мин образуется прочный гель. Исследования в данном направлении продолжаются.

Благодарность. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-33-90096_a) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.

УДК 29.03.85

Лебедев Вячеслав Сергеевич

УДАЛЕННЫЙ ДОСТУП К УСТАНОВКЕ РЕГИСТРАЦИИ АКТОВ ПОПАДАНИЯ ЧАСТИЦ В ДЕТЕКТОР

Руководитель: Белов А.Н.

Тверской Государственный Университет
Кафедра общей физики

Одним из активных направлений развития технологий удаленного доступа является снижение стоимости реализации, простота использования в совокупности с достаточной функциональностью. Настоящая работа решает задачу реализации удаленного доступа для важной составляющей учебного процесса – лабораторный практикум по курсу общей физики. Разработанный программный комплекс обеспечивает:

- Регистрацию и оцифровку данных
- Передачу данных по протоколу ТСР/IP
- Автоматизированное формирование файла отчета выполнения студентом лабораторной работы
- Рассылка почтовых уведомлений преподавателю

Программная часть реализуется в среде LabView [1]. С учетом требований к точности и объему физического эксперимента, в качестве аппаратного решения рассмотрена платформа Arduino. На основе разрабатываемого программно-аппаратного комплекса планируется реализация лабораторной работы по регистрации частиц полупроводниковым детектором с возможностью удаленного доступа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Тревис Дж. LabVIEW для всех / Джеффри Тревис: Пер. с англ. Клушин Н. А. ~ М.: ДМК Пресс; ПриборКомплект, 2005. ~ 544 с.; ил.



УДК: 544.623.032.73

Лебедев Иван Игоревич

ВЛИЯНИЕ РАСТВОРИТЕЛЯ НА ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ РАСТВОРОВ АММОНИЕВЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Руководитель: Журавлев О.Е.

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Ионные жидкости (ИЖ) представляют собой класс соединений, состоящих исключительно из ионов и имеющих, как правило, низкие температуры плавления (ниже 100 °С). Ионные жидкости могут использоваться в органическом синтезе в качестве растворителей. В связи с этим появляется большой интерес в изучении влияния структуры органического катиона и природы аниона в составе ионной жидкости и используемого растворителя на свойства их растворов.

В данной работе была исследована зависимость электропроводности (ЭП) растворов ИЖ тетрафторборат-анионом и катионом N-алкилтриэтиламмония с различной длиной алкильного заместителя. В качестве растворителей были выбраны ацетон и ацетонитрил.

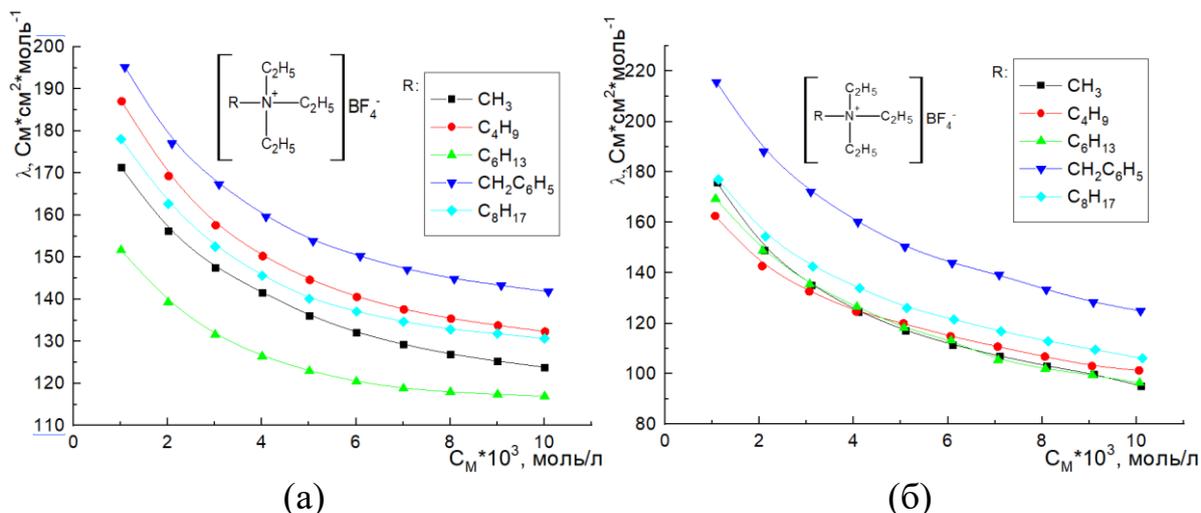


Рис. 1. Зависимость эквивалентной ЭП разбавленных растворов тетрафторборатов N-алкилтриэтиламмония от концентрации в ацетонитриле (а) и ацетоне (б) при 25°С.

Эквивалентная ЭП изученных ИЖ увеличивается с разбавлением раствора. Электропроводность исследованных ИЖ в ацетонитриле ниже, чем в ацетоне. Этот факт объясняется более высоким показателем вязкости для ацетонитрила. В более вязкой среде подвижность ионов снижается, а следовательно, уменьшается электропроводность.

УДК: 541.49

Макарова Екатерина Андреевна

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ АМПИЦИЛЛИНА С ЛАНТАНОИДАМИ

Руководитель: Минина М.В.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

Методом DFT/M-06-HF/CSDZ++** в программе Maestro проведен расчет структуры и энергии (в единицах Хартри) комплексных соединений ампициллина с лантаном, церием и лютецием (рис. 1).

Согласно имеющимся литературным данным для лантаноидов характерно образование с ампициллином гидроксокомплексов [1]. Последовательное введение в систему молекул воды показало, что ионы La^{3+} , Ce^{3+} , Lu^{3+} помимо анионов OH^- и Amp^- могут координировать до 5 молекул воды, что соответствует типичному для Ln (III) КЧ = 8.

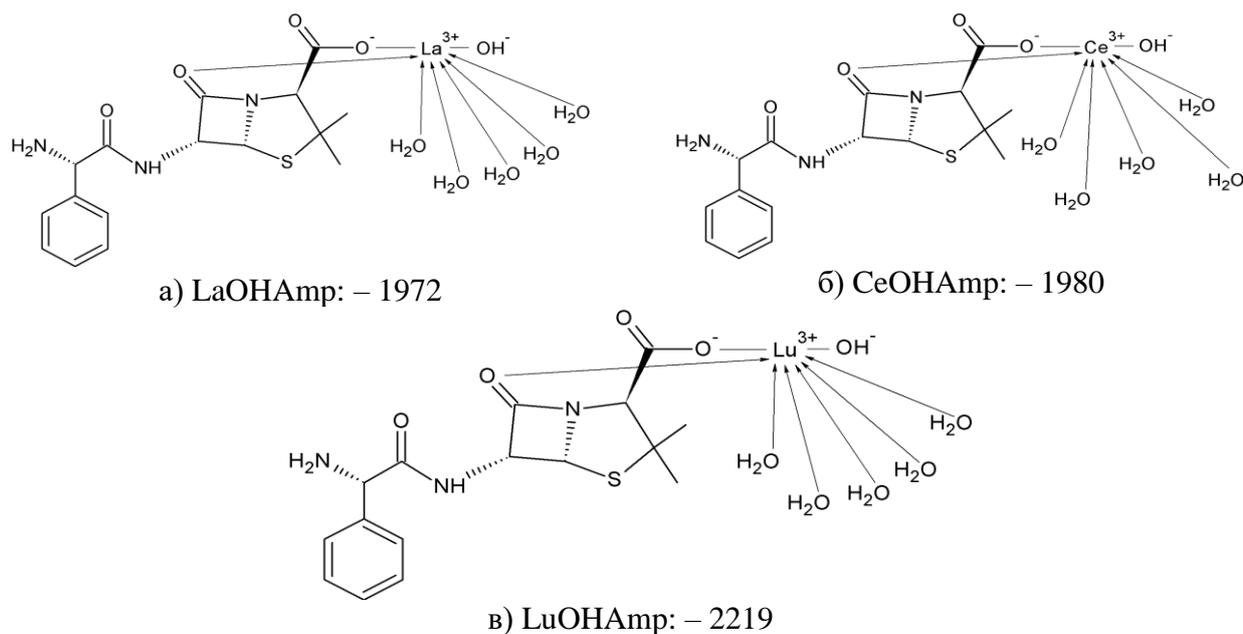


Рис. 1. Структуры и значения энергии (в единицах Хартри) комплексных соединений ампициллина с лантаном (а), церием (б) и лютецием (в)

По результатам компьютерного моделирования можно сделать вывод, что анион Amp^- бидентатно координирован с образованием семичленного хелатного цикла.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Алексеев В.Г., Голубева М.В., Якубович Ю.Я. Комплексообразование катионов лантаноидов с ампициллином // Журнал неорганической химии. 2013. Т. 58. № 5. С. 680-684.

УДК: 620.17

Малышев Максим Дмитриевич

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЭПОКСИДНОГО НАНОКОМПОЗИТА: МЕЗОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Руководитель: Комаров П.В.

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Создание перерабатываемых полимерных материалов (ППМ) является актуальной задачей из-за остро стоящей проблемы утилизации полимерных отходов. По своим эксплуатационным характеристикам ППМ почти не уступают пластикам на основе нефтепродуктов. Однако, их отдельные свойства (недостаточная механическая прочность, низкая температура тепловой деструкции и др.) ограничивают возможность использования ППМ. Для улучшения свойств полимеров широко используется подход, основанный на введении в них различных неорганических наполнителей в виде наночастиц (НЧ). Хотя регулирующая роль наночастиц хорошо известна, построение компьютерных моделей, способных прогнозировать свойства наноматериалов с учетом геометрических размеров НЧ, их формы и наличия поверхностного модификатора, представляет собой трудную задачу.

В докладе обсуждается мезомасштабная модель нанокompозита на основе сшитых полимерных сеток с внедренными НЧ глины. В качестве реального прототипа полимерной матрицы выбран сетчатый полимер, получаемый на основе эпоксидной смолы и трикарбоновой жирной кислоты. Для проведения расчетов использовался метод диссипативной динамики частиц.

Показано, что введение НЧ в полимер приводит к улучшению механических свойств только при сшивании НЧ с матрицей. При этом основной вклад в механический отклик вносят несущие нагрузку цепи (ННЦ), т.е. последовательность химически сшитых мономеров и НЧ, проходящих через весь объем ячейки моделирования. Установлено, что увеличение степени сшитости НЧ с полимерной матрицей приводит к постепенному возрастанию плотности числа ННЦ и, как следствие, увеличению жесткости системы в целом. Увеличение степени сшитости приводит к значительному возрастанию модулей Юнга, что коррелирует с увеличением плотности ННЦ. Построенная модель может быть использована для прогнозирования механических свойств наполненных эпоксидных смол.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России
(Соглашение № 075-15-2020-794) с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса
МГУ им. М.В. Ломоносова.*

Мамаев Павел Владимирович

ВЛИЯНИЕ СТРОЕНИЯ КАТИОНА ТЕТРААЛКИЛАММОНИЕВЫХ СОЛЕЙ НА ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ИХ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

Руководитель: Белоцерковец Н.И.

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Исследованы растворы четвертичных тетраалкиламмониевых солей с различным строением углеводородных заместителей у атома азота катиона: бромида тетраметиламмония (ТМАБ), хлоридов N-бензил-N,N,N-триэтиламмония (БТЭА) и N-бензил-N-децил-N,N-диэтиламмония (БДЭА-10).

Полученные результаты показали возрастание удельной электропроводности от 0 до 4000–8000 мкСм/см с увеличением концентрации раствора от 0 до 0.1 моль/л для всех исследованных соединений, что характеризует исследованные соединения как сильные электролиты. Значение удельной и эквивалентной электропроводности водных растворов всех исследованных тетраалкиламмониевых соединений уменьшается с ростом числа атомов углерода в катионе соли (рис.1), что связано с уменьшением подвижности более объемных катионов. Зависимость эквивалентной электропроводности от концентрации для всех исследованных соединений имеет нелинейный вид (рис.2): на всех кривых наблюдается резкий излом в области концентраций 10^{-2} – 10^{-3} моль/л, что указывает на структурные изменения, происходящие в растворе ЧС в этой области концентраций, что характерно для процесса мицеллообразования в растворах поверхностно-активных веществ

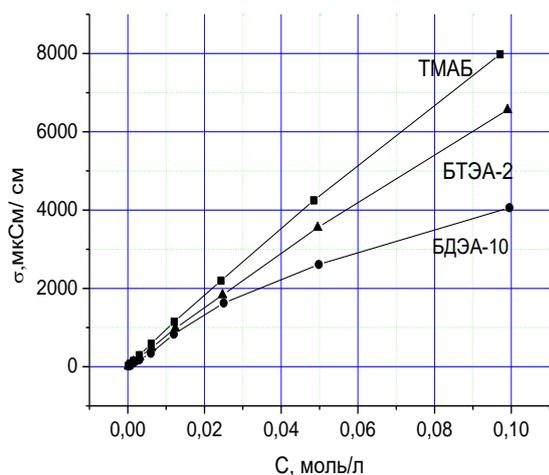


Рис. 1. Зависимость удельной электропроводности водных растворов ЧС от концентрации

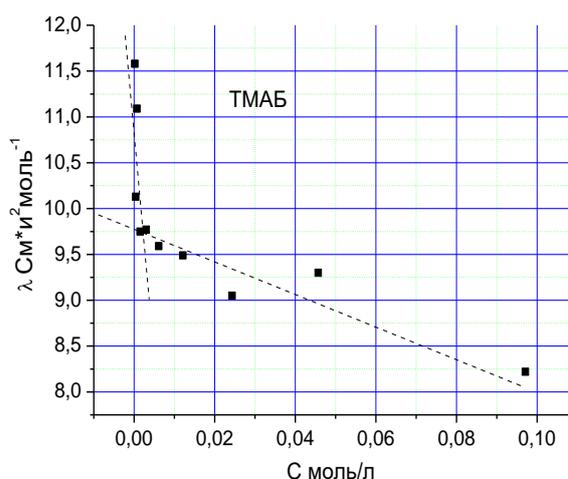


Рис. 2. Зависимость эквивалентной электропроводности водного раствора ТМАБ от концентрации.

УДК 541.6

Мананникова Мария Дмитриевна

**КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЖЕЛЕЗА В ВОДЕ
ИВАНЬКОВСКОГО ВОДОХРАНИЛИЩА С ПОМОЩЬЮ
СПЕКТРОМЕТРА АТОМНО-АБСОРБЦИОННОГО «КВАНТ-2»**

Научный руководитель: Павлов А.С.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Иваньковское водохранилище расположено в юго-восточной части Тверской области и в пределах Конаковского, Кимрского и Калининского районов. Водные ресурсы водохранилища используются в качестве источника водоснабжения г. Москвы, г.Твери и ряда прилегающих к водохранилищу территорий, промышленных объектов, сельского и рыбного хозяйства, рекреации, что предъявляет особые требования к состоянию водных экосистем и особенно к качеству воды в водоеме.

Железо как биологически активный элемент, в определенной степени влияет на интенсивность развития фитопланктона, качественный состав микрофлоры в водоеме и является одним из приоритетных загрязнителей Иваньковского водохранилища. Содержание его в водоёме в значительной мере определяется составом воды весеннего половодья, составом и объемом сточных вод предприятий металлургической, металлообрабатывающей, текстильной, лакокрасочной промышленности и с сельскохозяйственными стоками. Также из-за значительной заболоченности водосборного бассейна для воды Верхней Волги и Иваньковского водохранилища характерны высокие концентрации железа общего.

Сегодня, для обнаружения железа в воде, применяют атомно-адсорбционные методы [1], позволяющие определять, как следовые, так и достаточно высокие его содержания. В данной работе анализ вод проводился с помощью атомно-абсорбционного спектрометра «КВАНТ-2А». Результаты исследования сведены в таблицу.

Таблица:

Содержание железа (мг/л) в пробах, взятых в 2021 г.в створах Иваньковского водохранилища

Объект	Концентрация железа (мг/л)	
	ПДК	Эксперимент
г. Тверь выше города, 0,6 км выше моста окружной дороги	0,1	0,151
г. Тверь, ниже города, 15 км ниже впадения р. Тверца		0,174
д. Безбородово (Конаковский район), в черте деревни		0,227
г. Конаково, 0,3 км ниже города		0,23

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

2. Бейзель Н.Ф. Атомно-абсорбционная спектрометрия. Учебное пособие.-Новосибирск: Новосиб. гос.ун-т.- 2008.- 72 с.

УДК: 544.778.3

Маркова Алена Игорьевна

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЙ МЕТОД ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ РАЗМЕРА СТАНДАРТНЫХ ЧАСТИЦ ПОЛИСТИРОЛЬНОГО И ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТНОГО ЛАТЕКСОВ

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

Тверской государственной университете, г. Тверь
Кафедра физической химии

В современном мире для определения нормативной точности характеристик испытательного оборудования, и их соответствия требованиям нормативных документов, установления пригодности этого оборудования к эксплуатации используют стандартные образцы (СО). СО предназначены для поверки и калибровки приборов, а также для аттестации и контроля точности методик (методов) измерений. Для этого важно контролировать заданные параметры (концентрация, состав, размер частиц и т.д.). Для стандартных образцов на основе полистирольного и полиметилметакрилатного латексов мы предлагаем разработанный нами современный и эффективный спектроскопический метод, основанный на анализе рассеивающей компоненты электромагнитного излучения, проходящего через образец СО, позволяющий определить средний размер и распределение рассеивающих частиц по размерам.

Целью настоящей работы являлось выяснение возможности использования спектроскопического метода во всем оптическом диапазоне (УФ, видимая и ИК области спектра) для исследования морфологии латексов, как важных представителей дисперсных систем.

В качестве образцов исследования были взяты латексы на основе водных растворов сферических частиц полистирола и полиметилметакрилата с короной из карбоксильных и аминогрупп в различных концентрациях, с известным размером частиц (0,5 мкм и 4 мкм). Запись спектров осуществляли на ИК-Фурье спектрометре «Vertex-70» и УФ спектрометре «Evolution Array». Для контроля использовали электронный сканирующий микроскоп (ЭСМ) «JEOL JSM-6610LV»

Установлен эффект рассеяния в латексах. Показано, что с увеличением концентрации полимера происходит агрегация дисперсных частиц в латексе. Предложенный спектроскопический метод показал хорошее согласие с данными ЭСМ и может быть использован для контроля размера частиц стандартных образцов.

Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования ТвГУ.

УДК: 544.163.2

Матус Яна Александровна

ЭЛЕКТРОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ α -АМИНОАЛЬДЕГИДОВ, ПРОИЗВОДНЫХ КИСЛЫХ α -АМИНОКИСЛОТ

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

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Оптимизация геометрии молекул глутаминовой кислоты (1), аспарагиновой кислоты (2), 2-амино-4-карбобутанала (1') и 2-амино-3-карбопропаналя (2'), обладающих общей структурной формулой $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}-\text{CH}_2-\text{R}$ и $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}-\text{CH}_2-\text{R}$, где $\text{R} = \text{CH}_2-\text{C}(\text{O})\text{OH}$ (1, 1') и $\text{C}(\text{O})\text{OH}$ (2, 2') осуществлена методом ВЗЛУР [1] Заряды групп ($q(R)$) и шкала групповых электроотрицательностей ($\chi(R)$) соединений 1, 2, 1' и 2' получены с использованием «квантовой теории атомов в молекулах» (QTAIM) [2]. Структурная перестановка в α -АМК (1,2) позволяет сравнить их $q(R)$ (Таблица) с аналогичными $q(R)$ α -аминоальдегидов (1', 2') и составить общую шкалу $\chi(R)$.

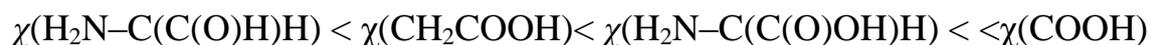
Функциональные группы NH_2 и COOH (с отрицательным зарядом) стягивают часть электронной плотности с соседних групп в свой атомный бассейн. Параметр $q(R)$ соответствующего заместителя в 1', 2' немного ниже, чем в 1, 2. На $q(\text{CH}_2)$ оказывают влияние оба концевых фрагмента, обладающих отрицательной величиной $q(R)$, что является результатом убывания электронной плотности в сторону данных R с CH_2 .

Таблица:

Заряды групп $q(R)^*$ молекул α -АМК (1,2) и α -аминоальдегидом (1', 2') в а.е.

$q(R)$, в а.е						
	COOH	CH	NH ₂	CH ₂	R	R
1	-0,185	0,418	-0,296	0,111	-0,048	CH ₂ C(O)OH
2	-0,160	0,447	-0,291	0,147	-0,144	COOH
	COH	CH	NH ₂	CH ₂	R	R
1'	-0,120	0,375	-0,301	0,098	-0,051	CH ₂ C(O)OH
2'	-0,069	0,402	-0,302	0,128	-0,159	COOH

Построение общей шкалы $\chi(R)$ молекул 1, 2, 1' и 2' проведено составлением соотношений $\chi(R)$ для каждой молекулы из сопоставления $q(R)$, затем выполнены объединение и унификация индивидуальных шкал $\chi(R)$ по одному заместителю:



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. Gaussian 03 (Revision E 0.1 SMP). Gaussian Inc., Pittsburgh PA. 2007.
2. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. М.: Мир. 2001. 528 с.

Механиков Илья Алексеевич

ЭФФЕКТ БРОМИД И ФТОРИД АНИОНОВ НА ПРОЦЕССЫ САМОСБОРКИ В L-ЦИСТЕИН-НИТРАТ СЕРЕБРА СИСТЕМАХ

Руководитель: Хижняк С.Д.

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Супрамолекулярные гели на основе низкомолекулярных соединений, например, аминокислот, образованы за счет нековалентных взаимодействий, таких как водородное связывание, силы Ван-дер-Ваальса, электростатические взаимодействия, которые управляют самосборкой этих маленьких молекул. В результате формируются высокоупорядоченные структуры, чаще всего волокна, что приводит к образованию 3D сетки. Особое место среди инициаторов гелеобразования в таких системах занимают анионы благодаря их важной роли в биологических процессах. Цель работы – продолжить изучение влияния анионов, в данном случае бромидов, на процесс самоорганизации в водных системах на основе аминокислоты L-цистеин (L-Cys) и нитрата серебра.

В работе [1] сообщалось, что фторид анион не инициирует образование L-Cys-AgNO₃ гидрогеля, однако автор позже обнаружил, что гелеобразование в этой системе – процесс очень длительный и составляет более 3–4 месяцев. Было решено для сравнения изучить с помощью УФ спектроскопии, быстро протекающие под воздействием бромидов калия в цистеин-серебряном растворе (ЦСР) процессы.

Для исследования получали образцы с разным содержанием бромидов калия: от 0.3 до 0.8 мМ, структурирование в которых изучали на спектрометре «Evolution Aggaу» в режиме «кинетика». Следует отметить, что добавление минимального количества Br⁻ в образец ЦСР приводит к обесцвечиванию раствора – слегка желтое окрашивание исчезает. В результате измерений была определена критическая концентрация бромидов калия, выше которой в системе в течение 20 мин появляются признаки фазового разделения – раствор мутнеет. При этой концентрации KBr на стенках флакона наблюдаются фрагменты геля, однако получить однородный гель-образец не удалось.



Рисунок. Образцы L-Cys-AgNO₃-KBr через 20 мин после получения: C_{KBr} - 0,30 и 0,35 мМ (слева направо)

Данная работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии ЦКП ТвГУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Механиков И.А., Лагусева В.С., Хижняк С.Д., Пахомов П.М. Процессы самосборки, инициированные фторид-анионом в низкоконцентрированных растворах на основе L-цистеина и AgNO₃ // Тезисы докладов «Кластер конференций 21», Иваново, С.373.

УДК 536.4.032.2:546.9

Митинев Егор Сергеевич

ЗАКОНОМЕРНОСТИ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦАХ Pd-Pt

Руководитель: Сдобняков Н.Ю.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

К настоящему времени имеются исследования размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации монометаллических нанокластеров Pt [1] и плавление бинарных наночастиц Pd-Pt различного вида (бинарный сплав, ядро-оболочка) [2]. В [2] исследовались бинарные частицы Pd-Pt с целью определения их термической стабильности. Однако технологический интерес также представляет исследование закономерности структурных превращений в процессе кристаллизации бинарных наночастиц Pd-Pt. В процессе моделирования использовался потенциал сильной связи [3]. Для перекрестных параметров мы использовали, апробированное ранее [4], правило Лоренцо-Бертло. Установлено, что в процессе нагревания наночастиц Pd₁₅₀₀-Pt₁₅₀₀ с первоначально равномерным распределением компонент не наблюдается формирование наночастицы по типу ядро-оболочка (см. рис. 1). Вместе с тем, при увеличении температуры, наночастица Pd₁₅₀₀-Pt₁₅₀₀ становится «рыхлой» – появляются приповерхностные дефекты (полости).

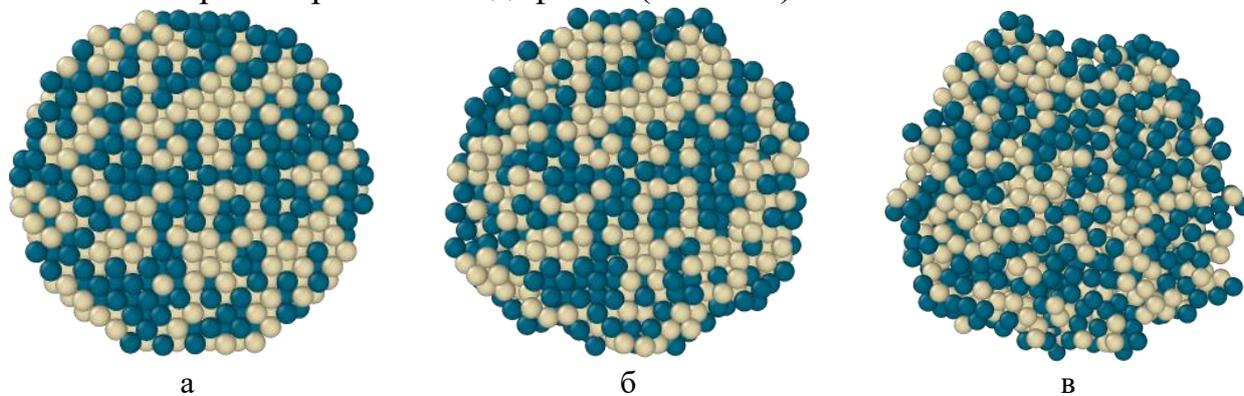


Рис. 1. Экваториальные сечения наночастицы Pd₁₅₀₀-Pt₁₅₀₀ при различных температурах: а – T= 300К, б – T=921 К, в – T=1527 К. Атомы Pt изображены светлыми шарами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Васильев С.А., Романов А.А. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2017. Вып. 9. С. 121–127.
2. Чепкасов И.В. и др. // Физика твердого тела. 2017. Т. 59. Вып. 10. С. 2050–2055.
3. Cleri F., Rosato V. // Physical Review B. 1993. V. 48. I. 1. P. 22-33.
4. Сдобняков Н.Ю., Самсонов В.М., Колосов А.Ю. и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2019. Вып. 11. С. 520–534.

УДК: 662.756.3+544.478

Михайлов Степан Петрович

ВЛИЯНИЕ СООТНОШЕНИЯ СУБСТРАТ: КАТАЛИЗАТОР В РЕАКЦИИ ВОССТАНОВИТЕЛЬНОГО АМИНИРОВАНИЯ

Руководители: Сульман М.Г., Долуда В.Ю.

Тверской государственный технический университет, г. Тверь
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Сегодня основным направлением развития новых подходов в органическом синтезе является получение новых и более сложных катализаторов с целью повышения их селективности и активности. Одним из примеров развития этого направления является реакция восстановительного аминирования. Этот процесс играет ключевую роль в синтетической химии и фармакологии, поскольку он является одним из наиболее эффективных инструментов для образования связи C-N [1]

Для исследования связи между концентрацией глюкозы и селективностью N-метил-D-глюкозамина была произведена серия опытов. Оценочным критерием конверсии субстрата от времени при разных C_0 и C_k , было выбрано их соотношение $q = C_0/C_k$ (моль/моль) [2].

В ходе этой серии опытов были исследованы Pt, Pd, Ru, би- и триметаллические катализаторы. Хорошая селективность достигается при помощи высокого содержания монодисперсных нанокластеров Pt со средним диаметром 2.1 нм. Большое количество поверхностнодоступного металла ведёт к увеличению активности по сравнению с крупными металлическими кластерами. Селективность процесса так же является следствием большой сорбционной ёмкости СПС, что в итоге ведёт к более полному протеканию реакции.

Исследование выполнено в рамках проекта «УМНИК» договор 16436ГУ/2021 от 28.05.2021

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Irrgang T., Kempe R. Transition-metal-catalyzed reductive amination employing hydrogen // Chemical Reviews. American Chemical Society, 2020. Vol. 120, № 17. P. 9583–9674.
2. Михайлов С.П. et al. N-METHYLGLUCOSEIMINE SYNTHESIS STUDY // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. Tver State University, 2020. № 1(39). P. 40–46.



УДК 664.683.9

Моисеева Елена Николаевна

ОСОБЕННОСТИ ТЕХНОЛОГИИ ВОЗДУШНО – ОРЕХОВЫХ ТОРТОВ

Руководитель: Брославская М.Н.

Тверской государственной университет
Кафедра биохимии и биотехнологии

Воздушные торты – пласты воздушного или воздушно-орехового полуфабриката, прослоенные кремом. Бока – крем, обсыпанный крошкой полуфабриката. Поверхность – крем, орехи, цукаты, фрукты. Изготавливаются без муки, исключение – торт «Киевский». Муку добавляют для стабильности полуфабриката [1]. Цель: выявить особенности технологии воздушно – ореховых тортов.

Качество готового изделия зависит от правильности взбивания белков. Охлажденные яичные белки отделяют от желтков. Взбивают во взбивальной машине МКР-25. Добавляют пищевую добавку Е330 или Е334 [2]. Готовая масса пышная, структура стойкая, пена не расплывающаяся.



Рис. 1. Торт «Киевский». Производитель:
Киевская кондитерская фабрика им. Карла
Маркса, 1956 г.

Физико-химические показатели определяются отдельно для выпеченных и отделочных полуфабрикатов. Наименование показателей: массовая доля влаги, %; массовая доля общего сахара (по сахарозе) в пересчете на сухое вещество, %, не более; массовая доля жира в пересчете на сухое вещество, %, не более; массовая доля общей сернистой кислоты, % не более; массовая доля сорбатовой кислоты, %; массовая доля сахарозы в водной фазе крема, %, не менее.

Особенностями технологии воздушно – ореховых тортов являются: правильное взбивание белков, определение органолептических и физико-химических показателей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Моисеева Е.Н., Брославская М.Н. Пищевые добавки, используемые при производстве торта «Киевский» // Пищевые добавки: материал Междунар. науч. практ. конф., [Донецк], 27 ноября 2021. – С. 87–88.
2. Моисеева Е.Н., Брославская М.Н. Применение пищевых добавок для производства и сохранения качества безеиных тортов // Сборник материалов Конкурса, 20.12.2021 г./ – Тверь: ФГБОУ ВО ТвГУ хим.-тех. факультет 2021. – С. 35–36.

УДК: 662.756.3+544.478

Монжаренко Маргарита Александровна

ПОЛУЧЕНИЕ ВЫСШИХ АЛИФАТИЧЕСКИХ СПИРТОВ ДЛЯ КОСМЕТИЧЕСКОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Руководитель: Степачёва А.А.

Тверской государственный технический университет г. Тверь
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Высшие алифатические спирты имеют большое значение в химической технологии и тонком синтезе. Эти соединения широко используются в качестве реагентов и полупродуктов для производства поверхностно-активных веществ, смазочных материалов, фармацевтике, парфюмерии и косметике.

Жирные спирты ориентируются на поверхности раздела фаз, что позволяет использовать их в виде эмульсий и микро-эмульсий. В косметических эмульсиях (кремы, лосьоны) основной функцией жирных спиртов является обеспечение их консистенции, в технических эмульсиях их используют для увеличения растворимости. Полярный характер жирных спиртов позволяет использовать их в качестве лубрикантов.

В данной работе было изучено исследование процесса получения жирных спиртов путем гидрирования карбоксильной группы жирных кислот. Синтез катализаторов проводился в среде перегретой воды в течение 15 минут при температуре 200 °С и давлении азота 60 атм. Гидрирование лауриновой кислоты (93,1%, ХимМедСервис, Россия) проводилось в шестиячеечной реакторе Parr Series 5000 Multiple Reactor System (Parr Instrument, США) при следующих условиях: температура – 200 °С, давление водорода – 1,0 МПа, масса катализатора – 0.15 г, концентрация лауриновой кислоты 0,12 моль/л. Гексан использовался в качестве растворителя. Образцы жидкой фазы анализировались с помощью хроматографа GC-2010 и масс-спектрометра GCMS-QP2010S (SHIMADZU, Япония).

Основными продуктами реакции были лауриловый альдегид, лауриловый спирт. Наибольший выход лаурилового спирта (93,1 %) был получен при использовании Pd-содержащего катализатора.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Rios L.A., Restrepo G.M., Valencia S.H. et al. // Scientia et Technica Año XII, 2006, Vol. 31, p. 221.



УДК 541.6

Москаленко Александр Борисович

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ И АДДИТИВНЫЕ СХЕМЫ РАСЧЁТА ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ

Руководитель: Виноградова М.Г.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Экспериментальных сведений по энтальпии образования карбоновых кислот немного. Поэтому развитие расчетных методов их определения и предсказания и получение с помощью этих методов новой информации в настоящее время актуально.

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций «структура-энтальпия образования» карбоновых кислот. В работе применялись методы теории графов, методы линейной алгебры, методы статистической обработки численных данных, методы регрессионного анализа, метод наименьших квадратов (МНК) и др.

Для достижения поставленной цели были построены и выбраны топологические индексы, наиболее подходящие для построения корреляций «структура-энтальпия образования карбоновых кислот», дана теоретико-графовая интерпретация аддитивных схем расчёта [1-3].

Так в четвёртом приближении для карбоновых кислот:

$$P_{C_nH_{2n+1}COOH} = p_1b + p_1'b' + p_2\Gamma_{CC} + p_2'\Gamma_{CO} + p_2''\Gamma_{OO} + R\Delta_{CCC} + \\ + p_3\tau_{CC} + p_3'\tau_{CO} + p_4\omega_{CC} + p_4'\omega_{CO} + p_5\nu_{CC} + p_5'\nu_{CO}$$

Здесь p_1, p_2, p_3, p_4 – соответственно такие индексы как число путей длины один, два, три, четыре; R – число троек смежных рёбер; b, b', Γ_{CC} – соответствующие параметры.

По данной схеме проведены численные расчёты $\Delta_f H^0_{298(ж)}$ карбоновых кислот, согласующиеся с экспериментом [4]. Получены новые данные.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

3. M. G. Vinogradova, Yu. A. Fedina, and Yu. G. Papulov. Graph Theory in Structure–Property Correlations// Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2016.-Vol. 90.- No. 2.- pp. 411–416.
4. Виноградова М.Г. Расчётные методы исследования взаимосвязи “структура-свойство” в атом-атомном представлении. Дис. докт. хим. наук.–Тверь: ТвГУ.–2004. –440 с.
5. Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г., Смоляков В.М. Количественные корреляции «структура-свойство» алканов. Аддитивные схемы расчёта. Учебное пособие. –Тверь:ТвГУ, 1999. – 96 с.
6. Lange's Handbook of Chemistry / Editor: J.A. Dean. (15th Edition), McGraw-Hill. 1999. [Электронный ресурс]. — URL: <http://fptl.ru/biblioteka/spravo4niki/dean.pdf> (дата обращения: 20.12.21).

УДК 29.03.85

Назаренко Алексей Вячеславович

ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ ОБРАБОТКИ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

Руководитель: Белов А.Н.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

В рамках реализации образовательных программ физического и технического профиля студенты выполняют лабораторный практикум по изучению физических свойств жидких кристаллов. Большая часть лабораторных установок являются аналоговыми, и для них требуется модернизация с учетом современных подходов к физическому эксперименту и минимизации финансовых и материальных расходов.

Был создан программный модуль для обработки и анализа данных полученных изображений жидких кристаллов, прежде всего - гистограмм яркости. Программный модуль был создан в среде разработки LabVIEW [1]. На вход созданной программы подается файл (в формате jpg) с изображением ЖК в определенный момент времени в процессе фазового перехода. Далее производится его попиксельное сканирование, в ходе которого формируются три двумерных массива, содержащих компоненты цветов RGB для каждого пикселя. Это позволяет построить гистограмму яркости для данного изображения. Затем организуется цикл по всем изображениям и для каждого шага строится гистограмма яркости. Вследствие данного процесса получаем массив гистограмм яркости для каждого изображения. Определяем момент, в который происходит ЖК- переход и характеризуем его с точки зрения гистограммы яркости [2].

В настоящее время программный модуль проходит тестирование и апробацию на физико-техническом факультете Тверского государственного университета.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. LabVIEW для всех / Джеффри Тревис: Пер. с англ. Клушин Н.А.-М.: ДМК Пресс; ПриборКомплект, 2005. -544с.
2. Гонсалес Р, Вудс Р. Цифровая обработка изображений. 3-е изд. испр. и доп. –М.: Техносфера, 2012. – 1104 с.

УДК 537.226.4

Найденкова Екатерина Евгеньевна

ГИСТЕРЕЗИСНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В МЕДЬ- И ХРОМСОДЕРЖАЩИХ КРИСТАЛЛАХ ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА

Руководитель: Большакова Н.Н

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Среди примесей типа внедрения ионы меди и хрома являются наиболее активными модификаторами форм роста кристаллов триглицинсульфата (ТГС). Огранка ТГС с двумя примесями меди и хрома вне зависимости от содержания меди сходна с огранкой хромсодержащего кристалла ТГС. Настоящая работа поставлена с целью получения информации о влиянии одновременного легирования кристаллов ТГС ионами меди и хрома на процессы их переполяризации. Кристаллы ТГС: Cu^{2+} : Cr^{3+} выращены в сегнетофазе динамическим способом на полидоменных затравках, ориентированных по плоскости (010). Концентрации ионов меди и хрома в кристаллах составляли (10^{-5} - 10^{-3}) вес.%. Динамические характеристики переполяризации кристаллов изучены с помощью схемы Сойера-Тауэра в переменном электрическом поле частотой 50 Гц.

Установлено, что петли диэлектрического гистерезиса преимущественно медьсодержащего кристалла ТГС не имеют существенных отличий от аналогичных для беспримесного ТГС. Они прямоугольны, не искажены и имеют незначительные смещения по координатным осям. Введение ионов хрома вызывает искажение формы петли гистерезиса кристаллов ТГС. Увеличение содержания хрома в кристалле ТГС, при концентрации меди меньшей 10^{-5} вес. %, приводит к увеличению искажений петли. Искажение петель диэлектрического гистерезиса свидетельствует о возникновении в кристаллах ТГС: Cu^{2+} : Cr^{3+} областей со стабилизированной спонтанной поляризацией, для ориентации которых требуются высокие электрические поля. В зависимости от концентрации примесей в кристаллах величины переключаемой поляризации колеблются в пределах $(1,9-2,9) \cdot 10^{-2}$ Кл·м⁻², коэрцитивных полей- $(46-62) \cdot 10^3$ В·м⁻¹.

Проведенные исследования показали, что ионы хрома оказывают более сильное влияние на процессы переполяризации и гистерезисные явления в кристаллах ТГС: Cu^{2+} : Cr^{3+} по сравнению с ионами меди. Это может быть связано с тем, что, внедряясь в кристалл, ионы хрома образуют заряженный хелатный комплекс, а ионы меди незаряженный. Вследствие этого ионы хрома являются более активной примесью по сравнению с ионами меди.

УДК:536.4:544.77

Небывалова Кристина Константиновна

ОЦЕНКА ИЗБЫТОЧНОЙ ПОВЕРХНОСТНОЙ И ИЗБЫТОЧНОЙ ЛИНЕЙНОЙ ЭНЕРГИИ, А ТАКЖЕ ЭНЕРГИИ НА ВЕРШИНАХ ДЛЯ ИКОСАЭДРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ РАЗЛИЧНЫХ МЕТАЛЛОВ.

Научный руководитель: Самсонов В.М.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

Поверхностное натяжение является одной из фундаментальных величин в области обработки материалов (таких как сварка и спекание), и получить оценки размерных зависимостей избыточной энергии однокомпонентных икосаэдрических наночастиц различных металлов является крайне важным. Нахождение поверхностной энергии ГЦК частицы сводится к формуле:

$$\varepsilon = \frac{E^{(S)} - E^{(\infty)}}{\omega},$$

где $E^{(\infty)} = E^c \cdot N^\omega$, E^c – энергия связи, $N^\omega = N(n) - N(n-1)$ – число частиц на поверхности [1].

Результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными [2].

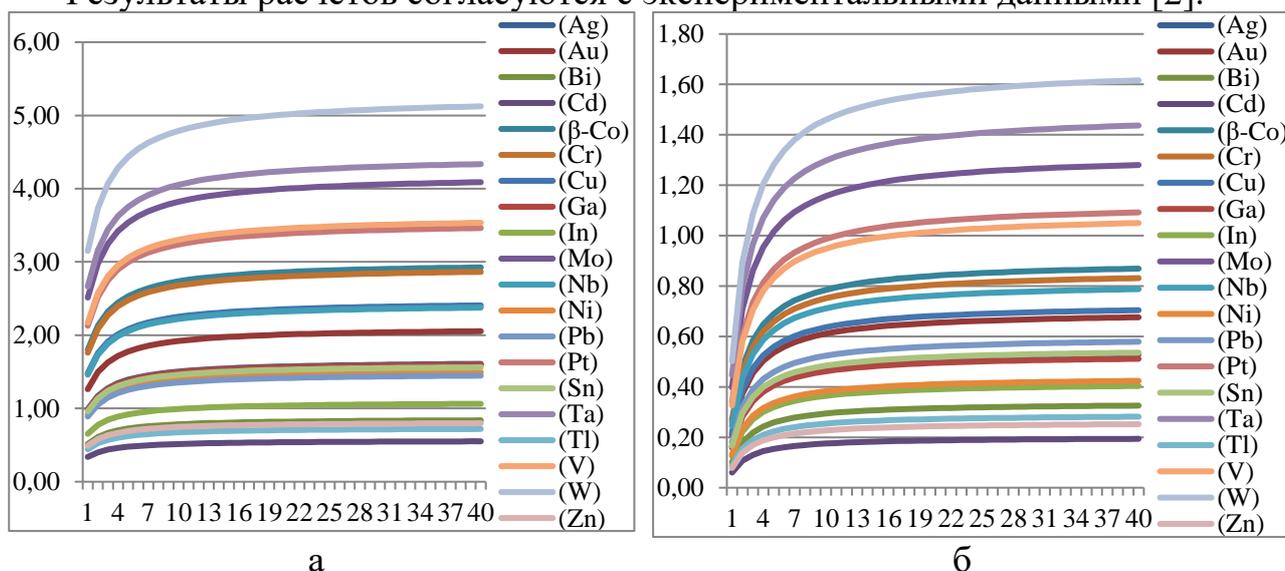


Рис 1. Размерные зависимости: а - избыточной поверхностной энергии $\varepsilon^S(n)$ в Дж/м² для различных металлов б - избыточной линейной энергии ребер $\varepsilon^L(n)$ в нДж/м для различных металлов.

Исследования выполнены при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения ГЗ в сфере научной деятельности (проект 0817-2020-007)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Samsonov V.M., Vasilyev S.A., Nebyvalova K.K., Talyzin I.V., et al // Journal of Nanoparticle Research. 2020. V. 22. I. 8. P.247.
2. Alchagirov.A.B., Alchagirov.B.B., Tao Khokonov Kh.B.// Transactions of JWRL Osaka University. Osaka, Japan. V.2001. V30.P 287-292

УДК: 664.64, 664.66

Немченко Ольга Сергеевна

ВЛИЯНИЕ ПРОЦЕССА ЗАМОРАЖИВАНИЯ И ДЕФРОСТАЦИИ НА ПОКАЗАТЕЛИ КАЧЕСТВА ПИРОГА СЛОЕНОГО «ВУЛЬФОВСКИЙ»

Руководитель: Брославская М.Н.

Тверской государственный университет
Кафедра Биохимии и биотехнологии

Цель: определить влияние процесса замораживания и дефростации на органолептические и физико-химические показатели качества пирога «Вульфовский». Замороженные готовые изделия- приоритетное направление развития современной пищевой промышленности. Пирог «Вульфовский»- любимое лакомство А.С. Пушкина. Изготавливается из слоеного теста, начинка- карамелизированные яблоки с корицей, залитые сметанно-яичной смесью. Украшение- загибы теста поверх начинки. Методы исследования: замораживание, дефростация, определение органолептических и физико-химических показателей качества.

Исследования проводились в лаборатории кафедры биохимии и биотехнологии. Результаты исследования: замораживание готового изделия при $t=-18^{\circ}\text{C}$ в морозильной камере «No frost»; дефростация в духовом шкафу при $t=200^{\circ}\text{C}$; определение органолептических показателей качества: Внешний вид: правильной формы, без деформации, Цвет светло-коричневый, Начинка- яблоки дольками, распределены равномерно, выложены в правильном порядке. Вкус: сметанный, карамелизированных яблок, меда, с ароматом корицы, без постороннего привкуса. Запах: свежей выпечки, яблочный, коричный. Состояние мякиша: не влажный, с пышными слоями, легко отделяющимися друг от друга (Таблица).

Таблица 1:

Результаты физико-химической оценки качества после дефростации

Наименование показателя	Показатель по ГОСТ	Факт.показатель	Соответствие ГОСТ
Влажность, %	19,0-52,0	42,3	Соответствует
Кислотность, град., не более	3,5	2,5	Соответствует
Пористость мякиша, %, не мен.	68,0	65, 5	Соответствует

Выводы: В результате замораживания пирога слоеного «Вульфовский» в морозильной камере «No Frost» при $t=-18^{\circ}\text{C}$ и дефростации в духовом шкафу при $t=200^{\circ}\text{C}$ органолептические и физико-химические показатели качества изделия соответствуют требованиям нормативных документов.

УДК: 544.169

Нефедова Ирина Андреевна

ЗАРЯДЫ ГРУПП БЕЛОГО СТРЕПТОЦИДА И АМИНОБЕНЗОЛА

Руководитель: Русакова Н.П.

Тверской государственный университет
 Кафедра физической химии, Кафедра общей физики

Обладая антибактериальным эффектом, белый стрептоцид (Рис. I) широко используется в медицине. Синтез медикамента может осуществляться из аминбензола (Рис. II) [1]. Отличие структуры молекул составляет сульфонильный фрагмент- SO_2NH_2 , чьи свойства (в том числе и электронные) снижают токсичность аминбензольного фрагмента и обеспечивают уникальность I.

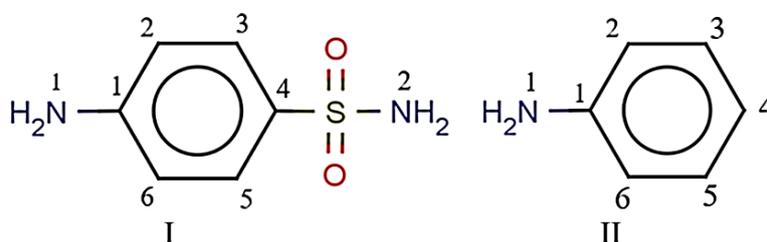


Рис.: белый стрептоцид - I, аминбензол - II

Геометрия молекул I, II была оптимизирована методом V3LYP в программе Gaussian 03. В «квантовой теории атомов в молекулах» вычислены групповые заряды ($q(R)$) и сведены в Таблицу.

Снижение $q(\text{CH})$ в II на 2CH и 6CH показывает влияние NH_2 , приводящее к увеличению доли электронной плотности ($\rho(r)$) в атомных бассейнах данных групп. Данный эффект, но в меньшей степени, отмечен на соответствующих группах в I. Атом S группы SO_2 в I выступает донором $\rho(r)$ для соседней 2NH_2 , что отражается в понижении $q(2\text{NH}_2)$ на 0,102 а.е. по сравнению с $q(1\text{NH}_2)$ в I, и на 0,093 а.е. по сравнению с $q(1\text{NH}_2)$ в II. Таким образом, S передает больше $\rho(r)$ в сторону 2NH_2 , чем C_6H_4 в атомный бассейн 1NH_2 .

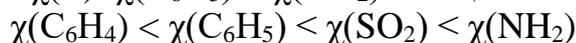
Таблица:

Заряды групп ($q(R)$) и атома H ($q(\Omega)$) в ($\text{C}_6\text{H}_4\text{NH}_2$, $\text{C}_6\text{H}_8\text{N}_2\text{O}_2\text{S}$)

Параметр	Молекула	1NH ₂	1C	2CH	3CH	4C	5CH	6CH	SO ₂ /H*	2NH ₂
$q(R)$, а.е.	I	-0,341	0,419	0,008	0,078	-0,156	0,078	0,008	0,349	-0,443
	II	-0,350	0,388	-0,018	0,003	0,001	0,003	-0,018	-0,009	-

*для молекулы I указаны заряды группы SO_2 , для II – H

Шкала групповых электроотрицательностей $\chi(R)$ получена сравнением зарядов соответствующих групп. Для I соотношение $\chi(R)$: $\chi(\text{C}_6\text{H}_4) < \chi(\text{SO}_2) < \chi(\text{NH}_2)$, для II неравенство $\chi(R)$: $\chi(\text{C}_6\text{H}_5) < \chi(\text{NH}_2)$. Общая шкала $\chi(R)$:



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Белобородов В.Л., Зурабян С.Э., Лузин А.П., Тюкавкина Н.А. Органическая химия: Учеб. для вузов: В 2 кн. М.: Дрофа. Кн.1. 2003. 640 с.

УДК 29.03.85

Низенко Артем Витальевич

АППАРАТНО-ИЗМЕРИТЕЛЬНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ РЕГИСТРАЦИИ ТЕКСТУР ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ВНЕШНИХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

Руководитель: Белов А.Н.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

Фазовый переход ЖК рассматривается в рамках выполнения лабораторных работ по направлениям 03.03.03 "Радиофизика".03.03.02 Физика, ФКСВ студенты выполняют лабораторный практикум по изучению физических свойств жидких кристаллов. Аппаратная часть некоторых из ряда лабораторных практикумов нуждается в модернизации связанных с автоматизацией физического эксперимента.

Целью настоящей работы было создание аппаратно-измерительного комплекса для регистрации текстур жидких кристаллов при различных внешних электрических полях. Регистрация изображений текстур ЖК осуществлялась при помощи программы созданной в среде разработки LabVIEW. Аппаратная часть состоит из цифрового микроскопа usb digital microscope 20x-200x, питание стенда осуществляется от любого источника переменного и постоянного тока от 0В до 5В, захват данных с источников производится звуковой картой компьютера, ПК. Оцифровка данных измерений получаемых осуществляется помощью звуковой карты. Частота дискретизации составляет 44кГц и разрядность 24 бита, а также динамический диапазон от 87дБ до 123дБ, что удовлетворяет требованиям проведения измерений. Микроскоп имеет следующие характеристики: разрешение в режиме фото и видео - от 160x120 до 2560x2048, ручная фокусировка от 10мм до 500мм, частота кадров - 30 к/с. увеличение от 20x до 200x, USB 2.0 интерфейс, это позволяет получать устойчивое изображение текстур жидких кристаллов.

На сегодняшний день проводится тестирование разработанного и собранного программно-аппаратного комплекса в ТвГУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. LabVIEW для всех / Джеффри Тревис: Пер. с англ. Клушин Н.А.-М.: ДМК Пресс; ПриборКомплект, 2005. -544с. : ил.
2. Васильев А.С., Лашманов О.Ю. Основы программирования в среде LabVIEW. - СПб: Университет ИТМО, 2015. - 32 с.

УДК 66.092–977

Никитин Павел Андреевич

ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ ТЕРМОДЕСТРУКЦИИ СШИТОГО ПОЛИЭТИЛЕНА

Руководитель: Чалов К.В.

Тверской государственной технической университет, г. Тверь
Кафедра химии и технологии полимеров

В работе представлено исследование процесса термической деструкции сшитого полиэтилена на различных катализаторах.

Исследован процесс пиролиза сшитого полимера в металлическом реакторе со стационарным слоем. Процесс деструкции полимера исследовался при температуре 550 °С. В качестве исходного сырья использовались образцы пластиковой трубы из сшитого полиэтилена марки РЕ-Ха с фракцией 2–3 мм. Исследовано влияния различных катализаторов процесса на выход твердых, жидких и газообразных продуктов пиролиза. В качестве катализаторов использовались ZSM-5 с Со 2 %, красная глина с ZSM-5 и Zeolite beta.

Выход твердых и жидких продуктов определялся по разнице масс реактора и сборника жидких продуктов соответственно. Выход пиролизного газа определялся по разнице масс исходного сырья и масс твердых и жидких продуктов.

Для газообразных продуктов был определен качественный и количественный состав при помощи газовых хроматографов «Газохром 2000» и «Кристаллюкс 4000М». Газохром 2000 оснащен детектором по теплопроводности для определения содержания водорода, азота и кислорода, метана, оксида и диоксида углерода. Кристаллюкс 4000М оснащен пламенно-ионизационным детектором для определения углеводородов C₁–C₄ и пламенно-температурным детектором для определения теплоты сгорания пиролизных газов.

Данные хроматографического анализа показали, что в состав пиролизных газов входят углеводороды C₁–C₄, водород, оксид и диоксид углерода. Низкое содержание оксида и диоксида углерода связано с низким массовым содержанием кислорода (в виде пероксидных сшивок) в исходном образце и проведением процесса в инертной среде (N₂). Основными компонентами пиролизного газа являлись углеводороды C₁–C₄.

Таким образом процесс пиролиза может использоваться для переработки отходов сшитого полиэтилена с получением жидких углеводородов и горючих газов.

УДК 543.573

Никонова Ирина Николаевна

АНАЛИЗ ЖИРНОАРОМАТИЧЕСКИХ ПОЛИАМИДОВ МЕТОДОМ ТЕРМОГРАВИМЕТРИИ

Руководитель: Лагусева Е.И.

Тверской государственный технический университет
Кафедра химии и технологии полимеров

Термический анализ жирноароматических полиамидов 6Т и 6И, а также сополиамидов 6ИТ-20, 6ИТ-60, 6ИТ-80, полученных газожидкостной поликонденсацией, проводился на дериватографической установке «Thermoscan-2». Параметры проведения анализа: нагрев образцов производился до температуры 400 °С; скорость нагрева 10 °С/мин, поскольку увеличение её на 1 шаг (до 20 °С/мин) приводит к смещению и размытию кривой ДТА; масса навески 0,1 г. [1].

Основными интересующими результатами данного анализа являются температуры плавления и температуры разложения. Анализ термограмм показал:

– ПА 6Т: при температуре 270 °С происходит начало плавления образца 375 °С, при достижении которой полимер деструктурирует с интенсивной потерей массы.

– ПА 6И: плавление сопровождается интенсивным окислением при 180–200 °С. При данной температуре происходит изменение массы навески до полного окисления и улетучивания части вещества, при этом на кривой ТГА появляется «подъем», который свидетельствует о тепловом эффекте.

– 6ИТ-20: плавление начинается при температуре 200 °С. Потеря массы идёт равномерно, что говорит о медленном разложении полиамида по достижении им температуры деструкции.

– 6ИТ-60: потеря массы при нагревании практически на всём участке равномерна, интенсивная потеря происходит при 350 °С, что говорит о начале деструкции полимера. Температура плавления равна 230 °С.

– 6ИТ-80: температура плавления лежит в пределах 230 °С. Потеря веса равномерна вплоть до достижения температуры термодеструкции (330–350).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Соловьёв, С.А., Иванов С.А., Лагусева Е.И. Дериватографический анализ полиамидов / Теоретические, экспериментальные и прикладные исследования молодых учёных ТвГТУ. – Тверь: ТвГТУ, 2017 – 482 с. –С. 346-351.

УДК: 538.956

Оспельников Никита Михайлович

ВЛИЯНИЯ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА И ВИСМУТА НА ПРОВОДИМОСТЬ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ НИОБАТА НАТРИЯ

Руководитель: Барабанова Е.В.

Тверской государственный университет
Кафедра прикладной физики

В современном мире керамика со структурой перовскита востребована во многих областях нашей жизни: от электроники, робототехники, медицины до твердотельных оксидных топливных элементов.

В работе исследовались электрофизические свойства образцов керамики на основе ниобата натрия (NaNbO_3), легированной Fe и Bi, которые были получены по традиционной керамической технологии. Концентрация примеси составила 10 мол. %. Спекание проводилось при температуре 1100 °С. Измерения ёмкости и тангенса угла диэлектрических потерь выполнялись на фазочувствительном измерителе Вектор-175 при температурах 30–655 °С и на частотах 10^{-1} – 10^6 Гц. Микроструктура изучалась с помощью растрового электронного микроскопа JEOL 6610 LV, кристаллическая – на дифрактометре Дрон-3.

В керамике, легированной железом (NNF), зёрна по форме близки к сферическим с чётко выраженными ступеньками роста, они плотно упакованы и имеют средний размер порядка 3 мкм. В керамике, легированной висмутом (NNB), зёрна близки к кубической форме без чётко выраженных ступенек роста, очень плотно упакованы и их размер порядка 1,6 мкм. Согласно полученным дифрактограммам в обоих случаях керамика однородна по составу и имеет орторомбически искажённую структуру перовскита.

Максимум на температурной зависимости диэлектрической проницаемости на 1 кГц у образца NNF наблюдается при 600 °С, у NNB – при 260 °С. По полученным результатам были сделаны выводы, что образцы с железом имеют значение действительной части комплексной диэлектрической проницаемости в максимуме порядка 30000, а образцы NNB - 2000, но и потери у NNF больше. Это приводит к разнице в величине удельной проводимости в области высоких температур (NNF - 10^{-2} Ом⁻¹м⁻¹, NNB – 10^{-3} Ом⁻¹м⁻¹). Высокую проводимость в обоих случаях можно объяснить формированием нестехиометрической структуры, характеризующейся наличием кислородных вакансий, что связано с разницей в валентности Nb^{5+} и Bi^{3+} , Fe^{3+} . Вместе с тем катионы висмута в два раза превосходят по размеру катионы железа, что затрудняет движение анионов кислорода и приводит к понижению проводимости.

УДК 537.226.4

Павлова Дарья Николаевна

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ГИСТЕРЕЗИС В МЕДЬСОДЕРЖАЩИХ КРИСТАЛЛАХ ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА

Руководитель: Большакова Н.Н.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Физико-технический факультет, направление инноватика

Настоящая работа поставлена с целью получения информации о влиянии отжига на процессы переключения медьсодержащих кристаллов триглицинсульфата. Исследования проведены на образцах монокристаллов триглицинсульфата (ТГС), содержащих примесь меди (Cu^{2+}) в количестве от $4,2 \cdot 10^{-3}$ вес. % до $8,7 \cdot 10^{-3}$ вес. %.

Процессы переключения образцов исследованы с помощью схемы Сойера-Тауэра на частоте 50 Гц. Доменная структура кристаллов выявлена методом растровой электронной микроскопии.

Установлено, что для кристаллов ТГС: Cu^{2+} петли диэлектрического гистерезиса прямоугольны и практически не искажены. По оси ординат они смещены относительно нулевого уровня, что соответствует униполярному состоянию образцов. С увеличением концентрации примеси в кристалле ТГС: Cu^{2+} от $4,2 \cdot 10^{-3}$ вес. % до $7,7 \cdot 10^{-3}$ вес. % значения переключаемой поляризации существенно уменьшаются, а при дальнейшем росте концентрации до $8,7 \cdot 10^{-3}$ вес. % наблюдается увеличение их значений. Наибольшая величина коэрцитивного поля в отожжённых образцах соответствует концентрации примеси $4,2 \cdot 10^{-3}$ вес. %. Максимальные значения эффективной диэлектрической проницаемости для кристаллов ТГС: Cu^{2+} с ростом концентрации примеси имеют тенденцию к увеличению.

Доменная структура кристаллов ТГС: Cu^{2+} состоит из матрицы основного домена, внутри которой располагаются линзовидные микродомены с противоположной ориентацией вектора спонтанной поляризации, которые занимают порядка 33% объёма образца, а также ламелеобразные домены замкнутой формы.

Проведенные исследования показывают, что отжиг приводит к увеличению значений диэлектрической проницаемости и уменьшению аналогичных для коэрцитивного поля кристаллов ТГС: Cu^{2+} . Это свидетельствует об увеличении подвижности доменных стенок кристаллов ТГС: Cu^{2+} , ранее стабилизированных дефектами. Поведение характеристик переключения и диэлектрических свойств кристаллов, а также доменной структуры, связаны с особенностями вхождения примеси меди в кристаллическую решетку кристаллов ТГС. Ионы меди создают незаряженный, планарный хелатный комплекс $[\text{CuGl}_2]^0$.

УДК: 544.344.015.3

Парфенова Мария Дмитриевна

НОВЫЕ ВАРИАНТЫ ВЛИЯНИЯ ДОБАВОК НА ПРЕВРАЩЕНИЯ ЖЕЛЕЗА

Руководители: Воробьева В.П., Луцык В.И.

Институт физического материаловедения СО РАН, г. Улан-Удэ
 Сектор компьютерного конструирования материалов

В дополнение к известным [1] были рассмотрены теоретически два новых типа фазовых равновесий в бинарных системах с участием трех полиморфных модификаций железа: 1) с метатектикой и эвтектоидом, разделенными эвтектикой (рис. 1, а); 2) с перитектикой и перитектоидом, разделенными эвтектикой (рис. 1, б). Они были разработаны с помощью схем фазовых реакций, известных как схемы фазовых реакций Шейла (рис. 1, в-г) [2].

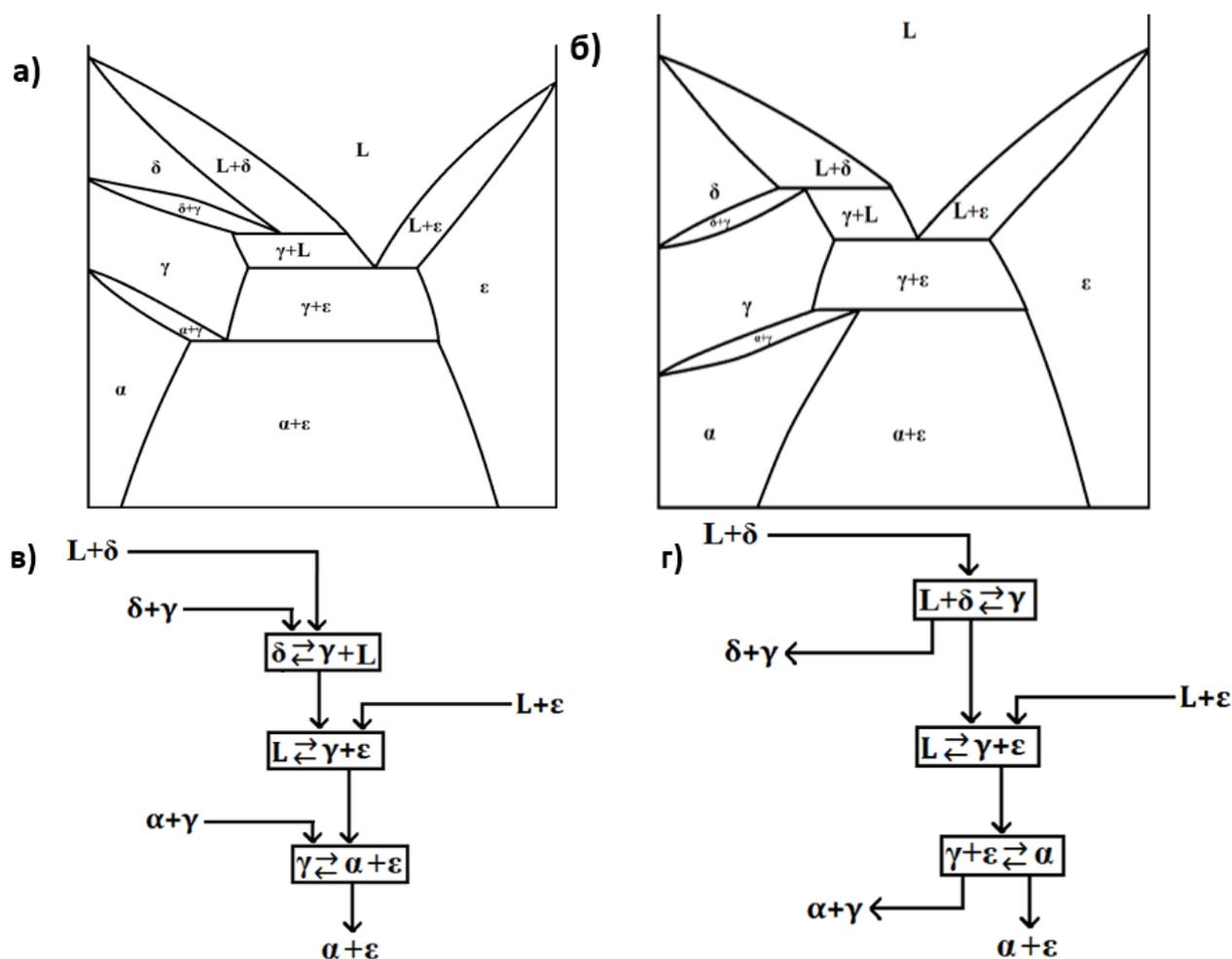


Рисунок 1. Бинарная система с участием железа (а-б), схемы фазовых реакций (в-г).

Исследование выполнено в соответствии с госзаданием ФГБУН ИФМ СО РАН на 2021–2023 гг. (проект № 0270–2021-0002).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. В.Я. Аносов, С.А. Погодин. Основные начала физико-химического анализа. Изд-во Академии наук СССР. М.-Л. 1947. 876с. С. 469.
2. R.G. Connell // J. Phase Equil. 1994. V. 15. P. 6–19.

УДК 544.774

Петров Владимир Романович

МИКРОСФЕРЫ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ $\text{Ag}/\alpha\text{-Ag}_2\text{MoO}_4/\text{h-MoO}_3$: СИНТЕЗ И СВЕТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА

Руководители: Аверкин Д.В., Вишневецкий Д.В.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Молекулярная самосборка – процесс спонтанной организации молекул в условиях, близких к термодинамическим, осуществляемый посредством нековалентных взаимодействий, продолжает притягивать внимание ученых со всего мира. Одним из примеров такого процесса является супрамолекулярная гель-система, содержащая наночастицы серебра (НЧС), полученная одним из подходов зеленых нанотехнологий [1].

В настоящем исследовании, используя результаты работ [1,2], был осуществлен one-pot синтез светочувствительных композитных микросфер, построенных из наночастиц, представляющих собой структуру типа «ядро-оболочка», на основе водных растворов L-цистеина, ацетата серебра и аммония гептамолибдата тетрагидрата. Методом рентгеноструктурного анализа (РСА) было установлено, что полученная система состоит из четырех кристаллических фаз: НЧС гранецентрированной кубической структуры (ГКС), L-цистина, Ag_2MoO_4 тетрагональной сингонии, MoO_3 гексагональной сингонии. Просвечивающая электронная микроскопия высокого разрешения (ПЭМВР) и дифракция выбранных областей (ДВО) подтвердили присутствие сферическо-эллиптических НЧС (ГКС). Элементное картирование (ЭК) установило, что НЧС покрыты оболочкой $\alpha\text{-Ag}_2\text{MoO}_4/\text{h-MoO}_3$.

УФ, ИК-спектроскопия, динамическое рассеяние света дали возможность исследовать структуру агрегатов и вместе с данными РСА, ПЭМВР, ДВО и ЭК верифицировало их строение. На основе полученных данных был выдвинут возможный механизм самосборки.

Конечная система показала высокую фотокаталитическую активность в реакции деградации красителя метиленового синего.

Работа выполнена на оборудовании ЦКП ТвГУ и МФТИ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. D.V. Vishnevetskii, A.R. Mekhtiev, T.V. Perevozova, D.V. Averkin, A.I. Ivanova, S.D. Khizhnyak and P.M. Pakhomov. Soft Matter. 2020. 16. 9669–9673. doi.org/10.1039/D0SM01431A.
2. Д.В. Аверкин, Д.В. Вишневецкий, В.Р. Петров, С.Д. Хижняк, П.М. Пахомов. Вестник ТвГУ. Серия Химия. 2020. №4 (42). С. 70–82. DOI 10.26456/vtchem2020.4.8.

УДК 66.094.25

Пинюкова Арина Олеговна

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЖИДКОФАЗНОГО ГИДРИРОВАНИЯ
АРЕНОВ И ИХ СМЕСЕЙ В ПРИСУТСТВИИ МЕТАЛЛОСОДЕРЖАЩИХ
КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ, СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ В
АРОМАТИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРНЫХ СЕТКАХ**

Руководитель: Быков А.В.

Тверской государственный технический университет, г.Тверь
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Гидрирование ароматических соединений — это одна из важных реакций в химической промышленности. На ее основе получают циклогексан, являющийся предшественником капролактама и растворителем, полупродукты фармацевтических субстанций в тонком органическом синтезе.

В рамках данной работы были исследованы процессы гидрирования ароматических субстратов (бензол, толуол, смесь бензол-толуол) на платиновом катализаторе, нанесенном на промышленный полимерный сорбент MN100 и на лабораторно синтезированные матрицы. При тестировании каталитических систем, предварительно восстановленных в токе водорода при 300°C в течение 3 часов, были получены следующие результаты, представленные в таблице.

Таблица:

*Сравнение приведенных скоростей гидрирования, выраженных в моль (Субстрата)/моль (Pt)*л*с, смесей бензола и толуола на платине, стабилизированной в различных полимерных сетках*

	Pt/MN100		Pt/C2	Pt/C3	Pt/C4
	чистые	смесь	смесь	смесь	смесь
Бензол	4,16	7,63	16,65	27,74	37,92
Толуол	34,33	9,99	7,86	16,65	19,42

Каталитические системы до и после каталитического цикла охарактеризованы рядом физических методов исследования. Суммируя полученные данные по активности каталитических систем на основе платины, стабилизированной в различных полимерных сетках (таблица), можно заметить, что каталитическая система на основе промышленного сорбента MN100 проявляет наименьшую активность. Максимальная активность как в гидрировании бензола, так и в гидрировании толуола в их смесях наблюдается для системы Pt/C4.

УДК: 635.21+631.811

Платонов Илья Андреевич

ВЛИЯНИЕ ХЕЛАТИРОВАННОЙ МЕДИ (II) НА ПРОДУКТИВНОСТЬ РАЗНЫХ СОРТОВ ТОМАТОВ

Руководитель: Шилова О.В.

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь
Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

В условиях Тверской области ощущается дефицит целого ряда микроэлементов в почве и воде, и, следовательно, в сельскохозяйственной продукции (в том числе меди). Решением этой проблемы может стать применение биологически активных и экологически безопасных веществ, содержащих медь. Поэтому целью исследований стало изучение влияния комплексона и его хелатированного медьсодержащего комплекса на разных фонах питания на почвенные показатели и продуктивность томатов разных сортов.

Исследования проводились в 2021 году в полевых условиях на экспериментальном участке кафедры агрохимии и земледелия Тверской ГСХА. Общая площадь участка – 300 м², площадь учетной делянки – 10 м². Повторность опыта трехкратная, расположение делянок – рендомизированное. Схема опыта включала: контроль (без удобрений и без опрыскивания растений), варианты с опрыскиванием растений растворами: сульфата меди (CuSO₄), ЭДДЯК (этилендиаминдизантарной кислоты), Cu-ЭДДЯК (комплексонатом меди) как на неудобренном фоне, так и на минеральном фоне питания. В качестве минеральных удобрений применялась нитроаммофоска. Комплексонат меди (Cu-ЭДДЯК) – был синтезирован на кафедре агрохимии и земледелия Тверской ГСХА к.х.н., доцентом Смирновой Т.И. Для сравнения в опыте применялись растворы на основе серноокислой меди и синтезированной аминокислоты (ЭДДЯК).

На опыте возделывались томаты двух раннеспелых сортов: Грот и Монгольский карлик. Растения томатов двукратно опрыскивали исследуемыми растворами с концентрацией 0,7 ммоль/л в объеме 100 мл/м² (с интервалом в 3 недели). На опыте фунгициды не применялись.

Перед проведением опыта были определены следующие агрохимические показатели почвы: рН_{KCl} = 5,8; содержание C_{орг.вещ-ва} – 1,98%, P₂O₅ – 208–210 мг/кг почвы, K₂O – 109–112 мг/кг почвы.

Применение медьсодержащих растворов на разных фонах питания привело к существенному увеличению подвижных форм азота, фосфора и калия в почве опытных делянок. При этом наибольшим их количеством отличались варианты с обработкой растений раствором комплексоната меди на минеральном фоне (в среднем на 5–15% больше по отношению к остальным вариантам и контролю), а наименьшим – вариант с комплексоном на неудобренном фоне.

Наибольшая урожайность плодов томатов сорта Грот (5,5 кг/м²) и прибавка к контролю (2,5 кг/м²), а также сорта Монгольский карлик (7,8 кг/м² и 2,7 кг/м² соответственно) получены на варианте с применением комплексоната меди на минеральном фоне питания. Урожайность на неудобренных вариантах, но с обработкой растений медьсодержащими растворами составила: по сорту Грот: 3,6–4,2 кг/м², а по сорту Монгольский карлик: 5,5 – 6,5 кг/м².

УДК 541.49:581.1

Платонов Илья Андреевич

ПРИМЕНЕНИЕ МОЛИБДЕНСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ ГОРОХА ПОСЕВНОГО

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

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь
Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

С учетом морфологических и биологических особенностей зернобобовых культур (в том числе, гороха), следует применять те комплексонаты, которые включают необходимые макро- или микроэлементы. Поскольку горох предъявляет максимальную требовательность к содержанию молибдена, целью проводимых исследований стало сравнение эффективности различных молибденовых микроудобрений: традиционного молибденового микроудобрения – молибдата аммония $((\text{NH}_4)_2\text{MoO}_4)$ и хелатного молибденосодержащего соединения на основе этилендиаминдиянтарной кислоты (ЭДДЯК) – Мо-ЭДДЯК. Разработана схема полевого опыта, которая включала следующие варианты: 1. Контроль (без опрыскивания растений); 2. Опрыскивание растений раствором $(\text{NH}_4)_2\text{MoO}_4$; 3. Опрыскивание растений раствором ЭДДЯК; 4. Опрыскивание растений раствором Мо-ЭДДЯК. Опрыскивание проводили как на неудобренном, так и на минеральном фонах питания. В качестве минерального удобрения использовалась нитроаммофоска.

Исследований проводились в 2021 году на мелкоделяночном опыте в пределах агротехнологического полигона Тверской государственной сельскохозяйственной академии (Тверской ГСХА). Общая площадь участка – 100 м², площадь одной делянки – 3 м², повторность вариантов – четырёхкратная, расположение вариантов – рендомизированное. Значения агрохимических показателей почвы опытного участка: $\text{pH}_{\text{кел}} = 5,8$; $\text{C}_{\text{орг.вещ-ва}} = 2,1\%$; $\text{P}_2\text{O}_5 = 224$ мг/кг почвы, $\text{K}_2\text{O} = 110$ мг/кг почвы. В мае 2021 года был высеян горох посевной среднеспелого сорта «Вельвет». Семена гороха, предварительно замоченные на 24 часа в исследуемых растворах с концентрацией растворённых веществ $1,5 \cdot 10^{-3}$ моль/л, высевались в открытый грунт согласно схеме опыта. Контролем служили семена, замоченные в $\text{H}_2\text{O}_{\text{dest}}$. Вегетирующие растения гороха опрыскивали исследуемыми растворами с концентрацией $1,5 \cdot 10^{-3}$ моль/л в объеме 100 мл/м². В течение вегетации посеvy обрабатывали гербицидом Пивот (0,8 л/га).

Среди удобренных вариантов максимальная урожайность семян гороха (3,15 т/га) установлена при опрыскивании растений раствором комплексоната молибдена, а минимальная урожайность – при обработке раствором комплексона (2,9 т/га). На вариантах с обработкой исследуемыми растворами на неудобренном фоне максимальная прибавка выявлена при обработке раствором молибденового комплекса (в среднем 0,3 т/га). Кроме того, обработка растений гороха комплексонатом молибдена на разных фонах питания способствовала увеличению содержания белка с 20,8% до 22,4%, а при использовании молибдата аммония – на 0,5–0,9% больше по отношению к остальным вариантам.

УДК: 635.21+631.811

Платонов Илья Андреевич

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ ХЕЛАТНЫХ СОЕДИНЕНИЙ СЕЛЕНА НА ЛУКЕ-ПОРЕЕ

Руководитель: Шилова О.В.

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь
Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

В настоящее время в сельскохозяйственной практике эффективными считаются комплексоны – органические комплексы металлов и неметаллов с комплексонами, производными органических кислот (например, этилендиаминдиантарной кислоты – ЭДДЯК, иминодиантарной кислоты – ИДЯК) и др. Однако, несмотря на многочисленные исследования, выводы о целесообразности применения органических и неорганических селеносодержащих соединений на почвенные и растительные показатели остаются весьма противоречивыми. В связи с этим целью проводимых в 2021 году исследований стало изучение влияния органических селеносодержащих комплексов в сравнении с минеральными формами на почвенные показатели и продуктивность лука-порея.

Исследования проводились в полевых условиях на экспериментальном участке кафедры агрохимии и земледелия Тверской ГСХА. Общая площадь участка 150 м², площадь учетной делянки – 4 м². Повторность опыта трехкратная, расположение делянок – рендомизированное. Схема опыта включала: контроль (без удобрений и без опрыскивания растений), варианты с опрыскиванием растений растворами селенита натрия (NaSeO₃), ЭДДЯК (этилендиаминдиантарной кислоты), Se-ЭДДЯК (комплексонатом селена) на разных фонах питания. В качестве минерального удобрения была использована нитроаммофоска. Хелатированный селен (Se-ЭДДЯК) и комплексон ЭДДЯК были синтезированы на кафедре агрохимии и земледелия Тверской ГСХА к.х.н., доцентом Смирновой Т.И. Для сравнения применялся раствор селенита натрия. На опыте возделывался среднеспелый сорт лука-порея – Камус. Растения лука-порея двукратно опрыскивали исследуемыми растворами с концентрацией 1,26 · 10⁻⁵ моль/л в объеме 100 мл/м² (с интервалом в 3 недели).

Агрохимическая характеристика почвы опытного участка: С_{орг.вещ-ва} – 1,9%; подвижных форм фосфора (214 мг/кг почвы) и калия (110 мг/кг почвы); рН_{KCl} – 5,7. В течение вегетационного периода 2021 года максимальным количеством подвижных форм азота, фосфора и калия отличался вариант с комплексонатом селена на минеральном фоне. На неудобренном фоне, но с некорневой обработкой растений селеносодержащими растворами, наблюдалось незначительное увеличение подвижных форм элементов питания по отношению к контрольному варианту. Наибольшая урожайность и прибавка урожая лука-порея получены на вариантах с применением хелатированного селена на удобренном фоне (2,4 кг/м² и 0,9 кг/м² соответственно). Разница в прибавке массе лука-порея между удобренными вариантами с опрыскиванием растений хелатированным селеном и селенитом натрия составила 0,2 кг/м², а на неудобренном фоне – 0,12 кг/м² соответственно.

УДК 541.49:581.1

Платонов Илья Андреевич

КОМПЛЕКСНЫЙ БОРАТ-ЭТИЛЕНДИАМИНДИСУКЦИНАТ КАК БИОСТИМУЛЯТОР ДЛЯ ГРЕЧИХИ

Руководители: Акимов А.А., Смирнова Т.И.

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь
Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Исследовано влияние внекорневой обработки раствором боросодержащего хелатного комплекса на основе этилендиаминдиантарной кислоты (В-ЭДДЯК) на изменение биохимического состава гречихи посевной – широко распространённой крупяной культуры в условиях полевого опыта. Актуальность и новизна исследованного объясняется необходимостью поиска новых экологически безопасных препаратов, повышающих урожайность сельскохозяйственных культур и качество пищевого сырья и продуктов питания.

Вегетирующие растения гречихи в фазе бутонизации опрыскивали водным раствором В-ЭДДЯК с концентрацией 1,5 ммоль/л из расчёта 100 мл/м². В качестве раствора сравнения был использован р-р борной кислоты с такой же концентрацией. Контрольные растения опрыскивали дистиллированной водой (100 мл/м²). В фазе цветения определяли содержание фотосинтетических пигментов в листьях, а после уборки – урожайность и содержание белка в семенах. Результаты представлены в таблице.

Таблица:

Влияние некорневой подкормки на урожайность и качество урожая гречихи, 2021 г.

№ п/п	Действующее вещество раствора для обработки	Фотосинтетические пигменты в сырых листьях, мг/100 г.		Белок в семенах, %	Урожайность, ц/га
		Хлорофилл <i>a+b</i>	Каротиноиды		
1	Контроль	90±1	56±1	10,1	12,0
3	H ₃ BO ₃	120±1	66±1	10,6	13,1
4	В-ЭДДЯК	182±3	49±1	11,2	14,3

Как видно из результатов опыта, В-ЭДДЯК оказал на опытные растения большое стимулирующее влияние, чем традиционно борное микроудобрение H₃BO₃ и может применяться в качестве борных микроудобрений при возделывании гречихи.

УДК: 661.1

Просьяник Юлия Андреевна

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕНОГАСЯЩИХ СВОЙСТВ РАСТВОРА КОКАМИДОПРОПИЛ БЕТАИНА

Руководитель: Веролайнен Н.В.

Тверской государственный университет
Кафедра органической и биоорганической химии

Акустический метод гашения пены заключается в формировании акустических колебаний высокой интенсивности, направленных в область пенообразования. Переменное звуковое поле наиболее активно воздействует на верхние слои пены, так как вглубь проникает слабо из-за быстрого затухания. При высокой интенсивности звуковой волны переменные силы достигают значений, при которых происходит разрыв пленок пены.

В данной работе для исследования был выбран водный раствор кокаמידопропил бетаина. Обработка ультразвуком осуществлялась ультразвуковой мойкой Teshraп TУPE UM-2, рабочая частота 25кГц, мощность 150 Вт. В течение времени эксперимента (60 мин) раствор кокаמידопропил бетаина с концентрацией 0,1М(а) при естественном осаждении потерял 7% от общего объема пены (рис.). Воздействие ультразвуковых колебаний ускорило разрушение пены раствора 0,1М (b) до 1,5 раз.

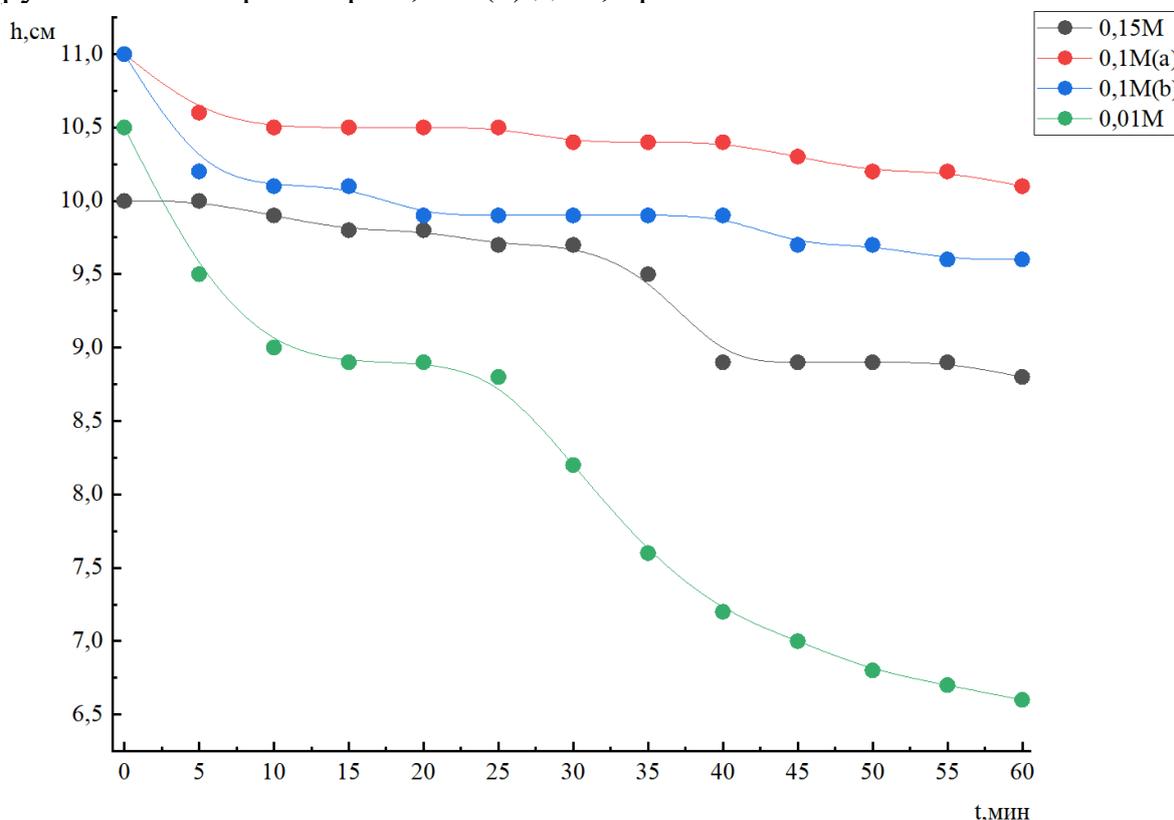


Рис. Зависимость высоты пены кокаמידпропил бетаина (h) от времени (t) оседания.

УДК 546.93

Пшеничная Александра Константиновна

DFT РАСЧЁТ СТРУКТУРЫ ТРИС(2-ФЕНИЛПИРИДИН)ИРИДИЯ

Руководитель: Алексеев В.Г.

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Трис(2-фенилпиридин)иридий $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ широко используется в органических светоизлучающих диодах (OLED). В данной работе была поставлена цель подобрать функционал, обеспечивающий создание компьютерной модели $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ (рис.), геометрия которой наиболее близка к экспериментальным данным [1]. Использован базис LACVP**++ и функционалы, рекомендованные в работе [2].

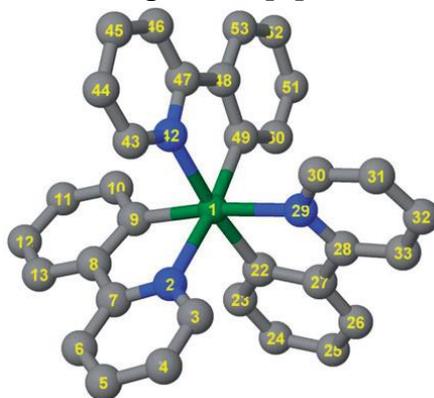


Рис. Изображение модели трис(2-фенилпиридин)иридия

Таблица: Длины химических связей в ангстремах

Связь	Эксперимент	B3LYP-D3	M05-2X-D3	M06-2X-D3	PW6B95-D3	M06-D3
$\text{Ir}_1\text{-N}_2$	2.13	2.17	2.18	2.20	2.16	2.18
$\text{Ir}_1\text{-C}_9$	2.02	2.01	2.00	2.00	2.00	2.01
$\text{N}_2\text{-C}_3$	1.33	1.34	1.34	1.34	1.34	1.34
$\text{N}_2\text{-C}_7$	1.37	1.35	1.35	1.35	1.36	1.36
$\text{C}_9\text{-C}_{10}$	1.40	1.41	1.41	1.40	1.40	1.40
$\text{C}_8\text{-C}_9$	1.41	1.43	1.41	1.42	1.42	1.42
$\text{C}_7\text{-C}_8$	1.49	1.47	1.47	1.47	1.46	1.46

Как видно из таблицы, наилучшие результаты обеспечивает использование функционалов PW6B95-D3 и M06-D3.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

- Garces F.O., Dedeian K., Keder N.L., Watts R.J. // Acta Crystallographica. 1993. Vol. C 49. P. 1117.
- Goerigk L., Hansen A., Bauer C., Ehrlich S., Najibi A., Grimme S. // Physical Chemistry Chemical Physics. 2017. Vol.48. P.32184.

УДК 537.638.5, 537.634.2

Ракунов Павел Андреевич

ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО И МАГНИТООБЪЕМНОГО ЭФФЕКТОВ СОЕДИНЕНИЙ $R\text{Co}_2$ В ОБЛАСТИ МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

Руководитель: Карпенков А.Ю.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Соединения $R\text{Co}_2$ (R – редкоземельный элемент) могут испытывать фазовый переход первого рода из парамагнитного в ферромагнитное состояние в некотором критическом магнитном поле, он также может быть индуцирован внешним магнитным полем в некотором температурном диапазоне вблизи T_c [1]. Такие особенности данного класса соединений оказывают влияние на магнитные, тепловые, структурные свойства данных соединений.

На рисунке 1 представлены температурные зависимости магнитокалорического эффекта данного соединения. Как видно из рисунка,

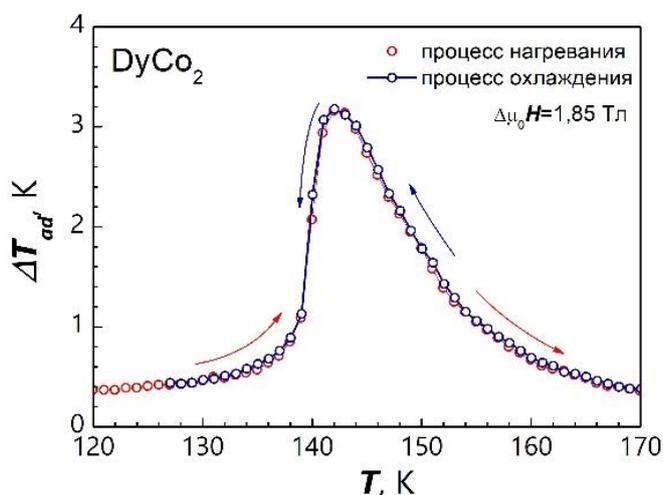


Рисунок 1. Температурные зависимости магнитокалорического эффекта DyCo_2

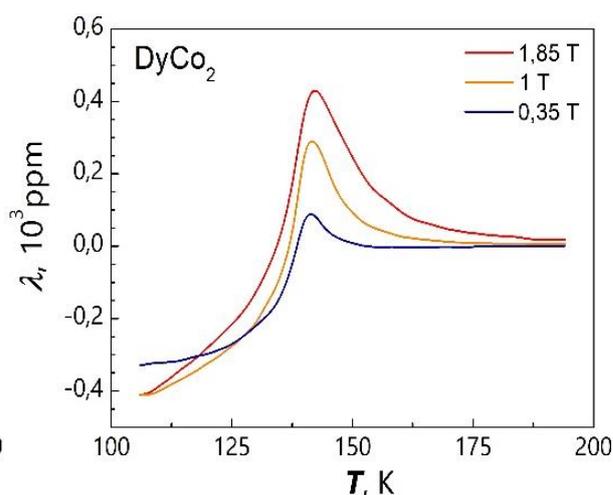


Рисунок 2. Температурные зависимости продольной магнитострикции DyCo_2

соединения DyCo_2 показывает большое значение 3,2 К в поле 1,85 Тл при температуре 142 К. На рисунке 2 представлены температурные зависимости продольной магнитострикции в различных полях. Анализ зависимостей показывает, что максимальные значения достигаются также при температуре 142 К, что соответствует температуре фазового перехода.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 21-72-10147.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Gignoux D., Givord F., Lemaire R. Magnetic properties of single crystals of GdCo_2 , HoNi_2 , and HoCo_2 //Physical Review B. – 1975. – Т. 12. – №. 9. – С. 3878.

УДК: 547.821.3

Рассказова Наталья Юрьевна

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССОВ АССОЦИИ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ В РАСТВОРАХ АЦЕТОНИТРИЛА

Руководитель: Журавлев О.Е.

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Ионные жидкости (ИЖ) представляют собой класс солей, являющихся жидкостями с низкими температурами плавления (ниже 100°C). Известно, что в растворах ионные жидкости являются ассоциированными. В связи с этим представляет большой интерес изучение влияния структуры органического катиона и природы аниона в составе ионной жидкости на процессы ионной ассоциации.

Нами были синтезированы ИЖ с гексафторфосфат- и тетрафторборат-анионами и катионом N-алкилпиридиния с различной длиной алкильных заместителей. Прекурсорами для получения ИЖ по реакции метатезиса выступали галогениды N-алкилпиридиния. Для изучения процессов ассоциации ИЖ было проведено измерение их электропроводности в растворах ацетонитрила (рис.1). Исходя из кондуктометрических данных, были рассчитаны константы ионной ассоциации (K_a) и ЭП при бесконечном разведении.

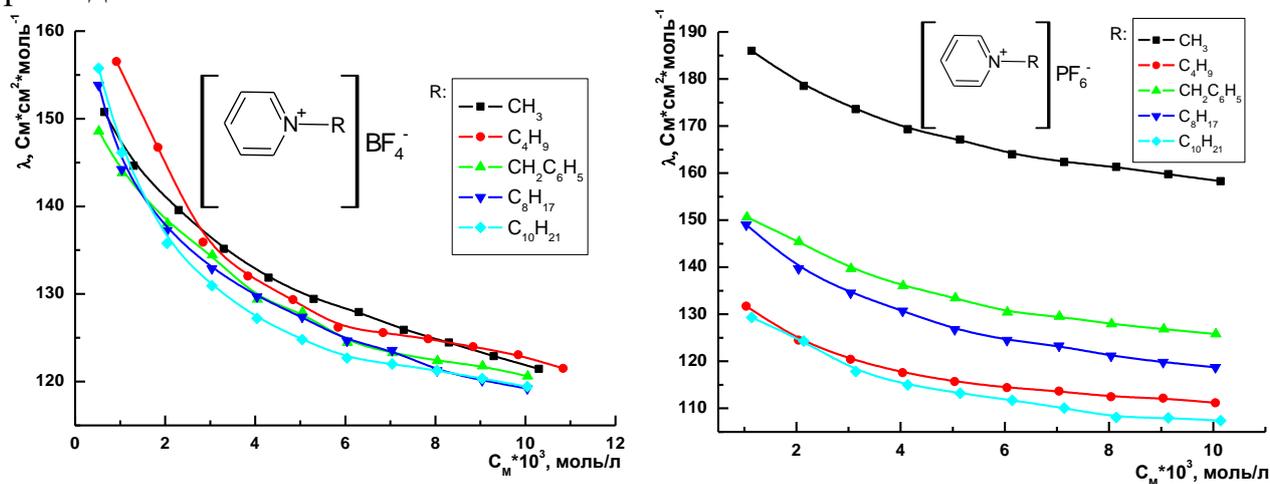


Рис. 1. Зависимость эквивалентной ЭП разбавленных растворов тетрафторборатов и гексафторфосфатов N-алкилпиридиния в ацетонитриле при 25°C.

Результаты анализа кондуктометрических данных показывают, что эквивалентная ЭП изученных ИЖ увеличивается с разбавлением раствора. Данные по константам ионной ассоциации указывают на то, что наиболее ассоциированными ионными жидкостями в растворе являются производные N-децилпиридиния.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-23-20084,
<https://rscf.ru/project/22-23-20084/>

УДК 29.03.45

Рихмайер Артем Михайлович

Программный модуль вычисления корреляционного интеграла для итерационной последовательности

Руководитель: Белов А.Н.

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

Дискретизация, а затем цифровая обработка сигналов (ЦОС), стали обычными этапами измерений во многих прикладных задачах. Анализ непериодической закономерности параметров представляет собой достаточно сложную задачу. При этом одним из ключевых вопросов становится выявление существующих закономерностей, либо вывод о случайной природе сигнала. Особый интерес представляет проверка наличия закономерностей, свойственных динамическим системам, где каждое последовательное состояние x_i зависит от предыдущего x_{i-1} . Качественной характеристикой может служить построение так называемой лестницы Ламерея – зависимости вида $x_i = f(x_{i-1})$. Вычисление корреляционного интеграла позволяет получить количественную меру для анализа реализации динамической системы. Наиболее эффективным методом вычисления корреляционного интеграла для последовательности $\{x_i\}$, $i=1 \dots M$, является алгоритм Грассбергера-Прокаччия [1]

$$\tilde{N}(\varepsilon) = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M(M-1)} \sum_{i,j=1}^M \theta(\varepsilon - \|x_i - x_j\|), \quad (1)$$

где ε -наперед заданная малая величина, θ -функция Хевисайда. Для реализации (1) в среде LabView был создан программный модуль, используемый, в частности, при анализе результатов радиофизических измерений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кузнецов С.П. Динамический хаос (курс лекций) М.: Издательство физико-математической литературы, 2006. – 356 с.



УДК: 541.49

Рудометова Анастасия Сергеевна

ИЗУЧЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ И ТЕРМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПЛЕКСОНОВ, ПРОИЗВОДНЫХ L-АСПАРАГИНОВОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель: Никольский В.М.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

Комплексон, L-N-(карбоксиметил) аспарагиновая кислота (L-КМАК, H_3X), как один из оптических изомеров, обладает способностью подвергаться быстрой биodeградации на безвредные для живой природы компоненты и является экологически безопасным [1]. Созданный комплексон может использоваться в качестве средства доставки биологически активных ионов металлов, таких как Ni^{2+} , Cu^{2+} и Zn^{2+} , различных генных конструкций в клетки живого организма [2]. Для осуществления синтеза и изучения поведения таких соединений актуальным является исследование кинетических характеристик превращения комплексонов и их комплексонатов металлов, особенно в тех случаях, когда осуществляется твёрдофазное превращение этих соединений при повышении температуры. В работе представлены результаты изучения влияния центральных ионов никеля, меди и цинка на термические характеристики этих комплексов.

Термогравиметрическое исследование проведено на калориметре STA 449F фирмы «NETZSCH». Идентификация состава комплексонатов металлов проведено на атомно-абсорбционном спектрометре «Квант-Z.ЭТА-1». В результате эксперимента установлено, что термическая устойчивость комплексов Ni^{2+} (удаление воды при $150^{\circ}C$ и разрушение лиганда при $360^{\circ}C$), Cu^{2+} (удаление воды при $120^{\circ}C$ и разрушение лиганда при $265^{\circ}C$) и Zn^{2+} (удаление воды при $145^{\circ}C$ и разрушение лиганда при $345^{\circ}C$) с оптическим изомером L-КМАК имеет обратно пропорциональную зависимость от ионного радиуса металла-комплексобразователя.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Loginova E.S., Nikol'skii V. M. // Russ. J. Phys. Chem. B. 2017. V. 11. No. 4. P. 708. DOI: 10.1134/S1990793117040200
2. Biberina E.S., Nikol'skii V. M., Feofanova M.A. // Russ. Chem. Bull. 2020. V. 69. No. 10. P. 1916. DOI:10.1007/s11172-020-2978-71



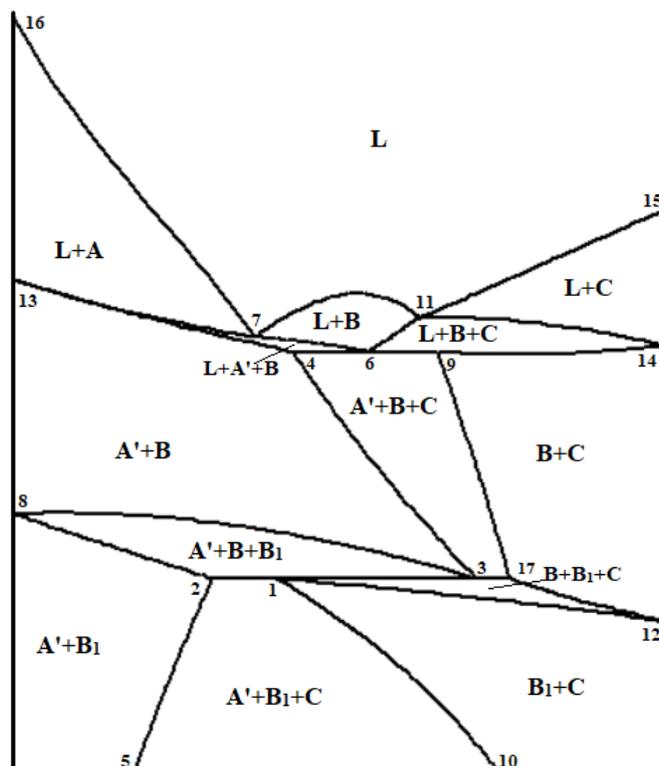
УДК: 544.344.015.3

Рудченко Наталья Александровна

РАСШИФРОВКА РАЗРЕЗОВ Т-х-у ДИАГРАММ Cr(Al)-Sn-Zn

Руководители: Воробьева В.П., Парфенова М.Д.

Институт физического материаловедения СО РАН, г. Улан-Удэ
 Сектор компьютерного конструирования материалов



При наличии программных продуктов СККМ ИФМ СО РАН <http://ipms.bsnet.ru/labs/skkm.html> автоматизируется расшифровка вертикальных и горизонтальных разрезов Т-х-у диаграмм (рис. 1), сопровождаемая табличной информацией (рис. 2).

Рисунок 1.:

Вертикальный разрез $S_1(0, 0.7, 0.3) - S_2(0.3, 0.7, 0)$ Т-х-у диаграммы системы Al-Sn-Zn (A-B-C).

№	Поверхность	Контур	Разрез	Обозначение(Т)
1	$V_{B1C(Q2-0)}^f$	$B1_{Q2}C_{Q2}C^0_{Q2}B1^0_{Q2}$	$(B1_{Q2}-C_{Q2})(C^0_{Q2}-B1^0_{Q2})$	1-10
2	$V_{AB1(Q2-0)}^f$	$A'_{Q2}B1_{Q2}A^0_{Q2}B1^0_{Q2}$	$(A'_{Q2}-B1_{Q2})(A^0_{Q2}-B1^0_{Q2})$	2-5
3	$V_{B1C(B)}^f$	$B1_{Q2}B1_C C_{B1} C_{Q2}$	$(B1_{Q2}-C_{Q2})(B1_C - C_{B1})$	12
4	$V_{BC(B1)}^f$	$e^B_{B1C} B_{Q2} C_{Q2} C_{B1}$	$(e^B_{B1C} - C_{B1})(B_{Q2} - C_{Q2})$	12
5	$V_{AB1(B)}^f$	$A'_{B1} A'_{Q2} B1_{Q2} B1_{A'}$	$(A'_{B1} - A'_{Q2})(B1_{Q2} - B1_{A'})$	8-2
6	$V_{AB(B1)}^f$	$A'_{B1} A'_{Q2} B_{Q2} p^B_{AB1}$	$(A'_{B1} - p^B_{AB1})(A'_{Q2} - B_{Q2})$	8-3
7	$V_{BC(A)}^f$	$B_E B_{Q2} C_{Q2} C_E$	$(B_E - C_E)(B_{Q2} - C_{Q2})$	9-17
8	$V_{AB(C)}^f$	$B_E B_{Q2} A'_{Q2} A'_E$	$(B_E - A'_E)(B_{Q2} - A'_{Q2})$	4-3
9	S_{BC}^f	$C_B C_E B_E B_C$	$(C_B - B_C)(C_E - B_E)$	14-9
10	Q_{CB}^f	$E_E B_C C_B C_E$	$(E - e_{BC})(e_{BC} - C_B)$	14-11

Рисунок 2. Фрагмент таблицы с расшифровкой разрезов (рис. 1) линейчатых поверхностей (r=ruled) на изоплете $S_1(0, 0.7, 0.3) - S_2(0.3, 0.7, 0)$.

Исследование выполнено в соответствии с госзаданием ФГБУН ИФМ СО РАН на 2021–2023 гг. (проект № 0270-2021-0002).

УДК 615.322

Русаков Максим Вячеславович

ВЛИЯНИЕ АНТРОПОГЕННОГО ФАКТОРА НА СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА С ПОМОЩЬЮ ЭКСТРАКТОВ ЛИСТЬЕВ БЕРЁЗЫ ПОВИСЛОЙ

Руководитель: Хижняк С.Д.

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
Кафедра физической химии

В настоящее время для синтеза наночастиц различных металлов применяются различные физические и химические процессы, которые позволяют получать наночастицы с необходимыми свойствами. Но несмотря на широкое распространение, это зачастую дорогостоящие и трудоёмкие методы, которые оказывают негативное влияние на окружающую среду и живые организмы. Таким образом, потребность в альтернативных, экологически безопасных методах производства наночастиц, очевидна.

Целью данной работы является синтез наночастиц серебра (НЧС) с использованием экстрактов листьев берёзы повислой, собранных в местах с различной антропогенной нагрузкой. Анализ процесса восстановления ионов серебра и образования НЧС в водных экстрактах листьев берёзы был проведен с помощью УФ спектроскопии. Сбор растений был произведен в июле и августе 2021 г. в трёх различных точках города Твери: Парк Победы, микрорайон Мигалово и СНТ «Рябинки».

Для проведения спектрального анализа листья берёзы были высушены, измельчены и на их основе приготовлены водные экстракты. Регистрация спектров проводилась на спектрометре «Evolution Array» фирмы «Thermo Scientific» в кварцевой кювете с толщиной слоя 2 мм. Для синтеза наночастиц серебра в водные экстракты добавляли определенный объем нитрата серебра (AgNO_3) и регистрировали электронные спектры через разные промежутки времени.

В результате эксперимента было установлено, что в водных экстрактах берёзы повислой под влиянием биоактивных веществ, содержащихся в образцах, происходит восстановление ионов серебра. Важно отметить, что обнаружена прямая связь между содержанием биоактивных веществ в образце, концентрацией и размером НЧС. Более того, анализ экспериментальных данных, полученных в 2021 и 2022 годах, подтверждает существование корреляции между антропогенной нагрузкой на место сбора образца и скоростью образования наночастиц в экстрактах.

Данная работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии центра коллективного пользования ТвГУ.

УДК 541.64:541.49

Савина Ольга Дмитриевна

ИЗМЕНЕНИЕ УРОЖАЙНОСТИ РАЗНЫХ СОРТОВ КАРТОФЕЛЯ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ХЕЛАТНЫХ СОЕДИНЕНИЙ СЕЛЕНА

Руководитель: Шилова О.В.

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г.Тверь
Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Целью исследований стало изучение эффективности действия селеносодержащего комплексоната (Se-ЭДДЯК) в качестве некорневой подкормки на разных фонах питания в сравнении с селенитом натрия и комплексом (ЭДДЯК) на почву и опытную культуру.

Полевой опыт был заложен на агротехнологическом полигоне Тверской ГСХА в 2021 г. Общая площадь участка – 1600 м², площадь 1 делянки – 14 м². Повторность опыта трехкратная, расположение делянок – рендомизированное. Схема включала варианты: контроль (без удобрений и опрыскивания растений); опрыскивание растений исследуемыми растворами: Na₂SeO₃; ЭДДЯК или Se-ЭДДЯК как на минеральном фоне, так и на неудобренном фонах питания растений. Из минеральных удобрений применялись: аммиачная селитра, простой суперфосфат и сернокислый калий. Селеносодержащий комплекс (Se-ЭДДЯК – C₁₀H₁₄N₂O₉Se) и ЭДДЯК синтезированы на кафедре агрохимии и земледелия Тверской ГСХА к.х.н., доцентом Смирновой Т.И. Для сравнения в опыте применялся Na₂SeO₃.

Возделывался картофель сортов Коломбо и Королева Анна. Растения картофеля дважды опрыскивали исследуемыми растворами с концентрацией 2 мМ из расчета 100 мл/м². Применялся инсектицид «Актара» (1,2 г препарата на 10 л воды, расход рабочей жидкости 5 л на 100 м².)

Использование селенита натрия и хелатированного селена на минеральном фоне привело к увеличению содержания нитратного азота, подвижного фосфора и обменного калия в почве по сравнению к остальным вариантам в среднем на 4–15% и на 10 – 20% по отношению к контролю. Наибольшая урожайность клубней по сравнению с контролем получена на варианте с применением Se-ЭДДЯК на минеральном фоне (по сорту Коломбо – 240 ц/га, по сорту Королева Анна – 250 ц/га). Опрыскивание растений селенитом натрия на неудобренном фоне по сравнению с контролем привело к увеличению выхода клубней в среднем на 3,6–4,2%, а на удобренном фоне – к увеличению урожайности картофеля на 14,8% (у сорта Коломбо) и на 15,3% (у сорта Королева Анна). Комплексонат селена на удобренном фоне по сравнению с селенитом натрия и комплексом на минеральном фоне способствовал увеличению крахмала в клубнях картофеля исследуемых сортов (на 0,6% и 1,5% – у сорта Коломбо и на 0,8% и 1,7% – у сорта Королева Анна соответственно).

УДК 541.49:631.46

Савина Ольга Дмитриевна

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ КОМПЛЕКСОНОВ И КОМПЛЕКСОНАТОВ С МИКРООРГАНИЗМАМИ

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

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь
Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Целью проводимых исследований стало изучение взаимодействия комплексов и комплексонатов с почвенными микроорганизмами.

Для проведения опытов были использованы следующие реактивы: этилендиамин-N,N,N¹,N¹-тетрауксусная кислота (ЭДТУК) х.ч.; иминодиянтарная кислота (ИДЯК); этилендиамин - N, N¹-диянтарная кислота (ЭДДЯК), а также их боратные комплексы: В-ИДЯК, В-ЭДДЯК, В-ЭДТУК, синтезированные на кафедре агрохимии и почвоведения Тверской ГСХА. В качестве источников опытных микроорганизмов использовали биологический пестицид «Ризоплан Ж». За время проведения опыта бактериальными организмами *P. fluorescens* частично (на 12–14%) были деструктированы 3 комплексона: ЭДТУК, ИДЯК и ЭДДЯК, однако полной их деструкции в опыте не наблюдалось. В отличие от комплексонов, комплекс В-ИДЯК на 88% был утилизирован псевдомонадами, а боратный комплекс В-ЭДТУК деструкцией не был затронут.

Влияние комплексонов и их боросодержащих хелатов на комплекс почвенных микроорганизмов было изучено в полевом опыте. Исследования проводили на опытном участке кафедры агрохимии и земледелия Тверской ГСХА.

Схема опыта включала варианты с обработкой семян 0,0015 М растворами H₃BO₃, В-ЭДТУК, В-ЭДДЯК, В-ИДЯК, ЭДТУК, ЭДДЯК, ИДЯК и контроль (с H₂O_{dest}). Опытной культурой стала свёкла столовая сорта «Красный шар». Семена свёклы замачивали на 24 часа в испытуемых растворах. После появления 3-го настоящего листа растения опрыскивали соответствующими 0,0015 М растворами из расчёта 100 мл/м², а растения контрольного варианта – H₂O_{dest}.

ЭДДЯК и, в большей степени ЭДТУК, оказывают выраженное антимикробное, а ИДЯК, напротив, стимулирующее действие. Влияние ИДЯК сравнимо с действием комплексов В-ИДЯК и В-ЭДДЯК, которые должны достаточно легко транспортироваться извне через клеточные мембраны микроорганизмов. Наибольшая прибавка урожая корнеплодов по отношению к контролю за 2 года исследований получена при опрыскивании боратными комплексами, а наименьшая – при использовании комплексонов. Применение В-ЭДДЯК позволяет увеличивать биомассу корнеплодов на 22,0 – 31,3% по отношению к остальным вариантам с использованием биологически активных соединений.

УДК 635.34

Саидов Сулаймон Мумиджонович

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ КОМПЛЕКСНЫХ УДОБРЕНИЙ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КАПУСТЫ БЕЛОКОЧАННОЙ

Руководитель: Павлов М.Н.

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь
Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Капуста белокочанная (*Brassica oleracea L. convar. capitata (L.) Alef. var. alba DC.*) - одна из важнейших овощных культур в сельскохозяйственном производстве. Цель наших исследований – изучить сравнительную продуктивность различных гибридов капусты белокочанной при некорневой подкормке различными комплексными удобрениями в условиях Центрального района Нечерноземной зоны РФ.

Исследования проводились в 2020 году на опытном поле Тверской ГСХА на дерново - среднеподзолистой остаточной карбонатной глееватой почве на морене, легкосуглинистой по гранулометрическому составу, хорошо окультуренной. Схема опыта включала: Фактор А: Гибрид: 1 – Юбилей F1, 2 – Зенон F1. Фактор В: Комплексное удобрение для некорневой подкормки: 1 – Контроль (без подкормки), 2. – Акварин – 3, 3 - Акварин - 5. Исследования проводили по современным методикам, принятым в растениеводстве, земледелии и агрохимии.

Исследованиями выявлено влияние изучаемых препаратов, как на продуктивность белокочанной капусты, так и на пораженность ее болезнями (таблица).

Таблица:

Влияние различных удобрений на урожайность и пораженность болезнями сортов капусты белокочанной

Сорт	Вариант	Урожайность,		Пораженность болезнями, %
		т/га	т/га к контролю	
Юбилей F1	Контроль	53,0	0,0	14,3
	Акварин 3	60,1	7,1	14,3
	Акварин 5	63,6	10,6	21,4
Зенон F1	Контроль	56,3	0,0	14,3
	Акварин 3	61,3	5,1	21,4
	Акварин 5	65,7	9,5	28,6

Лучшей урожайностью (61,1 т/га кочанов), но наибольшей пораженностью болезнями в среднем по вариантам отличался гибрид Зенон F1. Наиболее эффективным удобрением для некорневой подкормки капусты белокочанной обоих гибридов по повышению урожайности является комплекс макро и микроэлементов Акварин 5, который обеспечил прибавку урожайности кочанов по разным гибридам 9,5 – 10,6 т/га.

УДК 541.49

Саламатина Екатерина Вячеславовна

ТЕРМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ КОМПЛЕКСОВ НЕКОТОРЫХ 3D-МЕТАЛЛОВ С L-ИЗОМЕРОМ N-(КАРБОКСИМЕТИЛ)ГЛУТАМИНОВОЙ КИСЛОТЫ

Научный руководитель: Никольский В.М.

Комплексоны, способные подвергаться эффективной биodeградации на безвредные для живой природы компоненты это производные глутаминовой кислоты, в частности, их оптический изомер L-N-(карбоксиметил)глутаминовая кислота, L-КМГК, H_3Z [1].

Созданный комплексон может использоваться в качестве средства доставки биологически активных ионов металлов, таких как Ni^{2+} , Cu^{2+} и Zn^{2+} , а также различных генных конструкций в живой организм [2]. В работе представлены результаты изучения влияние центральных ионов никеля, меди и цинка, определяющих термодинамическую устойчивость комплексов L-КМГК, на их термические характеристики. Термогравиметрическое исследование всех комплексонатов выполнено на дифференциальном сканирующем калориметре STA 449F фирмы «NETZSCH». Для измерения брали навеску 10 ± 5 мг, нагревание осуществляли со скоростью 10 °C/мин до 500 °C.

Таблица 1. Термическая устойчивость комплексонатов металлов с L-КМГК

Комплексопат	Дегидратация, °C	Разложение органической составляющей, °C
$NiHZ \cdot 2H_2O$	145	340
$CuHZ \cdot H_2O$	140	310
$ZnHZ \cdot 2H_2O$	140	320

Экспериментально установлено, что термическая устойчивость комплексов Ni^{2+} , Cu^{2+} и Zn^{2+} с оптическим изомером L-КМГК имеет обратно пропорциональную зависимость от ионного радиуса металла-комплексобразователя [3], что практически согласуется с классическим рядом Ирвинга – Вильямса по термодинамической устойчивости комплексов $Ni^{2+} < Cu^{2+} > Zn^{2+}$ [3].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Loginova E.S., Nikol'skii V. M. // Russ. J. Phys. Chem. B. 2017. V. 11. No. 4. P. 708; DOI: 10.1134/S1990793117040200
2. Biberina E.S., Nikol'skii V. M., Feofanova M.A. // Russ. Chem. Bull. 2020. V. 69. No. 10. P. 1916; <https://doi.org/10.1007/s11172-020-2978-71>
3. Бугаенко Л.Т., Рябых С.М., Бугаенко А.Л. // Вестник МГУ. Серия 2. Химия. 2008. Т.49. №6. С. 363–367.

УДК 544.774

Саркисян Вазген Кароевич

ВЛИЯНИЕ КИСЛОТНОСТИ СРЕДЫ НА ПОВЕДЕНИЕ И БИОАКТИВНЫЕ СВОЙСТВА L-ЦИСТЕИН/AgNO₃ ВОДНОГО РАСТВОРА

Руководители: Андрианова Я.В., Вишневецкий Д.В.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Процессы самосборки с участием низкомолекулярных соединений являются уникальным явлением не только с точки зрения фундаментальной, но и прикладной науки. Ярчайшим примером является водная система на основе L-цистеина и солей серебра. Недавно были показаны необычные свойства данной системы и выдвинут возможный механизм самосборки [1,2,3]. Однако, до сих пор остаются открытыми вопросы, один из которых - строение частиц, формирующихся в процессе самосборки.

В работе использован L-цистеин/AgNO₃ водный раствор (ЦСР), который является предшественником геля, для уточнения структуры агрегатов, образующихся в этом растворе, и дополнительного понимания их взаимодействия с раковыми клетками карциномы линии MCF-7. Для этого мы добавляли различное количество щелочи (KOH) к исходному ЦСР и использовали комплекс физико-химических методов анализа. Методом турбидиметрического титрования показано, что система имеет изоэлектрическую точку и ведет себя подобно полиэлектролиту. Данные измерения дзета-потенциала подтвердили этот тезис. Результаты УФ-спектроскопии выявили значительные изменения в структуре агрегатов при переходе из кислой среды в щелочную, что также было верифицировано методами динамического рассеяния света, атомно-силовой микроскопии, а также квантово-химическими расчетами. Таким образом, дополнительно подтверждено и уточнено строение агрегатов. Оказалось, что данная система нетоксична для нормальных клеток соединительной ткани фибробластов линии Wi-38 и подавляет клетки карциномы, при этом наибольшая активность проявляется для ЦСР, в котором агрегаты находились в кислой среде.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ № 21-73-00134 на оборудовании ЦКП ТвГУ и ИБМХ им. В.Н. Ореховича.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. D.V. Vishnevetskii, A.R. Mekhtiev, T.V. Perevozova, D.V. Averkin, A.I. Ivanova, S. D. Khizhnyak, P.M. Pakhomov, *Soft Matter*, 2020, 16, 9669-9673.
2. D.V. Vishnevetskii, D.V. Averkin, A.A. Efimov, A.A. Lizunova, A.I. Ivanova, P.M. Pakhomov, E. Ruehl, *Soft Matter*, 2021, 17, 10416-10420.
3. D.V. Vishnevetskii, et al., *Soft Matter*, 2022, In Print.

УДК 548.5

Свешников Павел Александрович

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МИКРОТВЕРДОСТИ МОНОКРИСТАЛЛОВ ГЕРМАНИЯ И КРЕМНИЯ

Руководитель: Иванова А.И.

Тверской государственный университет
Кафедра прикладной физики

Монокристаллы германия и кремния активно применяются в инфракрасной оптике, фотопреобразователях, твердотельной электронике. Одним из важных структурно-чувствительных свойств кристаллических материалов является микротвердость [1-2].

В настоящей работе проведены сравнительные испытания микротвердости монокристаллов германия, кремния и германия, легированного кремнием. Экспериментальные исследования проводились на микротвердомере с применением индентора Виккерса при нагрузке 20г, размеры отпечатков определялись на растровом электронном микроскопе JEOL 6610LV и оптическом профилометре NanoMap 1000LW.

Определены значения микротвердости (H_V) для кристаллографических плоскостей (111), (100), (110) исследуемых кристаллов. Установлено, что наибольшие значения H_V соответствуют плоскостям (111): $H_{V(111)} > H_{V(100)} > H_{V(110)}$ как для монокристаллов германия, так и для кремния. Экспериментально подтверждено, что удаление нарушенного обработкой поверхностного слоя кристаллов с помощью химической полировки, приводит к увеличению микротвердости образцов.

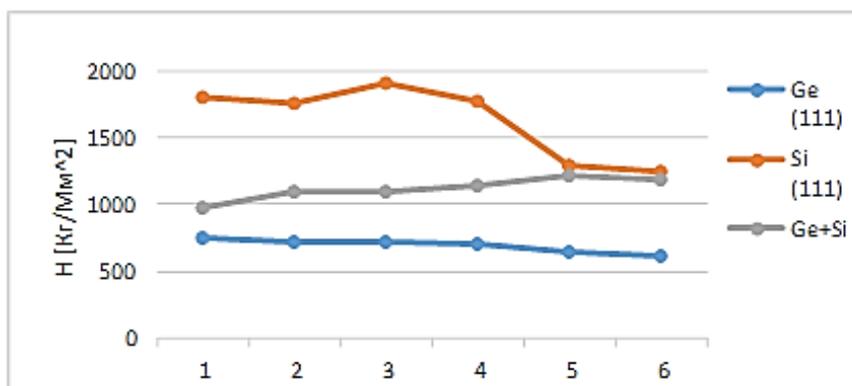


Рисунок.
Сравнение микротвердости кристаллов германия, кремния и германия, легированного кремнием.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Вабищевич С.А., Вабищевич Н.В., Бринкевич Д.И. Микротвердость пластин кремния, прошедшего геттерирующую обработку // Перспективные материалы. 2005, с.20-22.
2. Концевой Ю.А., Литвинов Ю.М., Фаттахов Э.А. Пластичность и прочность полупроводниковых материалов и структур. М.: Радио и связь. 1982, 240 с.

УДК: 54.021, 54.04, 54.056

Скобин Михаил Игоревич

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОМПЛЕКСА ЛЮТЕЦИЯ С ГЕПАРИНОМ

Руководитель: Феофанова М.А.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

Высокомолекулярный гепарин представляет собой гликозаминогликан, состоящий из замещенных повторяющихся дисахаридных звеньев D-глюкозамина и урановой кислоты. Предполагается, что комплексы лантаноидов с гепарином могут обладать повышенной фармакологической активностью вследствие синергизма компонентов.

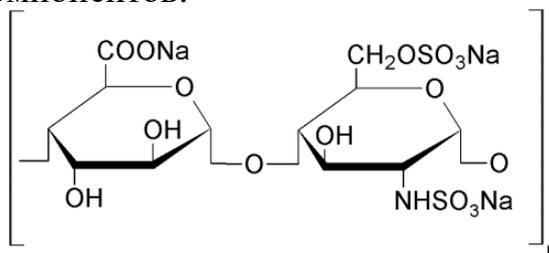


Рис. 1. Мономерное звено гепарина.

Методами потенциометрического титрования и математического моделирования для системы $\text{LuCl}_3 - \text{Na}_3\text{Hep} - \text{H}_2\text{O}$ получены константы протонирования комплексной формы $[\text{LuHep}]$. В результате расчета было получено значение $\lg\beta([\text{LuHep}]) = 4.223 \pm 0.025$.

Синтез твердого комплекса осуществлялся смешением растворов хлорида лютеция и натриевой соли гепарина в эквивалентных количествах с последующими центрифугированием и высушиванием.

ИК-спектры записывали на приборе Bruker Equinox 55 в диапазоне $450-7500 \text{ см}^{-1}$ для образцов в виде таблеток с KBr. Результаты спектроскопического исследования комплекса представлены в Таблице.

Таблица.

Спектральные характеристики натриевой соли гепарина и комплекса.

Образец	$\nu(\text{O-H})$	$\nu(\text{C=O}), \text{ s}$	$\nu(\text{S=O}), \text{ as}$	$\nu(\text{S=O}), \text{ s}$
Na_3Hep	3443	1424	1235	1028
$[\text{LuHep}]$	3436	1440	1229	1035

Данные ИК-спектроскопии позволяют предположить, что координация иона лютеция с гепарином происходит за счет кислородосодержащих центров функциональных групп гепарина. Методом ТГ установлено наличие четырех молекул кристаллогидратной воды, что позволяет определить координационное число лютеция в комплексном соединении $[\text{LuHep} \cdot 4\text{H}_2\text{O}]_n$, как равное 8.

УДК: 576, 535.015

Слатинская Ольга Вадимовна

ОЦЕНКА КОНФОРМАЦИОННОГО СОСТОЯНИЯ ГЕМОГЛОБИНА И ЭРИТРОЦИТА ПРИ ПАТОЛОГИЯХ

Руководители: Максимов Г.В.

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Москва
Биологический факультет, кафедра биофизики

Изменения конформации гемоглобина и состояния мембраны эритроцита служит маркером для определения типа заболевания и ее степени тяжести при заболеваниях. В настоящее время широко обсуждается вопрос о роли краудинга цитоплазмы в регуляции объема и гемодинамики эритроцитов в сосудах. В связи с этим, разрабатываются подходы оценки состояния эритроцитов *in vitro*, с использованием таких методов, как спектроскопия комбинационного рассеяния и ее разновидности, атомно-силовой микроскопии и лазерной интерференционной микроскопии, а также ряд стандартных биохимических методов. Так, было установлено, что диффузия молекул O_2 и NO_x через плазматическую мембрану эритроцита зависит от упорядоченности жирнокислотных хвостов фосфолипидов плазматической мембраны и состояния цитоскелета эритроцита, а способность гемоглобина (Гб) связывать и сбрасывать эти молекулы — от его локализации в примембранной области и цитоплазме клетки [1].

Спектры КР Гб имеют характерные полосы в области $1000-3000\text{ см}^{-1}$, обусловленные валентными колебаниями связей СН-групп аминокислот [2]. На наш взгляд, перенос O_2 из внешней среды в эритроцит осуществляется в несколько этапов: сначала кислород проникает в липидный бислой плазматической мембраны, затем координируется в гемопорфириновом цикле дезоксигемоглобина, фиксированным в белке полосы 3 и, наконец, оксигемоглобин десорбирует с молекулой кислорода в клетку, где осуществляются белок-белковые взаимодействия, меняющие способность гема фиксировать молекулу O_2 . Таким образом, в ходе этого процесса, должна сначала меняться конформация гема, а затем конформация глобина. Так же, при снижении числа комплексов гема с O_2 меняется конформация гема за счет увеличения вклада пиррольных колец гемопорфирина и валентных колебаний групп винилов [3].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Brazhe N. A. et al. *Biophysical journal* **97** (12), 3206-3214 (2009)
2. N. K. Howell, G. Arteaga, S. Nakai, et al., *Journal of agricultural and food chemistry* **47** (3), 924 (1999)
3. A. A. Semenova, A. P. Semenov, E. A. Gudilina et al. *Mendeleev communications* **26** (3), 177 (2016)

УДК 90.01.85

Слободяник Никита Васильевич

АПРОБАЦИЯ И ТЕСТИРОВАНИЕ ПРОГРАММНОГО МОДУЛЯ ЦИФРОВОГО ЧАСТОТОМЕТРА С ИНТЕРАКТИВНЫМ ДОСТУПОМ

Руководитель: Репин А.А., Белов А.Н.

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

В ряде физических экспериментов непосредственное измерение физических величин затруднено. Эти трудности обходят путем преобразования (для удобства его вид может быть линейным) в величинах более доступными для измерений. Например, целесообразно измерять частоту при исследовании зависимостей емкостных характеристик от внешних факторов. В рамках настоящей работы было проведено тестирование созданных частотомеров [1] при проведении серии экспериментов по изучению температурной зависимости диэлектрической проницаемости конденсаторов. Ряд сравнений показывает, что программа частотомера [1] работает корректно с вполне допустимым уровнем погрешности порядка $\sim 0,1\%$. Собранный измерительный стенд может использоваться также для изучения исследования фазовых переходов в сегнетоэлектриках.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Свидетельство № 2021615821 Российская Федерация. Программа исследования температурной зависимости диэлектрической проницаемости конденсаторов / И.И. Богуш, Л.И. Богуш, Б.Б. Педько, О.Н. Сергеева, А.А. Репин, Д.В. Дергачев; заявитель и правообладатель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет». № 2021614922; заявл. 09.04.2021; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 13.04.2021. – [1] с.



УДК 612.392.86

Смирнова Ирина Вячеславовна

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МАСЛА СЛАДКО-СЛИВОЧНОГО

Руководитель: Кудряшова Н.А.

Тверской государственный университет
Кафедра биохимии и биотехнологии

Сладко-сливочное масло – сливочное масло, произведенное из пастеризованных сливок [1]. Цель работы – физико-химический анализ масла сладко-сливочного несоленого.

Объектами исследования явились образцы масла Традиционного сладко-сливочного несоленого трех производителей: Образец №1 – "Из Вологды" жирность 82,5%, ГОСТ 32261-2013, производитель АО «Учебно-опытный молочный завод»; Образец №2 – «Простоквашино» жирность 82,5%, ТУ 10.51.30-058.13605199, производитель ОАО «Компания ЮНИМИЛК»; Образец №3 – «Тысяча Озер» жирность 82,5%, ГОСТ Р 52253-2004, производитель ООО «Невские Сыры».

Физико-химические показатели качества масла сладко-сливочного должны соответствовать требованиям ГОСТа 32261–2013 «Масло сливочное. Технические условия» [2]. Результаты экспертизы представлены в таблице.

Таблица: Физико-химические показатели образцов масла сладко-сливочного

Наименование показателя	Характеристика					
	Образец №1		Образец №2		Образец №3	
	ГОСТ	Факт	ГОСТ	Факт	ГОСТ	Факт
Титруемая кислотность молочной плазмы, °Т	не более 26,0	20,1	не более 26,0	21,4	не более 26,0	23,2
Массовая доля жира, %	не менее 82,5	83,0	не менее 82,5	83,0	не менее 82,5	83,0
Массовая доля влаги, %	не более 16	15,1	не более 16	15,3	не более 16	15,6

В результате проведенного физико-химического анализа установлено, что все исследуемые образцы масла сладко-сливочного несоленого соответствуют требованиям ГОСТа 32261–2013 «Масло сливочное. Технические условия». Наилучшие значения показал образец №1.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Технический регламент Таможенного союза "О безопасности молока и молочной продукции" (ТР ТС 033/2013).
2. ГОСТ 32261–2013 «Масло сливочное. Технические условия».

УДК 532.614.2+678.02.66.095.24

Смирнова Ксения Александровна

О ПРОЧНОСТИ ПЛЕНОК, ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ L-ЦИСТЕИНА, НИТРАТА СЕРЕБРА И ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА

Руководитель: Пахомов П.М.

Тверской Государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

На кафедре физической химии впервые синтезирован супрамолекулярный гидрогель на основе L-цистеина и ряда солей серебра [1]. Этот гель обладает высокими антимикробными свойствами и может проявлять высокую цитотоксическую активность [1,2], то есть использоваться в медицинских целях при лечении ран и ожогов или онкологических заболеваний. Поскольку гель получают из низкомолекулярных соединений и низкоконцентрированных водных растворов (~0.01%), то он обладает низкими прочностными свойствами. В ряде случаев из подобных гелей желательно получать прочные бактерицидные пленки, пластыри и бинты. Для этого нами предпринята попытка добавлять в цистеин-серебряный раствор (ЦСР) такие водорастворимые полимеры, как поливиниловый спирт (ПВС) [3], поливинилпирролидон, хитозан и полиэтиленгликоль, которые обладают хорошей биосовместимостью и уже используются в медицине.

Поэтому целью настоящей работы является изучение совместимости ЦСР с ПВС и получение на основе этих смешанных водных растворов прочных пленок, обладающих бактерицидными свойствами.

Приготовлены пленки ПВС-ЦСР и чистого ПВС при различных концентрациях, полученные методом отлива из раствора в чашке Петри. Вязкостные характеристики растворов оценивали на ротационном вискозиметре «Haake RF-1», а прочностные показатели на разрывной установке «Thümler». В ходе проведенных исследований установлена хорошая совместимость водных растворов ПВС и ЦСР при различных соотношениях компонентов. Оценены вязкостные характеристики растворов и прочностные показатели пленок. Работа по выбору оптимальных условий получения пленок продолжается.

Выражаем благодарность Кузьмину Н.И. (ВНИИСВ) и Трофимчук Е.С. (МГУ) за помощь в проведении эксперимента.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. П. М. Пахомов, С. Д. Хижняк, М. М. Овчинников, П. В. Комаров, Супрамолекулярные гели, Тверской гос. ун-т, Тверь, 2011, 269 с.
2. D.V. Vishnevetskii, A.R. Mekhtiev, T.V. Perevozova et.al. // Soft Matter. 2020. V16. №42. P.9669-9673.
3. Д.В. Вишневецкий, А.И. Иванова С.Д. Хижняк, П.М. Пахомов. // Химические волокна. 2021. №1. С.8-13.

УДК 543.421/.422

Смирнова Александра Владимировна

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ КОНЦЕВЫХ ГРУПП В МАКРОМОЛЕКУЛАХ ПОЛИЭТИЛЕНА МЕТОДОМ ИК СПЕКТРОСКОПИИ

Руководители: Межеумов И.Н., Пахомов П.М.

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Концентрация концевых групп и ветвлений в полимерах существенно влияет на их надмолекулярное строение, механические, термические и др. свойства. Для определения наличия и концентрации концевых групп и ветвлений в макромолекулах полимера может быть с успехом использован метод ИК спектроскопии [1,2]. Так в полиолефинах (полиэтилен - ПЭ, полипропилен и др.) в качестве концевых групп цепей и ветвлений часто выступают метильные ($-CH_3$) группы, которые проявляются в ИК спектре образца на частоте 1379 см^{-1} . Целью работы являлась разработка ИК спектроскопической методики для оценки содержания концевых CH_3 групп в пленочных образцах ПЭ.

Для исследования использованы пленки ПЭ высокого, среднего и низкого давления, а также сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ). ИК спектры пленок записывали на Фурье-ИК спектрометре «Vertax-70» фирмы Bruker. Концентрацию метильных групп определяли тремя способами: 1 – по уравнению Бугера-Ламберта-Бера ($D = kcd$, где D – оптическая плотность полосы поглощения 1379 см^{-1} , d – толщина пленки, c – концентрация метильных групп, коэффициент поглощения колеблющихся метильных групп); 2 – по формуле $D_{1379} / D_{ст}$, где D_{1379} – оптическая плотность полосы поглощения 1379 см^{-1} , $D_{ст}$ – оптическая плотность полосы стандарта (в качестве полосы стандарта выбрали полосу 1305 см^{-1}); 3 – методом «клина» (путем вычитания из спектра образца спектра пленки СВМПЭ, в котором концентрация CH_3 групп чрезвычайно мала. В результате проведенных исследований определена относительная концентрация метильных групп в различных ПЭ 3 способами. Показано, что все три способа дают согласующиеся результаты.

Выражаем благодарность В.А. Герасину и М.А. Гусевой за любезно предоставленные пленочные образцы полимеров.

Исследование выполнено на оборудовании лаборатории спектроскопии Центра коллективного пользования ТвГУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Тарутина Л.И., Позднякова Ф.О. Спектральный анализ полимеров. Ленинград, Химия, 1986. - 248 с.
2. Пахомов П.М., Хижняк С.Д. Спектроскопия полимеров (учебное пособие – 2-е издание). Тверь: ТвГУ. 2010. 188 с.

УДК 541.6:539:538

Соколов Александр Викторович

СВЕРХВЫСОКОПРОЧНЫЕ ВОЛОКОНА ИЗ ПОЛИЭТИЛЕНА. МЕТОД ГЕЛЬ-ФОРМОВАНИЯ

Руководители: Пахомов П.М., Галицын В.П.

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Военная, космическая и гражданская отрасли современной техники все больше ориентируются на использование легких и сверхпрочных материалов при изготовлении высокотехнологичных изделий. К таким материалам относятся волокна из сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ). Основным способом получения сверхвысокопрочных волокон из СВМПЭ является метод гель-формования. Отечественный метод гель-формования основан на использовании в качестве растворителя медицинского вазелинового масла (жидкий парафин).

В данной работе представлены результаты кандидатской диссертации о влиянии остаточного растворителя и качества самого растворителя на строение и физико-химические свойства высокопрочных волокон СВМПЭ.

Методами рентгеноструктурного анализа, сканирующей электронной микроскопии и механических испытаний показано, что вытягивание гель-волокна в среде растворителя и затем волокна с низким остаточным содержанием растворителя (<0.5%) в среде горячего воздуха сопровождается постепенным переходом от пористой структуры ксерогеля к высокоориентированной структуре волокна с высокой прочностью. Рост концентрации остаточного растворителя ведет к снижению прочности волокон.

Методами ИК- и УФ-спектроскопии установлено, что в результате термоокислительной деструкции в растворителе накапливаются продукты деструкции (С-О, С=О и С=С группы) как самого растворителя, так и СВМПЭ, что ведет к прилипанию волокон к транспортирующим галетам и дестабилизации процесса формования и ориентационной вытяжки. Разработаны методы фильтрации и адсорбционной очистки растворителя от продуктов деструкции СВМПЭ.

В результате проведенных исследований значительно возросла стабильность процесса гель-формования и достигнуты значения прочности для полифиламентной нити СВМПЭ (3.9 ± 0.3) ГПа и модуля упругости (150 ± 10) ГПа, что превышает мировые показатели.

УДК 541.6

Соловьева Елена Дмитриевна

АТОМНО-АБСОРБЦИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ В ЭКОЛОГИЧЕСКОМ МОНИТОРИНГЕ РЕК г. ТВЕРИ

Руководитель: Виноградова М.Г.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Вода — это главный элемент живой системы, то, без чего мы не сможем обойтись. Как ресурс она требует особого внимания, ведь для нормального функционирования и жизнедеятельности, человеку, да и вообще живому организму, требуется незагрязненная - чистая вода. Главным инструментом оценки состояния качества воды являются физико-химические методы исследования. В том числе и атомно-абсорбционная спектроскопия (ААС) [1]. Целью настоящей работы является - исследование качества воды рек города Твери методом атомно-абсорбционной спектроскопии.

В качестве объектов исследования были взяты: река Волга в районе пляжа расположенного на набережной Афанасия Никитина; река Тьмака – вблизи Первомайской рощи; река Тверца – в районе Тверецкого моста. Работа проводилась на спектрофотометре атомно-абсорбционном «Квант-2А», используемого для количественного определения примесей металлов в жидких пробах различного происхождения и состава по атомным спектрам поглощения и эмиссии. С его помощью определили содержание железа в выбранных объектах [1;2].

Результаты исследования сведены в таблицу.

Таблица:

Содержание железа (мг/л) в реках г. Твери в августе 2021 г.

Объект	Концентрация железа (мг/л)	
	ПДК	Эксперимент
р. Волга, городской пляж, наб. А. Никитина	0,3	0,32±0,07
р. Тьмака, п. Первомайский, зона отдыха		0,055±0,017
р. Тверца, зона отдыха у Тверецкого моста по ул. Красина		0,39±0,09

Как видно из таблицы, содержание железа немного превышено в реке Волга и реке Тверца. Вероятно, это связано со сточными водами, коррозией водопровода и движением автотранспорта.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Бейзель Н.Ф. Атомно-абсорбционная спектрометрия. Учебное пособие.-Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т.- 2008.- 72 с.
2. ГОСТ 31861–2012. Вода. Общие требования к отбору проб. – Взамен ГОСТ 4979–49; введ.01.01.2014. М.: Стандартинформ, 2019–36 с.

УДК: 544.144

Софронова Юлия Ивановна

ПРИМЕНЕНИЕ ИМИДАЗОЛИНИЕВОЙ СОЛИ ДЛЯ РАЗДЕЛЕНИЯ АЗЕОТРОПНОЙ СИСТЕМЫ АЦЕТОН–МЕТАНОЛ

Руководители: Феофанова М.А., Евдокимов А.Н.

Тверской государственный университет
Кафедра аналитической химии

Впервые рассматривается возможность применения имидазолиниевой соли (на примере хлорида 1,3-бис(2,4,6-триметилфенил имидазолиния) для разделения азеотропной смеси (на примере системы ацетон–метанол). Выбор указанной соли объясняется тем, что она является товарным реактивом одной из немногих имидазолиниевых солей.

Экспериментальные данные о парожидкостном равновесии в системах ацетон–метанол и ацетон–метанол–хлорид 1,3-бис(2,4,6-триметилфенил) имидазолиния при 101.3 кПа и трех различных молярных концентрациях соли приведены в табл. 1. Установлено, что при концентрации имидазолиниевой соли 0.100 моль кг⁻¹ происходит разрушение азеотропа.

Таблица 1. Равновесие жидкость–пар в системе ацетон (1)–метанол (2)–хлорид 1,3-бис(2,4,6-триметил-фенил)имидазолиния (3) при 101.3 кПа

x_1	y_1	T, K	x_1	y_1	T, K
$m_3 = 0.000$ моль кг ⁻¹			$m_3 = 0.100$ моль кг ⁻¹		
0	0	337,95	0,093	0,226	334,45
0,093	0,186	334,85	0,190	0,372	332,15
0,190	0,320	332,80	0,287	0,462	330,90
0,287	0,415	331,25	0,406	0,592	329,90
0,406	0,510	330,05	0,502	0,630	329,30
0,502	0,583	329,5	0,566	0,690	328,85
0,566	0,625	329,10	0,685	0,801	328,55
0,685	0,707	328,62	0,759	0,810	328,40
0,759	0,763	328,60	0,895	0,902	328,75
1,000	1,000	329,35			
$m_3 = 0.300$ моль кг ⁻¹			$m_3 = 0.500$ моль кг ⁻¹		
0,093	0,301	335,50	0,093	0,511	336,80
0,190	0,508	332,85	0,190	0,602	334,95
0,287	0,610	331,55	0,287	0,699	333,05
0,406	0,703	330,30	0,406	0,811	331,15
0,502	0,784	329,70	0,502	0,825	330,45
0,566	0,902	329,35	0,566	0,916	330,05
0,682	0,927	328,95	0,685	0,935	329,50
0,759	0,958	328,85	0,759	0,970	328,98
0,895	0,975	329,50	0,895	0,984	329,15

УДК 535.015

Степанов Валерий Сергеевич

ОПТИЧЕСКИЕ НЕОДНОРОДНОСТИ В КРИСТАЛЛАХ ПАРАТЕЛЛУРИТА, ВЫРАЩЕННЫХ ИЗ РАЗНОГО ИСХОДНОГО ВЕЩЕСТВА

Руководитель: Каплунов И.А.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра прикладной физики

Оптические приборы и устройства в зависимости от области применения и типов взаимодействия работают в широком диапазоне длин волн [1]. Чувствительность, разрешение и помехоустойчивость приборов зависят от качества материала, используемого в качестве световодов. Монокристаллы парателлурита, как показано в [2], обладают относительно малым коэффициентом поглощения и являются наиболее подходящим материалом для использования в терагерцевых технологиях. В [3] показано, что оптические характеристики материала зависят от поверхности, шлифовки и условий роста, как следствие, немаловажным параметром является чистота исходного материала.

В настоящей работе использовался метод коноскопии для выявления оптических аномалий и степени искажений оптической индикатрисы в монокристаллах парателлурита. Результаты представлены на рис.1. Изохромы на коноскопических картинах, полученных на монокристаллах парателлурита, выращенных из вещества ОСЧ и в Ужгороде, минимально искажены, что соответствует минимальному влиянию дефектов на оптическое качество световодов.

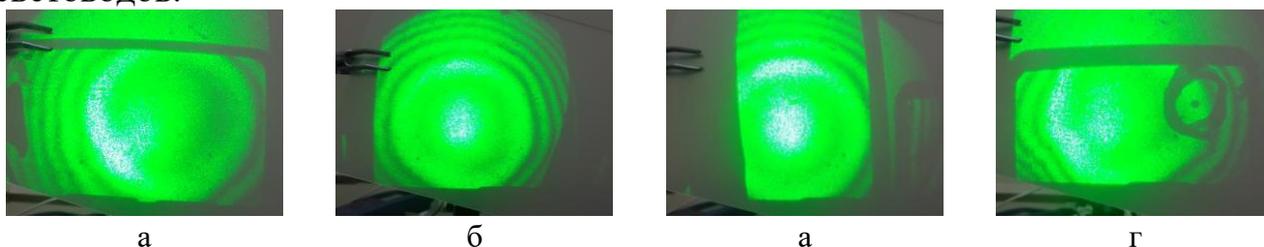


Рис. 1. Коноскопические изображения, полученные на образцах в направлении (001): а – ХЧ, б – ОСЧ, в – производитель из Ужгорода, г – производитель из Китая.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Усанов Д.А., Романова Н.В., Салдина Е.А. // Экономика науки. 2017. Т. 3. №3. С. 189–202.
2. Хоркин В.С., Волошинов В.Б., Ефимова А.И., Кулакова Л.А. // Оптика и спектроскопия. 2020. Т. 128. Вып. 2. С. 250–255.
3. Колесников А.И., Каплунов И.А., Морозова К.А., Третьяков С.А. // Вестник воздушно-космической обороны. 2018. № 1 (17). С. 5–11.

УДК:

Степанова Полина Андреевна

КОНЦЕПТ УСТРОЙСТВА ДЛЯ НАПОЛНЕНИЯ ШПРИЦА И ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ИНЪЕКЦИЙ ОДНОЙ РУКОЙ

Руководители: Жмакин И.А.

Тверской государственной медицинский университет, г. Тверь
Кафедра мобилизационной подготовки здравоохранения и медицины катастроф

Состояние здоровья населения в последние годы ухудшается, отмечается тенденция роста показателей инвалидности. Количество инвалидов в РФ на 2021 год составило 11 631 человек

Изобретение новых технологий для облегчения жизни инвалидов необходимо в современных условиях развития здравоохранения. Уже придуманы и введены в эксплуатацию: коляски, подъемники, пандусы, но есть недостаток средств для самостоятельного оказания медицинской помощи. Поэтому нашей целью стала разработка устройства для упрощения самостоятельного осуществления инъекций людьми с нарушениями функционирования одной из верхних конечностей – «Вспомогательное кольцо для инъекций», позволяющее делать такие манипуляции, как подкожные и внутримышечные инъекции. Кольцо удобно в использовании одной рукой, а за счет материалов оно легкое и доступное в цене.



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Федеральный реестр инвалидов - <https://sfri.ru/analitika/chislennost/chislennost/chislennost-po-prichinam>
2. Медицинская энциклопедия - <https://resursor.ru/content/zabolevaemost-i-smertnost-ot-ishemicheskoy-bolezni-serdca-i-infarkta-miokarda-v-rossii/>

УДК: 544.032.2

Стречень Артём Степанович

МОРФОЛОГИЯ ПОВЕРХНОСТИ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ $Tb_{0,16}Ho_{0,84}Fe_{2-x}Co_x$ ПОД ВЛИЯНИЕМ МЕХАНИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ

Руководитель: Семенова Е.М.

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Соединения RM_2 (R – редкоземельный элемент; M – Fe, Co, Ni) относятся к фазам Лавеса и обладают выраженными магнитострикционными и магнитокалорическими свойствами [1, 2]. Их используют при разработке датчиков, сенсоров, преобразователей, поэтому необходима информация о влиянии внешних воздействий на физические параметры и свойства этих составов. В данной работе исследуются квазибинарные редкоземельные интерметаллиды $Tb_{0,16}Ho_{0,84}Fe_{2-x}Co_x$ ($x = 0,1 \div 0,4$). Установлено, что механическое воздействие на поверхность на стадии завершающей полировки приводит к формированию регулярной микроструктуры на поверхности шлифов (см. рис. 1). При этом анализ элементного состава поверхности методом РЭМ не дает отличий по составу. Исследование поверхности методом профилометрии также выявило наличие регулярного рельефа. Поскольку исследуемые составы имеют высокие константы магнитострикции, то можно предположить, что причиной изменения морфологии поверхности являются стрикционные и магнитообъемные эффекты. Возвращение к равновесному состоянию поверхности достигается долговременной релаксацией. Нами также обсуждается влияние напряжений на магнитную доменную структуру поверхности рассматриваемых соединений.

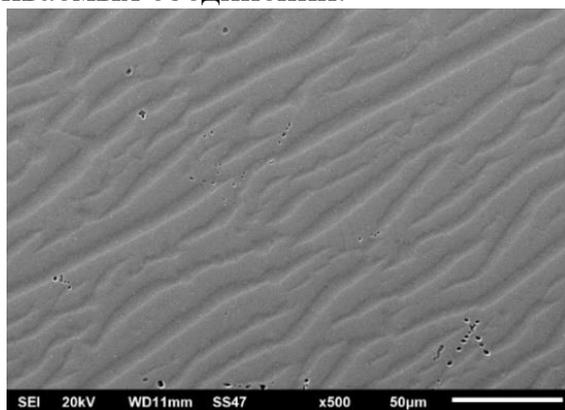


Рис. 1. Микроструктура, выявленная методом РЭМ на $Tb_{0,16}Ho_{0,84}Fe_{1,7}Co_{0,3}$ после механической полировки поверхности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Olabi A.G., Grunwald A. // Materials and Design. 2008. V. 29. P. 469-483.
2. Chzhan V.B., Tereshina I.S. et al. // Acta Materialia. 2018. V. 154. P. 303-310.

УДК 615.322

Стычинский Данил Максимович

ВЛИЯНИЕ АНТРОПОГЕННЫХ ФАКТОРОВ НА ОБРАЗОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА В ЭКСТРАКТАХ ХВОИ ЕЛИ ЕВРОПЕЙСКОЙ

Руководитель: Хижняк С.Д.

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

В настоящее время прогнозирование и оценка экологической безопасности окружающей среды является одним из важнейших направлений, необходимым для дальнейшего развития технологического прогресса. Благодаря исследованиям – биохимическим и морфологическим – установлено, что ель европейская может использоваться в роли биоиндикационного растения в городской среде, для изучения пагубных антропогенных воздействий в выбранной местности.

Цель данной работы – изучение влияния антропогенных факторов на синтез наночастиц серебра (НЧС) с использованием экстрактов хвои ели европейской методом УФ спектроскопии, ДСР и СЭМ. Объектами исследования были образцы хвои ели, собранные в период с 1–10 октября, разделенные на 4 группы в зависимости от возраста иголок. Сбор происходил в 4 местах г. Твери: вагоностроительный завод; полигон свалки твердых бытовых отходов; Тверская ТЭЦ-3; территория, прилегающая к трассе М10. Предполагаемые поллютанты в данной местности из-за большого трафика – монооксид углерода; альдегиды; диоксид серы; сернистый ангидрид и бензпирен.

Образцы иголок ели были высушены и измельчены, приготовлены водные и спиртовые экстракты. Кинетику формирования НЧС изучали на УФ спектрометре «Evolution Array», приборе «Zetasizer NanoZS» и сканирующем электронном микроскопе – «JEOL JSM-6610 LV». Для этого к водным экстрактам образцов добавляли AgNO_3 с концентрацией $1 \cdot 10^{-2}$ М и через определенные промежутки времени регистрировали спектры. Установлено, что в водных растворах хвои ели европейской при добавлении AgNO_3 происходит образование НЧС, которым в электронных спектрах соответствует широкая полоса поглощения с максимумом в диапазоне ~440-450 нм. Обнаружено, что существует прямая связь между концентрацией НЧС, скоростью их образования и загрязненностью места сбора образца. Это подтверждается данными ДСР и СЭМ. Следовательно, изучение химического состава хвои ели европейской и кинетики образования НЧС с помощью различных методов – УФ спектроскопии, ДСР и СЭМ – может быть использовано для оценки влияния антропогенных факторов на состояние окружающей среды.

Данная работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии центра коллективного пользования ТвГУ.

УДК 54.057

Сулман Александрина Михайловна

МУЛЬТИФЕРМЕНТНЫЕ СИСТЕМЫ

Руководитель: Гребенникова О.В.

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Ферменты хорошо известны как высокоэффективные катализаторы широкого спектра процессов, характеризующиеся высокой селективностью и активностью. Кроме того, ферменты могут уменьшить количество стадий реакции и количество необходимых опасных растворителей и, таким образом, делать процесс более дешевым и экологически чистым [1].

Иммобилизованные ферменты широко применяются в синтезе различных сложных лекарственных средств и их промежуточных соединений в мягких условиях без образования токсичных побочных продуктов. Они используются в рекультивации загрязненной воды, воздуха и почвы путем эффективного удаления стойких органических загрязнителей, в диагностике заболеваний и в коррекции различных генетических синдромов, возникающих из-за отсутствия метаболических ферментов. Иммобилизованным ферментом, используемым в промышленных масштабах, является глюкозооксидаза (GOx, К.Ф. 1.1.3.4, семейство оксигеназ, подкласс оксидоредуктаз). GOx используется в биосенсорах глюкозы для измерений в реальном времени и *in-situ* в пищевой промышленности и медицине. Создание носителей для иммобилизации GOx позволяет разрабатывать биосенсоры глюкозы с улучшенной прочностью, чувствительностью, расширенными диапазонами и пределами обнаружения [2].

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда
(проект № 22-24-20027).*

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Sheldon, R.A. Adv. Synth. Catal.- 2007. – Vol. 49. – P. 1289–1307.
2. Guzik, U. Molecules. – 2014. – Vol. 19. – P. 8995–9018.



УДК: 547.821.3

Суратова Екатерина Сергеевна

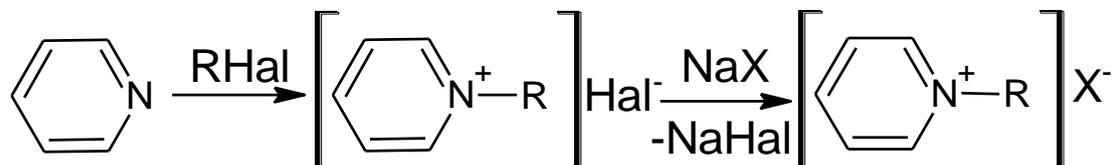
ПОЛУЧЕНИЕ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ N-АЛКИЛПИРИДИНИЯ ДЛЯ ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В СИНТЕЗЕ НАНОЧАСТИЦ

Руководитель: Журавлев О.Е.

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

В современной химии ионные жидкости весьма широко используются в качестве растворителей, катализаторов, электролитов для аккумуляторных батарей. Большой интерес представляет использование ионных жидкостей в процессах получения наночастиц, в частности, наночастиц полупроводников – квантовых точек.

Нами были синтезированы ИЖ с гексафторфосфат- и тетрафторборат-анионами и катионом N-алкилпиридиния с различной длиной алкильных заместителей (CH_3 , C_4H_9 , $\text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$, C_8H_{17} , $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$). Прекурсорами для получения гексафторфосфатов по реакции метатезиса выступали галогениды N-алкилпиридиния, которые в свою очередь были получены по реакции нуклеофильного замещения между пиридином и алкилгалогенидами. Схема реакций представлена ниже. Синтезированные соединения представляют собой жидкости или низкоплавкие твердые вещества белого или кремового цветов. Хорошо растворимые в полярных органических растворителях (спирт, ацетон, ацетонитрил), плохо растворимы в воде. Все синтезированные соединения охарактеризованы данными ИК-спектроскопии. Чистота подтверждена ТСХ. Определены основные физико-химические константы. Полученные ионные жидкости с длинноцепочечными заместителями (C_8H_{17} , $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$) в катионе предлагается использовать в качестве стабилизаторов для получения наночастиц полупроводников в смесях с органическими растворителями.



где R: CH_3 , C_4H_9 , $\text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$, C_8H_{17} , $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$.

Hal: I, Br.

X⁻: BF_4 , PF_6 .

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-23-20084,
<https://rscf.ru/project/22-23-20084/>

УДК 678; 67.08

Сурнина Валерия Андреевна

ВЛИЯНИЯ РАСТВОРИТЕЛЕЙ И КАТАЛИЗАТОРОВ НА ОБРАЗОВАНИЕ ОЛИГОМЕРА МОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель: Веролайнен Н.В.

Тверской государственный университет, г.Тверь
Кафедра органической и биоорганической химии

В настоящее время экологическая обстановка остро нуждается в сохранении природных ресурсов и создании разлагаемых и биоразлагаемых полимеров. Поэтому целью настоящей работы является разработка метода синтеза олигомера молочной кислоты на основе молочной кислоты с помощью реакции поликонденсации.

Для получения олигомера молочной кислоты использовали 80%-ную молочную кислоту, азеотропные смеси и катализаторы: оксид цинка, ацетат цинка. Осуществили синтез через поликонденсацию молочной кислоты, в результате получили полимерные цепочки, состоящие из олигомеров и низкомолекулярного полилактида. Условия реакций синтеза представлены в таблице. [1]

Таблица

Условия олигомеризации молочной кислоты

Азеотроп	Катализатор	Время олигомеризации, мин	Масса олигомера, г	Выход олигомера, %
Толуол	ZnO	32	35,671	59,37
Тетрахлорметан		45	14,864	24,83
Толуол	Zn(CH ₃ COO) ₂	34	39,874	61,85
Тетрахлорметан		50	25,343	42,17

В результате проделанной работы было установлено, что при использовании в качестве азеотропообразователя толуола, а качестве катализатора ZnO и Zn(CH₃COO)₂ увеличивается масса и выход олигомера. При использовании этих составляющих затрачивается меньше времени на синтез.



УДК: 541.49 : 615.33

Сутугина Кристина Алексеевна

ИССЛЕДОВАНИЕ КИСЛОТНО-ОСНОВНЫХ РАВНОВЕСИЙ В РАСТВОРАХ ЦЕФУРОКСИМА

Руководитель: Минина М.В.

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Цефуроксим — β- лактамный антибиотик, цефалоспорин второго поколения, известный также как Аксетин, Зиннат, Зинацеф, Кимацеф, Мегасеф, Селецеф, Цефтин, Цефрус. Относится к антибиотикам кислотного типа. Используется как для перорального, так и парентерального применения. Обладает бактерицидным свойством, а также цефуроксим имеет низкую токсичность и широкий терапевтический диапазон. В настоящее время идет активное изучение его взаимодействия с катионами металлов, а также свойств образующихся комплексных соединений. Наряду с этим идет поиск новых экспрессных методов определения цефуроксима в биологических жидкостях и продуктах питания. Следовательно, исследование кислотно-основных свойств, а также уточнение констант протонирования является важной задачей.

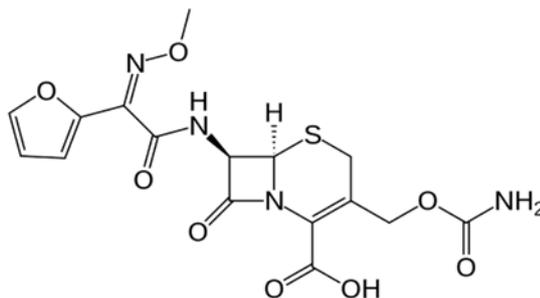


Рис 1. Структурная формула молекулы цефуроксима

Потенциометрическим методом было исследовано кислотно-основное равновесие в водном растворе цефуроксима. Для проведения эксперимента использовали натриевую соль цефуроксима NaCfur 0.1 моль/л раствор KNO₃ готовили из соли квалификации «х.ч.». 0.05 моль/л раствор HNO₃. По полученным данным были построены кривые титрования антибиотика и были обработаны в программе моделирования химических равновесий New DALSFEK. Модель равновесий включала самоионизацию воды и протонирование аниона Cfur⁻:



В результате расчета были получены следующие значения констант протонирования аниона цефуроксима: $pK_a=2,43$. Найденное значение константы кислотной диссоциации хорошо согласуется с литературными данными.

УДК 547.556.9

Сырова Елена Михайловна

СИНТЕЗ АМИНОКАРБОНИЛФОРМАЗАНОВ И КОМПЛЕКСОВ НА ИХ ОСНОВЕ

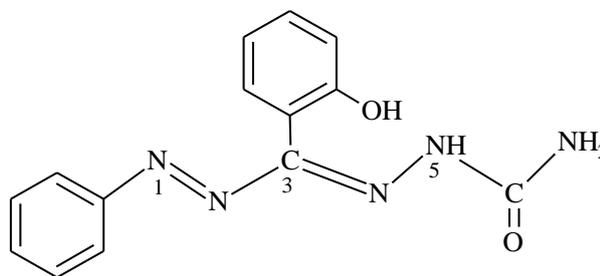
Руководитель: Егорова И.Ю.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Формаза́ны (азогидразоны) – это соединения, содержащие соответствующую цепочку атомов ($-N=N-C=N-NH$), которые формально рассматриваются как производные неизвестного в свободном виде азогидразона формальдегида $HN=N-CH=N-NH_2$. Одно из важнейших свойств формаза́нов – способность образовывать комплексные соединения с ионами металлов. Формаза́ны обладают рядом преимуществ среди различных лигандных систем, т.к. благодаря тонкому строению молекулы, широкой вариативности заместителей в положениях 1,3,5 и различным по природе донорным атомам, позволяют получать на их основе координационные соединения различной природы и структуры: моно- и биядерные комплексы, а также комплексы, отличающиеся локальным окружением и конфигурацией металлохелатного узла.

Представленная работа посвящена получению металлокомплексов на основе азотсодержащих лигандов – 1,3-дифенил – и 1-фенил-3(2'-гидроксифенил)-5-аминокарбонилформаза́нов и сульфата меди (II).

Синтез металлокомплексов проходил в три стадии. На первой стадии взаимодействием бензальдегида и салицилового альдегида с гидрохлоридом семикарбазида получили семикарбазоны бензальдегида и салицилового альдегида. На второй стадии реакцией взаимодействия полученных семикарбазонов с фенилдиазоний хлоридом синтезированы 1,3-дифенил- и 1-фенил-3(2'-гидроксифенил)-5-аминокарбонилформаза́ны, структурная формула которых представлена ниже:



На третьей стадии на основе аминокарбонилформаза́нов получены металлокомплексы с медью (II): бис-1,3-дифенил-5-аминокарбонил- и бис-1-фенил-3-(2'-гидроксифенил)-5-аминокарбонилформаза́наты.

Полученные соединения представляют собой кристаллические вещества темно-фиолетового и темно-коричневого цветов. Строение, растворимость и температура плавления исследуются.

УДК 543.51:546.3-19

Тактаров Антон Алексеевич

ИЗУЧЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ПОВЕРХНОСТНОЙ И СТРУКТУРНОЙ СЕГРЕГАЦИИ В БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦАХ Ni-Pd

Руководитель: Сдобняков Н.Ю.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

В настоящее время проблема стабильности/нестабильности наночастиц [1] является ключевой при исследовании их свойств и возможных практических применений. Актуальной задачей является исследование закономерностей и механизмов структурных превращений в бинарных наночастицах. При этом желательным может быть как формирование стабильной наноструктуры с разделенными (сегрегированными) компонентами, например наноструктуры ядро-оболочка или Янус-структуры, так и однородной (однофазной), в некотором приближении, наночастицы. Молекулярно-динамические эксперименты проведены с использованием потенциала сильной связи [2]. Для перекрестных параметров мы использовали, апробированное ранее [3], правило Лоренцо-Бертло. Установлено, что в процессе нагревания в наночастице Ni₁₅₀₀-Pd₁₅₀₀ с первоначально равномерным распределением компонентов при температуре T=798 К начинается формирование структуры ядро-оболочка, которая окончательно формируется при температуре T=1284 К.

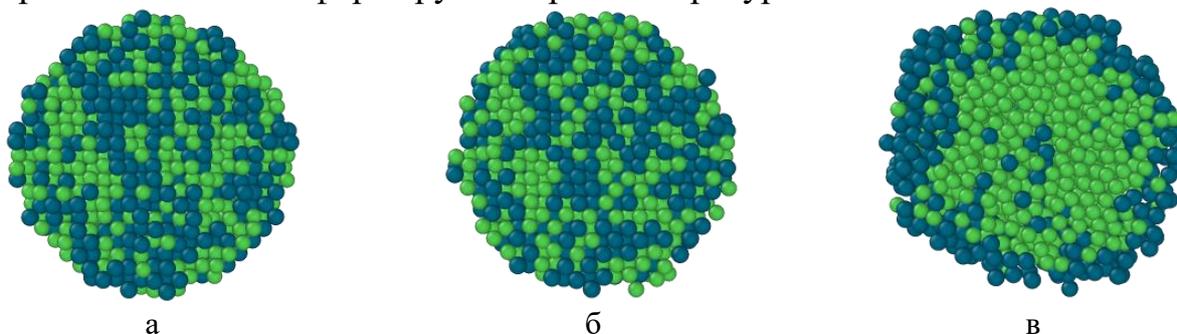


Рис. 1. Экваториальное сечение наночастицы Ni₁₅₀₀-Pd₁₅₀₀ в процессе плавления: а – 300 К, б – 798 К, в – 1284 К. Атомы Pd изображены более темными шарами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Самсонов В.М., Сдобняков Н.Ю. и др. // Известия РАН. Серия физическая. 2021. Т. 85. № 9. С. 1239-1244.
2. Cleri F., Rosato V. // Physical Review B. 1993. V. 48. I. 1. P. 22-33.
3. Сдобняков Н.Ю., Самсонов В.М., Колосов А.Ю. и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2019. Вып. 11. С. 520–534.

УДК 547.426.21/.23

Тарабанова Анастасия Алексеевна

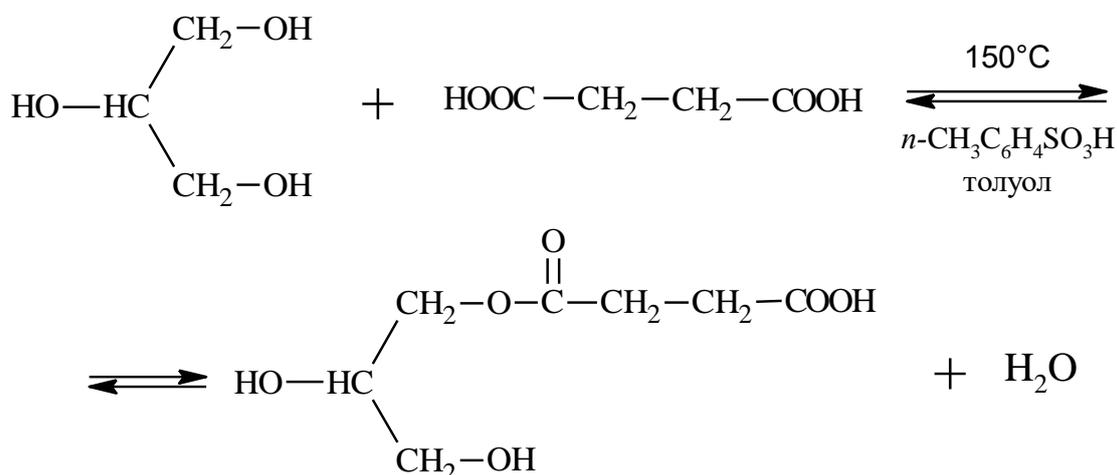
ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ СУКЦИНИЛГЛИЦЕРИДА

Руководитель: Егорова И.Ю.

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Сукцинилглицерид — сложный эфир глицерина и янтарной кислоты. Данное соединение относится к функциональному классу пищевых поверхностно-активных веществ и является эмульгатором, обеспечивающим создание эмульсий из несмешивающихся жидкостей.

Синтез сукцинилглицерида проведен путем взаимодействия глицерина и янтарной кислоты в присутствии *n*-толуолсульфокислоты при 150°C по следующей схеме:



Протекающая реакция этерификации сопровождается образованием азеотропной смеси толуола с водой в водоотделительной ловушке. Синтезировано соединение - вязкое вещество коричневого цвета. Исследованы поверхностно-активные свойства сукцинилглицерида: поверхностное натяжение его водных растворов, температура помутнения, расчет гидрофильно-липофильного баланса. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопического анализа и качественными реакциями на присутствие многоатомных спиртов и карбоновых кислот.



УДК: 581.192

Тарабарина Алена Алексеевна

СРАВНЕНИЕ СТАНДАРТНЫХ И ЭКСПРЕСС-МЕТОДОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МИКРОБИОЛОГИЧЕСКОЙ ЧИСТОТЫ ИНФУЗИОННЫХ РАСТВОРОВ

Руководитель: Ожимкова Е.В.

Тверской государственный технический университет, г. Тверь
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

При определении стерильности лекарственных средств, предпочтительным и стандартным методом является метод мембранной фильтрации. Этот метод имеет ряд преимуществ, так как менее трудоемок, материалы дешевые, имеется возможность выявить даже незначительное число микроорганизмов, проводить прямой и точный подсчет колоний и выделять их в чистую культуру. Основной недостаток – достаточно долгое получение окончательного результата, точность которого не дает идентифицировать видовое происхождение микроорганизмов [1].

Системы *API* компании *bioMérieux* стали настоящей революцией в области идентификации, благодаря миниатюризации и стандартизации традиционного метода. *API* системы – коммерческие тест-системы для биохимической идентификации микроорганизмов различных групп, представляющие собой готовые к использованию полистироловые планшеты и панели (стрипы) с сухими дифференцирующими средами или субстратами [2]. Преимущества *API* систем состоят в следующем: идентификация выделенных микроорганизмов до вида (в большинстве случаев); идентификация по большому количеству показателей; идентификация микроорганизмов занимает мало времени; стрипы и реактивы готовы к использованию и не требуют специальной подготовки.

Ограничениями данных систем являются экономические затраты на идентификацию различных видов микроорганизмов, что служит преградой для масштабного производства, а также нужно учитывать факторы, которые влияют на результат: количество тестируемых бактерий (инокулят), тип питательной среды, температура инкубации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

3. Микробиологическая чистота (ФС.1.2.4.0002.15) // XII Государственная Фармакопея Российской Федерации. Часть 1. – Москва, 2015. – 508 с.
4. *API* Идентификация микроорганизмов *BioMérieux*: [сайт]. 2021. (www.biomerieux.com)

УДК 547.867.4

Тараскина Мария Юрьевна

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА N-АЛКИЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИПЕРИДИНА

Руководитель: Ворончихина Л.И.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Фрагменты пиперидина, содержащиеся во многих органических соединениях, обладают высокой физиологической активностью, широко применяются в медицинской практике [1]. Соединения пиперидина применяют для стабилизации минеральных и синтетических масел против окисления, в качестве фунгицидов, ингибиторов коррозии в различных средах. Большинство N-алкильных производных пиперидина обладают ядовитыми свойствами, однако его соли не отличаются ядовитостью, чем и представляют интерес как бактерицидные препараты широкого спектра действия [2]. В настоящей работе получены соли N-алкилпиперидиния алкилированием алкилгалогенидами в присутствии ацетона в соотношении 2:1 по схеме, приведенной ниже (Рис.1):

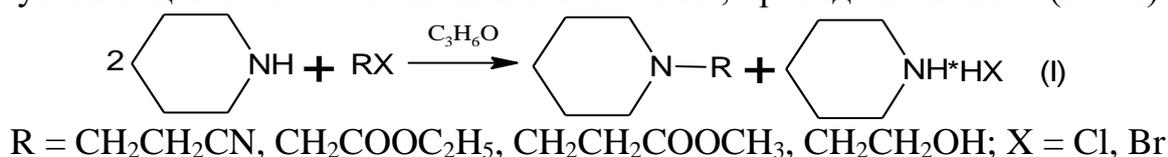


Рис. 1. Схема реакции алкилирования пиперидина

N-алкилпиперидин очищен перегонкой при атмосферном давлении. Кватернизацией N-алкилпроизводных получены четвертичные соли (Рис.2).

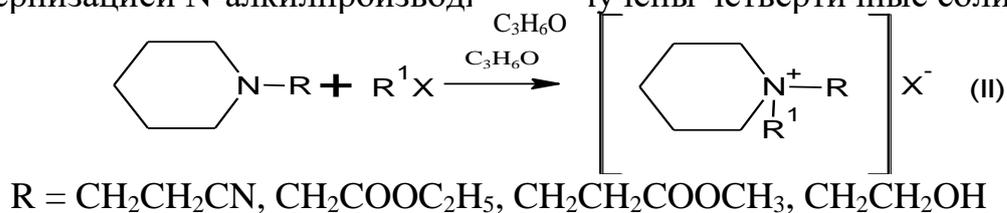


Рис.2. Схема реакции кватернизации N-алкильных производных пиперидина

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Журавлев О.Е., Веролайнен Н.В., Ворончихина Л.И. Синтез и биологическая активность четвертичных солей N-алкилпиперидиния // Вестн. ТвГУ. Сер. «Химик». 2012. №14. С. 78–85.
2. Правлиев К.Д. Особенности строения, синтеза и биологической активности пиперидина и его производных / К.Д. Правлиев, Г.С. Ахметова, Н.Ж.Дюсенова [и др.] // Вестник Казахского национального медицинского университета. 2020. №2–1. С.418-425.

УДК: 544.169:544.134

Тимофеева Елизавета Владимировна

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ АМФЕТАМИНА

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

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии, кафедра общей физики

Методом V3LYP получено распределение электронной плотности ($\rho(r)$), а в «квантовой теории атомов в молекулах» QTAIM - интегральные электронные характеристики групп правовращающего амфетамина. Ранее распределение $\rho(r)$ молекул на основе бензола рассматривалось в работе [1].

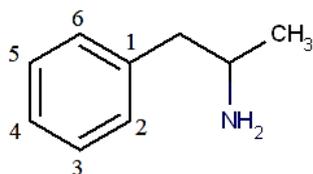


Рис.:
Нумерация групп СН ароматического кольца R-амфетамина

Наименьшим зарядом ($q(R)$) обладает фрагмент $-\text{NH}_2$, так же отрицательно заряжена CH_3 , ее $q(\text{CH}_3) = -0,029$ а.е., а СН, связанная с ними, имеет наибольший заряд (Таблица). Это свидетельствует о том, что группы NH_2 и CH_3 проявляют индуктивный эффект на СН, стягивая на себя ее $\rho(r)$. Кроме данной СН, электроотрицательному воздействию подвержена единственная CH_2 ($q(\text{CH}_2)$ выше нуля). Бензольное кольцо стабилизирует свой «эффективный» заряд ($q(\text{C}_6\text{H}_5) = -0,041$ а.е.) оттягивая $\rho(r)$ с CH_2 .

Таблица:

Заряды групп $q(R)$ (а.е.), энергии $-E(R)$ (а.е.) и объемы $V(R)$ (\AA^3) R-амфетамина

	1C	2CH	3CH	4CH	5CH	6CH	CH ₂	CH	CH ₃	NH ₂	C ₃ H ₈ N
$q(R)$	0,002	-0,028	-0,008	-0,007	-0,005	0,005	0,030	0,390	-0,029	-0,350	0,041
$-E(R)$	38,116	38,740	38,726	38,725	38,726	38,731	39,319	38,475	39,939	56,193	173,926
$V(R)$	10,0	19,8	19,9	19,9	19,8	19,4	22,9	13,8	32,9	27,2	96,8

Отличие в подвижности $\rho(r)$ симметрично расположенных 2СН и 6СН ароматического кольца отражено в отличии их интегральных электронных характеристик (Таблица) и связано с пространственной ориентацией фрагмента $\text{C}_3\text{H}_8\text{N}$ по отношению к сопряженной системе. Понижение полной электронной энергии 2СН на 24 кДж/моль (по сравнению с 6СН) говорит о стабилизации 2СН и дестабилизации 6СН. В то же время параметры $-E(R)$, $V(R)$ группы СН в позициях 3 и 5 идентичны.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Слабые взаимодействия в диметиланилине и его производных // *Журнал структурной химии*. 2020. Т.61, №12. С. 1951–1957.

Тупикина Елена Павловна

ВЛИЯНИЕ ТИПА ПОЛИМЕРА НА ПОВЕДЕНИЕ КАТАЛИЗАТОРОВ КРОСС-СОЧЕТАНИЯ СОНОГАШИРА

Руководитель: Никошвили Л.Ж.

Тверской государственный технический университет, г. Тверь
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Реакция Соногашира представляет собой образование углерод-углеродной связи между sp^2 -атомами галогенида и sp -атомами алкина. В большинстве случаев в настоящее время в качестве катализаторов для протекания данной реакции широко используются фосфиновые комплексы палладия и N-гетероциклические карбеновые комплексы палладия. Также были разработаны эффективные гетерогенизированные катализаторы на основе иммобилизованных на различные носители комплексов палладия. Кроме того, было показано, что эффективным носителем для создания катализаторов реакции Соногашира является полистирол.

В рамках данной работы было исследовано влияние типа сверхсшитого полистирола (нефункционализированный (MN270) или содержащий в составе третичные аминогруппы (MN100)) на протекание модельной реакции кросс-сочетания Соногашира между фенилацетиленом и 4-йоданизолом. В качестве катализаторов использовались две системы: 2,5%-Pd/MN270 и 2%-Pd/MN100. Реакция проводилась при температуре 90°C, в качестве растворителя был выбран диметилсульфоксид, а в качестве стабилизатора активной фазы – ацетат натрия. Кроме того, в каждом эксперименте в реакционную массу был добавлен тетрабутилбромид аммония. Реакция велась в периодическом режиме в инертной атмосфере (аргон) при скорости перемешивания 900 об./мин. Мольная доля палладия по отношению к 4-йоданизолу в каждом эксперименте составляла 0.235 мольн.%.

В ходе проведения исследования было показано, что катализатор на основе функционализированного MN100 проявляет более высокую активность в реакции Соногашира. Однако, наряду с целевым продуктом кросс-сочетания (1-метокси-4-(фенилэтинил)бензолом), в реакционной массе обнаруживается продукт его деметилирования – дифенилацетилен.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда
(проект № 20-19-00386).*

УДК 53.072

Туреев Иван Вадимович

О РАЗРАБОТКЕ КОМПАКТНОГО ГЕНЕРАТОРА СИГНАЛА ПРОИЗВОЛЬНОЙ ФОРМЫ НА ОСНОВЕ ПРИНЦИПА ПРЯМОГО ЦИФРОВОГО СИНТЕЗА

Руководитель: Макаров В.В.

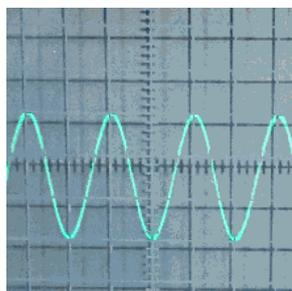
Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

Решение многих прикладных и исследовательских задач требует наличия генератора сигнала произвольной формы [1]. Принцип прямого цифрового синтеза (DDS) позволяет с высокой точностью генерировать сигналы различных форм всего одним функциональным узлом [2]. Мировой кризис полупроводников значительно повысил цены на программируемые лабораторные генераторы сигналов. Альтернативой может служить устройство, созданное на основе сравнительно недорогих компонентов, таких как: микросхема генератор AD9833, микроконтроллер AtMega8, LCD дисплей Nokia 5110, микросхема USB UART преобразователя CH340G.

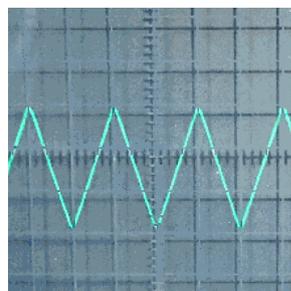
Целью настоящей работы является разработка универсального генератора сигнала с использованием принципа прямого цифрового синтеза. Для решения поставленной задачи нами был разработан генератор сигнала произвольной формы, внешний вид которого приведен на рис. 1. Данная разработка позволяет генерировать и получать осциллограммы различных типов сигналов (см. рис. 2).



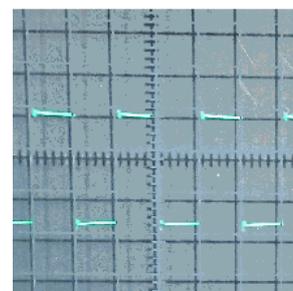
Рисунок 1.
Общий вид прототипа прибора.



а



б



в

Рисунок 2.
Различные виды сигналов генератора: а – синусоидальный сигнал, б – треугольный сигнал, в – П-образный сигнал (меандр).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Шатохин А.А., Желбаков И.Н., Коровина О.А. // Измерительная техника. 2010. № 11. С. 55–58.
2. Рыбин Ю.К., Петлина Т.А. // Метрология. 2018. Вып. 2. С. 49–63.

УДК 543.612.2

Уварова Софья Сергеевна

АНАЛИЗ МЕЗИМА И ПАНКРЕАТИНА НА СОДЕРЖАНИЕ СОЕДИНЕНИЙ ЭЛЕМЕНТОВ II-A ПОДГРУППЫ

Руководитель: Никольский В.М.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

Панкреатин компенсирует недостаточную активность собственных ферментов, способствует улучшению процесса пищеварения. Выпускается под разными торговыми наименованиями, например, «Биофесталь», «Нормоэнзим», «Ферестал», «Фестал» и т.п.

Федеральная служба по надзору в сфере здравоохранения РФ письмом от 13 октября 2021 г. отмечает, что под разными торговыми названиями одного препарата может производиться фальсифицикат, например, установлено, что препарат «Креон®» серии 58890, на вторичных упаковках которого указан производитель «Эбботт Лэбораториз ГмбХ, Германия» имеет признаки фальсификации.

В Базах лекарственных средств, изъятых из обращения, присутствует «Панкреатин» ОАО «ТЮМЕНСКИЙ ХИМИКО-ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИЙ ЗАВОД», ОАО «ИРБИТСКИЙ ХИМФАРМЗАВОД» и др. МЕЗИМ® ФОРТЕ также неизменно входит в топ-3 безрецептурных лекарственных средств по объему розничной реализации. Фальсификация препаратов, пользующихся массовым спросом, создает угрозу для жизни и здоровья населения.

Для быстрого и надежного определения таких компонентов мезима и панкреатина как стеараты элементов II-A подгруппы в качестве комплексонометрического титранта нами предложены созданные на кафедре неорганической и аналитической химии ТвГУ экологически безопасные комплексоны, производные дикарбоновых аминокислот [1].

Для анализа были взяты препараты: МЕЗИМ® ФОРТЕ 10000 немецкого производителя Берлин-Хеми АГ и ПАНКРЕАТИН отечественной фирмы ПАО «Биосинтез». При исследовании лекарственных средств было установлено содержание стеарата магния в 1 таблетке мезима – 1,867 мг, содержание стеарата кальция в 1 таблетке панкреатина – 3,120 мг. Это соответствует данным состава, представленного в инструкции к препарату.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Loginova E. S., Nikol'skii V. M., Tolkacheva L. N., Lukryanova N. I. Synthesis and some properties of complexones, succinic acid derivatives // Russian Chemical Bulletin, 2016, Vol. 65, No. 9, P. 2206-2210, DOI: 10.1007/S11172-016-1569-7

УДК 537.624

Филимонова Алина Викторовна

ПРОЦЕССЫ НЕОБРАТИМОГО ВРАЩЕНИЯ ВЕКТОРА НАМАГНИЧЕННОСТИ В СПЛАВАХ $Gd_{0,85}Zr_{0,15}(Co_{0,70}Cu_{0,09}Fe_{0,21})_z$

Руководитель: Ляхова М.Б.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Исследованы процессы перемагничивания ферромагнитных образцов $Gd_{0,85}Zr_{0,15}(Co_{0,70}Cu_{0,09}Fe_{0,21})_z$ с $z=5,6-6,8$. Подтвержден значительный вклад процессов необратимого вращения вектора намагниченности в наиболее

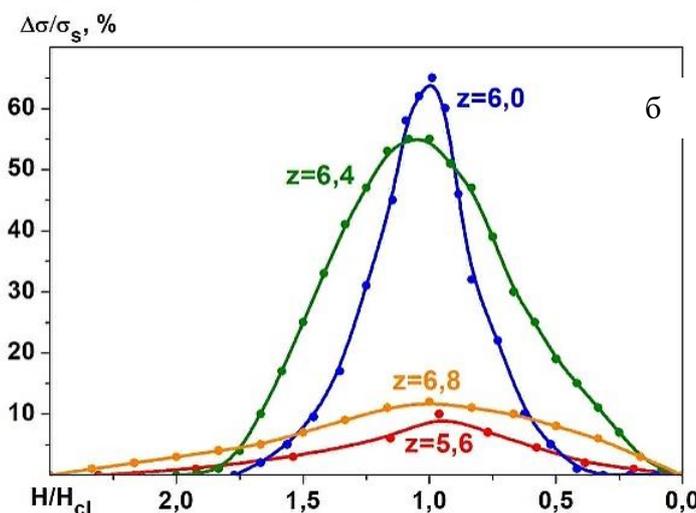
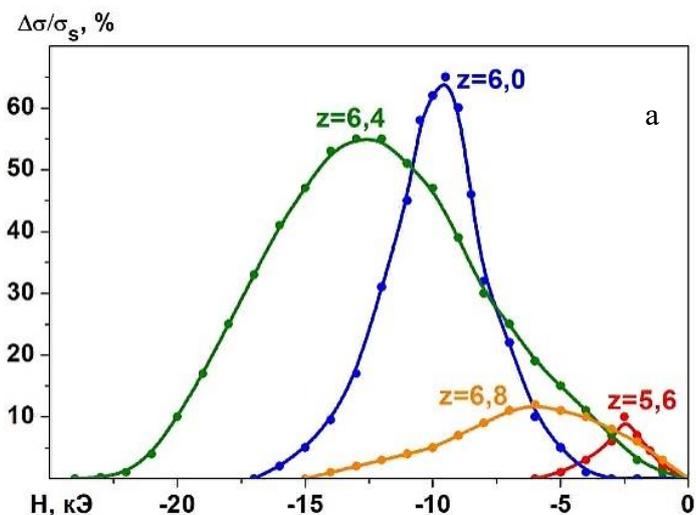


Рис.1.: Полевые зависимости $\Delta\sigma$ образцов $Gd_{0,85}Zr_{0,15}(Co_{0,70}Cu_{0,09}Fe_{0,21})_z$

низкоанизотропных областях структуры. Проведен эксперимент, предложенный в [1]. Измерения проводились методом вибрационного магнитометра. Перед каждым измерением образцы намагничивались до насыщения вдоль оси легкого намагничивания (ОЛН), затем подвергались воздействию размагничивающего поля конкретной величины от 0 до 25 кЭ с шагом 0,5–1 кЭ. Определялись значения удельной намагниченности вдоль ОЛН (σ), после поворота на 45° (σ_{45}) и их разность ($\Delta\sigma = \sigma - \sigma_{45}$).

Установлено, что после поворота на 45° дополнительно перемагничивается большая часть объема образцов. Особенно этот эффект значителен для образцов с $z=6,0$ и $6,4$, для которых кривые $\Delta\sigma/\sigma_s(H)$ имеют высокие максимумы (рис. 1а). Перестройка зависимостей в координатах $\Delta\sigma/\sigma_s(H/H_{cl})$ (рис. 1б) показывает, что максимальное дополнительное перемагничивание наблюдается в полях равных коэрцитивной силе образцов (H_{cl}).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Семенова Е.М. Магнитный гистерезис микронеодомных систем на основе 3d- и 4f-переходных металлов // Дисс. канд. физ.-мат. наук. Тверь, 2000. 136С.

УДК: 544.344.015.3

Фомина Елена Александровна

МЕТАТЕКТИЧЕСКОЕ И ПЕРИТЕКТИЧЕСКОЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ МАРГАНЦА В ТРОЙНОЙ СИСТЕМЕ Cu-Mn-Ni

Руководители: Балданов В.Д., Зеленая А.Э.

Институт физического материаловедения СО РАН, г. Улан-Удэ
Сектор компьютерного конструирования материалов

Полиморфизм приводит к значительному усложнению фазовых диаграмм (ФД) тройных и более сложных систем. Одна из таких Т-х-у диаграмм, Cu-Mn-Ni (рис. 1), с высокотемпературным полиморфизмом компонента В (Mn), рассмотрена при помощи программ «Редактор фазовых диаграмм» [1] и «Конструктор фазовых диаграмм» [2], разрабатываемых в ИФМ СО РАН, <http://ipms.bscnet.ru/labs/skkm.html>. Такой анализ позволяет получить информацию о влиянии протекающих процессов на формирование микроструктуры.

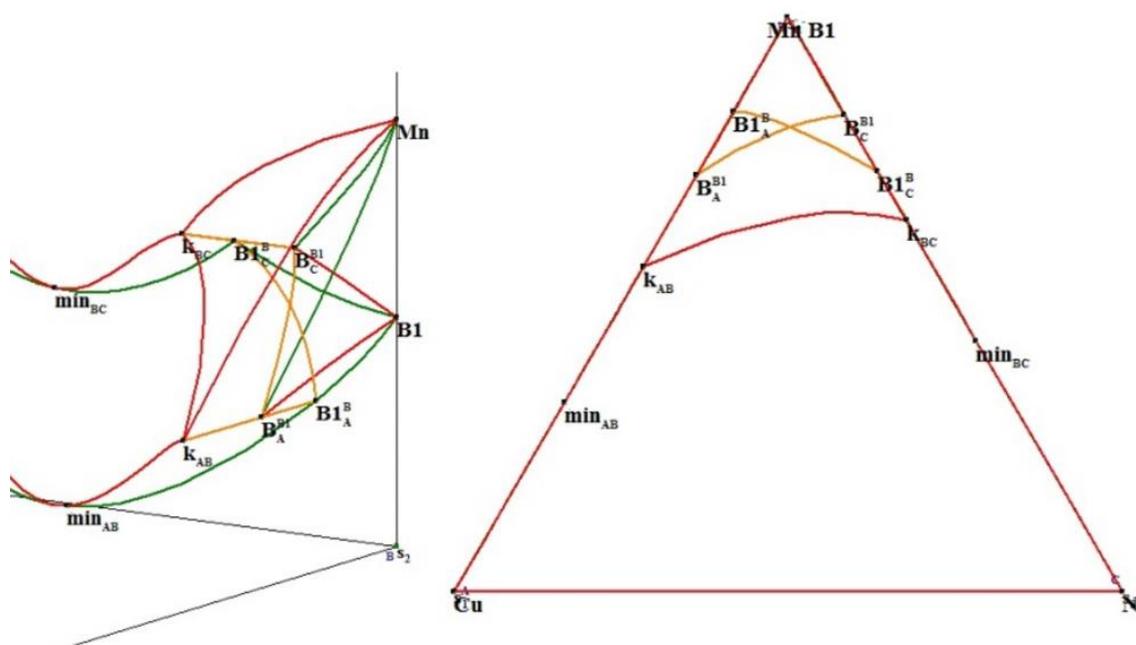


Рисунок 1. Смена типа трехфазной реакции с участием двух аллотропов Mn.

Исследование выполнено в соответствии с госзаданием ФГБУН ИФМ СО РАН
на 2021-2023 гг. (проект № 0270-2021-0002).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Насрулин Э.Р., Луцык В.И. Компьютерная программа "Редактор тройных фазовых диаграмм, состоящих из произвольного числа поверхностей с выпуклым прямолинейным контуром" // Свидетельство отраслевого фонда алгоритмов и программ № 6596. Инновации в науке и образовании. – 2006, №7, реф. 6596.
2. Луцык В.И., Воробьева В.П., Зеленая А.Э., Зырянов А.М. Компьютерная программа "Трехмерные компьютерные модели фазовых диаграмм тройных систем с одним разрывом растворимости" // Свидетельство отраслевого фонда алгоритмов и программ № 24084. Инновации в науке и образовании. – 2019, реф. 24084.

УДК: 616-72

Хаитов Азамат Кенджаевич

РАЗРАБОТКА КОМБИНИРОВАННОГО ВИНТОВОГО ЭКСТРАКТОРА КОРНЕЙ ЗУБОВ СО СЪЕМНЫМИ НАСАДКАМИ И ОБРАТНО- УДАРНЫМ МЕХАНИЗМОМ ДЕЙСТВИЯ

Руководитель: Жмакин И.А.

Тверской государственной медицинской университет, г. Тверь
Кафедра мобилизационной подготовки здравоохранения и медицины катастроф

Разработан и изготовлен на 3D принтере с использованием пластика макет комбинированного винтового экстрактора корней зубов со съёмными насадками и обратно-ударным механизмом действия (масштаб 1:1), который предназначен для проведения сложного хирургического вмешательства – удаления корней разрушенных зубов из зубных альвеол (лунок) верхней или нижней челюсти. Удаление корней зубов требует наличия хирургических инструментов, обеспечивающих высокое качество стоматологической помощи, в том числе экстракторов [1].



Рисунок:

Комбинированный винтовой экстрактор корней зубов со съёмными насадками и обратно-ударным механизмом действия

Обозначения: 1 - бур (насадка), 2 – крышка, 3 – основание, 4 – рукоятка.

Не имеющий аналогов экстрактор объединяет в себе несколько функций за счет использования набора сменных насадок диаметром от 1,5 мм до 4 мм и механизма обратно-ударного действия. Он изготавливается из хирургической стали, имеет более низкую себестоимость в сравнении с наборами стоматологических инструментов со схожими функциями, что обеспечивает его широкое применение и послужит реализации национального проекта «Здравоохранение» по обеспечению доступности населению качественной первичной медико-санитарной помощи [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. В лучших традициях тверской стоматологической школы (итоги международной научно-практической конференции) / Б.Н. Давыдов [и др.]. // Верхневолжский медицинский журнал. 2019. Т. 18. № 1. С. 15–20.
2. Национальный проект «Здравоохранение» как один из путей сохранения здоровья россиян / Е.Г. Королюк [и др.]. // Тверской медицинский журнал. 2021. № 1. С. 137–144.

УДК 631.8

Ханмамедов Гочмурад Сарыханович

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ АГРОГУМАТА КАЛИЯ НА ДЕРНОВО-ПОДЗОЛИСТОЙ ПОЧВЕ

Руководитель: Шилова О.В.

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь
Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Дерново-подзолистые почвы Тверской области бедны: органическим веществом, доступными формами калия, катионов обменных оснований и пр. Поэтому удобрения важны для воспроизводства эффективного плодородия. Перспективным видом удобрений являются гуматы – эффективные, экологичные и экономичные удобрения многофункционального действия. К этой группе относится и гранулированный торфяной мелиорант «Агрогумат калия» – органоминеральное удобрение. В связи с этим целью полевых исследований в 2021 году стало изучение влияния разных доз агрогумата на плодородие дерново-подзолистой почвы.

Опыт проводился на экспериментальном участке кафедры агрохимии и земледелия Тверской ГСХА. Общая площадь участка – 400 м², площадь учётной делянки – 12 м². Повторность опыта трёхкратная, расположение делянок – рендомизированное. Агрохимический анализ почвенных образцов показал, что почва участка – типичная для дерново-подзолистых почв: рН_{KCl} = 5,4; С_{орг.вещ-ва} – 2,0%, Р₂О₅ – 212 мг/кг почвы, К₂О – 113 мг/кг почвы. Схема опыта: контроль (без удобрений); агрогумат калия в дозе 6 т/га; агрогумат в дозе 3 т/га и N₃₈P₁₇K₁₂₁; агрогумат калия в дозе 1,5 т/га и N₅₈P₂₆K₁₈₁; N₇₇P₅₂K₂₄₂. Агрогумат обладал слабощелочной реакцией (8,0); содержание органического вещества составило 60%. Преобладало количество калия (6,3%) при низком содержании фосфора (0,9%). После внесения удобрений в почве возросло количество С_{орг.вещ-ва}, наибольшее значение было с агрогуматом в дозе 6 т/га (2,14%). Внесение агрогумата в дозе 3 т/га и N₃₈P₁₇K₁₂₁ способствовало увеличению С_{орг.вещ-ва} на 0,09%, а в дозе 1,5 т/га с минеральными удобрениями – на 0,07% соответственно. Максимальным количеством нитратного и аммиачного азота, подвижного фосфора и обменного калия отличалась почва, удобренная N₇₇P₅₂K₂₄₂ или агрогуматом в дозе 1,5 т/га и N₅₈P₂₆K₁₈₁. Вариант с агрогуматом в дозе 3 т/га и N₃₈P₁₇K₁₂₁ уступал указанным вариантам по количеству подвижных форм элементов питания (в среднем по периодам исследований на 3 – 10%). Внесение в почву агрогумата в дозе 6 т/га способствовало увеличению нитратов, фосфатов и калия по отношению к контрольному варианту (в среднем во все сроки наблюдений на 4–9%). Незначительно увеличивалось значение рН_{KCl} почвенного раствора (в среднем на 0,2–0,3). Наилучший уровень питательного режима почвы выявлен на вариантах с агрогуматом как в чистом виде, так и в сочетании с минеральными удобрениями.

УДК 544.774

Цветкова Виктория Александровна

**L-ЦИСТЕИН И N-АЦЕТИЛ-L-ЦИСТЕИН КАК БИОВОССТАНОВИТЕЛИ
ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ГЕЛЬ-СПРЕЯ, СОДЕРЖАЩЕГО КЛАСТЕРЫ И
НАНОЧАСТИЦЫ СЕРЕБРА**

Руководитель: Вишневецкий Д.В.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Одно из приоритетных направлений современной науки - поиск и разработка новых эффективных антибактериальных систем, что обусловлено растущей в геометрической прогрессии проблемой сдерживания инфекций, устойчивых к противомикробным препаратам. Для этого активно развивается новый эффективный и безопасный для окружающей среды и человека метод «зеленого» синтеза наночастиц серебра (НЧС), в котором применяются биовосстановители [1,2,3].

Объекты изучения настоящей работы – водные растворы и гели на основе L-цистеина (ЦИС), N-ацетил-L-цистеина (НАЦ) и солей серебра – AgNO_2 , AgNO_3 и AgOOCCH_3 . В ходе эксперимента варьировались концентрации исходных компонентов и их соотношение. Методами физико-химического анализа установлено, что химическая природа аминокислоты существенно влияет на возможность получения одновременно тиксотропного геля и НЧС в его матрице. Это характерно для системы с ЦИС и не характерно для НАЦ. Изменение концентрации исходных компонентов и их соотношения позволяет контролировать конечные важные характеристики систем: вязкость, стабильность, дисперсность, форму и размеры НЧС, величину заряда, концентрацию НЧС и индекс полидисперсности.

Конечные системы показали высокую антибактериальную активность в отношении наиболее распространенных видов микроорганизмов и отсутствие токсичности к нормальным клеткам человека. Данные показатели в свою очередь сильно зависят от химической природы аминокислоты.

*Работа выполнена в рамках гранта РФФ № 21-73-00134 на оборудовании ЦКП ТвГУ,
ТГМУ и ИБМХ им. В.Н. Ореховича.*

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

4. D.V. Vishnevetskii, A.R. Mekhtiev, T.V. Perevozova, D.V. Averkin, A.I. Ivanova, S. D. Khizhnyak, P.M. Pakhomov, *Soft Matter*, 2020, 16, 9669-9673.
5. D.V. Vishnevetskii, D.V. Averkin, A.A. Efimov, A.A. Lizunova, A.I. Ivanova, P.M. Pakhomov, E. Ruehl, *Soft Matter*, 2021, 17, 10416-10420.
6. D.V. Vishnevetskii, et al., *Soft Matter*, 2022, In Print.

УДК: 577.114:547.995.12:664(035.3)

Цветкова Ольга Игоревна

НОВЫЕ ПЛЁНКИ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА И КОБАЛЬТА(II)

Руководитель: Критченков А.С.

Российский университет дружбы народов, Москва
Кафедра неорганической химии

Два природных полимера – хитозан и хитин неразрывно связаны друг с другом. Эти соединения относятся к классу полисахаридов и обладают схожей структурой (рис. 1). В хитинологии принято считать хитозаном сополимеры *N*-ацетилглюкозамина и глюкозамина со степенью деацетилирования менее 50% (или 0.5), а хитином – со степенью деацетилирования более 50% [1].

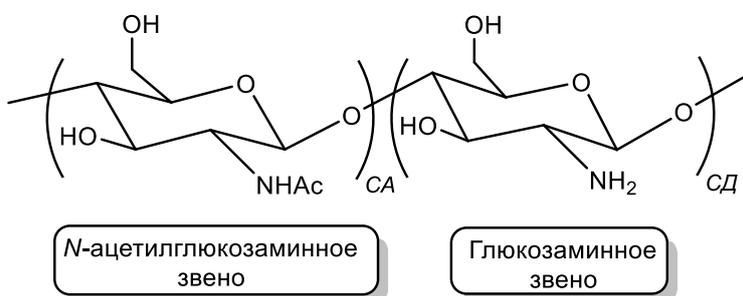


Рис. 1. Структура хитозана и хитина (CA – степень ацилирования, CD – степень деацетилирования).

Главными преимуществами хитозана являются его биосовместимость, биodeградируемость, отсутствие иммуногенности, канцерогенности, а также общей и системной токсичности. В связи с этим разработка плёночных материалов на основе хитозана является актуальной и важной задачей современной химии высокомолекулярных соединений и материаловедения.

В рамках данной работы были получены плёнки на основе хитозана с различным содержанием ионов кобальта Co^{2+} . Было выявлено, что введение окисленных ионов кобальта в полимерную матрицу приводит к улучшению механических и барьерных свойств образующихся плёнок, а также к выраженному увеличению их антибактериальной активности как в отношении грамположительных, так и в отношении грамотрицательных микроорганизмов без увеличения токсичности в отношении соматических клеток млекопитающих. Манифестация указанных характеристик характерна для оптимального содержания ионов Co^{2+} в плёнке, которое составляет 1 %.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 22-23-00044, руководитель – д.х.н. А.С. Критченков).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Kurita, K., *Chemistry and application of chitin and chitosan*. Polymer Degradation and Stability, 1998. **59**(1): p. 117-120.

УДК 547.721, 544.47

Цветкова Полина Андреевна

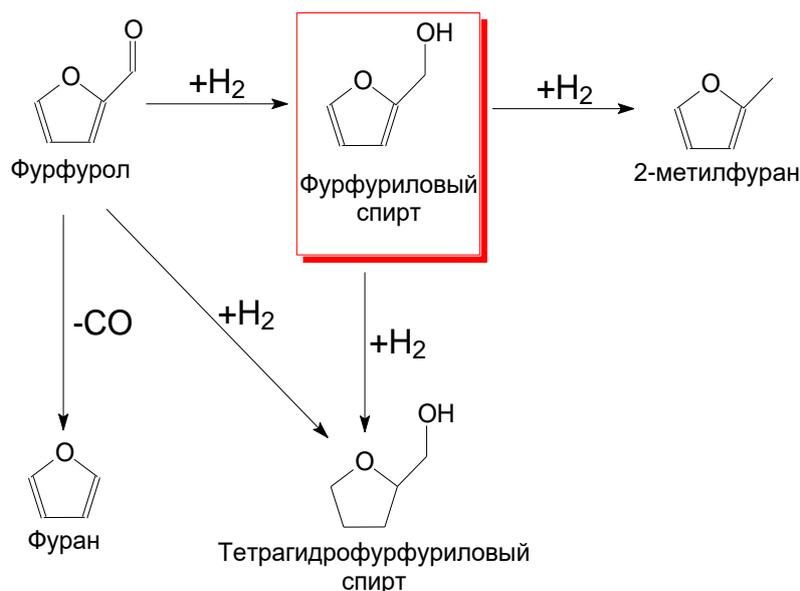
ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ Ru-СОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРОВ С ПОМОЩЬЮ ПРОЦЕССА ГИДРИРОВАНИЯ ФУРФУРОЛА

Руководитель: Матвеева В.Г., Сальникова К.Е.

Тверской государственный технический университет, г. Тверь
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Фурфурол является одним из основных компонентов биотоплива, который извлекается путем обработки лигноцеллюлозной биомассы. Фурфуроловый спирт, как основной продукт гидрирования фурфурола, является источником химических веществ с добавленной стоимостью. Были синтезированы и сравнены два типа рутениевых катализаторов. В данном исследовании представлены результаты каталитических свойств рутениевых катализаторов на основе сверхсшитого полистирола и оксида алюминия в процессе гидрирования фурфурола в фурфуроловый спирт. Новизна данной работы заключается в том, что было проведено сравнение Ru-содержащих катализаторов на различных носителях.

Сравнение каталитических свойств катализаторов на основе Ru показало, что катализатор на основе сверхсшитого полистирола (3%Ru/MN270) демонстрирует более высокие значения конверсии фурфурола (57%) и селективности к фурфуроловому спирту (93%), нежели катализатор на основе оксида алюминия (3%Ru/Al₂O₃). Можно предположить, что наночастицы Ru ответственны за образование каталитически активных центров селективного гидрирования фурфурола в фурфуриловый спирт.



УДК 538.953

Цилих Александра Дмитриевна

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ ТУЛИЯ И МАРГАНЦА НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ОРТОВАНАДАТА КАЛЬЦИЯ

Руководители: Солнышкин А.В., Сергеева О.Н.

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния вещества

Согласно [1], ортованадат кальция $\text{Ca}_3(\text{VO}_4)_2$ (CVO) – высокотемпературный сегнетоэлектрик ($T_c = 1100 \pm 10$ °C) со структурой типа витлокита. Величина спонтанной поляризации $68 \cdot 10^{-2}$ Кл/м².

Известно, структура типа витлокита, позволяет с помощью легирования управлять нелинейно-оптической активностью, а также сегнетоэлектрическими свойствами [2]. Поиск и комплексное исследование новых перспективных соединений на основе ванадата кальция является актуальной научной задачей. Цель работы заключается в исследовании распределения поляризации монокристаллов CVO, выращенных методом Чохральского, легированных ионами марганца и тулия.

Спонтанная поляризация соответствует профилю пирозлектрического коэффициента. В данной работе использована методика расчёта пироккоэффициента динамическим методом, представленная в [3]. Согласно этой методике, пироток рассчитывается как функция глубины проникновения теплового потока, а затем восстанавливается профиль пироккоэффициента по толщине образца (рис.1).

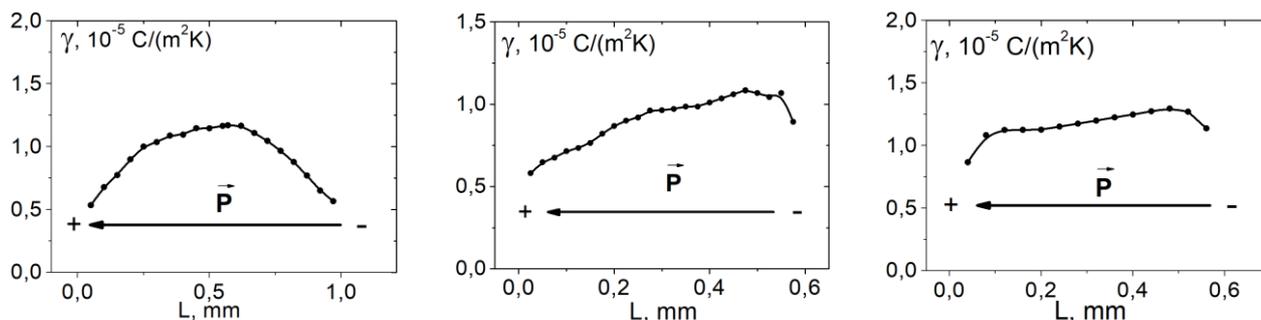


Рис1. Распределение пироккоэффициента по объёму исследуемых образцов (слева направо): номинально чистый CVO, CVO + 0,5% Tm_2O_3 , CVO + 0,8% Mn_2O_3

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. A.M. Glass, et al., *Ferroelectrics* 17, 579 (1978).
2. I.S. Voronina, et al., *J. Crystal Growth* 555, 125965 (2021).
3. А.А. Богомоллов, А.В. Солнышкин, А.В. Калгин, А.Г. Горшков, С.А. Гриднев, *Изв. РАН. Сер. Физ.* 75(10), 1452 (2011).

УДК: 539.32

Шамарина Карина Алексеевна¹

ИССЛЕДОВАНИЕ МОДУЛЯ УПРУГОСТИ ПОЛИМЕРА НА УСТАНОВКЕ СКАНИРУЮЩЕГО ЗОНДОВОГО МИКРОСКОПА

Руководители: Веролайнен Н.В.¹, Кузнецова Ю.В.²

Тверской государственный университет

¹Кафедра органической и биоорганической химии, ²кафедра магнетизма

Развитие современных нанотехнологий требует все более глубоких знаний о строении материалов и их физических свойствах на микро- и наноуровне. Атомно-силовая микроскопия является одним из наиболее современных и перспективных методов изучения морфологии и локальных свойств поверхности с высоким пространственным разрешением. В числе таких свойств модуль упругости – одна из важных механических характеристик, которая дает представление о подверженности деструкции полимера.

В данной работе для исследования были изготовлены пленки наполненного карбонильным железом лестосила. С помощью метода контактной силовой микроскопии, применяя программное обеспечение установки сканирующего зондового микроскопа Solver P47, получены топография поверхности (рис.1, а) и силовые кривые полимера (рис.1, б).

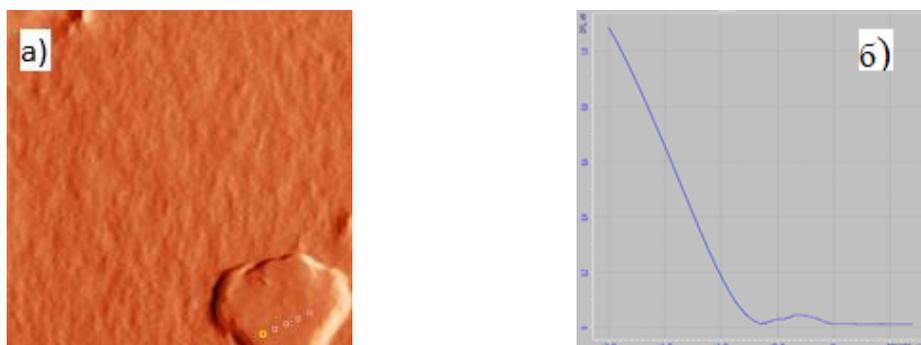


Рис.1 Изображение рельефа поверхности образца (а), силовая кривая (б).

В работе исследованы различные точки поверхности полимера и с помощью анализа силовых кривых, используя модель Герца и применяя скрипт YUNG[1], были рассчитаны локальные значения модуля Юнга. Вычисленные значения находятся в диапазоне 1.1-4.8 кПа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Кузнецова Ю.В. Повышение эффективности метода контактной силовой спектроскопии атомно-силового микроскопа / Ю.В. Кузнецова // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2021. – Вып. 13. – С. 243-249.

УДК 663.4; 543.554; 678.048

Шамахов Вячеслав Игоревич

СРАВНЕНИЕ АНТИОКСИДАНТНОЙ АКТИВНОСТИ ПОЛИФЕНОЛОВ В РАЗЛИЧНЫХ СОРТАХ ПИВА

Руководитель: Рыжков Ю.А.

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Пиво – одна из сложнейших систем, содержащих в себе большое количество различных химических соединений. Его состав определяется качеством очистки воды, экстрактивностью солода, содержанием α -кислот гумулонов в хмеле, процессами брожения и созревания.

Антиоксиданты – вещества, ингибирующие окислительные процессы в системе, их молекулы содержатся в пиве в виде монофенолов, мономерных и конденсированных полифенолов. В данной работе решалась задача сравнения антиоксидантной активности полифенолов в различных сортах пива с целью отработки методики экспресс-определения полифенолов. Антиоксидантную активность полифенолов измеряли методом потенциометрии с использованием хлорсеребряного электрода [1].

Для проведения эксперимента были выбраны следующие образцы пива: пшеничное с кориандром и апельсиновой цедрой (№1), lager (безалкогольный) (№2), медовуха (№3), lager (№4), IndiaPaleAle (№5), яблочный сидр (№6), darklager (№7). Антиоксидантная активность (АОА) представлена в таблице.

Таблица. Антиоксидантная активность полифенолов пива

Номер образца	АОА · 10 ⁴ , М·экв	Номер образца	АОА · 10 ⁴ , М·экв	Номер образца	АОА · 10 ⁴ , М·экв
1	20,2	4	10,6	7	33,3
2	14,6	5	33,4		
3	6,3	6	16,2		

Наибольшую антиоксидантную активность показали образцы №5 из-за сильного сухого охмеления и №7 из-за наличия в составе карамельного и жженого солода, что подтверждает большее содержание полифенолов в этих образцах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Иванова А.В., Герасимова Е.Л., Кравец И. А., Матерн А. И. Потенциометрическое определение водорастворимых антиоксидантов с использованием комплексов металлов / Журнал аналитической химии. 2015. Т. 70. № 2. С.173-177.



УДК 544.473

Шарапова Мария Дмитриевна

СРАВНЕНИЕ МОНО- И БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПАЛЛАДИЕВЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ СВЕРХСШИТОГО ПОЛИСТИРОЛА В РЕАКЦИИ ЖИДКОФАЗНОГО ГИДРИРОВАНИЯ НИТРОБЕНЗОЛА

Руководитель: Никошвили Л.Ж.

Тверской государственный технический университет, г. Тверь
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

В настоящее время актуальной является разработка и исследование высокоэффективных катализаторов гидрирования ароматических нитросоединений в соответствующие амины, так как последние находят широкое применение в производстве различных красителей, лекарственных препаратов, ингибиторов коррозии, антидетонационных присадок к бензинам и моторным топливам [1-2]. В данной работе проводилось сравнение монометаллического (Pd) и биметаллического (Pd-Zn) катализаторов на основе сверхсшитого полистирола марки MN100 в реакции гидрирования нитробензола.

Реакция гидрирования нитробензола (1 ммоль) проводилась в термостатируемом стеклянном реакторе, оборудованном магнитной мешалкой, при температуре 70°C в среде этанола в присутствии гидразина (10 ммоль) в качестве восстановителя. Количество палладия в каждом эксперименте составило 0.47 мольн. % по отношению к нитробензолу. Анализ проб катализата осуществлялся методом газовой хроматомасс-спектрометрии с применением газового хроматомасс-спектрометра GCMS-QP2010S (SHIMADZU, Япония).

При использовании 1%Pd-2%Zn/MN100 достигается конверсия нитробензола 99% за время реакции 30 мин при селективности по анилину 71%, тогда как в случае 1%Pd/MN100 конверсия нитробензола и селективность по анилину составили 98% и 21%, соответственно. Вероятно, малый выход продукта при использовании монометаллического катализатора был обусловлен полимеризацией анилина.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Пономарев, В.Г., Калинин, А.И., Кудрявский, Ю.П. // Современные наукоемкие технологии. 2010. Т.141. №6. С.78.
2. Образцова, И.И., Ефимов, О.А. // Прикладная химия. 2004. Т.77. № 3. С. 517.



УДК 541.49:581.1

Шаронова Софья Владимировна

СРАВНЕНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ХЕЛАТОВ МИКРОЭЛЕМЕНТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ НА ОСНОВЕ РАЗНЫХ КОМПЛЕКСОНОВ

Руководители: Павлов М.Н., Смирнова Т.И.

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Хелатные соединения микроэлементов на основе этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТУК) входят в состав различных макро- и микроудобрений, применяемых при выращивании культивируемых растений. К числу таких препаратов относится комплексное удобрение «Акварин-5». Однако ЭДТУК считается экологически небезопасным веществом, так как при попадании в окружающую среду практически не подвергается ни физико-химической, ни биологической деградации. С целью замены «Акварина» безопасным с экологической точки зрения аналогом на кафедре агрохимии, земледелия и лесопользования ТГСХА была разработана рецептура препарата, содержащего те же макро- и микроэлементы, что и «Акварин» и так же предназначенного для внекорневой обработки растений, с той лишь разницей, что эссенциальные микроэлементы и магний введены в состав нового макро-микрокомплекса в форме хелатных соединений этилендиаминдиантарной кислоты (ЭДДК). Биологическая активность препарата в сравнении с «Акварином» была исследована на посадках картофеля сорта «Гала». В течение вегетации было определено содержание фотосинтетических пигментов в листьях растений, а после уборки урожая – крахмала и аскорбиновой кислоты в клубнях. Результаты опыта приедены в таблице.

Таблица:

Урожайность и качество урожая клубней, а также содержание фотосинтетических пигментов в листьях картофеля

№ п/п	Действующее вещество раствора для обработки	Фотосинтетические пигменты				Крахмал, %	Аскорбиновая кислота, мг/100 г	Урожайность, ц/га
		Хлорофилл <i>a</i>	Хлорофилл <i>b</i>	Хлорофилл <i>a+b</i>	Каротиноиды			
1	-	121,8	46,3	168,1	29,0	10,1±0,2	11	35,2
2	Акварин-5	109,0	37,0	146,0	31,3	16,2±0,2	13	39,9
3	ММК	156,2	98,1	254,3	32,0	20,1±0,3	17	38,2

Как свидетельствуют результаты исследования, препарат ММК по биологической активности существенно превосходит имеющийся в открытой продаже и всё более широко используемый «Акварин». Разница с последним по урожайности клубней составляет 1,7 т/га и находится в пределах ошибки опыта ($НСР_{05} = 1,8$).

УДК 614.21:62

Шаршавых Александра Александровна

СИСТЕМА КОНТРОЛЯ СОСТОЯНИЯ ЗДОРОВЬЯ

Руководитель: Жмакин И.А.

Тверской государственной медицинской университет, г. Тверь
Кафедра мобилизационной подготовки здравоохранения и медицины катастроф

Реализации федеральных проекта по созданию единого цифрового контура в здравоохранении Национального проекта «Здравоохранение» может служить разработка новых видов компьютерной техники медицинского назначения [1, 2]. На основе имеющегося опыта создан опытный образец переносного компьютерного модуля по оценке основных физиологических показателей деятельности сердечно-сосудистой и дыхательной систем человека с использованием сертифицированных медицинских датчиков, позволяющий проводить интегрированную оценку отдельных параметров состояния здоровья [3]. Прибор подключается к персональному компьютеру и позволяет снимать 5 показателей: температура тела, частота сердечных сокращений, частота дыхания, артериальное давление и уровень алкогольной интоксикации. Их оценка проводится с использованием разработанной компьютерной программы. Возможна интеграция модуля в локальную компьютерную сеть медицинского учреждения. Модуль представлен электронным блоком, пластмассовым корпусом с датчиками, вес – до 3 кг, размеры 300×300×300 мм. Имеется возможность использования дистанционного голосового управления, а также идентификации пациента по биометрическим данным: тембр голоса и черты лица. По итогам обследования врач получает сведения, которые используются при постановке диагноза и разработке рекомендаций. Модуль позволяет снизить нагрузку на медицинский персонал при обследовании пациентов, расширить перечень исследуемых физиологических показателей при посещении пациента на дому, проводить текущий контроль значений изучаемых параметров в ходе лечения, а также вести базу данных полученных показателей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Указ Президента РФ от 7.05.2018г. №204 «О национальных целях и стратегических задачах развития Российской Федерации на период до 2024 года» [Электронный ресурс]. URL: <https://base.garant.ru/71937200/> (дата обращения: 03.03.2022).
2. Национальный проект «Здравоохранение» как один из путей сохранения здоровья россиян / Е.Г. Королюк [и др.]. // Тверской медицинский журнал. 2021. № 1. С. 137-144.
3. Мобильное здравоохранение в Тверской области: от идеи до реализации и продвижения / Н.П. Кириленко [и др.]. // Профилактическая медицина. 2019. Т. 22. № 3. С. 44-50.

УДК 543.24

Шачнева Кристина Сергеевна

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СУЛЬФАНИАМИДА В ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТАХ

Руководитель: Баранова Н.В.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

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

В качестве объекта исследования были выбраны препараты, которые содержат сульфаниламид и сульфаниламид натрия в качестве активного вещества. Количественное определение проводили методом нитритометрии, основанным на способности первичных ароматических аминов образовывать в кислой среде диазосоединения:

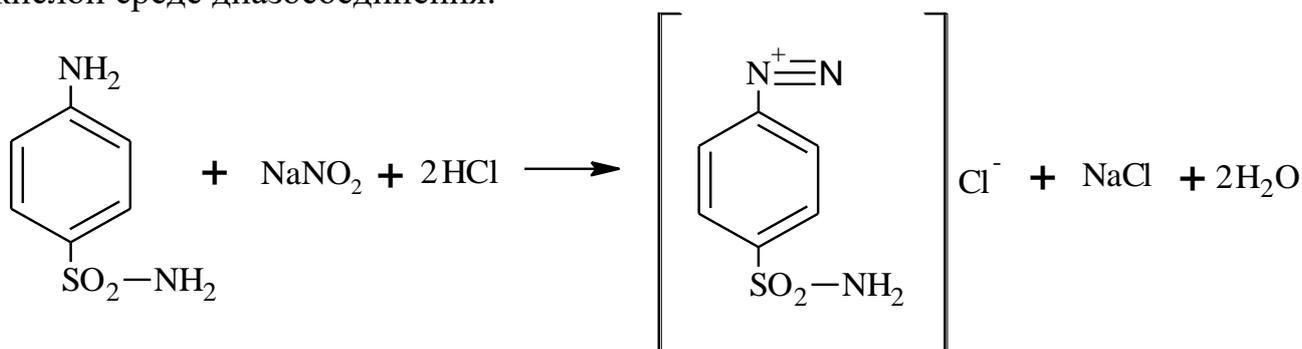


Таблица:

Результаты количественного определения стрептоцида

Методы исследования	Объекты исследования							
	Стрептоцид ООО «Люми»		Стрептоцид ООО «Тюльская фармацевтическая фабрика»		Стрептоцид ЗАО «ФП Мелиген»		Стрептоцид растворимый АО «Нижфарм»	
	$m_{\text{теор}}$, Г	$m_{\text{пр}}$, Г	$m_{\text{теор}}$, Г	$m_{\text{пр}}$, Г	$m_{\text{теор}}$, Г	$m_{\text{пр}}$, Г	$m_{\text{теор}}$, Г	$m_{\text{пр}}$, Г
Нитритометрия	0,250	0,246 $\pm 0,004$	0,250	0,246 $\pm 0,004$	0,250	0,244 $\pm 0,004$	0,250	0,248 $\pm 0,006$

Количество активного вещества в порошке получено из расчета, что на 1 мл 0,095 н раствора NaNO_2 приходится 16,359 мг сульфаниламида. Количество действующего вещества в линименте получено из расчета, что на 1 мл 0,095 н раствора NaNO_2 приходится 27,36 мг сульфаниламида натрия. В результате проведенного анализа можно сделать вывод о подлинности этих препаратов.

УДК 537.226.4

Шипилов Сергей Сергеевич

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ АЛАНИНСОДЕРЖАЩИХ КРИСТАЛЛОВ ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА

Руководитель: Большакова Н.Н.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Настоящая работа поставлена с целью получения информации о влиянии легирования аланинсодержащих кристаллов триглицинсульфата (АТГС) марганцем и фосфором на их диэлектрические свойства и процессы переполяризации. Исследуемые образцы содержали 10 мол.% *L*- α -аланина в растворе, а так же марганец и фосфор.

Установлено, что петли диэлектрического гистерезиса кристаллов АТГС униполярны и смещены по координатным осям, что свидетельствует о преимущественной ориентации доменов одного из направлений вектора поляризации и наличии полей смещения. Процессы поляризации кристаллов АТГС начинаются в более высоких полях, чем ТГС. Полевые зависимости поляризации кристаллов АТГС выходят на насыщение в полях, напряженность которых в два раза превышает аналогичную для беспримесного ТГС. Для кристаллов группы АТГС величины диэлектрической проницаемости изменяются от 20 до 40, переключаемой поляризации- в пределах $(1,8 - 2,6) \cdot 10^{-2}$ Кл·м⁻², коэрцитивных полей – $(45-100) \cdot 10^3$ В·м⁻¹. Доменная структура кристаллов исследована с помощью растрового электронного микроскопа JEOL LSM-6610LV (Япония) в режиме вторичных электронов. Выявлено, что состоит из основного домена, занимающего порядка 90% объема образца, и линзовидных микродеменов, неравномерно распределенных по образцу.

Полученные результаты можно объяснить влиянием дефектности на процессы переключения кристаллов. При изоморфном замещении части молекул глицина молекулами *L*- α -аланина в кристаллической решетке ТГС появляется большое число необратимых диполей, возникают локальные поля напряжений, направленные вдоль полярной оси, и формируется большие монодоменные области, которые практически не участвуют в процессах переключения. Нетрадиционные замещения группы $(Si_4)^{2-}$ и $(PO_4)^{3-}$ и частицы глицина на аланин приводят к получению в ТГС устойчивого униполярного состояния. Марганец в виде Mn^{2+} в кристаллах ТГС способен находиться в комплексах с кубической симметрией

УДК 539.422.52

Ширялин Илья Михайлович

ВЛИЯНИЕ СТРОЕНИЯ ТЕРМОРЕАКТИВНОГО СВЯЗУЮЩЕГО НА ХИМИЧЕСКУЮ СТОЙКОСТЬ И ПРЕДЕЛ ПРОЧНОСТИ НА РАЗРЫВ СТЕКЛОПЛАСТИКА

Руководитель: Лагусева Е.И.

Тверской государственный технический университет, г. Тверь
Кафедра химии и технологии полимеров

Исследования химической стойкости и предела прочности на разрыв стеклонаполненных композитов необходимо для понимания возможности использования в различных отраслях промышленности. Стеклопластики отличаются малым весом и хорошими физико-механическими показателями, при этом стойкость к различным агрессивным средам напрямую зависит от используемого связующего, а механическая прочность обусловлена наличием на их поверхности дефектов в виде микротрещин.

В работе рассмотрена химическая стойкость и предел прочности на разрыв стеклонаполненных композиционных материалов, в которых в качестве полимерного связующего использована термореактивная ортофталевая смола и стеклянный волокнистый наполнитель.

Для испытаний на химическую стойкость изготовлены образцы стеклопластика (по 12 образцов из ортофталевой полиэфирной смолы) стандартного размера 150x20x3мм, которые были помещены на 36 часов в среды: H₂SO₄ 25%, HCl 15%, HNO₃ 5%, NaOH 5%, NH₄OH 25%, керосин, дистиллированная вода, CH₃COOH (лед.), H₂O₂ 25 %. Образцы взвешивались на аналитических весах до и после погружения в растворы.

Для испытаний на предел прочности на разрыв образцы стеклопластика, после погружения в растворы, были подвергнуты деформированию с помощью разрывной машины. Результаты показывают, что во всех случаях наблюдалось увеличение массы образцов. В ледяной уксусной кислоте в образцах – наблюдалось изменение структуры (вздутия, поры), а также наименьшая нагрузка, прилагаемая разрывной машиной, на деформацию данных образцов. Это говорит об ограничении применения стеклопластиков на основе указанной смолы в агрессивной среде ледяной уксусной кислоты.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Бондарь А.А., Бондарь Д.А., Лагусева Е.И. Оптимизация состава композиции для отверждения системы при производстве крупногабаритных изделий методом контактного формования // Саморазвивающаяся среда технического вуза. Ч.2. –Тверь, 2019. С. 69–72.

УДК 66.095.26

Шкерина Кристина Николаевна

ПОИАНИЛИН КАК ОСНОВА СОЗДАНИЯ МАГНИТНОРАЗДЕЛЯЕМЫХ КОМПОЗИТОВ

Руководитель: Никошвили Л.Ж.

Тверской государственный технический университет, г. Тверь
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Полианилин (ПАНИ) — это органический высокомолекулярный полупроводниковый материал с достаточно высоким уровнем электронной проводимости [1]. В зависимости от степени окисления выделяют три основные формы ПАНИ: полностью окисленная форма называется пернигранилин, полностью восстановленная — лейкоэмеральдин, ПАНИ с равным соотношением окисленных и восстановленных фрагментов носит название эмеральдин [2]. В последние десятилетия ПАНИ привлекает значительный научный интерес благодаря своим хорошим электрическим и окислительно-восстановительным свойствам. Он находит широкое применение в составе химических сенсоров, электромеханических приборов, электрохромных ячеек, органический батарей и противокоррозионных добавок [1]. Кроме того, ПАНИ является хорошим сорбентом для различных анионов и катионов. ПАНИ обладает совокупностью свойств, необходимых сорбенту, и характеризуется высокой термостойкостью, отсутствием растворимости и токсичности. К высокоперспективным направлениям использования ПАНИ можно отнести гетерогенный катализ. В сочетании с каталитически активными металлами полимер используется как сокатализатор и стабилизатор.

В рамках данной работы был синтезирован ПАНИ путем анионной полимеризации анилина в растворе HCl (1 моль/л) в присутствии $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$. Наряду с чистым полимером был получен магнитный композит ПАНИ- Fe_3O_4 . Было выявлено, что полимеризация анилина успешно проходит в присутствии Fe_3O_4 , а ПАНИ равномерно покрывает магнитные наночастицы. Показано, что композит ПАНИ- Fe_3O_4 хорошо реагирует на магнитное поле.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Harun M.H., Saion E. Conjugated conducting polymers: A brief overview. Journal for the Advancement of Science & Arts. 2007. – Vol. 2, p. 65-67.
2. Sapurina I., Shishov M. Oxidative polymerization of aniline: Molecular synthesis of polyaniline and the formation of supramolecular structures. New polymers for special applications. 2012, pp. 251-312.



УДК 547.867.4

Шторих Ксения Алексеевна

СИНТЕЗ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ N-АЛКИЛМОРФОЛИНЯ

Руководитель: Ворончихина Л.И.

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Морфолин находит применение в различных областях промышленности и органическом синтезе. Четвертичные соли N-алкилпроизводных представляют интерес как ионные жидкости, КПАВ, ингибиторы коррозии, физиологически и биологически активные вещества. В связи с этим, целенаправленный синтез новых соединений в указанном ряду и дальнейшая оценка их биологической активности представляет научный и практический интерес. В настоящей работе получены четвертичные соли N-алкилморфолина.

N-алкилпроизводные получены алкилированием морфолина галогенпроизводными алканов в соотношении 2:1 (Рис. 1), соединения очищены перегонкой при атмосферном давлении.

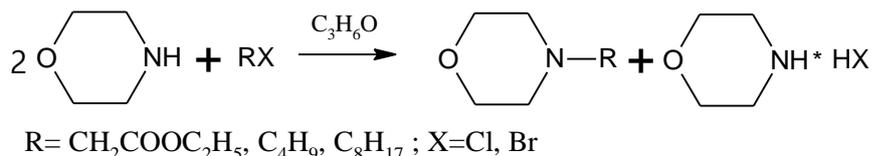


Рис. 1 – Схема реакции алкилирования морфолина

Кватернизацией N-алкилпроизводных получены четвертичные соли морфолина (Рис. 2).

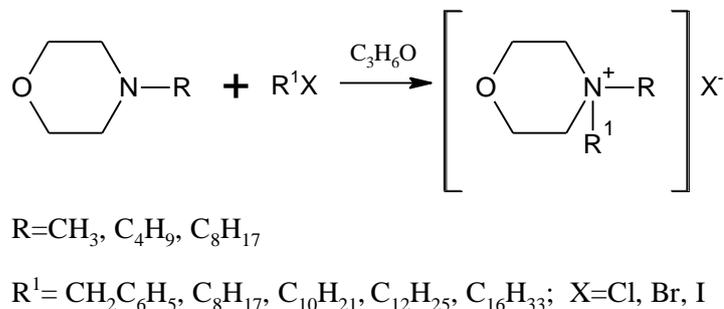


Рис. 2 – Схема реакции кватернизации N-алкилпроизводных морфолина

Полученные четвертичные соли представляют собой кристаллические вещества, хорошо растворимые в воде. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопии, чистота продукта подтверждена данными тонкослойной хроматографией, наличие галоида доказано положительным результатом на пробу Бельштейна. Данные теста на катионные ПАВ подтверждают катионную природу четвертичных солей N-алкилморфолина с длинноцепочечными радикалами.

УДК: 537.226.4

Шустова Ольга Александровна

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ОДНОСЛОЙНЫХ И ДВУХСЛОЙНЫХ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛАСТИН НИТРИДА АЛЮМИНИЯ

Руководители: Солнышкин А.В., Сергеева О.Н.

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Нитрид алюминия (AlN) является перспективным материалом для создания микроэлектромеханических преобразователей. Ранее пирозлектрические и диэлектрические характеристики двухслойных пластин AlN/AlN подробно исследовались нами в [1]. Целью данной работы являются исследования пирозлектрических и диэлектрических свойств однослойных пластин AlN (образец № 1) и двухслойных пластин AlN/AlN (образец № 2) и сравнительный анализ характеристик изучаемых структур.

Монокристаллические однослойные пластины были выращены методом хлорид-гидридной эпитаксии и представляют собой монокристаллы. Аналогично выращивались двухслойные пластины нитрида алюминия. Все образцы характеризовались ростовой ориентацией вдоль гексагональной [0001] полярной оси. Измерения пирозлектрического отклика проводились динамическим методом. Пирозлектрический ток, регистрируемый с помощью ЭВМ, предварительно усиливался операционным усилителем. Исследования диэлектрических характеристик проводились с помощью измерителя иммитанса E7-30.

Установлено, что пирозлектрический отклик для образца № 1 находится в фазе с опорным сигналом, а для образца № 2 – в противофазе, т.е. поляризация в образце № 1 направлена от нижнего электрода к верхнему, а в образце № 2 наоборот. Значения пироккоэффициента: образец № 1 – 8,5 мкКл/(м²×К); образец № 2 – 12 мкКл/(м²×К). Таким образом, резкая граница раздела вносит существенный вклад в электрофизические свойства пластин. Кроме того установлено, что диэлектрическая проницаемость ϵ для обоих образцов сильно зависит от частоты приложенного переменного поля. Величина $\text{tg } \delta$ также нелинейно зависит от частоты. Для обоих образцов наблюдается максимум $\text{tg } \delta$: для образца № 1 в интервале частот от 10^4 до 10^5 Гц, для образца № 2 – от 10^5 до 10^6 Гц.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Солнышкин А.В. и др. // Письма в ЖТФ. 2021. Т.47. Вып. 9. С. 7-10.

УДК: 544.169

Щенухина Алина Сергеевна

ЭНЕРГИЯ ГРУПП ТРАНСИЗОМЕРОВ МЕТИЛОВОГО КРАСНОГО

Руководители: Русакова Н.П., Туровцев В.В.

Тверской Государственный университет
 Кафедра физической химии, кафедра общей физики

Получены полные электронные энергии групп - $E(R)$ для трех конформеров метилового красного с транс положением ароматических колец относительно диазогруппы $-N=N-$ (Рис.) и внутримолекулярными слабыми взаимодействиями: $N^{\cdots}H$ (структура 1), $N^{\cdots}O(H)$ (форма 2) и $N^{\cdots}O$ (состояние 3).

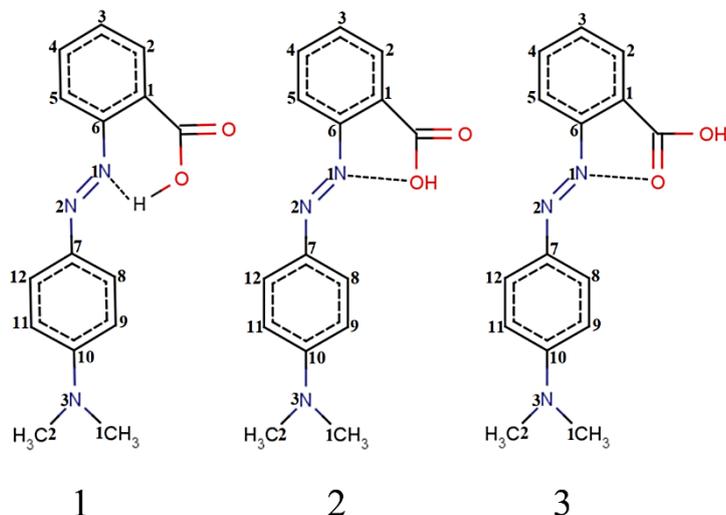


Рис.: Транс-формы метилового красного;
 ВМСВ показаны пунктиром

В материалах использовано относительное значение $\Delta E(R)$ (Таблица), которые вычислено вычитанием из текущей величины $E(R_i)$ стандартного параметра $E(R_{cm})$, в качестве которого выбраны $E(R)$ наиболее энергетически выгодного конформера – 1.

Стабилизация $E(C)$ отмечена для 1С, связанного с $COOH$ в 1, в случае 6С, 7С и 10С $E(C)$

увеличен. В изомерах 2 и 3 $E(C)$ на соответствующих атомах снижена.

Величина $E(1N)$ в 1 минимальна и принята за стандартную $E(N_{ст})$. По сравнению с ней величина $\Delta E(N)$ показывает дестабилизацию $E(2N)$ и увеличение $E(2N)$ на 80 кДж/моль. У конформеров 2 и 3 $E(N)$ увеличена. Для $E(1N)$ – на 120 кДж/моль в обоих случаях, а для $E(2N)$ – на 30 кДж/моль и 40 кДж/моль соответственно. В 2 и 3 стабилизируется $E(COOH)$ (энергия $COOH$ снижается), а $E(-N=N-)$ возрастает.

Таблица:

Относительные энергии групп* $\Delta E(R)$ изомеров метилового красного, в кДж/моль

	COOH	1C	2CH	3CH	4CH	5CH	6C	1N	2N
1	0	0	30	20	20	20	480	0	80
2	-50	-10	30	20	20	20	470	120	110
3	-60	0	20	20	20	20	470	120	120
	7C	8CH	9CH	10C	11CH	12CH	3N	1CH ₃	2CH ₃
1	540	10	10	710	10	0	0	0	0
2	480	20	0	690	10	-10	20	-10	-10
3	470	30	0	690	0	-10	30	-10	-10

*нумерация групп и атомов соответствует нумерации на рисунке, в затемненных ячейках показаны $E(R_{cm})$

УДК 544.774

Щербакова Диана Владимировна
**КОНЦЕНТРАЦИОННЫЙ ЭФФЕКТ В СИСТЕМЕ
L-ЦИСТЕИН/AgNO₂/ВОДА**

Руководители: Потапенкова Т.В., Вишневецкий Д.В.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Недавно коллектив авторов ТвГУ осуществил синтез композиции, содержащей наночастицы серебра (НЧС), равномерно распределенные в матрице супрамолекулярного геля [1]. Были изучены основные закономерности самосборки в данной системе и ее некоторые биоактивные свойства.

В настоящей работе было исследовано влияние концентрации исходных компонентов водной системы – L-цистеина и нитрита серебра, а также их соотношения, на процесс самосборки с их участием. В зависимости от концентрационного диапазона возможно формирование: 1) бесцветного прозрачного водного раствора кластеров серебра 2) обратимого от желтого до коричневого цвета прозрачного геля, содержащего НЧС 3) необратимого от желтого до коричневого цвета непрозрачного геля, содержащего НЧС 4) бесцветного обратимого прозрачного геля, содержащего осадок НЧС (Рис. 1.) УФ-спектроскопия подтвердила результаты визуального анализа систем. Методом сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии изучена микроструктура композиций. Методом элементного анализа установлено, что практически все серебро в композиции прозрачного обратимого геля находится в связанном состоянии (осадке), что также верифицировано качественными реакциями на катионы серебра добавлением хлорид и иодид ионов.

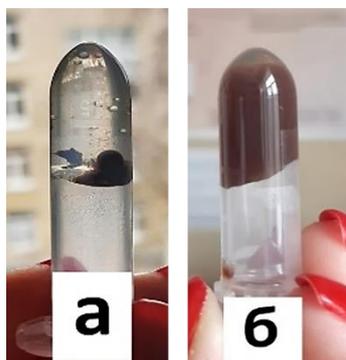


Рис. 1. а – прозрачный гель с осадком НЧС.
б – гель с равномерно распределенным осадком НЧС
(встряхивание системы а).

Работа выполнена в рамках гранта РФФ № 21–73–00134 на
оборудовании ЦКП ТвГУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. D.V. Vishnevetskii, A.R. Mekhtiev, T.V. Perevozova, D.V. Averkin, A.I. Ivanova, S.D. Khizhnyak and P.M. Pakhomov. *Soft Matter*. 2020. 16. 9669–9673. doi.org/10.1039/D0SM01431A.

УДК 547.821.4

Юлмасов Глеб Сергеевич

ПИРИДИНИЕВЫЕ ИОННЫЕ ЖИДКОСТИ НА ОСНОВЕ МЕТАЛЛСОДЕРЖАЩИХ АНИОНОВ

Руководитель: Журавлев О.Е.

Тверской государственный университет, Тверь
Кафедра органической химии

Металлсодержащие ионные жидкости (МИЖ) известны уже несколько десятилетий. Они используются в органическом синтезе, для десульфурации и денитрогенизации, а также в потоковых батареях [1]. Кроме того, известно их применение для аналитической экстракции и сепарации газа [2].

В настоящей работе получены и охарактеризованы N-алкилпиридиниевые ионные жидкости с металлсодержащими анионами, состава $[MCl_4]$, $[MBr_2Cl_2]$ и $[MI_2Cl_2]$ (M – Co, Mn, Ni), структурная формула представлена на рисунке 1. Синтез проводился по ранее известной методике [3]. Для подтверждения наличия комплексного неорганического аниона были записаны спектры в УФ- и видимой области. Получены ИК-спектры соединений, определена их температура плавления, а также электропроводность их растворов. Проведен анализ зависимости свойств соединений от длины алкильной цепочки в структуре катиона и состава аниона.

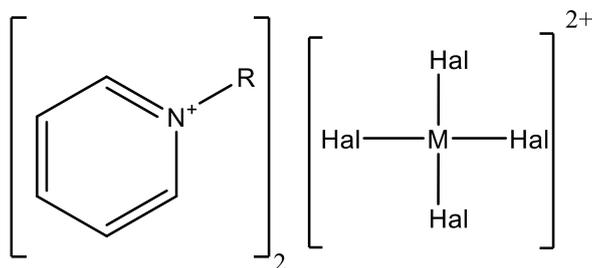


Рисунок 1: Общая структурная формула исследуемых молекул

1. Металлсодержащие ионные жидкости: современные представления и применение / А. Г. Zazybin, К. Rafikova, V. Yu [и др.] // Успехи химии. – 2017. – Т. 86. – № 12. – С. 1254-1270. – DOI 10.1070/RCR4743.
2. Varona M. et al. Metal-containing and magnetic ionic liquids in analytical extractions and gas separations //TrAC Trends in Analytical Chemistry. – 2021. – Т. 140. – С. 116275.
3. Hayashi S., Hamaguchi H. Discovery of a magnetic ionic liquid [bmim] FeCl₄ //Chemistry Letters. – 2004. – Т. 33. – №. 12. – С. 1590–1591.



УДК 54.057

Яковлева Екатерина Сергеевна

КАСКАДНЫЕ РЕАКЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МУЛЬТИФЕРМЕНТНЫХ СИСТЕМ

Руководитель: Сульман А.М.

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Каскадные реакции, существующие в природе, где различные ферменты расположены в непосредственной близости друг от друга, вдохновляют исследователей на реализацию аналогичного подхода при проектировании разнообразных биокатализаторов, объединяющих несколько ферментов на одной и той же подложке [1,2]. Основными преимуществами мультиферментных биокатализаторов являются устойчивость однокомпонентных синтезов, а также исключение стадий выделения и очистки промежуточных продуктов. В свою очередь, каскадные реакции весьма перспективны для устойчивых процессов получения экологически чистых химических веществ и материалов без опасных побочных продуктов. Важными параметрами, которым следует следовать в мультиферментных катализаторах, являются соотношение ферментов, их распределение на поверхности носителя, а также доступ ферментов к субстратам [3].

В данной работе было исследовано влияние значения pH на работу биферментной системы на основе GOx и HRP в процессе последовательного окисления D-глюкозы и 2,2'-азино-бис-(3-этилбензтиозолин-6-сульфоукислоты)диаммониевой соли (АБТС).

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда содействия инновациям (программа У.М.Н.И.К., Договор 16434ГУ/2021 от 28.05.2021).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Sperl J.M., Sieber V. Multienzyme cascade reactions-status and recent advances. ACS Catal. 2018. vol. 8. pp. 2385-2396.
2. Hwang E.T., Lee S. Multienzymatic Cascade Reactions via Enzyme Complex by Immobilization. ACS Catal. 2019. vol.9 (5). pp. 4402–4425.
3. Vranish J.N., Ancona M.G., Oh E., Susumu K., Medintz I.L. Enhancing coupled enzymatic activity by conjugating one enzyme to a nanoparticle. Nanoscale. 2017. vol. 9. pp. 5172-5187.



Авторский указатель:

(курсивом выделены фамилии молодых ученых,
без выделения – руководителей научных работ)

Аверкин Д.В. 114	Веролайн Н.В. 22, 43, 49, 64, 75, 120, 149, 168	Калугина О.Н. 72
Авлякулова Г. 17	Веселова А.В. 43	Каплунов И.А. 143
Адамян А.Н. 18	Виноградова М.Г. 78, 102, 141	Капранов А.А. 70
Акимов А.А. 119	Вишневецкий Д.В. 114, 132, 164, 180	Караулова Д.А. 71
Алексеев В.Г. 33, 62, 69, 71, 121	Волков Д.О. 44	Карелина К.С. 72
Алябина Н.В. 19	Волкова А.В. 45	Карпенков А.Ю. 59, 60, 122
Андрианова Я.В. 132	Волкова В.М. 46	Кибирева А.В. 73
Аннагелдиев М.А. 20	Воробьева А.О. 47	Кириллова Е.А. 74
Арефьев А.А. 21	Воробьева В.П. 113, 126	Кислова И.Л. 68
Арзамасова А.Ю. 22	Ворончихина Л.И. 155, 177	Ковальчук К.М. 75
Базулева В.А. 23	Галицын В.П. 140	Коверина В.О. 76
Балданов В.Д. 161	Галузин И.Р. 48	Козликова Е.Е. 77
Барабанова Е.В. 111	Гальцова В.В. 49	Козлова Р.Р. 78
Баранник А.А. 24	Гешко В.В. 50	Комаров В.А. 79
Баранова А.Е. 25	Гребенникова О.В. 147	Комаров П.В. 92
Баранова Н.В. 29, 67, 84, 173	Григорьев Р.Е. 51	Корнев П.П. 80
Бахвалова Е.С. 26	Громов А.Н. 52	Королева Ю.С. 27
Башикирова В.А. 27	Губская Е.М. 53, 54	Кострова П.А. 81, 82
Белая Н.И. 34	Гугуцидзе К.А. 55	Котомкин А.В. 83
Белов А.Н. 70, 79, 89, 103, 108, 124, 136	Данилова Д.А. 56	Кравец О.Б. 84
Белоцерковец Н.И. 93	Дегтева О.Б. 20	Критченков А.С. 165
Белый А.В. 34	Демьянов Г.В. 57	Крюков Т.В. 85
Белявский М.А. 28	Долуда В.Ю. 99	Кудряшова Е.А. 86
Биткова В.В. 29	Дорошенко И.Д. 58	Кудряшова Н.А. 137
Богаченков Н.А. 30	Доянова Ю.Д. 59	Кузнецова Ю.В. 28, 168
Бойкова С.С. 31	Дунаева Г.Г. 59, 60	Курносов Ю.А. 87
Болденкова М.С. 32	Евдокимов А.Н. 142	Кучурова А.К. 88
Большакова Н.Н. 104	Егорова И.Ю. 86, 151, 153	Лагусева Е.И. 65, 110, 175
Большакова Н.Н. 112, 174	Ежов В.П. 61	Лебедев В.С. 89
Бондарева Т.Д. 33	Ермолаева А.А. 62	Лебедев И.И. 90
Брославская М.Н. 35, 100, 106	Ефимова Т.А. 63	Луцык В.И. 113
Будникова Е.А. 34	Жевлакова Я.А. 64	Ляхова М.Б. 160
Бурштейн А.Л. 35	Жмакин И.А. 144, 162, 172	Макаров В.В. 44, 76, 158
Быков А.В. 26, 115	Жохов И.С. 65	Макарова Е.А. 91
Варзар А.А. 36	Журавлев О.Е. ... 21, 47, 90, 123, 148, 181	Максимов Г.В. 135
Васильев А.Д. 37	Зеленая А.Э. 73, 161	Мальшиев М.Д. 92
Васильева Д.В. 38	Зеников Г.Р. 66	Мальшкина О.В. 72
Ватаманюк В.О. 39	Зуева А.С. 67	Мамаев П.В. 93
Велмурадов А. 40	Иванов В.В. 68	Мананникова М.Д. 94
Вересов С.А. 41	Иванова А.А. 69	Маркова А.И. 39, 95
Веролайн В.А. 42	Иванова А.И. ... 37, 55, 133	Матвеева В.Г. 166
		Матус Я.А. 96
		Межеумов И.Н. 139
		Механников И.А. 97
		Минина М.В. ... 36, 91, 150

<i>Митинев Е.С.</i>98	<i>Рихмайер А.М.</i> 124	<i>Тактаров А.А.</i> 152
<i>Михайлов С.П.</i>99	<i>Рудометова А.С.</i> 125	<i>Тарабанова А.А.</i> 153
<i>Моисеева Е.Н.</i>100	<i>Рудченко Н.А.</i> 126	<i>Тарабарина А.А.</i>154
<i>Монжаренко М.А.</i> 101	<i>Русаков М.В.</i> 127	<i>Тараскина М.Ю.</i> 155
<i>Москаленко А.Б.</i> 102	<i>Русакова Н.П.</i> ... 31, 83, 96, 107, 156, 179	<i>Темникова С.А.</i> .38, 42, 56
<i>Назаренко А.В.</i> 103	<i>Рыжков Ю.А.</i> 169	<i>Тимофеева Е.В.</i> 156
<i>Найденкова Е.Е.</i> 104	<i>Савина О.Д.</i> 128, 129	<i>Тупкина Е.П.</i> 157
<i>Небывалова К.К.</i> 105	<i>Саидов С.М.</i> 130	<i>Туреев И.В.</i> 158
<i>Немов С.А.</i>57	<i>Саламатина Е.В.</i> 131	<i>Туровцев В.В.</i> 179
<i>Немченко О.С.</i>106	<i>Сальникова К.Е.</i> 166	<i>Уварова С.С.</i> 159
<i>Нефедова И.А.</i> 107	<i>Самсонов В.М.</i> 61, 105	<i>Усанова З.И.</i> 52, 74
<i>Низенко А.В.</i> 108	<i>Саркисян В.К.</i> 132	<i>Феофанова М.А.</i> 19, 85, 134, 142
<i>Никитин П.А.</i> 109	<i>Свешников П.А.</i> 133	<i>Филатова А.Е.</i> 53, 54
<i>Никольский В.М.</i> ... 77, 125, 131, 159	<i>Сдобняков Н.Ю.</i> 41, 48, 51, 98, 152	<i>Филимонова А.В.</i> 160
<i>Никонова И.Н.</i> 110	<i>Семенова Е.М.</i> 87, 145	<i>Фомина Е.А.</i> 161
<i>Никошвили Л.Ж.</i> ..26, 157, 170, 176	<i>Сергеева О.Н.</i> 167, 178	<i>Хаитов А.К.</i> 162
<i>Ожимкова Е.В.</i> ...45, 53, 54, 154	<i>Скобин М.И.</i> 134	<i>Ханмамедов Г.С.</i> 163
<i>Орлов Ю.Д.</i> 79, 83, 96, 156	<i>Слатинская О.В.</i> 135	<i>Хижняк С.Д.</i> 18, 24, 30, 46, 50, 58, 63, 66, 88, 95, 97, 127, 146
<i>Осовская И.И.</i>25, 80	<i>Слободяник Н.В.</i> 136	<i>Цветкова В.А.</i> 164
<i>Оспельников Н.М.</i> 111	<i>Смирнова А.В.</i> 139	<i>Цветкова О.И.</i> 165
<i>Павлов А.С.</i>94	<i>Смирнова И.В.</i> 137	<i>Цветкова П.А.</i> 166
<i>Павлов М.Н.</i>81, 82, 130, 171	<i>Смирнова И.Н.</i> 74	<i>Цилих А.Д.</i> 167
<i>Павлова Д.Н.</i> 112	<i>Смирнова К.А.</i> 138	<i>Чалов К.В.</i> 109
<i>Парфенова М.Д.</i> 73, 113, 126	<i>Смирнова Т.И.</i> 82, 117, 119, 129, 171	<i>Шамарина К.А.</i> 168
<i>Пахомов П.М.</i> ... 18, 30, 39, 63, 66, 88, 95, 138, 139, 140	<i>Соколов А.В.</i> 140	<i>Шамахов В.И.</i> 169
<i>Петров В.Р.</i> 114	<i>Солнышкин А.В.</i> ... 32, 167, 178	<i>Шарапова М.Д.</i> 170
<i>Пинюкова А.О.</i> 115	<i>Соловьева Е.Д.</i> 141	<i>Шаронова С.В.</i> 171
<i>Платонов И.А.</i> 116, 117, 118, 119	<i>Софронова Ю.И.</i> 142	<i>Шаршавых А.А.</i> 172
<i>Потапенкова Т.В.</i> 180	<i>Степанов В.С.</i> 143	<i>Шачнева К.С.</i> 173
<i>Просяник Ю.А.</i> 120	<i>Степанова П.А.</i> 144	<i>Шилова О.В.</i> ... 17, 40, 116, 117, 118, 128, 129, 163
<i>Прутенская Е.А.</i> 23	<i>Степачёва А.А.</i> 101	<i>Шипилов С.С.</i> 174
<i>Пшеничная А.К.</i> 121	<i>Стречень А.С.</i> 145	<i>Ширялин И.М.</i> 175
<i>Ракунов П.А.</i> 122	<i>Стычинский Д.М.</i> 146	<i>Шкерина К.Н.</i> 176
<i>Расказова Н.Ю.</i> 123	<i>Сульман А.М.</i> 147, 182	<i>Шторих К.А.</i> 177
<i>Репин А.А.</i> 136	<i>Сульман М.Г.</i> 99	<i>Шустова О.А.</i> 178
	<i>Суратова Е.С.</i> 148	<i>Щенухина А.С.</i> 179
	<i>Сурнина В.А.</i> 149	<i>Щербакова Д.В.</i> 180
	<i>Сутугина К.А.</i> 150	<i>Юлмасов Г.С.</i> 181
	<i>Сырова Е.М.</i> 151	<i>Яковлева Е.С.</i> 182