



# **XIII РЕГИОНАЛЬНЫЕ КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ**

**Областная научно-техническая конференция молодых  
ученых  
"Физика, химия и новые технологии"**

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

**Тверь 2006**

Федеральное агентство по образованию

Государственное образовательное учреждение высшего  
профессионального образования  
“Тверской государственный университет”

Тверской региональный общественный фонд имени  
академика В.А. Каргина

# **XIII РЕГИОНАЛЬНЫЕ КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ**

**Областная научно-техническая конференция  
молодых ученых  
"Физика, химия и новые технологии"**

30 марта 2006 года

г. Тверь

**Тезисы докладов**

**Тверь 2006**

УДК 539:541:543:661:678

**Ответственные за выпуск:**

Доктор химических наук П.М. Пахомов  
Кандидат химических наук С.Д. Хижняк

Областная научно-техническая конференция молодых ученых ежегодно проводится в рамках Региональных Каргинских чтений начиная с 1999 года. Представлены доклады студентов, аспирантов, молодых ученых и школьников тверских вузов и школ, а также и некоторых других городов. Рассмотрены современные проблемы физики, химии и новых технологий.

© Тверской государственный  
университет, 2006

УДК: 622.747:622.731+66.097

В.В. Алфёров

## ИЗУЧЕНИЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ПИРОЛИЗА ТОРФА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРИРОДНЫХ И СИНТЕТИЧЕСКИХ АЛЮМОСИЛИКАТНЫХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Руководитель Э.М. Сульман

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Цель настоящего исследования – изучение каталитического влияния природных и синтетических алюмосиликатных минералов на процесс низкотемпературного пиролиза торфа.

Эксперименты по исследованию низкотемпературного пиролиза торфа проводились в температурном диапазоне 350–480°C с концентрацией катализаторов по отношению к массе субстрата 1, 2, 3, 4, 5 и 10%.

В данной работе определены элементный состав исследуемых образцов катализаторов, площади их поверхности, а также распределение пор по размерам.

Наилучшие результаты среди природных алюмосиликатных материалов наблюдались при использовании бентонитовой глины. В присутствии данного катализатора количество образующихся углеводородов, а также теплота сгорания получаемого пиролизного газа значительно превышали эти показатели по сравнению с некаталитическим процессом. Величина энергии активации для каталитического процесса пиролиза торфа оказалась примерно в 2 раза меньше, чем для некаталитического.

Было установлено, что при использовании синтетических цеолитов, содержащих железо, выделяется наибольшее количество углеводородов и, как следствие, наблюдалось значительное повышение теплоты сгорания получаемого пиролизного газа по сравнению с данными, полученными как для некаталитического процесса, так и при использовании природных минералов. Обнаружено, что при применении синтетических цеолитов, не содержащих железо, в процессе пиролиза торфа выделяется преимущественно метан.

В результате выполненных экспериментов были определены оптимальные условия проведения пиролиза торфа в присутствии природных минералов. Было выявлено, что применение таких катализаторов повышает выход газообразных углеводородов в 2,1–2,5 раза, а теплота сгорания увеличивается в 1,5–2 раза.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК  
КАТАЛИЗАТОРА Pd/"Сибунит" (4%Pd) МЕТОДАМИ  
СОРБЦИИ-ДЕСОРБЦИИ

Руководитель И.П. Шкилёва

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

В настоящей работе методами сорбции-десорбции паров жидкого азота проведена диагностика катализатора Pd/"Сибунит" (4%Pd). В ходе исследования были получены изотермы адсорбции азота, распределение площади и объема пор в зависимости от их диаметра, а также определена удельная поверхность пор.

Эксперименты по определению площади поверхности и распределения пор по размерам проводились на приборе BECMAN COULTER™ SA 3100™ (COULTER CORPORATION, Miami, Florida)

Одним из основных факторов, определяющих доступность каталитических центров, является величина удельной поверхности катализатора. Результаты расчета удельной площади поверхности представлены в таблице:

Образец	$S_{\text{ВЕТ}}$ , м <sup>2</sup> /г (модель БЭТ)
4%Pd/Сибунит	158,77
4%Pd/Сибунит, обработанный H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	205,29
4%Pd/Сибунит после гидрирования ацетофенона	70,40
4%Pd/Сибунит после гидрирования пропиофенона	142,24
4%Pd/Сибунит после гидрирования бутирофенона	119,02
4%Pd/Сибунит после гидрирования 2 - метилацетофенона	75,23
4%Pd/Сибунит после гидрирования 2,4 - диметилацетофенона	108,69

Установлено, что при обработке катализатора Pd/"Сибунит" (4%Pd) серной кислотой, повышающей селективность процесса гидрирования ароматических кетонов по отношению к выходу ароматических углеводородов, наблюдается не только увеличение удельной площади поверхности, но и увеличение содержания микропор. В восстановленных образцах наблюдается тенденция снижения удельной площади поверхности, что, вероятно, объясняется блокировкой пор продуктами гидрирования.

О.А. Балашова  
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАСТВОРОВ  
ПОЛИАМФОЛИТОВ: ВЛИЯНИЕ ФОНОВОГО ЭЛЕКТРОЛИТА

Руководитель П.Г. Халатур  
Тверской государственной университет  
Кафедра физической химии

В данной работе исследовалось поведение растворов полиамфолитов с добавлением фонового электролита от температуры методом броуновской динамики. Фоновый электролит брался как среда, оказывающая существенное влияние на термодинамические свойства ионов, и, следовательно, на их электрохимическое поведение. Полиамфолитная цепь представляла собой последовательность регулярных блоков, имеющих равную длину и противоположный заряд. Длина цепи  $N$  равнялась 1024, а длина блока – 32.

Мы применяем модель свободно-сочлененной цепи, в которой мономерные звенья соединены жесткими связями фиксированной длины ( $1\sigma$ ) и ван-дер-ваальсовы радиусы мономерных звеньев считались одинаковыми. Звенья полимерной цепи отличались друг от друга только знаком заряда  $q$ ,  $|q|=1$ . Ионы соли моделировались как сферические частицы, имеющие единичный заряд, отличающиеся только знаком. В целом в системе соблюдалось условие электронейтральности.

Ван-дер-ваальсовы взаимодействия между несвязанными частицами задавались комбинацией потенциалов Юкавы и Леннарда–Джонса. Электростатические взаимодействия между заряженными частицами описывались кулоновским потенциалом. Расчеты проводились в системе с периодическими граничными условиями. Электростатические взаимодействия учитывались по схеме Эвальда. Размер ребра расчетной ячейки кубической формы равнялся  $30\sigma$ .

В работе рассматривалось два случая. В первом случае фоновый электролит представлял собой однозарядный сильный электролит (например, NaCl), а во втором случае вместо фонового электролита в систему вводилось такое же число незаряженных частиц, размер которых совпадал с размером мономерных звеньев. Количество частиц фонового электролита равнялось 2048 и 4976. В качестве реперной системы мы использовали разбавленный раствор полиамфолита, когда в расчетную ячейку помещалась одна макромолекула.

В процессе моделирования рассчитывались следующие характеристики цепи: квадрат радиуса инерции, квадрат расстояния между концами цепи, внутримолекулярный структурный фактор, радиальная функция распределения и энергетические характеристики.

*Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ № 04 03 32185.*

УДК: 678.5/8:614.841.41:66.097.7

Т.М. Берсенева, Т.А. Глазунова, С.Е. Дрягина, Д.Г. Мнацаканова,  
Н.А. Муравьева

## СИНТЕЗ И ИСПЫТАНИЯ АНТИРЕТЕРДАНТОВ

Руководитель Ю.Н. Смирнов

Тверской государственный технический университет  
Кафедра технологии полимерных материалов

Развитие новой техники в настоящее время невозможно без использования полимерных материалов, в особенности материалов с пониженной горючестью. Снижение горючести полимерных материалов достигается путем их модификации или введением в материал замедлителей горения в составе антипирюющих систем.

Выполняя основную задачу – снижение горючести и повышение пожаробезопасности, компоненты антипирюющей системы не должны ухудшать эксплуатационные свойства полимерных материалов.

Высокую эффективность в составе фосфорсодержащих антипирюющих систем для пенополиуретанов проявляют азотсодержащие соединения – вторичные замедлители горения, выполняющие одновременно роль синергистов.

Соединения бора тоже эффективны в зоне пиролиза и являются синергистами фосфор– и азотсодержащих замедлителей горения. Были отработаны параметры синтеза комплексов меламина с борной кислотой. Полученные комплексы с мольным соотношением компонентов от 1:0,5 до 1:2 испытывались в составе пенополиуретана на влагопоглощение и стойкость к воздействию кипящей воды. Показано, что применение этих комплексов даже в больших количествах не увеличивает гигроскопичность пенополиуретана и не снижает его водостойкость. Введение исходных компонентов в пенополиуретан заметно увеличивает влагопоглощение и снижает водостойкость полимерной композиции.

Таким образом, синтезированные комплексы меламина с борной кислотой, обладая высокой эффективностью, не снижают эксплуатационных свойств пенополиуретана – низкой гигроскопичности, высокой водостойкости, хорошо совмещаются с полимерной пеной без изменения ее физико-механических свойств, повышают однородность структуры пены и ее декоративный вид, резко снижают усадочные явления при деформировании полимерной пены. Одновременно использование замедлителей горения в таком виде позволит заметно снизить себестоимость полимерной системы.

## ПРОЦЕССЫ БЛИСТЕРООБРАЗОВАНИЯ В КРЕМНИИ

Руководитель Н.Н. Большакова

Тверской государственной университет  
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Оптимизация технологии «Smart-Cut» получения структур кремний на изоляторе в настоящее время является перспективным направлением в разработке и производстве новой элементной базы для микро- и наноэлектроники.

Цель настоящей работы – изучение влияния оптимальной дозы облучения пластинки кремния ионами водорода и температуры послерадиационного отжига на формирование поверхностных структур (блистеров и флэкингов), указывающих на признаки склонности образца к радиационно-газовому скалыванию.

Блистер – вид поверхностных дефектов, возникающих за счет давления внутри газовых пор в приповерхностном слое твердого вещества, легированном атомами газа. Флэкинг – дефект на поверхности облученного образца после отжига, образовавшийся под действием давления в блистере, превышающего предел прочности материала.

Облучение образцов проводилось в вакууме на установке ЭЦР (ЛЯР, ОИЯИ, г. Дубна) ионами водорода с энергией  $E=12,5$  кэВ до доз  $2 \times 10^{16}$ ,  $5 \times 10^{16}$ ,  $1 \times 10^{17}$  см<sup>-2</sup>. Структурные исследования выполнялись с помощью оптического микроскопа типа «JENALUMAR» с фиксацией изображения цифровой камерой NIKON.

Установлено, что с увеличением дозы облучения концентрация атомов водорода в веществе линейно возрастает. При дозах облучения (2; 5; 10)  $\times 10^{16}$  см<sup>-2</sup> пики профилей концентрации ионов водорода составляют 4,5; 10,5 и 23 ат. % соответственно.

Термический отжиг облученных ионами водорода образцов при температурах 400 и 500<sup>0</sup>С показал, что минимальная доза облучения, необходимая для формирования блистеров составляет около  $5 \times 10^{16}$  см<sup>-2</sup>, а флэкингов – около  $1 \times 10^{17}$  см<sup>-2</sup>. Размеры блистеров находятся в интервале 0,4-3,0 мкм, площадь флэкингов – 0,3-17,0 мкм<sup>2</sup>.

На образование пористости в исследованных образцах оказывает влияние концентрация водорода. Развитие флэкингов при температуре 400<sup>0</sup>С в образцах, облученных дозой  $1 \times 10^{17}$  см<sup>-2</sup>, дает основание считать возможным радиационно-газовое скалывание монокристаллической пластинки кремния толщиной порядка 0,2 мкм.



О.В. Большакова

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ НИОБИЙСОДЕРЖАЩИХ  
КРИСТАЛЛОВ ТИТАНАТА БАРИЯ

Руководитель В.В. Иванов

Тверской государственной университет  
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Целью настоящей работы является исследование процессов переключения кристаллов  $\text{BaTiO}_3$  с примесью  $\text{Nb}^{5+}$ : 0,1; 0,3; 0,9 мол.% под воздействием электрического поля, приложенного к образцу в направлении  $[001]$ .

Известно, что поляризационно-оптическим методом фиксируется перестройка сегнетоэластической доменной структуры кристаллов. Реориентация  $180^\circ$ -доменов в направлении  $[001]$  этим методом не визуализируется. Поэтому процессы полного переключения кристаллов  $\text{BaTiO}_3: \text{Nb}^{5+}$  изучены методом эффекта Баркгаузена.

Установлено, что с увеличением приложенного к образцу поля от 0 до  $10 \text{ кВ} \cdot \text{см}^{-1}$  число скачков переполаризации возрастает, что свидетельствует о переключении доменов в направлении поля. С дальнейшим ростом поля эти процессы становятся менее интенсивными. Для образцов  $\text{BaTiO}_3: \text{Nb}^{5+}$  ( $c=0$ ;  $c=0,3$ ;  $c=0,9$  мол. %) процесс поляризации в направлении поля практически заканчивается в полях  $E \approx 25 \text{ кВ} \cdot \text{см}^{-1}$ , а  $\text{BaTiO}_3: \text{Nb}^{5+}$  ( $c=0,1$  мол.%) – в существенно меньших полях  $E \approx 12 \text{ кВ} \cdot \text{см}^{-1}$ . Это можно объяснить различной величиной коэрцитивных полей для этих кристаллов, составляющих 6,3; 1,1; 5,8; 2,1  $\text{кВ} \cdot \text{см}^{-1}$  для концентраций  $\text{Nb}^{5+}$  ( $c=0$ ;  $c=0,1$ ;  $c=0,3$ ;  $c=0,9$  мол. %) соответственно.

Результаты оценки размера ( $\Delta P_{\text{ср.}}$ ), длительности ( $\tau_{\text{ср.}}$ ) скачка; переключающегося при одном скачке объема ( $\Delta V_{\text{ср.}}$ ); доли общих объемов образцов, переполаризующихся при одном скачке ( $\beta$ ) и при прохождении кривой поляризации ( $\eta$ ), для исследуемых кристаллов представлены в таблице:

$d \cdot 10^{-3}$ , см	$c$ , мол. %	$\Delta P_{\text{ср.}}$ , $10^{-14}$ Кл·см	$\Delta V_{\text{ср.}} \cdot 10^{-9}$ , $\text{см}^3$	$\tau_{\text{ср.}}$ , мкс	$\beta$ , $10^{-4}\%$	$\eta$ , %
12	0	1,0	0,8	0,4	0,5	2,0
30	0,1	1,3	1,1	0,3	0,2	1,0
12	0,3	0,8	1,05	0,4	0,7	2,5
14	0,9	1,2	1,1	0,4	0,7	9,0

УДК: 541.123.21:543422.4

Н.В. Бурачук, И.А. Рощина, В.М. Микин

## ИЗМЕНЕНИЕ ЦЕЛОСТНЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ИК ИЗЛУЧЕНИЯ В СИСТЕМАХ ЛИПОСОМЫ – ВОДА, АЛЬБУМИН – ВОДА

Руководитель А.В. Каргаполов

Тверская государственная медицинская академия  
Кафедра общей и биорганической химии

В настоящей работе изучалось влияние малых концентраций растворов альбумина и липосом на состояние водного компонента с помощью аппаратно-программного комплекса «ИКАР».

Модельные системы получали путем последовательного десятикратного разведения до  $10^{16}$  раз 10% раствора альбумина на физрастворе и 10% раствора липосом на бидест воде. Липосомы извлекали стандартным методом, не подвергая действию ультразвука. Результаты анализа показали, что для концентраций  $10^{-1}$ - $10^{-16}$  % имеет место синусоидальная зависимость между количеством исследуемого вещества и величиной целостных показателей.

Максимальное отличие от контроля (bидест) для альбумина критерия Бартлетта наблюдается при разведении  $10^5$ , а незначительное увеличение наблюдается при разведении  $10^{12}$ , минимальное отличие – при разведении  $10^2$ ,  $10^8$  раз. Амплитуда колебания составила порядка 170 у.е.

Для растворов липосом максимально значимое отличие от контроля (bидест) наблюдается при разведении  $10^8$ ,  $10^{14}$ ,  $10^{16}$  раз, минимальное –  $10^{12}$ ,  $10^{15}$  раз. Амплитуда колебания составляет 38 у.е.

Оценивая эффект действия альбумина с помощью целостного показателя расстояния Махаланобиса на ИК излучение водной основы обнаружено, что максимальное значение этой величины наблюдается при разведении исходного раствора в  $10^4$ ,  $10^{10}$ ,  $10^{12}$ ,  $10^{13}$  раз. При этом максимальное значение зарегистрировано при разведении  $10^{13}$  раз. Минимальное – фиксируется при разведении  $10^7$ ,  $10^5$  раз. Амплитуда колебания составила 100 у.е. При оценке действия липосом на ИК излучение водной основы с помощью расстояния Махаланобиса можно сказать, что максимальное значение показателя наблюдается при разведении  $10^3$ ,  $10^5$  раз, минимальное при разведении  $10^2$ ,  $10^{13}$ ,  $10^{15}$  раз. Амплитуда колебания составила 580 у.е.

Таким образом, при сопоставлении данных имеем, что липосомы с увеличением степени разведения оказывают малое воздействие на водную основу в отличие от альбумина, что связано с различием в их структурах и возможностью влияния на структурные особенности водных составляющих модельных растворов.

## ВЛИЯНИЕ ФОТОРЕФРАКТИВНЫХ ПРИМЕСЕЙ НА ПРОТЕКАНИЕ ИМПУЛЬСНЫХ ПРОЦЕССОВ В КРИСТАЛЛАХ SBN

Руководитель Б.Б. Педько

Тверской государственной университет  
Кафедра сегнето- и пьезоэлектриков

В работе методом теплового эффекта Баркгаузена (ТЭБ) исследовано влияние фоторефрактивных примесей на протекание импульсных процессов переключения в кристаллах SBN.

В ходе исследования термоиндуцированные скачки (ТИС) Баркгаузена были обнаружены во всех кристаллах в районе фазового перехода.

В чистом SBN зафиксированы преимущественно «двугорбые» ТИС, длительность  $t_{ск}$  – более 100 мс, амплитуда ( $A_{ск}$ ) – более 5 В.

В кристаллах с примесью Се наблюдались ТИС с одним максимумом,  $t_{ск}$  – до 0,6 мс,  $A_{ск}$  – более 5 В.

В кристаллах с примесью Сг ТИС наблюдались с одним максимумом,  $t_{ск}$  – до 1 мс,  $A_{ск}$  – более 5 В.

После отжига и последующей поляризации наблюдалось уменьшение амплитуды ТИС и смещение области наибольшей интенсивности в сторону более высоких температур от 360 до 373 К.

В чистом SBN наблюдались ТИС с  $t_{ск}$  – до 1 мс,  $A_{ск}$  – до 3 В.

В кристалле с примесью Се ТИС с  $t_{ск}$  – до 0,3 мс,  $A_{ск}$  – до 3,5 В.

В кристалле с примесью Сг ТИС с  $t_{ск}$  – до 1 мс,  $A_{ск}$  – до 3,5 В.

В кристаллах неполярного среза наблюдались схожие термоиндуцированные скачкообразные процессы.

В кристаллах с примесью Се наблюдались ТИС в интервале температур от 295 до 343 К, скачки обладали одним максимумом,  $t_{ск}$  – от 2 до 40 мс,  $A_{ск}$  – до 3,5 В.

В кристаллах с примесью Се наблюдались ТИС в интервале температур от 330 до 357 К, один максимум,  $t_{ск}$  – от 2 до 25 мс,  $A_{ск}$  – до 2,5 В.

Таким образом, примесь Сг приводит к увеличению времени протекания единичного скачка и уменьшению его амплитуды, а примесь Се приводит к уменьшению времени единичного скачка, что связывается с ускорением процесса экранирования спонтанной поляризации в кристалле и косвенно может быть подтверждено улучшением фоторефрактивных свойств.

И.Н. Веселов

## ДИЗАЙН ДВУХБУКВЕННЫХ ПОЛИПЕПТИДНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ

Руководитель А.С. Павлов

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Являясь природными биополимерами, белки имеют много общего с полимерами, полученными искусственно: линейное цепное строение макромолекул, высокая вязкость растворов, способность к набуханию в больших пределах и др. Но имеются и существенные различия: так, например, и полимеры, и белковые молекулы способны сворачиваться в компактные шарообразные структуры – глобулы, однако глобулы полимера, не способные больше существовать в растворе, покидают его, выпадая в осадок или поднимаясь к поверхности раствора. В отличие от них, глобулярные белки остаются в растворе, образуя коллоидную систему. Изучение именно этого свойства и явилось целью данной работы.

В работе была предпринята попытка моделировать белково-подобную структуру методами компьютерного эксперимента, причем в качестве мономеров были взяты аминокислоты, которые подбирались с учетом определенных требований: аминокислотный остаток должен иметь по возможности малое количество атомов и не должен содержать групп, диссоциирующих в воде. Этому условию удовлетворяют остатки валина и аспарагина. Моделирование производилось методами броуновской динамики с использованием пакета программ Tinker. Полипептиды длиной 100 аминокислотных остатков моделировались без периодических граничных условий. Вода задавалась с помощью потенциалов с использованием метода SASA. Электростатические взаимодействия учитывались дальнедействующим (неэкранированным кулоновским) потенциалом. Потенциалы для атомов в молекуле брались из Amber95, входящего в состав комплекса программ Tinker.

Для получения белковоподобной последовательности использовался метод “раскраски”. Сначала брали полипептид, состоящий только из гидрофобных аминокислотных остатков, и сворачивали его в глобулу. Затем на поверхности глобулы часть аминокислот заменялась на гидрофильные и проводилось дальнейшее моделирование, проверяя этим устойчивость полученной глобулы. Полученные последовательности считались верными, если линейный полипептид, созданный по полученной последовательности, сворачивался в сходную глобулу. В результате работы были получены несколько таких последовательностей, радиальные функции распределения, а также проведено сравнение с результатами, полученными на моделях свободно-сочлененной цепи.

В.А Волков, Н.А. Дорофеева

УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ МЕТОДИКИ ОЦЕНКИ  
АНТИРАДИКАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ ВЕЩЕСТВ ПО РЕАКЦИИ  
СО СТАБИЛЬНЫМ РАДИКАЛОМДФПГ

Руководитель П.М.Пахомов

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Среди методов изучения антирадикальной и антиоксидантной активности веществ и их композиций наиболее распространенным является метод, в котором критерием активности служит падение оптической плотности раствора окрашенного стабильного свободного радикала 1,1-дифенил-2-пикрилгидразила (ДФПГ) при смешивании с образцом. Достоинствами метода являются его экспрессность и высокая доступность необходимого оборудования. Однако время проведения реакции (30 мин) является недостаточным, так как реакция проходит практически до конца при стандартных условиях за время порядка нескольких суток. Это создает значительные погрешности в результатах эксперимента. Но значительное увеличение времени реакции затруднительно, так как при этом становится заметной деградация радикала в растворе.

Нами предложен способ устранения указанного недостатка методики, состоящий в следующем. Записанный на двухлучевом спектрофотометре начальный участок кинетической кривой (20-30 мин от начала реакции) оцифровывается и обрабатывается с помощью программ Origin, SYSTAT TableCurve2D, которые позволяют аппроксимировать эмпирические данные в виде уравнения, с высокой точностью описывающего кинетическую кривую. В частности, при работе с использованием Origin практически полное совпадение с экспериментальными кинетическими кривыми дают кривые, описываемые уравнениями общего вида  $D=D_0+A_1e^{-t/a_1}+A_2e^{-t/a_2}$ , где  $D$  – оптическая плотность раствора при  $\lambda=517$  нм,  $t$  – время от начала реакции,  $D_0$ ,  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $a_1$ ,  $a_2$  – параметры, подбираемые программой. Нетрудно убедиться, что при  $t \rightarrow \infty$   $D=D_0$ . Таким образом, параметр  $D_0$  – это оптическая плотность раствора, в котором происходит реакция при достижении химического равновесия. Разность начальной оптической плотности раствора и  $D_0$  мы предлагаем считать истинной величиной падения оптической плотности раствора ДФПГ при реакции с исследуемым образцом. Получение уравнения, описывающего кинетическую кривую реакции, позволяет вычислить скорость реакции в начальный момент времени и константу скорости взаимодействия радикала с образцом. Без вычисления уравнения это сделать было бы невозможно, так как за временной интервал от момента смешивания компонентов до начала регистрации прибором изменения  $D$  в ходе реакции глубина превращения становится значительно большей 5 %.

А.Ю. Воловодова, М.В. Симонова, Д.М. Тимофеев

КИНЕТИКА ГИДРОЛИТИЧЕСКОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ  
КАПРОЛАКТАМА

Руководитель В.А. Никифоров

Тверской государственной технической университет

Кафедра технологии полимерных материалов

Известно, что полиамид-6 находит широкое применение в различных областях, из которых важнейшими являются: получение волокна (капрона), пленок, изготовление лаков и клеев, различных массивных литых изделий. Производство полимера налажено во многих странах. Синтез осуществляется по двум механизмам: гидролитическая и анионная полимеризация. Большая доля полимера получается первым методом, но он имеет недостаток – выход составляет примерно 90%. Для решения проблемы необходимо изучить кинетику процесса.

Целью настоящей работы является изучение кинетики гидролитической полимеризации капролактама. Синтез проводили на стандартной лабораторной установке получения капролактама по стандартной методике, варьируя температуру от 205 до 275 °С с интервалом 10 °С и время от 3 до 9 ч. Исследовали зависимость, описывающую кинетику полимеризации капролактама. В результате проведенного эксперимента установили, что с повышением температуры уменьшаются степень полимеризации и выход продукта, но увеличивается скорость процесса (рис. 1 и 2). Для решения проблемы, предлагается вести полимеризацию в два этапа: при высокой температуре (с высокой скоростью) и при низкой температуре (с высоким выходом), что снизит содержание мономера до 3-4%.

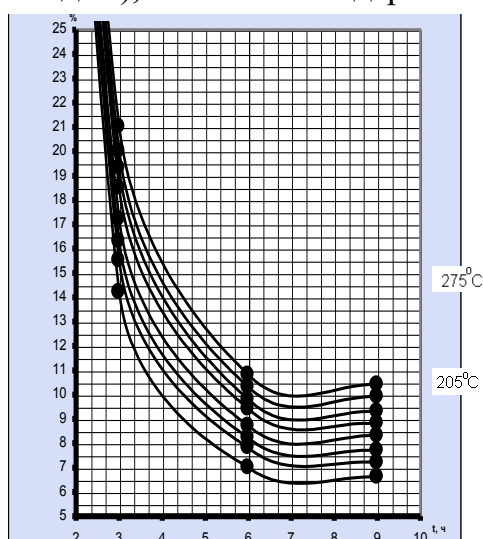


Рис. 1. Зависимость содержания водорастворимой фракции от времени при различной температуре

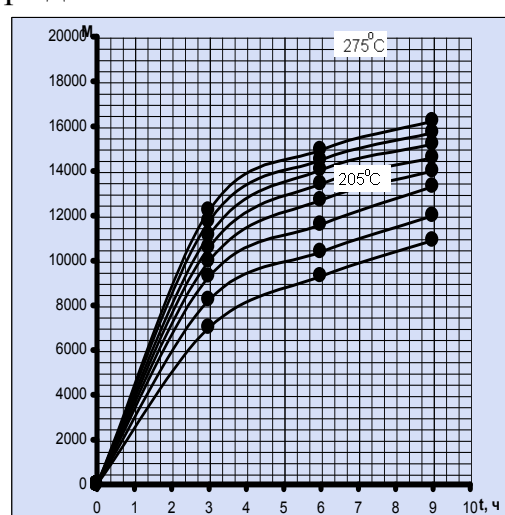


Рис. 2. Зависимость молекулярной массы от времени при различной температуре

## ИЗУЧЕНИЕ КИНЕТИКИ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ НИТРАТОВ

Руководители: Э.М. Сульман, В.Г.Матвеева  
Тверской государственной технической университет  
Кафедра биотехнологии и химии

Содержащиеся в природных и сточных водах нитраты оказывают неблагоприятное воздействие на природу и здоровье человека. Используемые способы очистки воды не могут полностью решить задачу снижения концентрации нитратов и подготовки воды к использованию. Поэтому для решения указанной проблемы необходимо использовать улучшенные химические и современные каталитические технологии удаления нитратов из водных источников.

Целью работы является исследование процесса каталитического восстановления нитратов водородом при использовании Pd-содержащих биметаллических гетерогенных катализаторов. В процессе выполнения экспериментов с целью выявления оптимальных факторов и условий денитрификации при варьировании в системе концентрации каталитически активных центров, а также температуры и продолжительности опыта испытаны биметаллические катализаторы:

Pd - Cu (4:1) /  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (4.7% Pd) и Pd - Zn (1:3) /  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (0.5% Pd).

Изучены кинетика восстановления нитратов, а также влияние следующих параметров: количества катализатора, начальной концентрации субстрата и температуры на скорость процесса гидрирования и механизм реакции. Проведено определение массовых валовых содержаний химических элементов методом рентгенофлуоресцентного анализа (РФА) и определение поверхностных характеристик катализаторов, в том числе определение площади поверхности и распределение пор по объему в зависимости от их диаметра. Зависимость конверсии нитратов от различного содержания катализатора в реакционной смеси приведены на рис. 1 и 2.

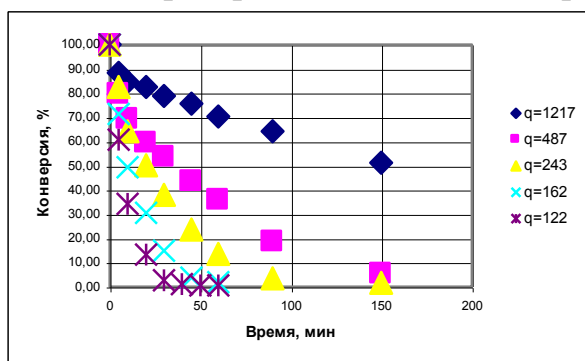


Рис. 1. Зависимость конверсии нитратов от различного содержания катализатора Pd-Cu (4:1) /  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (4.7% Pd) в реакционной смеси

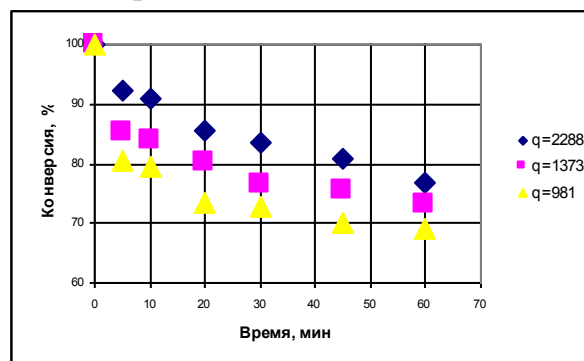


Рис.2. Зависимость конверсии нитратов от различного содержания катализатора Pd-Zn (1:3) /  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (0.5% Pd) в реакционной смеси

УДК:541.134

М.В. Гвозденко

## УГЛЕВОДНЫЙ СОСТАВ ЛИШАЙНИКОВ В УСЛОВИЯХ АТМОСФЕРНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ

Руководитель А.Ф. Мейсунова  
Тверской государственный университет  
Кафедра экологии

Основу жизни человека составляет окружающая природная среда, а основу современной цивилизации – ископаемые природные ресурсы и вырабатываемая из них энергия, включая самый технологичный ее вид – электроэнергию. Промышленное производство электрической и тепловой энергии сопровождается крупномасштабными выбросами поллютантов в окружающую среду, в том числе соединений серы, к которым наиболее чувствительны эпифитные лишайники. Под воздействием экотоксикантов происходят изменения биохимического состава, физиологических процессов, анатомических и морфологических признаков, структуры популяций, видового состава и структуры лишайниковых сообществ.

Цель нашей работы – выяснение влияния степени загрязнения атмосферного воздуха на ИК спектр углеводов, выделенных из лишайников. Для спектральных исследований был отобран среднеустойчивый к атмосферному загрязнению вид *Nurogymnia physodes* из фоновой зоны (дер. Ферязкино Тверской обл.) и загрязнённой зоны (окрестностей ТЭЦ-3 г. Твери). Из пробы сырья по стандартной методике были выделены углеводы, которые использовали для приготовления таблетки с KBr. ИК спектры образцов записали на ИК спектрометре “Equinox 55” в диапазоне 4000-400 см<sup>-1</sup>.

В результате отнесения характеристических полос поглощения в спектрах образцов было установлено, что углеводам соответствуют следующие полосы: 2948,77, 1074,69, 780,26 см<sup>-1</sup> (валентные и деформационные колебания СН<sub>2</sub>-групп); 3418,39, 1622,89 см<sup>-1</sup> (валентные и деформационные колебания ОН-групп).

Сравнение ИК спектров образцов углеводов из фоновой и загрязнённой зон показало, что атмосферное загрязнение не приводит к существенному изменению в спектрах. Таким образом, углеводный состав лишайника *Nurogymnia physodes* в условиях атмосферного загрязнения, по-видимому, не изменяется.



А.Ю. Голикова, М.А. Шавырина

## СТРОЕНИЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГЕЛЬ-ВОЛОКОН ИЗ СВЕРХВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛИЭТИЛЕНА НА РАЗЛИЧНЫХ ЭТАПАХ ОРИЕНТАЦИОННОГО ВЫТЯГИВАНИЯ

Руководитель П.М. Пахомов

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

В настоящее время для упрочнения волокон из гибкоцепных полимеров, в частности сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ), успешно применяется метод гель-формования, важнейшей стадией которого является ориентационное вытягивание уже сформованных гель-волокон. Однако вопрос о перестройках молекулярной и надмолекулярной структуры полимера, происходящих при вытягивании, и влиянии их на механические свойства готовых волокон остается пока открытым.

Цель данной работы – исследование изменений структуры волокон из СВМПЭ, полученных методом гель-формования, и их упруго-прочностных свойств на разных этапах ориентационного вытягивания. Объектами исследования служили полифиламентные нити (280 филаментов) из СВМПЭ ( $M_w = 1,9 \times 10^6$ ) с различными кратностями и температурами вытягивания, полученные в условиях экспериментальной установки ВНИИ синтетического волокна г. Твери. Комплексные исследования проводились с помощью таких физических методов, как Фурье-ИК спектроскопия, рентгеновская дифракция в больших углах, дифференциальная сканирующая калориметрия и механические испытания.

В ходе проведенной работы установлено, что при ориентационном вытягивании волокон из СВМПЭ происходят обогащение конформационного набора полимера Т-изомерами и обеднение его G-изомерами и не наблюдается существенного роста концентрации молекулярных разрывов. Основной рост ориентации Т-изомеров обнаружен уже на начальных этапах вытягивания. В образцах нитей из СВМПЭ наблюдались два типа кристаллитов – кристаллиты на складчатых и выпрямленных цепях (КСЦ и КВЦ), и мезофаза. Установлено, что при ориентационном вытягивании нити СВМПЭ КСЦ переходят в КВЦ за счет распрямления складок ламелярного кристаллита. Это, в свою очередь, ведет к росту кристаллической непрерывности в направлении оси волокна и обеспечивает высокие упруго-прочностные свойства готовой нити. На основе полученных экспериментальных данных предложена модель строения слабо- и высокоориентированных волокон СВМПЭ.

О.В. Грицунова

СТРУКТУРНАЯ ОБЩНОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТОВ ХОЛЛА  
И МАГНУСА

Руководитель Ю.М. Смирнов

Тверской государственный университет  
Кафедра прикладной физики

В литературе по-разному трактуется тензорная принадлежность коэффициента Холла. Для уточнения тензорной принадлежности коэффициента Холла можно обратиться к работе [1], где приведено соотношение  $\frac{V_H}{I} = \frac{1}{W} \mathbf{R}_H \mathbf{H}$ . Из него легко определить тензорную принадлежность коэффициента Холла. Левая часть уравнения является электрическим сопротивлением (полярным тензором второго ранга). В правой части имеется напряженность магнитного поля – аксиальный вектор, дуальный антисимметричному тензору второго ранга. Тензорное соответствие левой и правой частей уравнения достигается сверткой при умножении двух псевдотензоров, приводящей к результату – истинному тензору второго ранга, получаемому в итоге. Из этого следует, что коэффициент Холла является псевдотензором третьего ранга.

В системах с тройкой векторов проявляется определенная общность. Несмотря на различие физических факторов, действующих в системах по Холлу и Магнусу (по существу – характеристик термодинамических сил), общность структуры этих систем может быть выражена в виде векторного произведения  $\mathbf{p} \times \mathbf{a} \rightarrow \mathbf{p}$  [2]. И коэффициент Магнуса следует считать по рангу и виду также псевдотензором третьего ранга.

В итоге в рассмотренных эффектах имеем постоянные коэффициенты, тензорные ранг и вид которых можно объяснить только диадным произведением всех взаимодействующих и возникающих при эффектах величин – двух полярных векторов (истинных тензоров первого ранга) и одного аксиального вектора (псевдотензора первого ранга) типа  $[\mathbf{p}\mathbf{a}\mathbf{p}] \rightarrow \varepsilon \mathbf{T}$ .

Проведенное исследование этих и подобных им систем позволяет в дальнейшем распространить частный случай на более широкую общность эффектов типа  $\mathbf{p} \times \mathbf{a} \rightarrow \mathbf{p}$ ;  $\mathbf{p} \times \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{a}$ ;  $\mathbf{a} \times \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}$ ;  $\mathbf{a} \times \mathbf{a} \rightarrow \mathbf{a}$ .

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вустер У. Применение тензоров к теории групп для описания физических свойств кристаллов. М., 1977.
2. Смирнов Ю.М. Актуальные проблемы кристаллофизики. Тверь, 1998.

## ЛАНТАНФТОРИДНЫЙ ЭЛЕКТРОД С ОТКЛИКОМ НА ИОНЫ ФТОРА

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Определение концентрации ионов фтора входит в ряд наиболее актуальных проблем химии, медицины, биологии и т.д. При определении ионов фтора особый интерес представляет лантанфторидный электрод. Поскольку изготовление монокристаллического фторида лантана является весьма трудоемким а готовый монокристалл труднодоступен, можно попытаться изготовить электрод из поликристаллического  $\text{LaF}_3$ .

Были созданы электроды с мембранами с матрицей из эпоксидной смолы, сульфида серебра и ПВХ.

Электрод с мембраной на основе фторида лантана и эпоксидной смолы дал удовлетворительные результаты: наклон электродной функции составлял 31,8 мВ/рС; время отклика – 10 с; время жизни электрода – 2–3 суток. Электрод на основе фторида лантана и сульфида серебра также давал удовлетворительные результаты: наклон электродной функции составлял 10,6 мВ/рС; время отклика – 20 с; время жизни электрода – 1 сутки.

Хорошие результаты показал электрод с мембраной из фтористого лантана (содержание  $\text{LaF}_3$  не менее 40%) и ПВХ. Наклон электродной функции этого электрода составил 42,5 мВ/рС; время отклика электрода – 10 с; время жизни – 2–3 суток.

Метрологические характеристики электродов с мембранами на различных материалах

Наклон эл. ф-и, мВ/рС	E отн. Ag/AgCl, мВ	Время откл., с	Вр. жизни, сут
Электрод на основе $\text{LaF}_3$ и эпоксидной смолы			
31,8±3,25	48,3±6,0	10	2 – 3
Электрод на основе $\text{LaF}_3$ и сульфида серебра			
10,6±0,6	39,1±1,2	20	1
Электрод на основе $\text{LaF}_3$ и ПВХ			
42,5±0,5	19,2±0,7	10	2 – 3

Изготовленный поликристаллический лантанфторидный электрод по своим метрологическим характеристикам уступает электроду, изготовленному из монокристалла, но простота его изготовления, дешевизна и доступность исходных материалов заставляют надеяться на успешное использование его в аналитической практике.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ТЕРМООБРАБОТКИ НА ФИЗИКО–  
МЕХАНИЧЕСКИЕ И УСАДОЧНЫЕ СВОЙСТВА  
ПОЛИЭТИЛЕНОВЫХ МОНОНИТЕЙ

Руководители В.Б. Кваша, В.И. Исаева

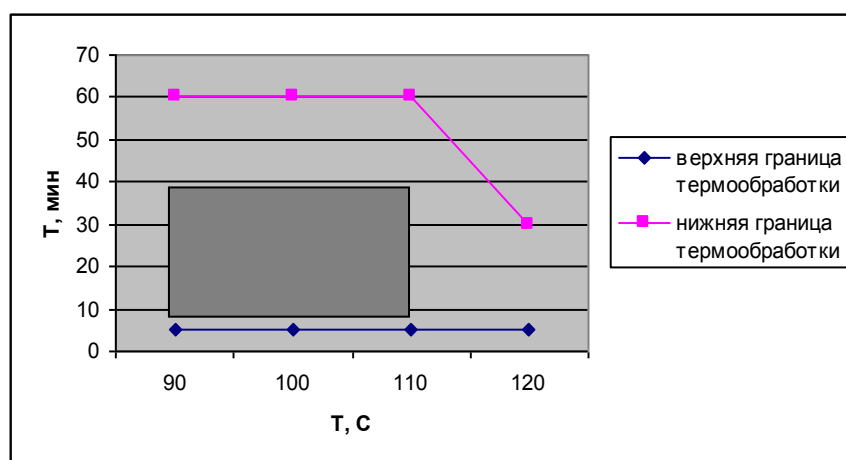
Тверской государственный технический университет  
Кафедра технологии полимерных материалов

Обладая ценным сочетанием свойств и относительно низкой стоимостью, волокна и нити из полиолефинов получили широкое распространение на мировом рынке. Наибольшими темпами развития отличаются волокна и нити из полиэтилена, разновидностью которых является полиэтиленовая мононить\*.

В данной работе исследовано влияние условий термообработки на физико-механические и усадочные свойства нити. В качестве исходного материала была взята полиэтиленовая мононить диаметром 0,2 мм. Эта нить была подвергнута термообработке в свободном состоянии (т.е. в мотках, заготовленных на мотовилах) и под натяжением (на катушках). Обработка проводилась при нескольких температурных режимах: 90, 100, 110 и 120°C. Продолжительность воздействия от 5 до 60 мин.

Из полученных данных можно сделать вывод, что при обработке полиэтиленовых мононитей в свободном состоянии их прочность падает, удлинение меняется незначительно. В случае обработки мононитей под натяжением прочность нитей увеличивается, удлинение снижается.

На основании данных определена область режимов термообработки (рисунок) для получения мононитей с показателями, отвечающими требованиям ТУ.



Область устойчивых режимов термообработки полиэтиленовых мононитей

\*Конкин А.А., Зверев М.П. Полиолефиновые волокна. М., 1966.

УДК: 541.486. + 52.337:63

П.В. Гусев

## СОВМЕСТНОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ И МИКРОЭЛЕМЕНТОВ НА ПРОРАСТАНИЕ И РАЗВИТИЕ AVENA SATIVA

Руководитель Т.И. Смирнова

Тверская государственная медицинская академия  
Кафедра общей и биоорганической химии  
Школа № 12

Положительное влияние микроэлементов на рост и развитие растений в полевых условиях проявляется лишь в сочетании с прочими благоприятствующими факторами: оптимальным температурным и водным режимом, обеспеченностью почвы макроудобрениями, определенной кислотностью почвенного раствора.

При прорастании семян и на первых стадиях развития растение расходует питательные вещества семени и может развиваться, образуя зеленую массу, без почвы. В этот период удобно исследовать воздействие микроэлементов и различных физических факторов по уровню образования зеленой массы. С этой целью был поставлен опыт с использованием семян овса посевного (*Avena sativa*), раствора солей микроэлементов по Хогланду, раствора комплексонов тех же микроэлементов и постоянного магнита с напряженностью поля 0,03 Тл. Определялось образование зеленой массы овса, пророщенного на стерильной увлажненной фильтровальной бумаге с предварительным замачиванием в воде, растворе солей микроэлементов или их комплексонов, образованных с ЭДТА. Растения выращивались как под воздействием магнитного поля, так и без него.

Наибольшая масса зеленых частей растений получена в опыте с семенами, замоченными в растворе комплексонов микроэлементов под воздействием магнитного поля, при дальнейшем выращивании в магнитном поле. В этом опыте зеленая масса оказалась на 218 % выше, чем тот же показатель контрольных растений.

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ “ШЕЛКОАКТИВНЫХ” ТИОФЕН-ПЕПТИДНЫХ ДИБЛОКСОПОЛИМЕРОВ

Руководитель П.Г. Халатур

ИНЭОС РАН

Лаборатория физической химии полимеров

Методом молекулярной динамики в объеме и вблизи адсорбирующей поверхности проведено исследование устойчивости агрегатов, состоящих из индивидуальных антипараллельных  $\beta$ -листов (из восьми цепей тиофен-пептидных диблоксополимеров), а также би- и тетраслоев  $\beta$ -листов, в зависимости от силы водородного связывания в белковой компоненте, дисперсионного притяжения между валентно несвязанными атомами и температуры в системе.

Критериями устойчивости выступали общая целостность агрегата, планарность  $\beta$ -листов, а также образование стопок из тиофеновых колец разных слоев агрегата.

В качестве модели использовалась упрощенная молекулярная модель диблоколигомера, которая первоначально задавалась в программе NupurChem (четыре тиофеновых кольца, соединенных в цепь по принципу “голова к хвосту”, и декапептидный блок (Gly-Ala)<sub>5</sub> – последовательность аминокислот в шелке). Расчеты проводились в два этапа: сначала были подготовлены “исходные состояния” – моно-, би- и тетраслои с таким расположением молекул относительно друг друга, чтобы формировались обнаруженные в эксперименте  $\beta$ -листы из пептидного блока\*, а затем при изменении силы водородного связывания  $\epsilon_H$ , дисперсионного взаимодействия  $\epsilon$  и температуры  $T$  исследовалась устойчивость этих агрегатов.

В результате проведенных расчетов по геометрическому (среднеквадратичный радиус инерции цепи  $R_g^2$ ) и энергетическим критериям ( $\epsilon_H$ ,  $\epsilon$ ) построена диаграмма состояния тетраслоя с выделением областей преимущественного существования агрегата, удовлетворяющего выбранным критериям устойчивости, а также областей, где комплексы нестабильны.

*Работа выполнена при финансовой поддержке SFB 569 (Hierarchic Structure Formation and Function of Organic-Inorganic Nano Systems, Germany).*

\*Klok H.-A., Rösler A., Götz G., Mena-Osteritz E., Bäuerle P. // Org. Biomol. Chem. 2004. N.2. P.3541-3544.

УДК: 543.257:541.134

О.В. Гуськова, Д.В. Думкин, К.М. Титова

## ПОЛИАНИЛИНОВЫЙ рН-СЕНСОР

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственной университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

В настоящее время наблюдается стремительный рост исследования и производства химических сенсоров, который знаменует собой коренные изменения в инструментарии химического анализа. Наиболее многочисленную группу химических сенсоров составляют рН-сенсоры, которые в основном представлены стеклянными электродами. Одним из серьезных недостатков сенсоров этого типа является недостаточно высокая селективность по отношению к ионам некоторых металлов, обусловленная соответствующим механизмом отклика. Поэтому в настоящее время ведутся работы по поиску перспективных материалов для создания высокоселективных рН-сенсоров.

В нашей работе рассматривается возможность использования в качестве рабочего тела рН-потенциометрического сенсора полианилина. Электрод был приготовлен путем нанесения пленки полианилина на платиновую подложку в процессе электрохимической полимеризации в потенциодинамическом режиме. Оказалось, что структура образующейся пленки и метрологические характеристики рН-сенсора на ее основе в значительной степени определяются параметрами электрохимической полимеризации.

Был обнаружен линейный отклик потенциала этого электрода в диапазоне рН 1-10, крутизна электродной функции составляла 45 мВ/рН. Электрод сохранял высокую работоспособность в интервале температур 15-70<sup>0</sup>С, имел быстрый отклик (менее 10 с).

Предложенный механизм отклика рН-сенсора заключается в обратимой окислительно-восстановительной реакции с участием ионов Н<sup>+</sup>. Вероятно, этим обусловлена высокая селективность данного электрода в присутствии различных мешающих ионов. Линейность отклика рН-сенсора нарушается в присутствии сильных окислителей и восстановителей. Это связано с тем что на потенциал сенсора влияют не только величина рН, но и соотношение аминных и иминохиноидных фрагментов полимера, а это соотношение, в свою очередь, зависит от ОВ-потенциала системы.

В настоящее время проводится дальнейшее исследование свойств сенсора, но уже на данном этапе можно рассматривать этот электрод как достаточно перспективный рН-сенсор.

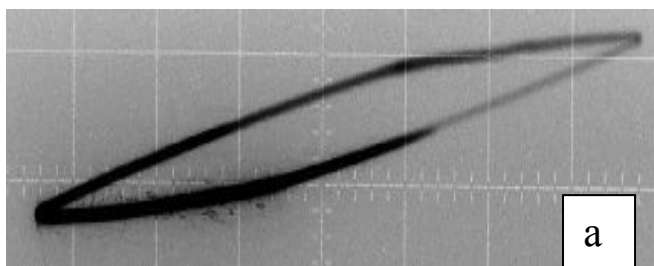
ИССЛЕДОВАНИЕ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ  
ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА И ЕГО СОПОЛИМЕРОВ

Руководители: П.М. Пахомов, О.В. Малышкина

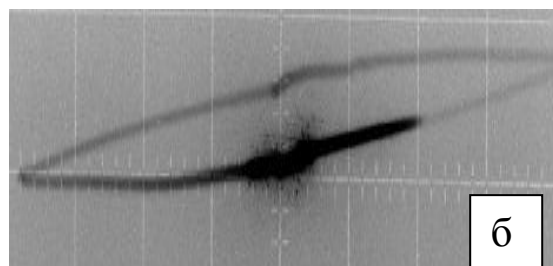
Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Фторсодержащие гибкоцепные полимеры обладают рядом интересных электрофизических свойств. Так, политетрафторполиэтилен является электретом, а в поливинилиденфториде (ПВДФ) и его сополимерах обнаружены сегнетоэлектрические свойства. ПВДФ кристаллизуется с образованием по крайней мере четырех форм:  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , и  $\delta$ . Наибольший интерес вызывает кристаллическая  $\beta$ -форма, так как она обладает сегнето- и пьезоэлектрическими свойствами. В данной работе исследовались ПВДФ марки «Ф – 2М» и его сополимеры с ТФЭ марки «В, Ф – 2М» и марки «Ф – 2МЭ». Методом горячего формования из расплава были получены пленки ПВДФ и его сополимеров. С помощью метода ИК спектроскопии на Фурье–ИК спектрометре «Equinox 55» фирмы «Bruker» были записаны спектры образцов, по которым оценивали содержание  $\beta$  – фазы.

Для исследования сегнетоэлектрических свойств на полимерные пленки напыляли контакты из серебра. После чего на пленки подавалось электрическое поле с различной напряженностью и частотой, в результате наблюдалось явление гистерезиса (рисунок), что свидетельствует о наличии сегнетоэлектрических свойств и  $\beta$  – фазы в исходном ПВДФ.



Напряженность поля 240 В, частота 20 Гц



Напряженность поля 250 В, частота 10 Гц

Также исследовались образцы ПВДФ с наполнителем, в качестве которого использовались порошки с наноразмерными частицами сегнетокерамики 0,61 ЦТС-19 – 0,39 SrTiO<sub>3</sub> (ЦТС). Как и ожидалось, обнаружен рост сегнетоэлектрических свойств в пленках полимерных нанокомпозитов. Работа в области получения и изучения строения и свойств композитов на основе полимерных сегнетоэлектриков продолжается.



## КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ИОНОВ СЕРЕБРА(I) С АМПИЦИЛЛИНОМ, АМОКСИЦИЛЛИНОМ И ЦЕФАЛЕКСИНОМ

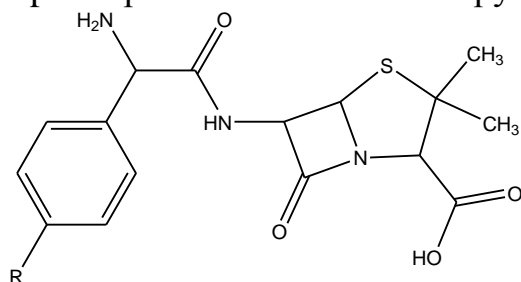
Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственной университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

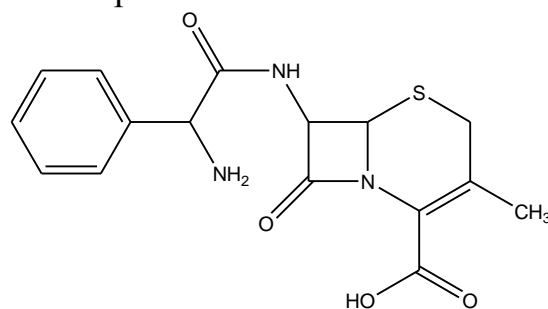
Антибиотики ампициллин (HАmp), амоксициллин (HАхп) и цефалексин (HСрх) имеют некоторую структурную аналогию с дипептидами. Их анионы ( $L^-$ ) способны образовывать устойчивые комплексы состава  $ML$  и  $M(OH)L$ . В данной работе потенциометрическим методом с использованием Ag-селективного электрода исследовано взаимодействие  $Ag(I)$  с анионами  $Amp^-$ ,  $Axp^-$ ,  $Cpx^-$  при 20 °С на фоне 0,1 М  $KNO_3$ . Обнаружено, что в нейтральной и щелочной среде образуются моно- и билигандные комплексы, сосуществующие в растворе.

L	$lg\beta(AgL)$	$lg\beta(AgL_2)$
$Amp^-$	$3.37 \pm 0.03$	$6.27 \pm 0.07$
$Axp^-$	$3.26 \pm 0.04$	$6.05 \pm 0.06$
$Cpx^-$	$3.72 \pm 0.03$	$7.36 \pm 0.04$

Известно, что анионы аминокислот и дипептидов в комплексах с  $Ag(I)$  координируются через аминогруппу как монодентатные лиганды, а устойчивость образующихся комплексов пропорциональна основности аминогрупп. Основность аминогрупп  $Amp^-$ ,  $Axp^-$  и  $Cpx^-$  существенно ниже, чем аминокислот, но исследованные комплексы  $Ag(I)$  с антибиотиками и соответствующие комплексы аминокислот равны по устойчивости. Поэтому можно предполагать, что  $Amp^-$ ,  $Axp^-$  и  $Cpx^-$  координируются как бидентатные лиганды и это является дополнительным, стабилизирующим комплексы фактором. Поскольку координация карбоксильных и амидных групп для  $Ag(I)$  нехарактерна, наиболее вероятным вариантом представляется координация  $Amp^-$ ,  $Axp^-$  и  $Cpx^-$  через атом азота аминогруппы и атом серы.



R = H – ампициллин,  
R = OH – амоксициллин



Цефалексин

УДК: 691.675

Т.Н. Долгова

## ИЗУЧЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ РАСТЯЖЕНИЯ ПОЛИМЕРНОЙ ГЛОБУЛЫ ЗА КОНЦЫ ЦЕПИ

Руководители: П.Г. Халатур, А.С. Павлов

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Полимеры представляют собой важный класс веществ, окружающих нас. Благодаря своим необычным свойствам они находят широкое применение в химии, физике, биологии, медицине, технологии, где они используются в элементах памяти и других устройствах цифровой техники. Более того, процессы самосборки белковых молекул лежат в основе процессов жизнедеятельности биологических систем и изучаются уже на протяжении нескольких лет. Однако, несмотря на достигнутые успехи, попытки получения нативной белковой структуры оказались неудачными.

В связи с этим возникла задача – понять механизм самосборки белковых систем путем постепенного растяжения полимерной цепочки из глобулярного состояния за ее концевые атомы. Поэтому нами методом молекулярной динамики смоделированы процессы растяжения простейших гомополимерных и гетерополимерных цепей.

Рассматривалась простейшая свободно-сочлененная цепь с фиксированными длинами связей. Дальние взаимодействия описывались комбинацией потенциалов Леннарда–Джонса и потенциала типа Юкавы. Рассмотрено поведение сравнительно коротких цепей, имеющих длину до 256 звеньев. Величина энергетического параметра потенциала была задана равной  $\epsilon=1,0$ , приведенная температура  $T=1,0$ . При этих условиях устойчивой конформацией макромолекулы является глобулярная (система значительно ниже  $\theta$  точки).

В процессе моделирования рассчитывались следующие характеристики цепи: компоненты тензора инерции, квадрат радиуса инерции, квадрат расстояния между концами цепи и спэны. Приложенная к концевым атомам сила является параметром расчета. Растяжение макромолекулы в состоянии рыхлого клубка подчиняется гуковскому закону и связано с потерей энтропии при растяжении. Анализ результатов моделирования показал, что можно выделить несколько режимов растяжения цепи в зависимости от величины приложенной силы.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (код проекта 04-03-32185).*

А.А. Донец

## ЭКСПРЕСС-МЕТОД КОЛИЧЕСТВЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ НЕФТЕБИТУМОСОДЕРЖАНИЯ ГОРНЫХ ПОРОД

Руководитель П.М. Пахомов

Тверской государственной университет

Кафедра физической химии

Используемые в настоящее время методы определения нефтебитумосодержания горных пород – люминесцентно-битуминологический анализ, термическая дистилляция, фотоколориметрия – обладают рядом существенных недостатков, ограничивающих их применение для оценки нефтенасыщенности бурового шлама при проведении геолого-геохимических и геолого-технологических исследований в полевых условиях.

Для количественного определения концентрации нефти и битумов в горных породах нами предложен альтернативный метод ИК спектроскопии, реализованный с помощью анализатора нефтебитумосодержания АН-2. Этот прибор фиксирует интенсивности рабочего ИК излучения с максимумом на частоте  $\nu=2930 \text{ см}^{-1}$  (валентные колебания метильных и метиленовых групп в молекулах парафинов, нафтенов и в боковых цепях аренов) и опорного ИК сигнала с частотой  $\nu=3300 \text{ см}^{-1}$  (уровень спектрального фона), а затем вычисляет отношение этих величин. Амплитуды рабочего и опорного сигналов прямопропорциональны концентрации углеводородов в исследуемом образце.

Цель настоящих исследований – апробация предложенной нами методики при изучении пластового флюида, промывочной жидкости и горной породы в полевых условиях. Для этого были интерпретированы данные, полученные геологами непосредственно с буровых станций. Предложенный метод позволил установить глубину залегания полезного пласта при бурении скважины, изучить кинетику испарения пластового флюида из порового пространства горных пород, определить тип вмещающего флюида и приблизительно установить его химический состав, рассчитать концентрацию нефти в буровом растворе и в промывочной жидкости.

Общая продолжительность анализа одного образца не превышает 10-15 мин. Диапазон измерения содержания нефти в горных породах составляет 0,15-60 мг/г. Для повышения достоверности получаемой информации ИК анализатор калибруют с помощью государственного стандартного образца (ГСО). Метод позволяет определять нефтесодержание бурового раствора и промывочной жидкости. Его основными достоинствами являются высокая оперативность, точность и достоверность количественного определения нефти и битума в различных образцах (относительная ошибка результатов измерений не превышала 1,5 %).

УДК: 678.743.22

И.В. Егоров, Е. В. Лаврентьева

## ВЛИЯНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ИСТОРИИ НА КОНЕЧНЫЕ СВОЙСТВА ЖЕСТКОЙ КОМПОЗИЦИИ НА ОСНОВЕ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА

Руководитель В. А. Никифоров

Тверской государственной технической университет

Кафедра технологии полимерных материалов

На примере ПВХ композиции оконного назначения исследовано влияние времени пребывания массы в материальном цилиндре лабораторного экструдера на конечные свойства продукта (термостабильность, физико-механические свойства, цвет и т.д.). Данная задача осуществлена путем многократной переработки ПВХ композиции с получением на каждом цикле гранулята, подвергнутого исследованию.

Непластифицированные поливинилхлоридные композиции обладают достаточно широким набором физико-механических свойств, обуславливающих их широкое использование в качестве композиционных и строительных материалов. Трудность переработки ПВХ заключается в том, что температуры переработки материала близки к температуре его активного разложения. Поэтому любое термомеханическое воздействие вызывает необратимые изменения в полимере.

В ходе исследования было установлено, что полимерная композиция находилась в течение одного цикла переработки в материальном цилиндре лабораторного экструдера на протяжении 1,5 мин.

При проведении испытаний на пластографе Brabender'a было установлено, что после первого цикла композиция находится в недостаточно гомогенизированном состоянии, так как имеет длительное время пластикации. При последующих циклах время пластикации сокращается вдвое, дальнейшая переработка дает незначительное сокращение времени пластикации, это свидетельствует о том, что гомогенизация смеси в основном уже осуществилась на втором цикле.

Увеличение желтой окраски и снижение термостабильности композиции говорит о том, что произошла частичная деструкция ПВХ. Пожелтение свидетельствует об образовании сопряженных кратных связей (хромофорные группировки).

Низкие разрывные показатели на 1-м цикле говорят о наличии неоднородности в материале. Со 2-го цикла наблюдаются постепенное снижение разрывной нагрузки и увеличение удлинения, что, вероятно, связано с увеличением длины последовательностей кратных связей, образующихся в результате деструкции.

В работе затронуты только начальные стадии деструкции ПВХ.

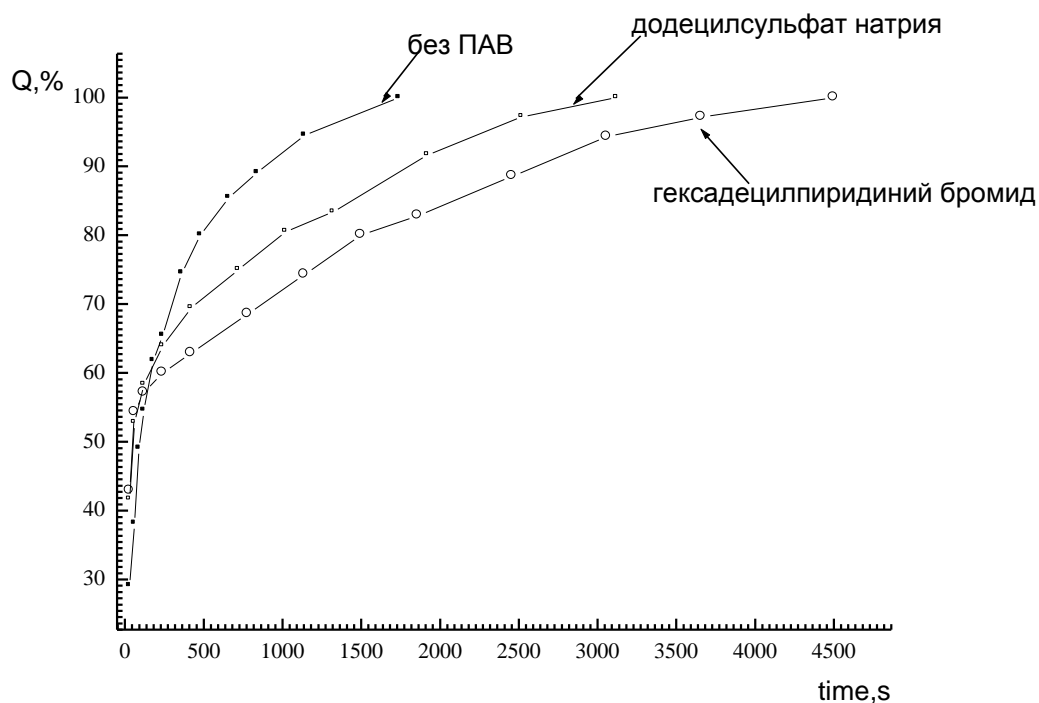
О.Е. Журавлев

## ИЗУЧЕНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ СУСПЕНЗИЙ В ПРИСУТСТВИИ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Руководитель Ю.А. Рыжков

Тверской государственной университет  
Кафедра органической химии

Изучение влияния поверхностно активных веществ (ПАВ) на устойчивость различных дисперсных систем перспективно для применения в различных областях промышленности. Объектом исследования был выбран полидисперсный порошок сульфата бария. Изучалось влияние ПАВ различных классов на устойчивость его суспензии в водной среде. Устойчивость систем определялась методом седиментации в гравитационном поле и методом светорассеяния (нефелометрии) в присутствии ПАВ различных классов: катионных (гексадецилпиридиний бромид), анионных (додецилсульфата натрия), неионогенных (ОС-20), амфолитных (сорбитан-С20). На основе полученных данных были построены кривые зависимости массы осадка от времени и дифференциальные кривые распределения частиц по радиусам, сделаны выводы о стабилизационной способности ПАВ различных классов (рисунок).



ВЛИЯНИЕ НАПРЯЖЕНИЙ НА МАГНИТНУЮ ДОМЕННУЮ СТРУКТУРУ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ  $RFe_{11}Ti$ 

Руководитель Ю.Г. Пастушенков

Тверской государственный университет

Кафедра магнетизма

Интерметаллические соединения редкоземельных металлов (R) с железом  $RFe_{11}Ti$  интенсивно исследуются в течение последних десятилетий [1]. Особый интерес вызывают обнаруженные в них спин-переориентационные фазовые переходы (СПП). Несмотря на большое число исследований интерметаллидов  $RFe_{11}Ti$ , данные о температурах и типах СПП в них весьма противоречивы. В частности, в работах [2-4] было обнаружено, что в соединении  $DyFe_{11}Ti$  при комнатной температуре, когда соединение в соответствии с имеющимися магнитными фазовыми диаграммами является магнитоодноосным, на поверхности образца наблюдается магнитная доменная структура (ДС), характерная для магнитомногоосного магнетика. Это обстоятельство было связано авторами с наличием напряжений в поверхностном слое образца.

С целью дальнейшего изучения влияния напряжений на характер ДС и соответственно тип магнитокристаллической анизотропии соединений  $RFe_{11}Ti$  в настоящей работе выполнены исследования магнитной доменной структуры (ДС) на (110)-, (001)- и на произвольно ориентированных поверхностях монокристаллов  $RFe_{11}Ti$  ( $R=Tb, Dy$ ). На основании полученных экспериментальных данных анализируются роль магнитоупругого вклада в результирующую энергию анизотропии соединений  $RFe_{11}Ti$  и возможное влияние этого эффекта на характер ДС и ориентационные фазовые переходы в них.

В работе показано, что в интерметаллидах с конкурирующими вкладами в результирующую анизотропию редкоземельной подрешетки и подрешетки 3-d металла, к которым относятся рассматриваемые соединения, напряжения, возникшие в процессе роста монокристаллов или в результате их механической обработки, могут изменить тип результирующей анизотропии и вызвать смещение температур СПП за счет дополнительного магнитоупругого вклада в энергию анизотропии.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hu B.-P. // J. Phys. Condens. Matter. 1989. V.1. P. 755.
2. Pastushenkov Yu.G. et al. // J. Magn. Mater. 2002. V. 238. P.215.
3. Никитин С.А. и др. // ФТТ. 2005. Т.47. С.501.
4. Пастушенков Ю.Г. и др. // Вестник ТвГУ. Сер. Физика. 2005. Вып.2. №9. С.5.

ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ «ТЕРМООПТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА»  
В МОНОКРИСТАЛЛЕ НИОБАТА ЛИТИЯ  $\text{LiNbO}_3$

Руководитель Б.Б. Педько

Тверской государственный университет  
Кафедра физики сегнето-и пьезоэлектриков

В работе\* была обнаружена возможность записи оптической информации на полярных срезах ниобата лития с помощью нанесения проводящих масок с последующей температурной обработкой. Эффект был назван «термооптическим». Фиксация изображений обусловлена неоднородным сохраняющимся во времени распределением заряда, причина появления которого носит «полевой» характер. В настоящей работе сделана попытка объяснения «термооптического» эффекта на базе упрощенной модели заряженная нить на незаряженной диэлектрической поверхности. В результате расчета модели в первом приближении получено выражение для тангенциального электрического поля заряженной нити в приповерхностном слое кристалла толщиной  $h$ :

$$E_x = \frac{2\rho \cdot d}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \cos \alpha. \text{ Здесь } \rho \cdot d - \text{плотность заряда в приповерхностном}$$

слое,  $\alpha$  – угол между направлением поля в кристалле и его проекцией на оси X,  $r_x$  – проекция расстояния от нити. Данное распределение тангенциальной составляющей электрического поля нити в приповерхностном слое качественно хорошо согласуется с экспериментальными данными\*. Механизм фиксации термооптических изображений в кристалле ниобата лития можно связать с прыжковополяронным механизмом переноса заряда в интервале температур 20-120°C. Итак, при нагревании кристалла (30-70)° C происходит увеличение проводимости кристалла за счет роста концентрации свободных носителей, термически возбужденных с локальных уровней, в результате чего происходит дрейф носителей заряда в кристалле, который объясняется прыжковой проводимостью по глубоким локальным уровням кислородных вакансий. Электрическое поле от заряженной нити фиксирует заряды в ловушках кристалла  $\text{LiNbO}_3$ . Недавно было установлено, что проводимость в искомом интервале температур (20-120°C) представлена двумя видами поляронов: биполяронами малого радиуса  $\text{Nb}^{3+}_{\text{Li}} \text{Nb}_{\text{Nb}}$  и поляронами большого радиуса  $\text{Nb}^{3+}_{\text{Li}}$ .

\*Зубреева А.А., Педько Б.Б. // Поверхность. 2006. №1. С.66-69 .

## ВЫСОКОСКОРОСТНОЕ ФОРМОВАНИЕ ПОЛИЭФИРНЫХ ТЕКСТИЛЬНЫХ НИТЕЙ

Руководители: В.Б. Кваша, В.Э. Геллер

Тверской государственной технической университет

Кафедра технологии полимерных материалов

Полиэфирные нити и волокна являются основным видом текстильного сырья. Десять – пятнадцать лет назад полиэфирные нити получали при сравнительно низких скоростях намотки. За последние годы в мире созданы и эксплуатируются установки со скоростями формирования 9 000 – 12 000 м/мин – установки высокоскоростного формирования (ВСФ).

Целью данной работы являлось изучение вопросов о влиянии скорости формирования на свойства получаемой нити.

В результате изучения процесса ВСФ полиэфирной нити выявлены следующие закономерности в изменении свойств при варьировании скоростей намотки:

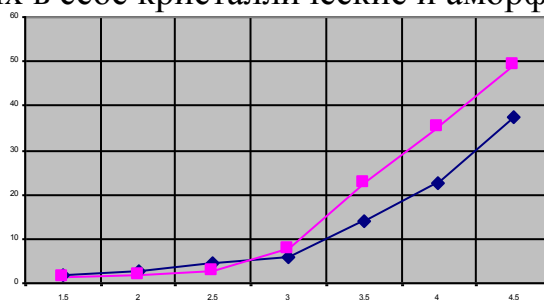
- при изменении скорости в ряду от 2 000 до 6 000 м/мин усадка возрастает до некоторого предела, а затем снижается и появляется второй пик усадки в области плавления;

- для незакристаллизованных образцов (малая скорость формирования) имеет место мгновенное возрастание силы усадки до максимального значения с последующим снижением во времени; кристаллизованные образцы не имеют максимума, и сила усадки возрастает во времени с постепенным замедлением (рисунок);

- при возрастании скорости формирования плотность сформованной нити увеличивается;

- образцы, полученные ВСФ, имеют различный вид деформационных кривых в зависимости от скорости, их прочность выше, чем у нити, сформованной при низких скоростях намотки, но ниже, чем у вытянутой нити.

Все эти закономерности объясняются образованием первичных надмолекулярных структур в нити – микрофибрилл, имеющих сложное строение и сочетающих в себе кристаллические и аморфные фазы.



Зависимость силы усадки от кратности вытяжки



Д.А. Киселев

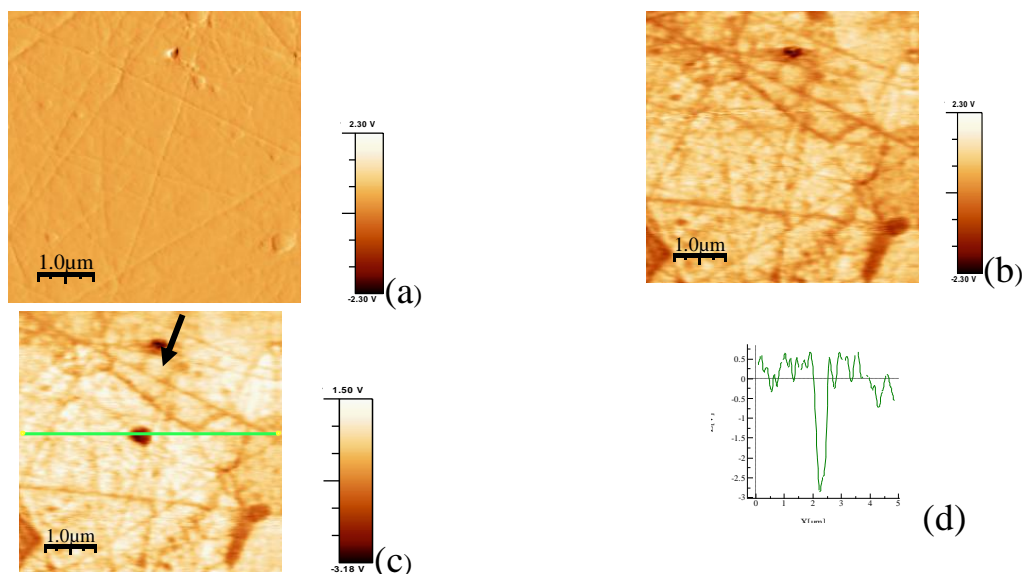
## НАБЛЮДЕНИЕ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ КЕРАМИКИ PLZT 7/65/35 МЕТОДОМ PFM

Руководитель А.Л. Холкин

Университет г. Авейро, Португалия

В данной работе представлены результаты исследования визуализации доменной структуры прозрачной керамики PLZT 7/65/35 методом пьезосиловой сканирующей микроскопии (PFM).

Изображения доменной структуры получены методом PFM, используя атомно-силовой микроскоп (Multimode, Nanoscope IIIA, Digital Instruments) с кантилевером средней жесткости, равной 15 Н/м, и частотой резонанса 130 кГц. Визуализация доменной области выполнена при приложении переменного напряжения амплитудой  $V_{ac} = 5$  В и частотой  $f = 50$  кГц. Результаты исследований представлены на рисунке.



Топография (а); пьезоотклик (b); пьезоотклик после приложения постоянного внешнего электрического поля  $U_{DCmax} = \pm 15$  В (с); профиль пьезоотклика керамики PLZT 7/65/35 (d), полученный вдоль горизонтальной прямой, изображенной на рисунке (с)

Показано, что после приложения внешнего постоянного электрического поля, отвечающего прохождению по восходящей и нисходящей ветвям пьезоэлектрического гистерезиса, образуется устойчивый сегнетоэлектрический домен, наблюдаемый спустя 4 суток, после первого сканирования (рисунок (с) – указан стрелкой). Можно предположить, что такое устойчивое сегнетоэлектрическое состояние в данном масштабе вызвано приложением механических напряжений под действием PFM.

*Работа выполнена при финансовой поддержке the Portuguese Foundation for Science and Technology (grant SFRH/BD/22391/2005).*

УДК: (635.21) (470.31)

Г.В. Киселёва

## ВЛИЯНИЕ СОЛЕЙ И КОМПЛЕКСОНАТОВ МИКРОЭЛЕМЕНТОВ НА ПРОДУКТИВНОСТЬ РАЗНЫХ СОРТОВ КАРТОФЕЛЯ

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра растениеводства

Получение запрограммированных урожаев разных сортов картофеля во многом зависит не только от их биологических особенностей, но также и от технологии возделывания, в том числе от применения удобрений и микроэлементов. Обработка клубней комплексонатами и их солями позволяет повысить урожайность культуры.

Цель исследований – изучить особенности формирования урожайности и качества урожая разных сортов картофеля на запрограммированных фонах минерального питания при использовании микроэлементов для предпосадочной обработки клубней; выявить лучшие варианты технологий возделывания сортов, обеспечивающие получение запрограммированных урожаев клубней высокого качества с наименьшей себестоимостью продукции. Исследования проводились в 2005 году в семеноводческом севообороте кафедры растениеводства на опытном поле ТГСХА. Изучались 3 фактора: А – фон минерального питания: 1 – в расчете на урожай 20 т/га, 2 – на урожай 30 т/га; В – сорта: Скарб, Луговской, Резерв, Елизавета; С – обработка семян: водой, солями микроэлементов (Mn, B, Cu), комплексонатом микроэлементов.

В результате были получены следующие результаты: наиболее продуктивным в условиях 2005 года оказался сорт Елизавета, в среднем по фонам урожайность составила 31,2 т/га, у сорта Луговской она была 30,4 т/га, Резерв – 24,5 т/га, Скарб – 22,6 т/га.

На 1-м фоне сформирован урожай клубней выше запрограммированного уровня: по сорту Скарб на 2,8 т/га, Луговской на 10,0 т/га, Резерв на 6,3 т/га и Елизавета на 10,0 т/га. На 2-м фоне запрограммированный урожай получен по сортам Елизавета (32,7 т/га) и Луговской (31,0 т/га).

Обработка семян солями микроэлементов обеспечила достоверную прибавку урожая на 1-м фоне по сортам Скарб (7,6 т/га) и Резерв (7,4 т/га), а обработка комплексонатом микроэлементов – на 2-м фоне по сортам Луговской (2,5 т/га) и Резерв (5,1 т/га).

Полученные результаты показывают, что в условиях Тверской области можно получать запрограммированные уровни урожайности в 20 и 30 т/га. Выявлена неодинаковая реакция разных сортов на применение микроэлементов в виде солей и комплексонатов. Исследования продолжаются.

Р.В. Кожин

## ИМПУЛЬСНЫЕ ПРОЦЕССЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ ЦИРКОНАТА-ТИТАНАТА СВИНЦА

Руководитель Н.Н. Большакова

Тверской государственный университет  
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Сегнетоэлектрическая керамика на основе титаната-цирконата свинца (ЦТС) находит широкое применение в электронной технике. Ее физические свойства существенно зависят от процентного содержания циркония, титана и присутствия модифицирующих добавок [1].

В настоящей работе приводятся результаты исследования процессов переключения твердых растворов ЦТС с различным содержанием циркония и титана, соответствующих морфотропной области диаграммы состояния.

Исследования проведены методом теплового эффекта Баркгаузена [2] на образцах в виде дисков диаметром 10мм и толщиной 1мм. Установлено, что изменение температуры керамики сопровождается перестройкой доменной структуры в интервале температур 40-90<sup>0</sup>С, о чем свидетельствует появление скачков переполяризации.

Температурные зависимости скорости следования скачков переключения имеют максимум при температурах порядка 70<sup>0</sup>С. Приложение к образцам постоянного электрического поля  $\sim 100 \text{ В}\cdot\text{см}^{-1}$  вызывает рост интенсивности процессов переполяризации. Увеличение приложенного к образцам поля от 100 до 540  $\text{ В}\cdot\text{см}^{-1}$  приводит к возрастанию скорости следования скачков переключения на 2-3 порядка.

Исследования диэлектрической проницаемости показали, что для всех составов температурные зависимости  $\epsilon$  не имеют аномалий в интервале температур 40-90<sup>0</sup>С. По-видимому, перестройка доменной структуры керамики в этом случае связана с эффектом памяти процессов ее поляризации в производственных условиях.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Материалы Международной научно-практической конференции «Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения». М., 2004.
2. Рудяк В.М. Процессы переключения в нелинейных кристаллах. М., 1986.

ВАРЬИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ АКТИВНОСТИ  
АЛЬБУМИНОВЫХ БЕЛКОВ СЕМЯН ЛЬНА

Руководитель Г.П. Лапина

Тверской государственный университет  
Кафедра биоорганической химии

Известно, что поверхностно-активные вещества способны накапливаются в поверхностном слое, имеют поверхностное натяжение меньше поверхностного натяжения растворителя; обладают малой растворимостью. Среди большого числа белковых макромолекул альбумины, выделенные из природных объектов, недостаточно изучены в плане стабильности молекулы при воздействии различных факторов: рН среды, органических и неорганических солей, добавление органических (гидрофобных) веществ и т.д.

Объект исследования – альбумины, выделенные нами из семян льна. Цель работы – изучить возможные изменения стабильности альбуминовых глобул при варьировании величины заряда (числа и интенсивности электростатических взаимодействий) в макромолекулах альбумина. Для этого определено поверхностное натяжение растворов белка различных концентраций. Измерение поверхностного натяжения проводили методом максимального давления пузырька (капли). Метод используется как относительный, и поверхностное натяжение водного раствора альбуминов определяется из соотношений соответствующих высот поднятия манометрической жидкости  $\sigma = \sigma_3 \cdot h/h_3$ , где  $h$ ,  $h_3$  – высоты поднятия исследуемой и эталонной жидкости;  $\sigma_3$ ,  $\sigma$  – поверхностное натяжение эталонной и исследуемой жидкости. Затем были построены изотермы адсорбции водного раствора альбуминов семян льна на поверхности раздела водный раствор – воздух.

Такой была система сравнения. Для варьирования величины заряда между радикалами аминокислот в белковой глобуле в водный раствор белка вносили возрастающие концентрации NaCl, таким образом меняя ионную силу раствора. Построены и обсуждены изотермы адсорбции альбуминов семян льна на границе вода–воздух при изменении ионной силы водной фазы. Подтверждена роль электростатических взаимодействий в формировании нативной и денатурированной форм белковых молекул и выявлены возможные способы варьирования адсорбируемости, а следовательно, поверхностной активности альбуминовых белков льна на границе вода–воздух.

УДК 541.486+52.337.63

О.И. Корнеева

ВЛИЯНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СПОСОБОВ  
ПРЕДПОСАДОЧНОЙ ОБРАБОТКИ НА ПРОРАСТАНИЕ И ПЕРВЫЕ  
СТАДИИ РАЗВИТИЯ ЗЛАКОВЫХ РАСТЕНИЙ

Руководители: З.И. Усанова, Т.И. Смирнова, К.П. Скоков

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра растениеводства и химии

Тверской государственной университет

Кафедра магнетизма

В лабораторных условиях исследованы различные методы предпосевной обработки семян культурных злаков: овса «Санг», озимой пшеницы «Инна», озимой ржи «Альфа» и ячменя «Заозерский 85». Семена на 12 ч замачивались в растворе солей микроэлементов и в растворе комплексонатов тех же микроэлементов с суммарной концентрацией  $10^{-3}$  моль/л. Контролем служило замачивание семян в дистиллированной воде. Далее половина семян каждой параллели подвергалась десятиминутной экспозиции в постоянном магнитном поле (0,1 Тл). Затем семена высевались в промытый стерилизованный речной песок и через 2 недели после появления всходов сравнивалась зелёная масса разных параллелей опыта.

Наибольшее влияние на образование зелёной массы злаков оказало сочетание замачивания семян в растворе комплексонатов и экспозиции в магнитном поле.

По сравнению с контролем увеличение зелёной массы оказалось максимальным для растений овса (на 95%) и озимой ржи (на 97%), минимальным – для озимой пшеницы (на 10%).

МАГНИТНАЯ ДОМЕННАЯ СТРУКТУРА  
ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ  $(\text{Tb,Dy})\text{Fe}_{11}\text{Ti}$  и  $\text{Y}_2(\text{Fe,Co})_{17}$ 

Руководитель Ю.Г. Пастушенков

Средняя общеобразовательная школа №12

Магнитооптическим методом Керра и методом порошковых фигур Акулова–Биттера исследована магнитная доменная структура интерметаллических соединений редкоземельных металлов (РЗМ) с 3d-переходными металлами типа  $(\text{Tb,Dy})\text{Fe}_{11}\text{Ti}$  и  $\text{Y}_2(\text{Fe,Co})_{17}$ . Соединения РЗМ с повышенной концентрацией 3d-элемента в последнее время привлекают пристальное внимание исследователей как перспективные материалы для практических применений. В связи с этим весьма актуально знание их основных микромагнитных параметров.

На основании результатов анализа магнитной доменной структуры интерметаллидов  $(\text{Tb,Dy})\text{Fe}_{11}\text{Ti}$  и  $\text{Y}_2(\text{Fe,Co})_{17}$  в работе определены значения поверхностной плотности энергии доменных границ  $\gamma$  в данных соединениях. Для этого использованы метод Киттеля [1] и метод Боденбергера–Хуберта [2]. В первом случае для определения  $\gamma$  строились зависимости ширины основных доменов  $D$  на призматических плоскостях монокристаллов рассматриваемых соединений от толщины монокристаллов  $L$ . Во втором случае методами стереометрической металлографии оценивалось среднее расстояние между доменными границами  $W$ .

Выбор соединений  $(\text{Tb,Dy})\text{Fe}_{11}\text{Ti}$  и  $\text{Y}_2(\text{Fe,Co})_{17}$  обусловлен необходимостью исследования соединений с различными типами магнитокристаллической анизотропии – ось легкого намагничивания, конус осей легкого намагничивания, плоскость осей легкого намагничивания и выявить влияние типа магнитокристаллической анизотропии на характер и количественные характеристики магнитной доменной структуры.

Средняя энергия доменных границ в рассматриваемой группе соединений составляет  $\sim 10$  Эрг/см<sup>2</sup>, что позволяет рассчитывать на получение высококоэрцитивного состояния в материалах на их основе. Определенные в работе значения  $\gamma$  использованы для расчета таких микромагнитных параметров рассматриваемых материалов, как толщина доменных границ  $\delta$ , критический размер однодоменного состояния  $d_{\text{cr}}$  и обменный параметр  $A$ .

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kittel Ch. // Phys. Rev. 1946. V.70, N.11. P.965.
2. Bodenberger R., Hubert A. // Phys. Stat. Sol. A. 1977. Bd. 44. P.K7.

Ю.С. Кошкидько

## РАСЧЕТ МАГНЕТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В МОНОКРИСТАЛЛЕ $Er_2Fe_{17}$

Руководитель К.П. Скоков

Тверской государственной университет  
Кафедра магнетизма

Для создания холодильных установок, работающих на основе магнетокалорического эффекта, необходимо подобрать магнитный материал, который будет эффективно работать при комнатной температуре. Таким материалом может стать соединение  $Er_2Fe_{17}$ . Известно, что магнетокалорический эффект максимален в точке Кюри. Соединение  $Er_2Fe_{17}$  имеет точку Кюри 306К, что близко к комнатной температуре. В связи с этим в работе были поставлены следующие задачи:

- рассчитать магнетокалорический эффект соединения  $Er_2Fe_{17}$  из кривых намагничивания вблизи точки Кюри,
- определить пригодность соединения  $Er_2Fe_{17}$  для использования в качестве рабочего тела холодильных установок.

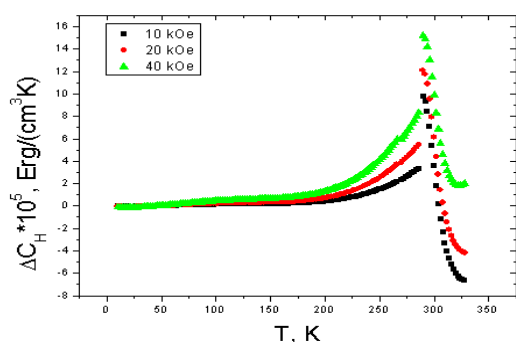


Рис.1. Магнитный вклад в теплоемкость  $C_H$ , при различных полях

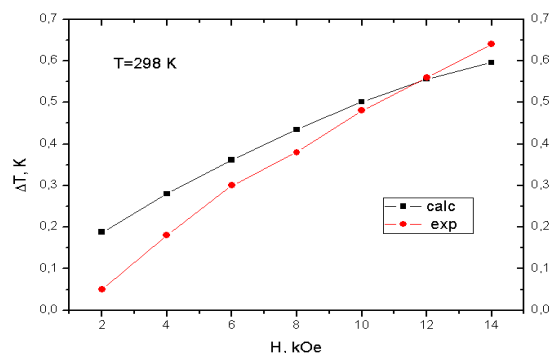


Рис.2. Изменение  $\Delta T$  в зависимости от магнитного поля H

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бозорт Р. Ферромагнетизм. М., 1956.
2. Вонсовский С.В. Магнетизм. М., 1971.
3. Румер Ю.М., Рывкин М.Ш. Термодинамика, статистическая физика и кинетика. Новосибирск, 2001.
4. Mandal K., Yan A., Kersch P., Handstein A., Gutfleisch O., Muller K-H. // J. Appl. Phys. 2004. V.37.

А.А. Кравченко

## ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ПРИВЕДЕННУЮ ВЯЗКОСТЬ ПОЛИМЕРА ПРИ ПРОВЕДЕНИИ СИНТЕЗА ПОЛИАМИДА ПТ

Руководитель В.А. Никифоров

Тверской государственный технический университет  
Кафедра технологии полимерных материалов

Полиамид ПТ используется в производстве синтетической бумаги и фильтровальных элементов благодаря тонкой морфологической структуре фибридов.

В настоящей работе исследовалось влияние температуры проведения процесса синтеза на приведенную вязкость полимера. Синтез проводили на опытной установке газожидкостной поликонденсации по известной методике, варьируя температуру газовой фазы от 150 до 200<sup>0</sup> С и жидкой фазы от 20 до 100<sup>0</sup> С. После обработки данных получили графические зависимости, описывающие влияние температуры газовой фазы и жидкой на приведенную вязкость полимера (рис. 1 и 2).

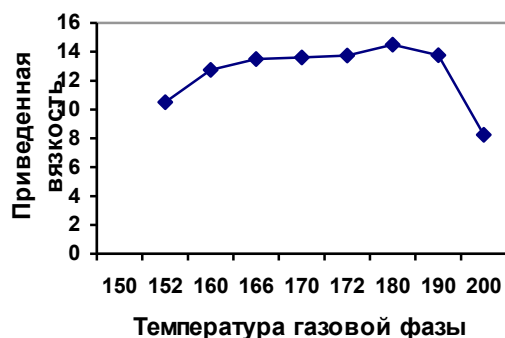


Рис. 1. Зависимость приведенной вязкости от температуры газовой фазы

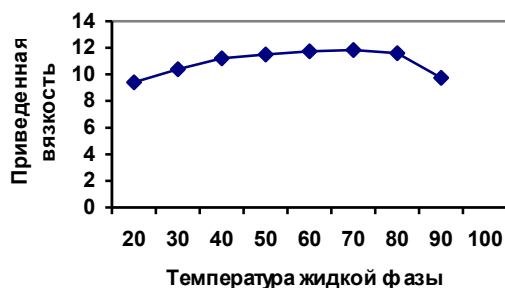


Рис. 2. Зависимость приведенной вязкости от температуры жидкой фазы

Эксперимент показал, что с повышением температуры синтеза увеличивается приведенная вязкость полимера. Таким образом, оптимальная температура жидкой фазы – 100-102<sup>0</sup>С, газовой фазы – 180-200<sup>0</sup>С.



## ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ЖИДКОЙ ФАЗЫ НА УДЕЛЬНУЮ ВЯЗКОСТЬ И СТЕПЕНЬ ПОМОЛА ПОЛИМЕРА ПРИ СИНТЕЗЕ ПОЛИАМИДА 6Т

Руководитель В.А. Никифоров

Тверской государственной технической университет

Кафедра технологии полимерных материалов

Полиамид 6Т используется в производстве синтетической бумаги и фильтровальных элементов благодаря тонкой морфологической структуре фибридов.

В настоящей работе исследовалось влияние температуры жидкой фазы при проведении процесса синтеза на удельную вязкость и степень помола полимера. Синтез проводили на опытной установке газожидкостной поликонденсации по известной методике, варьируя температуру жидкой фазы от 50 до 100<sup>0</sup> С. После обработки данных получили графические зависимости, описывающие влияние температуры жидкой на удельную вязкость и степень помола полимера.

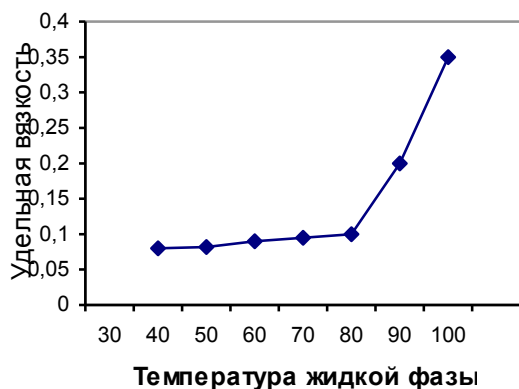


Рис. 1. Зависимость удельной вязкости от температуры жидкой фазы



Рис. 2. Зависимость степени помола от температуры жидкой фазы

Эксперимент показал, что с повышением температуры жидкой фазы при синтезе увеличиваются удельная вязкость и степень помола полимера. Таким образом, оптимальная температура жидкой фазы – 99-100<sup>0</sup>С.

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ  
К РАСЧЕТУ ИЗБЫТОЧНОЙ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ТРЕХФАЗНЫХ  
ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМ

Руководители: В.М. Самсонов, Н.Ю. Сдобняков  
Тверской государственный университет  
Кафедра теоретической физики

Моделью для изучения многих наносистем может служить твердый шар с жидким слоем на нем, погруженный в бесконечную газовую среду. Такие системы встречаются при рассмотрении гетерогенной конденсации на малых ядрах, когда наиболее вероятен механизм равномерного обволакивания ядра жидким слоем, при исследовании эмульсий, в которых капли дисперсной фазы покрыты слоем поверхностно-активные вещества, при изучении тонких пленок на мелкодисперсных порошках и т.д. Размерные эффекты в подобных системах могут оказывать существенное влияние на их свойства, поэтому определение размерной зависимости избыточной свободной энергии такой модели представляет как теоретический, так и практический интерес.

На основе ТТВ\* произведен расчет избыточной свободной энергии трехфазной системы. Из анализа полученных закономерностей для избыточной свободной энергии трехфазной системы от толщины слоя  $h$  аргона при заданном радиусе малой капли натрия можно сделать вывод о том, что при малых толщинах справедлив линейный закон.

Получены размерные зависимости приведенной удельной свободной избыточной энергии трехфазной модельной системы для двух случаев:

- 1) высокоэнергетическое ядро в окружении низкоэнергетической пленки;
- 2) низкоэнергетическое ядро в окружении высокоэнергетической пленки.

Проведены расчеты приведенной удельной свободной избыточной энергии трехфазной системы для «тонких» и «толстых» пленок. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с теоретическими предсказаниями.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 04-03-32214-а).*

---

\*Щербаков Л.М. Оценка избыточной свободной энергии малых объектов. Исследования в области поверхностных сил. М., 1964.

С.В. Лапшин, Е.С. Лившиц, Ю.Н. Шляхова

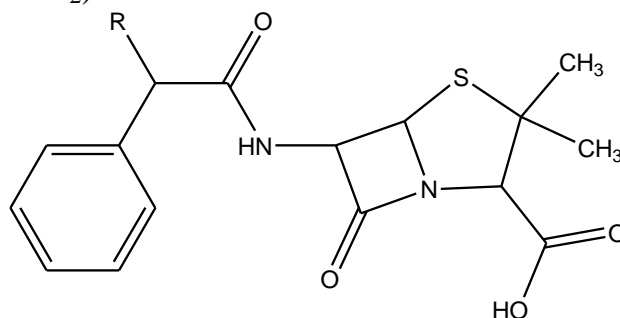
ГИДРОЛИЗ АМПИЦИЛЛИНА И БЕНЗИЛПЕНИЦИЛЛИНА  
В ПРИСУТСТВИИ ИОНОВ МЕДИ(II)

Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Антибиотики группы пенициллина уже давно применяются в медицине для лечения различных заболеваний. Исследованию этих веществ посвящены многочисленные работы. Однако кинетика гидролиза этих антибиотиков изучена недостаточно. Имеются литературные данные о том, что процесс гидролиза ускоряется в присутствии ионов *d*-элементов.

В данной работе методами поляриметрии и хронопотенциометрии исследована кинетика гидролиза бензилпенициллина ( $R = H$ ) и ампициллина ( $R = NH_2$ ):



Показано, что распад бензилпенициллина в присутствии ионов меди(II) происходит в одну стадию и представляет собой реакцию первого порядка, присутствие ионов меди(II) ускоряет этот процесс. Рассчитана константа скорости реакции. Ампициллин образует с ионами меди(II) устойчивый комплекс. Распад ампициллина в присутствии меди(II) происходит в две стадии: первая – внутримолекулярная перестройка комплекса, вторая – собственно распад с разрывом  $\beta$ -лактмного кольца. Поляриметрический метод для изучения такого процесса неприменим, так как не позволяет определить окончание первой стадии и начало второй. Поэтому был применен хронопотенциометрический метод определения скоростей последовательных реакций. На хронопотенциограмме распада ампициллина в присутствии ионов меди(II) четко видны стадии комплексообразования, существования неустойчивого соединения, внутримолекулярная перегруппировка, существование второго комплекса и распад. Определены константы скоростей изученных процессов.

Т.В. Лебедева

## ВОЗДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ НА ДИНАМИКУ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ ТГС

Руководитель В.В. Иванов

Тверской государственный университет  
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Эволюция сегнетоэлектрической доменной структуры при переполяризации представляет собой сложный процесс зарождения, роста и слияния множества отдельных доменов. Особую роль в исследовании процессов переключения играет анализ скачков Баркгаузена\*, которые обычно связывают с образованием зародышей, сквозным прорастанием отдельных доменов и взаимодействием доменных стенок с дефектами. Под влиянием различных внешних воздействий (механических напряжений, освещения, ультразвука,  $\gamma$ -облучения и др.) доменная структура и характер ее перестройки существенно изменяются.

В настоящей работе с помощью метода эффекта Баркгаузена выполнены исследования процессов переключения монокристаллов ТГС, облученных сильноточным импульсным пучком электронов. Установлено, что для необлученных кристаллов ТГС и облученных флюенсом  $10 \cdot 10^{15}$  электрон·см<sup>-2</sup> закон представляет собой обычную экспоненту с одним временем релаксации; для кристаллов, облученных флюенсом  $30 \cdot 10^{15}$  и  $60 \cdot 10^{15}$  электрон·см<sup>-2</sup>, становится оправданным предположение о существовании спектра времен релаксации. Математическая обработка экспериментальных результатов показала, что в широком интервале температур временные зависимости числа скачков Баркгаузена, полученные после коммутации внешнего электрического поля, хорошо аппроксимируются законом  $N \sim 1 - \exp\left(-\left(\frac{t}{\tau}\right)^\alpha\right)$ , где  $\tau$  и  $0 < \alpha \leq 1$  – константы.

Были определены температурные и полевые зависимости характерного времени релаксации  $\tau$  и параметра  $\alpha$ , являющегося характеристикой спектра распределения времен релаксации.

---

\*Рудяк В.М. Процессы переключения в нелинейных кристаллах. М., 1986.

Ю.В. Луговой, В.Ю. Долуда, Н.В. Лакина

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО  
КАТАЛИТИЧЕСКОГО ОКИСЛЕНИЯ ФЕНОЛОВ НА НОВЫХ  
ПОЛИМЕРНЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ

Руководитель: Э.М. Сульман, В.Г. Матвеева

Тверской государственный университет  
Региональный центр новых технологий

Одной из наиболее сложных и актуальных проблем экологии и сбережения водных ресурсов является решение проблемы очистки воды от фенольных примесей. Для удаления фенолов из воды в настоящее время используют сорбционный метод, мембранные технологии и микробиологическую очистку, которые не позволяют в полной мере достичь необходимой степени очистки. Применение наноструктурированных катализаторов для окисления фенольных соединений в полной мере позволит реализовать полную очистку сточных вод.

Жидкофазное окисление фенола кислородом воздуха осуществляется при температуре 70-100°C и давлении 10-15 МПа. Применение наноструктурированных катализаторов при жидкофазном окислении позволяет снизить температуру процесса до 50°C, а давление – до атмосферного.

В ходе проведенных экспериментов были исследованы платиновые катализаторы на основе сверхсшитого полистирола с различным содержанием платины (6-0,1%). Изучена кинетика окисления фенолов на гетерогенных катализаторах. Определено влияние температуры, концентрации фенола и катализатора на процесс окисления фенольных соединений. Найдены энергии активации, предэкспоненциальные множители и порядок реакции. Исследуемые катализаторы готовились пропиткой предварительно высушенного полимерсодержащего носителя раствором металлсодержащей соли или кислоты. В ходе приготовления катализаторов варьировались различные условия, позволяющие управлять размерами нанесенных нанокластеров металлов. В ходе экспериментальной работы проводилась оптимизация работы катализаторов, что позволило существенно снизить содержание драгметаллов в катализаторах, сократить время проведения процесса и проводить окисление не только до CO<sub>2</sub> и H<sub>2</sub>O, но и с получением органических кислот и гликолей – необходимого сырья органического синтеза.

М.Н. Маланин

## ФОРМИРОВАНИЕ ПОРИСТОСТИ В КОМПОЗИТЕ ПОЛИЭТИЛЕН–МНОГОСЛОЙНЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ

Руководитель П.М. Пахомов

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Проблемы получения, оценки структуры и поиска новых областей применения полимерных композиционных материалов, в особенности нанокomпозитов, являются одним из наиболее перспективных направлений в современной науке. Среди всевозможных систем особое место отводят композитам на основе полимера и углеродных нанотрубок. Введение подобного наполнителя в полимер способствует улучшению его структуры (нередко наблюдается упорядочение в системе) и, следовательно, свойств (например, температуры плавления, механических и термоэластических свойств, коэффициента диффузии и т.д.). Несмотря на обширный список публикаций по данному вопросу [1; 2], свойства вышеупомянутого объекта в виде волокон, пленок и т.п. изучены еще недостаточно. Цель данной работы – изучение влияния концентрации многослойных углеродных нанотрубок на формирование пористой структуры в ксерогельных пленках полиэтилена.

Объектами исследования являлись пористые пленки ксерогелей сверх-высокомолекулярного полиэтилена ( $M_w=1,7 \cdot 10^6$ ), наполненные многослойными углеродными нанотрубками (multi wall carbon nanotubes). Степень наполнения ксерогельных пленок варьировалась от 0 до 15%. Дальнейшее увеличение степени наполнения приводило к разрушению материала в процессе получения. В качестве методов изучения структуры композитов и их пористости в зависимости от степени наполнения использовали Фурье-ИК и электронную спектроскопию. В качестве независимых контролирующих методов выступали электронная сканирующая микроскопия и ртутная порометрия.

В ходе проведенных исследований установлено, что с повышением концентрации наполнителя наблюдается тенденция к формированию более развитой пористой структуры. Максимум кривой распределения пор по размерам при этом смещается в сторону меньших значений. Установление подобных закономерностей открывает широкие возможности получения полимерных материалов с заранее заданными свойствами.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Германской службы академических обменов DAAD и Министерства образования и науки РФ в рамках программы «Михаил Ломоносов» 2005-2006, код проекта 999998.*

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mahfuz H. // International J. of Nanoscience. 2005. V.4, №1. P.55-72.
2. McNally T. et al. // Polymer. 2005. V.46. P.8222-8232.

УДК 541.647.577.1

М.П. Малыщик, П.С. Лихуша, Ю.Н. Таланцева

## О ФАКТОРАХ СТАБИЛЬНОСТИ О-ДИФЕНОЛОКСИДАЗЫ ПРОРОСТКОВ ЛЬНА

Руководитель Г.П. Лапина

Тверской государственный университет  
Кафедра биоорганической химии

Ферментный препарат о-дифенолоксидаза (о-ДФО) растительного происхождения мало изучен. Особое внимание исследователей привлекает о-ДФО проростков льна, так как данный фермент участвует в процессах лигнификации на молекулярном уровне и его исследование позволит найти новые подходы к улучшению качества льняных волокон. При изучении роли о-ДФО в лигнификации необходимо иметь информацию о стабильности фермента. В связи с этим цель работы – изучение закономерности изменений поверхностной активности о-ДФО.

На первом этапе выделили и очистили о-ДФО из 3-7-дневных проростков льна по методике, предложенной В.Д. Анисимовым и др.\* с собственными модификациями. Далее с использованием метода биуретовой реакции определили концентрации (г/мл) и содержание (г/г сырой массы растительной ткани) фермента.

Факторы стабильности о-ДФО изучили путем определения поверхностной активности фермента на границе вода – воздух методом наибольшего давления пузырьков воздуха (метод П.А. Ребиндера), меняя ионную силу в растворе фермента. Ионную силу варьировали от 0,2 до 0,4 моль/л добавлением хлорида натрия в фиксированный объем с фиксированной концентрацией о-ДФО. Для всех систем определили поверхностное натяжение ( $\sigma$ ). Далее строили изотермы поверхностного натяжения  $\sigma - C$ , рассчитали значения адсорбции ( $\Gamma$ ), из графика в координатах  $C/\Gamma - C$  определили значения предельных адсорбций ( $\Gamma_{\infty}$ ). Рассчитали важные поверхностные характеристики о-ДФО проростков льна: 1) площадь, занимаемую молекулой ( $S_0$ ); 2) поперечный размер молекулы, равный толщине предельного монослоя ( $h$ ). Обсуждено влияние заряда на поверхностную активность ферментной молекулы.

---

\* Анисимов В.Д., Кастальева Т.Б. // Биохимия. 1978. Т.43, вып. 9. С. 1616-1621.

ФАЗОВОЕ РАВНОВЕСИЕ В СИСТЕМАХ «СВЕРХКРИТИЧЕСКИЙ  
СО<sub>2</sub>-ЭТИЛОВЫЙ ЭФИР ЖИРНОЙ КИСЛОТЫ»

Руководитель Е.Ф. Новиков

Тверской государственный университет

Кафедра общей физики

Изучение фазовых равновесий в сверхкритических условиях и растворимости различного рода соединений в надкритических жидкостях очень важны для технологии. Результаты могут быть полезны, например, при разработке условий хранения нефти и природного газа в резервуарах, опреснения воды, эксплуатации реакторов, хроматографического разделения веществ с низкой термостойкостью.

Уравнение UNIQUAC хорошо представляет равновесие как пар–жидкость, так и жидкость–жидкость в многокомпонентных системах, содержащих различные неэлектролиты, например углеводороды, сложные эфиры, воду, спирты и пр. В основной концепции метод UNIFAC следует положению о том, что коэффициенты активности в смесях связаны с взаимодействиями между структурными группами. Для этой концепции характерны следующие два положения: производится обработка экспериментально определенных значений коэффициентов активности для получения параметров, характеризующих взаимодействие между парами структурных групп в неэлектролитических системах; эти параметры используются для расчета коэффициентов активности в других системах, которые экспериментально не исследовались, но содержат те же самые функциональные группы.

В данной работе предложен подход, основанный на комбинации уравнения состояния Соаве–Редлиха–Квонга и модифицированного варианта модели групповых вкладов UNIFAC, с помощью которого можно рассчитать фазовые равновесия «жидкость–пар» при высоких давлениях. В качестве правил усреднения свойств или правил смешения были использованы модифицированные правила смешения Гурона–Видаля (MNV1 и MNV2).

Также проведен расчет фазовых равновесий и построены фазовые диаграммы для систем, одним из компонентов которых является надкритическая жидкость СО<sub>2</sub>. Расчетные кривые и соответствующие экспериментальные значения находятся в удовлетворительном согласии, учитывая качество экспериментальных данных, которые использовались при оценке параметров. Средняя относительная погрешность по давлению составила 7,8%. Проведенное сравнение результатов расчета давления данным методом и расчета с помощью уравнения SRK и ван-дер-ваальсовых правил смешения показывает заметное превосходство первого.



## КОЛЛАПС ОДИНОЧНОЙ ЦЕПИ РЕГУЛЯРНОГО АВ-СОПОЛИМЕРА

Руководитель А.С. Павлов

Тверской государственный университет  
Кафедра органической химии

Методом броуновской динамики выполнено моделирование процесса формирования глобулярного состояния одиночной цепи регулярного сополимера при постоянной температуре  $T=1,0$ . Цепь представлена чередующимися сегментами двух видов жесткости (жесткими (*A*) и гибкими (*B*)) одинаковой длины с различным сродством к растворителю. В предложенной модели длина звеньев сорта *A* и *B* варьировалась в пределах от 9 до 30. Общая длина цепи *N* также принимала различные значения.

Расчеты проводились как для случая плохого растворителя для жестких фрагментов цепи и хорошего для гибких, так и для случая плохого растворителя для гибких фрагментов. Качество растворителя моделировалось изменением энергии взаимодействия между отдельными звеньями полимерной цепи. Растворитель характеризуется вязкостью среды  $\eta=0,5$ .

Невалентные взаимодействия мономерных звеньев описывались потенциалом Леннарда–Джонса с радиусом обрезки  $4,5\sigma$ . Полная потенциальная энергия системы определялась как сумма всех видов энергий взаимодействия между силовыми центрами цепи.

Начальные конфигурации цепи генерировались методом случайных блужданий без самопересечений на кубической решетке и уравнивались в течение  $\sim 3 \cdot 10^6$  шагов интегрирования. Во время режима релаксации условие хорошего растворителя выполнялось для всех силовых центров цепи. Переход в равновесное состояние определялся по стабилизации потенциальной энергии системы и отсутствию дрейфа размеров макромолекулы на достаточно больших временных интервалах. Для каждого набора параметров цепи проводилось усреднение на серии из 10 расчетов. Кроме этого, усреднение проводилось и по начальным состояниям системы. Длительность вычислений в рабочем режиме в зависимости от длины цепи составляла  $3 \cdot 10^6 - 10 \cdot 10^6 \Delta t$  шагов.

Расчеты показали, что конечные конформации цепи напрямую зависят от длины образующих ее сегментов и от общей длины цепи. Мы наблюдали образование высокоупорядоченных структур (пачек) при возрастании длины жестких блоков. С увеличением общей длины цепи конечное состояние характеризовалось образованием нескольких блоков, стабилизированных гидрофильной опушкой.

## РАСПРЕДЕЛЕНИЕ СВОБОДНОГО ОБЪЕМА В ЖЕСТКОЦЕПНЫХ ПОЛИМЕРАХ: КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Руководитель А.С. Павлов

Тверской государственной университет

Кафедра физической химии

Прогнозирование транспортных характеристик стеклообразных полимеров – одна из важнейших задач современной науки о полимерах. Практический интерес к ней связан с широким применением мембран в современной технике. Газоразделительные мембраны должны обладать высокой газопроницаемостью и селективностью газоразделения.

Целью данной работы было смоделировать реальный полимер – политриметилсилилпропин. В качестве метода компьютерного моделирования был выбран метод молекулярной динамики, так как он сохраняет эффективность при достаточно высоких плотностях системы.

В стеклообразных полимерах не наблюдается плотной упаковки полимерных молекул, так как в полимерной матрице образуются микропустоты, которые могут занимать малые молекулы. Суммарный объём этих микропустот – свободный объём полимера. Он определяется из плотности системы при данной температуре.

Для вычисления свободных объёмов следует считать все атомы углерода и водорода, так как при этом сохраняется геометрически правильная структура объекта, поэтому их нельзя заменять псевдоатомами. Поле ММ3 имеет параметры для всех атомов системы, поэтому оно используется для нашего исследования.

Для расчёта была выбрана молекула из 20 мономерных звеньев. Она помещается в кубическую ячейку с длиной ребра 45 Å и не взаимодействует со своим соседним образом. Молекулярная масса этого олигомера – 2247 а.е., число атомов – 382. Для моделирования ансамбля цепей их все нужно поместить в расчётную ячейку так, чтобы не возникало перекрывания молекул. Созданная конфигурация минимизируется с помощью программного комплекса Тинкер и в ансамбле NPT, методом молекулярной динамики проводится сжатие системы. Затем методом Монте–Карло рассчитывается свободный объём. Потенциальная энергия системы и энергия межмолекулярного взаимодействия молекул с изменением давления в системе меняются мало, а плотность и свободный объём изменяются достаточно сильно. При давлении 1000 атм. потенциальная энергия системы составила 95490 кДж/моль, плотность системы – 0,908 г/см<sup>3</sup>, а величина свободного объёма – 10 %.

А.Ю. Николенко

## ФОРМ-ФАКТОР И РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПЛОТНОСТИ ВЕЩЕСТВА В МИНИМАЛЬНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Руководитель В.М. Смоляков

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Плотность вещества в основном приближении с  $K = K_{\min}=0$ , волновая функция которой имеет вид:

$$\varphi_0(\rho) = C\rho^{N-\frac{1}{2}}e^{-\alpha\rho^2}, \quad (1)$$

где  $C, N, \alpha$  – коэффициенты, и

$$\varphi_0(\rho) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{R_{in}}} \exp\left\{-\left(\frac{\rho - R_{in}\sqrt{A}}{R_{in}}\right)^2\right\}, \quad (2)$$

где  $R_{in} = R/\sqrt{1 + \frac{1}{4A}}$  ( $R_{\max}=4.5$ ). Все функции нормированы.

Запишем оператор распределения плотности вещества

$$n(\vec{\rho}_0) = \frac{1}{z} \sum_{i=1}^A \delta(\vec{\rho}_i - \vec{\rho}_0) \left(\frac{1}{2} + \tau iz\right), \quad (3)$$

где  $\rho_0$  – точка наблюдения. Физический смысл плотности – вероятность нахождения частицы в точке пространства. Чтобы получить выражение для плотности вещества, нужно найти усреднение соответствующего оператора по волновой функции

$$n(\vec{\rho}_0) = \langle \Psi | n(\vec{\rho}_0) | \Psi \rangle. \quad (4)$$

Если вычислять этот интеграл, учитывая только первое слагаемое в разложении  $\Psi$  (минимальное приближение), можно получить следующее выражение для плотности вещества в основном приближении метода гиперсферических функций:

$$n(\rho) = \int_0^\infty \varphi^2(r) F(\rho, r) \frac{dr}{r^3}. \quad (5)$$

Для плотности  $n(r)$  в этом приближении получим следующее выражение

$$n(r) = \frac{64}{75\pi\sqrt{15\pi}} \frac{\Gamma(34.5)}{\Gamma(33)} \int_{r\sqrt{16/15}}^\infty \left(1 - \frac{16}{15} \frac{r^2}{\rho^2}\right)^{31} \left(1 + \frac{16 \cdot 253}{45} \frac{r^2}{\rho^2}\right) \varphi_0^2(\rho) \frac{d\rho}{\rho^3}. \quad (6)$$

С учетом того, что плотность не зависит от углов вектора  $\vec{r}$ , форм-фактор  $F(q)$  представляет Фурье-образ  $n(r)$  и рассчитывается по формуле

$$F(q) = 4\pi \int_0^\infty n(r) \frac{\sin qr}{qr} r^2 dr. \quad (7)$$

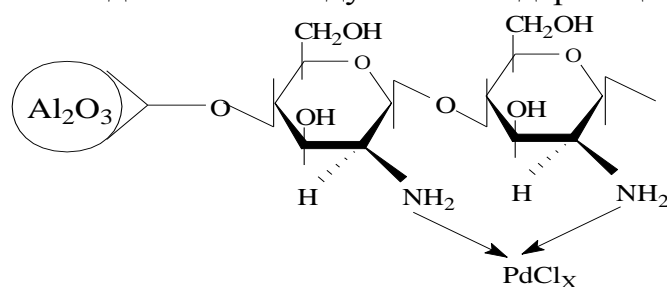
КАТАЛИЗАТОРЫ СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ С≡С СВЯЗИ НА  
ОСНОВЕ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТРИЦ

Руководители: Э.М. Сульман, В.Г. Матвеева

Тверской государственный технический университет  
Кафедра биотехнологии и химии

В настоящее время все большее значение приобретает использование наночастиц металлов при создании каталитических систем. В качестве стабилизирующих наночастицы агентов высокоперспективными являются полимеры благодаря многообразию своих свойств, варьируя которые можно эффективно воздействовать на морфологию наночастиц. В случае использования полимерных матриц для формирования нанодисперсных частиц металлов полученные композитные материалы могут сочетать в себе свойства как матрицы, так и собственно наночастиц и – более того – способны приобретать совершенно новые свойства.

Данная работа посвящена исследованию палладийсодержащих катализаторов гидрирования С≡С связи, синтезированных с использованием полистиролсульфонокислоты и природного полимера – хитозана, который применялся для стабилизации наночастиц металлов за счет образования хелатных комплексов, в которых координационные связи формировались между двумя атомами азота и атомом палладия. Полистиролсульфонокислота выступала в роли полианиона, способного формировать слой на поверхности поликатиона (хитозана) и контролировать взаимодействие между металлсодержащими слоями:



Это приводит к уменьшению агрегации наночастиц и созданию каталитических систем с низким содержанием благородного металла (0,2 %) и высокой селективностью (98 %). Новые нанокompозиты на основе полиэлектролитов и природных биodeградируемых полимерных матриц являются высокоэффективными катализаторами стадий производства витаминов А, Е, К.

СХЕМА ДЛЯ АЛКАНОВ С УЧЕТОМ КРАТНЫХ НЕВАЛЕНТНЫХ  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ АТОМОВ ЧЕРЕЗ ДВА СКЕЛЕТНЫХ АТОМА

Руководители: Ю.Г. Папулов, В.М. Смоляков  
Тверской государственной университет  
Кафедра физической химии

Получена экстраполяционная формула, учитывающая взаимное влияние атомов в явном виде: пар атомов, троек, четверок и пятерок атомов через один и два атома углерода в цепи молекулы алкана (с учетом этана):

$$P_{C_{10}H_{2n+2}} = n_0 p_0 + n_1 p_1 + n_2 p_2 + n_3 p_3 + n_4 p_4 + n_5 p_5 + n_6 p_6 + n_7 p_7 + n_8 p_8, \quad \text{где (1)}$$

$$p_0 = \xi_{C-C} + 6\xi_{C-H} + 6\eta_{HH}^C + 6\eta_{HC}^C + 2\eta_{HHH}^C + 6\eta_{HHC}^C + 2\eta_{HHHC}^C + 9\zeta_{HH}^{CC} + 18\zeta_{HH-H}^{CC} + 6\zeta_{HHH-H}^{CC} + 9\zeta_{HH-HH}^{CC} + 6\zeta_{HHH-HH}^{CC}, \quad (2)$$

$$p_1 = -4\xi_{C-H} - 5\eta_{HH}^C - 2\eta_{HC}^C + \eta_{CC}^C - 2\eta_{HHH}^C - 4\eta_{HHC}^C + 2\eta_{HCC}^C - 2\eta_{HHHC}^C + \eta_{HHCC}^C - 6\zeta_{HH}^{CC} - 6\zeta_{HC}^{CC} - 18\zeta_{HH-H}^{CC} + 12\zeta_{HC-H}^{CC} + 6\zeta_{HH-C}^{CC} - 8\zeta_{HHH-H}^{CC} + 6\zeta_{HHC-H}^{CC} + 2\zeta_{HHH-C}^{CC} - 12\zeta_{HH-HH}^{CC} + 12\zeta_{HC-HH}^{CC} - 10\zeta_{HH-HHH}^{CC} + 6\zeta_{HH-CHH}^{CC} + 4\zeta_{CH-HHH}^{CC}, \quad (3)$$

$$p_2 = 4\xi_{C-H} + 6\eta_{HH}^C + 3\eta_{HHH}^C + 3\eta_{HHC}^C - 3\eta_{HCC}^C + \eta_{CCC}^C + 3\eta_{HHHC}^C - 3\eta_{HHCC}^C + \eta_{HHCC}^C + 9\zeta_{HH-H}^{CC} - 18\zeta_{HC-H}^{CC} + 9\zeta_{XH-H}^{CC} + 9\zeta_{HHH-H}^{CC} - 18\zeta_{XHH-H}^{CC} + 9\zeta_{XXH-H}^{CC} + 9\zeta_{HH-HH}^{CC} - 18\zeta_{XH-HH}^{CC} + 9\zeta_{XX-HH}^{CC} + 12\zeta_{HHH-HH}^{CC} - 18\zeta_{XHH-HH}^{CC} - 6\zeta_{XH-HHH}^{CC} - 9\zeta_{CCH-HH}^{CC} + 3\zeta_{XX-HHH}^{CC}, \quad (4)$$

$$p_3 = -4\xi_{C-H} - 6\eta_{HH}^C - 4\eta_{HHH}^C - 4\eta_{HHC}^C + 6\eta_{HCC}^C - 4\eta_{HCCC}^C + \eta_{CCCC}^C - 12\zeta_{HHH-H}^{CC} + 36\zeta_{CCH-H}^{CC} + 36\zeta_{CCH-H}^{CC} + 12\zeta_{CCC-H}^{CC} + 12\zeta_{HHH-HH}^{CC} + 36\zeta_{CCH-HH}^{CC} - 36\zeta_{CCH-HH}^{CC} + 12\zeta_{CCC-HH}^{CC}, \quad (5)$$

$$p_4 = \eta_{HH}^C - 2\zeta_{H-C}^{CC} + \zeta_{C-C}^{CC} + 4\zeta_{HH-H}^{CC} - 4\zeta_{CH-H}^{CC} - 4\zeta_{C-HH}^{CC} + 4\zeta_{CH-C}^{CC} + 2\zeta_{HHH-H}^{CC} - 2\zeta_{CCH-H}^{CC} - 2\zeta_{C-HH}^{CC} + 2\zeta_{CCH-C}^{CC} + 4\zeta_{HH-HH}^{CC} - 8\zeta_{CH-HH}^{CC} + 4\zeta_{CH-CH}^{CC} + 4\zeta_{HHH-HH}^{CC} - 4\zeta_{CCH-HH}^{CC} - 4\zeta_{CH-HHH}^{CC} + 4\zeta_{CCH-CH}^{CC}, \quad (6)$$

$$p_5 = \zeta_{HH-HH}^{CC} + 2\zeta_{CH-H}^{CC} + \zeta_{C-HH}^{CC} - \zeta_{CC-H}^{CC} - 2\zeta_{CH-C}^{CC} + \zeta_{CC-C}^{CC} - \zeta_{HHH-H}^{CC} + 2\zeta_{CCH-H}^{CC} + \zeta_{C-HH}^{CC} - \zeta_{CCH-H}^{CC} + 2\zeta_{CCH-C}^{CC} + \zeta_{CCH-C}^{CC} - 2\zeta_{HH-HH}^{CC} + 6\zeta_{CH-HH}^{CC} - 2\zeta_{CC-HH}^{CC} - 4\zeta_{CH-CH}^{CC} + 2\zeta_{CC-CH}^{CC} - 3\zeta_{HHH-HH}^{CC} + 5\zeta_{CCH-HH}^{CC} + 4\zeta_{CH-HHH}^{CC} - 2\zeta_{CCH-HH}^{CC} - \zeta_{CC-HH}^{CC} - 6\zeta_{CCH-CH}^{CC} + 2\zeta_{CCH-CH}^{CC} + \zeta_{XX-XHH}^{CC}, \quad (7)$$

$$p_6 = \zeta_{HHH-H}^{CC} - 3\zeta_{CCH-H}^{CC} - \zeta_{C-HH}^{CC} + 3\zeta_{CCH-H}^{CC} + 3\zeta_{CCH-C}^{CC} - \zeta_{CCC-H}^{CC} - 3\zeta_{CCH-C}^{CC} + 2\zeta_{HH-HH}^{CC} + \zeta_{CCC-C}^{CC} - 6\zeta_{HCH-HH}^{CC} - 2\zeta_{CH-HHH}^{CC} + 6\zeta_{CCH-HH}^{CC} + 6\zeta_{CCH-CH}^{CC} - 2\zeta_{CCC-HH}^{CC} - 6\zeta_{CCH-CH}^{CC} + 2\zeta_{CCC-CH}^{CC}, \quad (8)$$

$$p_7 = \zeta_{HH-HH}^{CC} - 4\zeta_{CH-HH}^{CC} + 2\zeta_{CC-HH}^{CC} + 4\zeta_{CH-CH}^{CC} - 4\zeta_{CC-CH}^{CC} + \zeta_{CC-CC}^{CC} + 2\zeta_{HHH-HH}^{CC} - 4\zeta_{CCH-HH}^{CC} - 4\zeta_{CCH-HH}^{CC} + 2\zeta_{CC-HH}^{CC} + 8\zeta_{CCH-CH}^{CC} - 4\zeta_{CCH-CH}^{CC} - 4\zeta_{CC-CH}^{CC} + 2\zeta_{CCH-CC}^{CC} + \zeta_{HHH-HH}^{CC} - 4\zeta_{HHH-CH}^{CC} + 2\zeta_{HHH-CCH}^{CC} + 4\zeta_{CCH-CH}^{CC} - 4\zeta_{CCH-CCH}^{CC} + \zeta_{CCH-CCH}^{CC}, \quad (9)$$

$$p_8 = -\zeta_{HHH-HH}^{CC} + 3\zeta_{CCH-HH}^{CC} + 2\zeta_{CH-HH}^{CC} - 3\zeta_{CCH-HH}^{CC} - \zeta_{CC-HH}^{CC} - 6\zeta_{CCH-CH}^{CC} + \zeta_{CCC-HH}^{CC} + 6\zeta_{CCH-CH}^{CC} + 3\zeta_{CC-CH}^{CC} - 2\zeta_{CCC-CH}^{CC} - 3\zeta_{CCH-CC}^{CC} + \zeta_{CCC-CC}^{CC}, \quad (10)$$

По схеме (1) проведены расчёты  $\Delta_f H^0$  и  $S_f^0$  алканов в разных приближениях. С использованием параметров  $p_0 - p_6$  схемы (1) можно рассчитывать свойства  $P$  алканов с учетом их конформационного состава.

Д.Ю. Нилов, Д.В. Соколов, Д.М. Федин

ПЕРЕЧИСЛЕНИЕ ИЗОМЕРОВ ЗАМЕЩЕНИЯ ПАРАЛЛЕЛОЭДРОВ:  
ПЕНТАГОНДОДЕКАЭДР, ТРАПЕЦЕРОМБИЧЕКИЙ ДОДЕКАЭДР,  
РОМБОДОДЕКАЭДР

Руководители: Ю.Г. Папулов, В.М. Смоляков  
Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Методами комбинаторного анализа дан вывод хиральных и ахиральных изомеров замещения пентагондодекаэдра ( $T_h$ ), трапецеромбического додекаэдра ( $D_{3h}$ ) и ромбододекаэдра ( $O_h$ ). Установлены формулы симметрии  $Z$  и производящие функции для определения числа изомеров замещения по вершинам многогранника, распределения изомеров по семействам  $\rho(m)$  и в зависимости от числа  $m$  мест возможного замещения. Замещенные распадаются на  $\rho(m)$  семейств  $h^m, h^{m-1}x, \dots$ , соответствующих разбиению числа  $m$  на целые части.

1. Частная простая форма пентагондодекаэдр получается, если двухскатные крыши на грани куба размножить всеми операциями группы  $T_h$ ; его пятиугольные грани имеют собственную симметрию  $C_s$ . Операции симметрии группы  $T_h$ :  $E, 4C_3, 4C_2^2, 3C_2, i, 4S_6, 4S_6^5, 3\sigma_d$ , а  $Z_{(T_h)} = 1/24\{f_1^{20} + 8f_1^2f_2^9 + 4f_2^{10} + 8f_2^1f_6^3 + 3f_2^4f_4^2\}$ ;  $m = 20$ ,  $\rho(20) = 627$ ; семейства  $h^{20}, h^{19}x, \dots, h^{18}xy, \dots, h^{14}x^2y^2zu, \dots, h^5x^4y^4z^4u^3, \dots, hxyzuvwq\dots rst$  содержат 1, 2, ..., 18, ..., 290856, ..., 10184716080, ..., 101370917007360000 изомеров, среди которых соответственно 1, 1, ..., 3, ..., 216, ..., 52920, ..., 0 изомеров ахиральны;

2. а) если плотноупакованные шары равномерно расширять в замкнутом сосуде, то при гексагональной упаковке каждый шар превращается в трапецеромбический додекаэдр ( $D_{3h}$ ). Операции симметрии группы  $D_{3h}$ :  $E, 2C_3, 3C_2, 2S_3, \sigma_h, 3\sigma_v, m = 14$ ,  $\rho(14) = 135$ , а  $Z_{(D_{3h})} = 1/12\{f_1^{14} + 2f_1^2f_3^4 + 4f_2^7 + 2f_6^2f_2^1 + 3f_1^6f_3^4\}$ . Семейства  $h^{14}, h^{13}x, \dots, h^{12}xy, \dots, hxyzuvwqrstgd$  содержат 1, 3, ..., 23, ..., 7264857600 изомеров, среди которых соответственно 1, 3, ..., 15, ..., 0 изомеров ахиральны;

б) при кубической упаковке каждый шар превращается в простую форму – ромбододекаэдр ( $O_h$ ). Операции симметрии группы  $O_h$ :  $E, 6C_4, 8C_3, 6C_2, 3C_2', i, 8S_6, 6S_4, 3\sigma_h, 6\sigma_d, m = 14$ ,  $\rho(14) = 135$ , а цикловой индекс группы  $Z_{(O_h)} = 1/48(f_1^{14} + 3f_2^5f_1^4 + 6f_2^4f_1^6 + 6f_4^3f_1^2 + 3f_2^6f_1^2 + 7f_2^7 + 8f_3^4f_1^2 + 8f_6^2f_2^1 + 6f_4^3f_2^1)$ ; семейства  $h^{14}, h^{13}x, \dots, h^{12}xy, \dots, h^8x^2y^2zu, \dots, hxyzuvwqrstgd$  содержат 1, 2, ..., 9, ..., 11535, ..., 1816214400 изомеров, среди которых соответственно 1, 2, ..., 9, ..., 506, ..., 0 изомеров ахиральны. Полученные результаты важны при формировании ряда гомологов базисного многогранника и построении расчетных методов оценки свойств исследуемых объектов.

УДК 532.632

И.Е. Новиков

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОДЕЛИ ГРУППОВЫХ ВКЛАДОВ ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ НЕФТЯНЫХ ФРАКЦИЙ

Руководитель Ю.Д. Орлов

Тверской государственный университет  
Кафедра общей физики

Поверхностное натяжение играет значительную роль в межфазном тепло- и массопереносе. Предсказание поверхностного натяжения для многокомпонентных систем очень важно, поскольку жидкие растворы, используемые в химической технологии, являются многокомпонентными. Кроме того, в смесях сложного состава типа нефтяных фракций имеется огромное число химически подобных образований. В этом случае очень трудно или практически невозможно с помощью обычного химического анализа идентифицировать различные составляющие. В связи с этим предсказание поверхностного натяжения точно не идентифицируемых по составу нефтяных фракций представляет особый интерес для нефтехимии и нефтяной промышленности.

Свойства отдельной нефтяной смеси могут быть оценены исходя из свойств чистых углеводородов с помощью так называемого приближения «псевдосостава», которое прежде уже успешно применялось для расчета таких термодинамических и физических величин как энтропия, теплоемкость, вязкость и теплота парообразования. Согласно Дауберту, отдельная фракция сырой (неочищенной) нефти может быть представлена тремя псевдокомпонентами: парафинами, нафтенами и ароматическими соединениями, которые в сумме имеют тот же молекулярный вес, что и реальная фракция нефти. Процентное содержание каждого псевдокомпонента оценивалось с помощью эмпирических уравнений, для решения которых необходимы только сведения о температурах кипения и плотности отдельной нефтяной фракции.

Применение уравнения Батлера требует знания числовых значений величины поверхностного натяжения чистых компонентов, площадей поверхности, а также значений коэффициентов активности. Для расчета коэффициентов активности каждого компонента использовался модифицированный метод UNIQUAC. Поверхностное натяжение каждой нефтяной фракции, рассматриваемой как смесь трех псевдокомпонентов, было рассчитано при четырех различных температурах. Этот метод, сочетающий в себе уравнение Батлера и модель UNIQUAC, способен с удовлетворительной точностью учитывать температурную зависимость поверхностного натяжения нефтяных фракций и дает хорошие результаты, особенно для низко и умеренно кипящих нефтяных

фракций. Отклонение рассчитанных значений поверхностного натяжения фракций сырой нефти от экспериментальных значений составляет около 7%.



Е.В. Ожимкова

## ЭКСТРАКЦИЯ ИММУНОСТИМУЛИРУЮЩИХ ПОЛИСАХАРИДОВ ИЗ КОРНЕЙ *Valeriana officinalis L*

Руководитель А.И. Сидоров

Тверской государственный технический университет  
Кафедра биотехнологии и химии

В настоящее время интерес к полисахаридам существенно возрос. Если ранее полисахариды в основном применялись в качестве вспомогательных веществ в производстве различных лекарственных форм в качестве формообразователей, загустителей и стабилизаторов, диспергирующих агентов, наполнителей, то в последние годы их в большей степени рассматривают как биологически активные вещества. Обнаружены антигипоксические, противовоспалительные, противоопухолевые, противовирусные, противомикробные, сорбционные, антиатеросклеротические свойства растительных полисахаридов. При этом особого внимания заслуживают данные об их иммуностимулирующем действии [1].

Из зарегистрированных лекарственных и лечебно-профилактических средств, действующим началом которых являются полисахариды, 18% приходится на лекарственное растительное сырье, 17% – на лекарственные препараты, 65% – на биологически активные добавки к пище.

Представленная работа посвящена выделению и идентификации водорастворимых полисахаридов из корней *Valeriana officinalis L.*, обладающих иммуностимулирующей активностью [2]. Первый этап исследования – получение медицинской настойки корней валерианы традиционным настаиванием, используя ультразвуковую экстракцию. Доказана значительная интенсификация процесса при ультразвуковой обработке. На следующем этапе проведена экстракция полисахаридов из сырья, оставшегося после первого этапа.

Для идентификации исследуемых полисахаридов использован метод ИК спектроскопии.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Michaelsen T.E., Gilje A., Samuelsen A.B. et al. // Scand J. Immunol. 2000. V. 52, N 5. P.483-490.
2. Hensel A., Schmidgall J., Kreis W. // Pharmaceutica Acta Helvetice. 1998. V.73. P.37–43.

Ю.М. Павлова, А.А. Савельева, Д.Ю. Нилов, П.В. Корольков  
 ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ И АДДИТИВНЫЕ СХЕМЫ  
 В КОРРЕЛЯЦИЯХ «СТРУКТУРА – СВОЙСТВО»

Руководитель В.М. Смоляков  
 Тверской государственный университет  
 Кафедра физической химии

Топологические индексы (ТИ) – инварианты молекулярного графа (МГ) – удобное средство изображения молекул. Для построения корреляционных зависимостей «структура – свойство алкана» нами использованы ТИ и аддитивные схемы:

индекс Х. Хосойя

$$Z = \sum_k P(G, K), \quad (1)$$

способ построения которого основан на матрице смежности.  $Z$  определяется как суммарное число способов, при помощи которых в графе  $G$  можно выбрать  $k$  ребер, не имеющих попарно общих концов;

индекс Рандича и индексы  ${}^2\chi$  и  ${}^3\chi$ , связанные с числами  $n_{ijm}$  и  $n_{ijmk}$

$${}^1\chi = \sum_{i,j=1; i \leq j} (v_i v_j)^{-\frac{1}{2}} \quad (2), \quad {}^2\chi = \sum_{j=2}^4 \sum_{i,m=1; j \leq m} (v_i v_j v_m)^{-\frac{1}{2}} \quad (3) \quad {}^3\chi = \sum_{j,m=2}^4 \sum_{i,k=1; j \leq k} (v_i v_j v_m v_k)^{-\frac{1}{2}}, \quad (4)$$

где  $v_i \cdot v_j$  – произведение степеней вершин, инцидентных данному ребру в МГ алкана;  $v_i \cdot v_j \cdot v_m$  – произведение степеней вершин, имеющих общим концом вершину  $v_j$  в МГ;  $v_i \cdot v_j \cdot v_m \cdot v_k$  – произведение степеней вершин, имеющих общим концом ребро  $e_{jm}$  в МГ алкана.

Проведена аппроксимация  $\Delta_f H_{298K}^\circ, S_{298}^\circ$  и других свойств алканов как функции нескольких переменных. Показано, что для аппроксимации свойств алканов с использованием ТИ и функций вида  $\Delta_f H_{298K, газ}^\circ = a + bn + c(ТИ)$  и др. следует подбирать для каждого свойства  $P$  алканов свой индекс и свою функцию. Для сравнения проведены расчёты  $\Delta_f H_{газ}^0$  и  $S_f^\circ$  алканов (с учетом этана) по 9-константной схеме, имеющей строгую теоретическую основу

$$P_{C_{10}H_{2n+2}} = n_0 p_0 + n_1 p_1 + n_2 p_2 + n_3 p_3 + n_4 p_4 + n_5 p_5 + n_6 p_6 + n_7 p_7 + n_8 p_8, \quad (5)$$

где  $p_0, p_1, p_2, \dots, p_8$  – эмпирические параметры, а  $n_0, n_1, n_2, \dots, n_8$  – их числа. Схема учитывает взаимное влияние атомов в явном виде: пар и троек атомов через один атом углерода; пар атомов, троек атомов, четверок и пятерок атомов через два атома углерода в цепи молекулы алкана.

В.С. Пакшвер, Э.Р. Мурсалов

## ПОЛУЧЕНИЕ АВ-СОПОЛИМЕРА В УСЛОВИЯХ «ИДЕАЛЬНОЙ» СОПОЛИМЕРИЗАЦИИ: ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ МОНОМЕРОВ И АДСОРБЦИИ НА ПОВЕРХНОСТИ

Руководитель Н.Ю. Старовойтова

Тверской государственной технической университет  
Кафедра технологии полимерных материалов

Сополимеризация как метод получения полимеров с разными физико-химическими характеристиками, зависящими от распределения звеньев разного типа по цепи, хорошо известна и широко используется в химии ВМС. В зависимости от поставленной задачи для получения сополимера можно организовать радикальную или ионную полимеризацию, а также поликонденсацию; проводить ее в блоке, растворе, эмульсии или суспензии и получать сополимеры как со случайным (статистические сополимеры), так и с регулярным (блоксополимеры) строением.

В данной работе методом компьютерного моделирования проводится изучение «идеальной» сополимеризации вблизи плоской поверхности, протекающей в условиях избирательной адсорбции мономеров и в отсутствие адсорбции. Для моделирования использовался метод Монте–Карло на решетке. Полимерная цепь представлена моделью флуктуирующих связей. Взаимодействие мономеров и мономерных звеньев соответствует условиям термодинамически «хорошего» растворителя. В случае когда моделировалась избирательная адсорбция, мономеры *A*-типа адсорбировались на поверхности с постоянной энергией адсорбции, в то время как мономеры *B* не адсорбировались на поверхности.

Результаты расчетов показали, что в случае отсутствия адсорбции мономеров соотношение числа *A*- и *B*-мономерных звеньев в полученном сополимере соответствует концентрациям мономеров в растворе; распределение звеньев по цепи соответствует альтернирующему типу. В случае когда моделируется избирательная адсорбция, зависимость состав – концентрация становится более сложной, а тип полученного сополимера соответствует случайно-блочному.

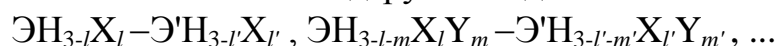
Д.Р. Папулова

СХЕМЫ РАСЧЕТА СВОЙСТВ ЗАМЕЩЕННЫХ ЭТАНА  
И ЕГО АНАЛОГОВ

Руководитель М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Обсуждаются схемы расчета физико-химических свойств ( $P$ ) замещенных этана и его аналогов по подгруппе вида



( $\text{Э}, \text{Э}' = \text{C}, \text{Si}, \text{Ge}, \dots$ ; а  $\text{X}, \text{Y}, \dots = \text{D}, \text{T}, \text{F}, \text{Cl}, \dots, \text{CH}_3, \dots$ ). Объекты разбиты на две группы: 1) замещенные с одинаковыми скелетными атомами ( $\text{Э} = \text{Э}'$ ) и 2) замещенные с разными скелетными атомами ( $\text{Э} \neq \text{Э}'$ ).

При учете парных взаимодействий атомов (пренебрегая заторможенностью внутреннего вращения) для X-замещенных первой и второй групп соответственно находим [1-3]:

$$P^{ll'} = \lambda_0 + \lambda_1(l+l') + \lambda_2(l^2+l'^2) + \lambda_3(ll') \quad (l, l' = 0, 1, 2, 3; l \leq l'), \quad (1)$$

$$P^{ll'} = \lambda_0^\times + \lambda_1^\times l + \lambda_1' l' + \lambda_2^\times l^2 + \lambda_2' l'^2 + \lambda_3^\times(ll') \quad (l, l' = 0, 1, 2, 3). \quad (2)$$

Здесь  $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_0^\times, \lambda_1^\times, \lambda_1', \dots$  – параметры, выражающиеся через валентные и невалентные взаимодействия. Параметры  $\lambda_2, \lambda_2^\times, \lambda_2'$  исчезают, если выполняется допущение о среднем арифметическом для невалентных взаимодействий через один;  $\lambda_3 = \lambda_3^\times = 0$ , если такое допущение имеет место для невалентных взаимодействий через два. При введении различий между *транс*- и *гош*-взаимодействиями появляются поправки на поворотную изомерию. При  $\text{Э} = \text{Э}'$  формула (2) переходит в формулу (1).

Формулы (1) и (2) распространены на XY-, XYZ-, ... замещенные. Установлены теоретико-числовые закономерности в параметрах схем. Оценена предсказательная способность теории.

Проведены численные расчеты. Сделаны предсказания. Построены диаграммы «Свойство – степень замещения», позволяющие графическим путем получать недостающие значения о свойствах.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 04-03-96703р 2004 Центр-а).*

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. Расчетные методы в атом-атомном представлении. Тверь, 2002.
2. Салтыкова М.Н., Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г. и др. // Свойства веществ и строение молекул. Тверь, 1998. С. 14-19.
3. Vinogradova M.G., Papulova D.R., Smolaykov V.M., Papulov Yu.G. // J. Phys. Chem. (Russ.) 2005. V. 79. Suppl. 1. P. 8-13.

УДК 547.565.2 : 577.158

Першина О.Н.

## ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРОЦЕССА ИММОБИЛИЗАЦИИ ПЕРОКСИДАЗЫ КОРНЯ ХРЕНА НА КИНЕТИКУ ОКИСЛЕНИЯ ФЕНОЛОВ

Руководитель: Э.М. Сульман, В.Г. Матвеева

Тверской государственный технический университет  
Кафедра биотехнологии и химии

В последние годы значительно увеличилось использование ферментов как промышленных катализаторов. Однако практическое использование ферментов часто требует работы при денатурирующих условиях (например, при повышенной температуре) для увеличения производительности, перемещения равновесия реакции к желательным продуктам и увеличения субстратной растворимости. Стабилизация фермента иммобилизацией на носителе обрела большое значение в прикладном биокатализе. Иммобилизация – один из наиболее распространенных подходов к стабилизации фермента, и более 10 000 статей и патентов были изданы на эту тему начиная с начала 1960-х годов.

Иммобилизованные препараты пероксидазы применяются в очистных сооружениях, поскольку фермент способен катализировать окисление азотсодержащих, ароматических, гетероциклических, хлор-органических и других веществ, принадлежащих к числу наиболее опасных загрязнителей окружающей среды.

В ходе проведенных экспериментов были применены различные сшивающие агенты, такие, как глутаровый альдегид и карбодиимид, в качестве неорганического носителя использовалась окись алюминия, предварительно обработанная щелочью и полистиролсульфоокислотой.

Изучена кинетика окисления фенолов, рассчитаны  $K_M$  и  $W_{max}$ , определено влияние концентрации фенола и катализатора на процесс окисления фенольных соединений. Поскольку из литературных данных известно, что пероксидаза инактивируется избытком перекиси водорода, были проведены эксперименты для определения оптимальной концентрации прикапываемой перекиси. Выявлен оптимальный способ иммобилизации фермента, применение которого приводит к высокой степени конверсии фенольного субстрата.

УДК: 538.245

К.С. Петухов

## ОСОБЕННОСТИ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ R-Fe-B

Руководитель К.П. Скоков

Тверской государственный университет  
Кафедра магнетизма

Соединения типа R-Fe-B являются перспективными материалами для применения в постоянных магнитах, поэтому изучение их магнитных свойств и структуры является актуальной задачей физики магнитных материалов.

Для прецизионного измерения магнитных свойств исходных сплавов и сплавов с атомами внедрения требуются монокристаллические образцы. В связи с этим в работе была поставлена следующая задача – определить оптимальный режим получения монокристаллических образцов соединения  $R_2Fe_{14}B$  массами не менее 10 мг, пригодных для магнитных измерений намагниченности и вращательного момента.

В качестве объектов исследования были выбраны сплавы  $Y_2Fe_{14}B$ ,  $Nd_2Fe_{14}B$ ,  $Y_2Fe_{14}Co_2B$ ,  $Nd_2Fe_{14}Co_2B$ .

Из анализа литературы [1;2] следует, что при отжиге сплавов типа Nd-Fe-B, подвергнутых HDDR-процессу, наблюдается «аномальный» рост зерен. В связи с этим в настоящей работе для получения монокристаллических образцов использовалась технология HDDR.

Полученные образцы внешне представляли собой пластины, которые по-разному ориентировались в поле постоянного магнита: параллельно или перпендикулярно их базисной плоскости.

Рентгеноструктурный анализ обнаружил два типа структур: на одних кристаллах по лауэграммам однозначно идентифицируется тетрагональная структура, соответствующая соединению  $R_2Fe_{14}B$ , однако часть кристаллов имеет пространственную симметрию третьего порядка.

На полученных монокристаллах были проведены наблюдения микроструктуры и доменной структуры образцов на поляризационном металлографическом микроскопе «НЕОРНОТ-30» на произвольно ориентированной поверхности методом полярного эффекта Керра.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Harris I.R., Williams A.J. // Z. Metallk. 2002. N9. P.10.
2. Гольцов В.А., Рыбалка С.Б., Волков А.Ф., Путилов Ю.Г., Дидусь В.А. // Физика металлов и металловедение. 2000 V.89. N.4.

УДК: (633.16+631.416) (470.31)

Ю.М. Поленов

## ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ МИКРОЭЛЕМЕНТОВ И МАГНИТНОГО ПОЛЯ В ТЕХНОЛОГИЯХ ВОЗДЕЛЫВАНИЯ ЯЧМЕНЯ

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия  
Кафедра растениеводства

Получение высоких урожаев дешевого фуражного зерна хорошего качества является актуальной проблемой сельского хозяйства Центрального региона России. В ее решении большую роль играют оптимальное программирование урожайности и применение наиболее совершенных технологий возделывания.

С целью изучения особенностей формирования запрограммированных урожаев ячменя ярового сорта Гонар при разных технологиях возделывания, в том числе с применением микроэлементов и обработкой семян в магнитном поле, в 2005 году был проведен двухфакторный полевой опыт на опытном поле Тверской ГСХА. В опыте изучались два фактора: А – фон минерального питания, удобрения вносили под программируемый урожай: I фон – 2 (без удобрений), II фон – 3, III фон – 4, IV фон – 5 т/га; В – технологии: 1 – экологически безопасная (контроль); 2 – интенсивная; 3 – интенсивная с обработкой семян микроэлементами (цинк и бор); 4 – альтернативная; 5 – интенсивная с обработкой семян в магнитном поле (0,1 тл).

В результате исследований выявили, что внесение удобрений способствует существенному росту урожайности при всех технологиях возделывания ячменя соответственно на II, III и IV фонах – на 0,55; 0,87 и 1,34 т/га или на 47,8; 75,6 и 116,5%.

Более эффективным оказалась технология с применением обработки семян в магнитном поле. Так, на II и III фонах минерального питания получены прибавки урожая к контролю соответственно 0,79 и 0,23 т/га или 66,9 и 11,8%. На IV фоне наибольшую прибавку урожая обеспечила технология с применением микроэлементов, она составила 1,3 т/га или 82,8%.

Таким образом, в условиях 2005 года применение микроэлементов и обработка семян в магнитном поле способствовали существенному росту урожайности ячменя. Исследования продолжаются.

ИЗЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН СВЕРХСВЕТОВЫМ 2-П  
ИМПУЛЬСОМ С ГАУССОВЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ АМПЛИТУДЫ  
ВОЛНЫ

Руководитель С.В. Афанасьев

Тверской государственной университет  
Кафедра общей физики.

Решена задача о нахождении характеристик черенковского излучения сверхсветового  $2\pi$ -импульса с гауссовым распределением амплитуды волны. Показано, что распределение энергии излучения по частоте и лепестковая структура диаграммы направленности находятся в согласии с экспериментальными измерениями в миллиметровом диапазоне.

Исследование эффекта Вавилова–Черенкова от нелинейной поляризации удобно провести при генерации разностной частоты, поскольку в этом случае почти для всех нелинейных кристаллов волна нелинейной поляризации распространяется со «сверхсветовой» скоростью (ССВ), показатель преломления на разностной частоте (радиочастоты и дальняя ИК область) больше, чем на частотах возбуждающих излучений. Поэтому распространение коротких и сверхкоротких оптических импульсов в таких средах будет сопровождаться излучением волн в данные диапазоны. Таким образом, распространяющийся импульс будет терять энергию[1].

Интересные возможности по обнаружению излучения Вавилова–Черенкова возникают при распространении, например, в усиливающих средах стационарных волн (солитонов) со скоростью, большей  $c/n$ . Такая скорость достигается за счет взаимодействия импульса с инвертированной средой, в результате которого происходит «перекачивание», или переформирование, движущегося импульса со смещением по направлению движения. Подробно этот механизм рассматривается в [2]. Распространение таких импульсов должно сопровождаться сверхсветовым излучением (ССИ) дополнительных электромагнитных волн, механизм испускания которых во многом напоминает излучение Вавилова–Черенкова.

Полученные результаты о распределении энергии по гармоникам и лепестковая структура диаграммы интенсивности излучения находятся в хорошем согласии с экспериментальными измерениями в миллиметровом диапазоне.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ораевский А.Н. // УФН. 1998. Т.168, №12. С.1310.
2. Багдасарян Д.А., Макарян А.О., Погосян П.С. // Письма в ЖЭТФ. 1983. Т.37, вып.10. С.498-500.

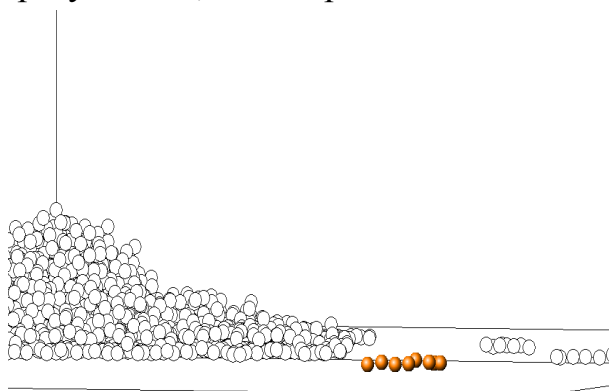


## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСТЕКАНИЯ НАНОКАПЕЛЬ, СОСТОЯЩИХ ИЗ МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

Руководитель В.М. Самсонов

Тверской государственный университет  
Кафедра теоретической физики

Проведено сравнительное молекулярно-динамическое исследование процесса растекания нанокapель простого флюида и полимерных жидкостей. Полимерные цепи воспроизводились цепочками из нескольких взаимодействующих центров. Каждое звено такой цепочки можно интерпретировать как сегмент Куна реальной полимерной цепи. Интерес к этой задаче обуславливается тем, что еще в 1985 году П. де Жен<sup>\*</sup> сделал заключение о том, что простые жидкости растекаются по механизму «расстилающегося ковра», тогда как полимерные жидкости растекаются вследствие скольжения молекул вдоль подложки. Выяснение адекватности этого вывода о растекании наноразмерных capель и характера скольжения цепей являлось целью данного исследования. В результате проведенных экспериментов с использованием метода меченых атомов были получены результаты, подтверждающие в целом выводы П. де Жена: простой флюид



растекается по механизму «расстилающегося ковра», а полимерные жидкости – по механизму особого рептационного скольжения. Ранее понятие о рептациях, т.е. о движении цепей, подобном движению гусеницы или червяка, использовалось в макроскопической физике полимеров. На рисунке представлена одна из конфигураций, отвечающая нанокapле, состоящей из октамеров.

Видно, что отдельные молекулы вследствие рептации вдоль подложки опережают движение линии трехфазного контакта.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 05-03-32198), а также Министерства образования и науки РФ (гранты № 52-850 и УР 05.01.390).*

<sup>\*</sup> de Gennes P.G. // Rev. Mod. Phys. 1985. V.57. P.827-863.

И.А. Рощина, В.М. Микин, Н.В. Бурачук

ВЛИЯНИЕ СВЕРХМАЛЫХ РАЗВЕДЕНИЙ РОТОВОЙ ЖИДКОСТИ  
НА ПОКАЗАТЕЛИ ИК СПЕКТРА ВОДНОГО КОМПОНЕНТА  
КУРЯЩИХ И НЕКУРЯЩИХ ЛЮДЕЙ

Руководитель А.В. Каргаполов

Тверская государственная медицинская академия  
Кафедра общей и биорганической химии

Данное исследование проводилось с целью выявить степень влияния сверхмалых разведений ротовой жидкости на показатели ИК спектра водного компонента курящих и некурящих людей.

Растворы ротовой жидкости в бидистиллированной воде готовили методом последовательного десятикратного разведения от  $10^{-1}$  до  $10^{-16}$ . Исследование проводили на программно-аппаратном комплексе «ИКАР» в диапазоне длин волн от 2,86 до 10,42 мкм ( $3500-960\text{см}^{-1}$ ). Спектральный диапазон определялся девятью дискретными полосовыми фильтрами. Во время анализа в кювету помещали 30 мкл исследуемого образца и проводили спектрофотометрию.

При проведении статистического анализа с помощью многомерного критерия Бартлетта, который сравнивает ковариационные матрицы, установили, что значимые отличия от эталона воды наблюдаются в следующих разведениях у курильщиков:  $10^{-15}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-6}$ ,  $10^{-5}$ ,  $10^{-2}$ ; у некурящих:  $10^{-10}$ ,  $10^{-4}$ ,  $10^{-3}$ .

При расчете расстояния Махаланобиса замечено, что максимальные значения этой величины у курильщиков наблюдаются при разведении  $10^{-16}$  – 69,8937, у некурящих –  $10^{-10}$  – 135,1049. Минимум у курящих наблюдается при  $10^{-9}$  – 13,5828, у некурящих –  $10^{-14}$  – 18,163. Амплитуда колебания между самым высоким и самым низким значениями составляет у курящих – 56,3109, у некурящих – 116,9419. Таким образом доказано, что изменения состояния ротовой жидкости у людей, употребляющих и не употребляющих табак, можно достоверно зафиксировать с помощью ИК спектроскопии и представленных математических методов.

Различия в степени влияния ротовой жидкости курящих и некурящих людей на показатели ИК спектра, по-видимому, связаны с особенностями биохимических и физико-химических факторов в системе слюна–вода.

Н.П. Русакова

КВАНТОВО–МЕХАНИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРОЕНИЯ  
И СВОЙСТВ ИЗОМЕРНЫХ РАДИКАЛОВ  $\text{H}_3\text{CS}^\bullet$ 

Руководители: Ю.Д. Орлов, В.В. Туровцев

Тверской государственный университет  
Кафедра общей физики

Для радикалов  $\text{H}_3\text{CS}^\bullet$  мыслимы четыре изомера:  $\text{H}_2\text{C}=\text{S}^\bullet$ ,  $\text{H}_2\text{S}=\text{CH}^\bullet$ ,  $\text{H}_3\text{C}-\text{S}^\bullet$ ,  $\text{H}_2\text{C}^\bullet-\text{SH}_2$ . Поэтому представляют интерес изучение возможности существования данных изомеров, их сравнительная энергетика, пути и возможности взаимных превращений.

В данной работе выполнены исследования особых точек поверхности потенциальной энергии (ППЭ) системы изомерных радикалов  $\text{H}_3\text{CS}^\bullet$ . Для этого использовалась процедура раздельного старта. Анализ электронной плотности радикалов, оптимизация геометрий и все последующие расчёты выполнены с ключом tight с помощью программы GAUSSIAN\* методом гибридного функционала плотности B3LYP в базисе 311++G(3d,3pd).

Расчёты показали, что для изомера  $\text{H}_2\text{S}=\text{C}^\bullet\text{H}$  не наблюдается минимума ППЭ, для других рассмотренных структур такие минимумы найдены. При этом метод раздельного старта выявил, что радикалы двух- ( $\text{H}_2\text{C}=\text{S}^\bullet\text{H}$ ) и четырёхвалентной серы ( $\text{H}_2\text{C}^\bullet-\text{SH}$ ) являются одним соединением, так как им соответствует один и тот же минимум ППЭ.

Таким образом, реально существуют два изомера  $\text{H}_3\text{C}-\text{S}^\bullet$  и  $\text{H}_2\text{CSH}^\bullet$  радикалов ( $\text{H}_3\text{CS}^\bullet$ ).

Изомеры радикалов ( $\text{H}_3\text{CS}$ )

\* Gaussian 98 (Revision A. 11), M.J. Frisch et al., Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2001.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМПЬЮТЕРНОГО  
ДЕНСИТОМЕТРИРОВАНИЯ ДЛЯ КОЛИЧЕСТВЕННОГО АНАЛИЗА  
ФОСФОЛИПИДОВ МЕТОДОМ ТСХ

Руководитель В.К. Макаров

Тверская государственная медицинская академия  
Кафедра инфекционных болезней с курсом эпидемиологии

Изучение фосфолипидного спектра лейкоцитарных мембран и плазмы крови имеет важное значение для диагностики, контроля и прогнозирования результатов лечения пациента. Наиболее часто для анализа фосфолипидного состава используется метод тонкослойной хроматографии (ТСХ). При этом окрашенные зоны либо подвергаются денситометрированию, либо механически извлекаются и анализируются с использованием различных физико-химических методов. Первый способ малодоступен, так как требует специального дорогостоящего оборудования, второй – трудоемкий и длительный. В последнее время в литературе появились сведения об использовании компьютерного денситометрирования (КД). Это позволяет значительно сократить материальные затраты и ускорить процесс анализа. Поэтому целью настоящей работы было сравнение эффективности ТСХ анализа фосфолипидов методом соскабливания и с применением КД.

ТСХ разделение фосфолипидов осуществляли по общеизвестным методикам. Хроматограммы подвергались компьютерному денситометрированию, далее те же хроматографические зоны механически извлекались и фотометрировались.

Для КД хроматограмм их оцифровывали с использованием планшетного сканера и обрабатывали с использованием программ “Tlc manager 31” и “Сорбфил”, а также программ “Хромоскан”, разработанную на кафедре неорганической и аналитической химии ТвГУ. В основе алгоритма работы этих программ лежит закон светоотражения Кубелки–Мунка. Сравнение результатов анализа хроматограмм, полученных фотометрированием, и КД с использованием различных программ показало, что результаты статистически достоверно не различаются.

Таким образом, метод компьютерного денситометрирования позволяет без потери точности анализа существенно сократить время, трудозатраты и повысить производительность труда.

УДК: (633.1:631.559) (470.31)

В.В. Сайко

## ВЛИЯНИЕ СОЛЕЙ, КОМПЛЕКСОНАТОВ МИКРОЭЛЕМЕНТОВ И ИХ КОМПЛЕКСОВ НА ФОРМИРОВАНИЕ УРОЖАЙНОСТИ ОЗИМОЙ ПШЕНИЦЫ

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра растениеводства

Актуальной проблемой сельского хозяйства является увеличение производства продовольственного зерна. В ее решении значительная роль принадлежит озимой пшенице. Важнейшим условием достижения заданного уровня урожаев является удовлетворение потребности растений в питательных веществах на каждом этапе формирования урожая, это достигается путем применения минеральных удобрений, а также микроэлементов в виде их солей и комплексонатов.

В 2004-2005 годах на опытном поле ТГСХА начаты исследования в полевом двухфакторном опыте в севообороте на кафедре растениеводства. Цель исследований – изучить особенности формирования запрограммированных урожаев озимой пшеницы при использовании микроудобрений для предпосевной обработки семян; выявить лучшие варианты технологии возделывания, обеспечивающие получение заданных уровней урожайности с высоким качеством зерна и низкой себестоимостью.

В опыте изучались два фактора: А – фон минерального питания, рассчитанный на урожайность – 2 (без удобрений), 3,4 и 5 т/га; Б – обработка семян – водой, раствором микроэлемента Zn, раствором микроэлемента В, комплексонатом Zn, комплексонатом Zn+В, комплексом микроэлементов Zn и Cu+В.

В результате исследований выявлено, что внесение удобрений увеличило урожайность озимой пшеницы в 2005 году на 6,7–10,9 ц/га или на 37,4-60,9%, но не обеспечило получение ее запрограммированных уровней.

Инкрустация семян микроэлементами наибольший эффект оказала на III фоне минерального питания. Так, при обработке семян раствором соли микроэлемента Zn получена прибавка урожая к контролю (обработка водой) 2,8 ц/га или 10,8% и при обработке семян комплексонатом микроэлемента Zn – 2,9 ц/га или 11,2%. Применение других микроэлементов, комплексонатов и комплексов не обеспечило получение достоверных прибавок урожаев.

Таким образом, в условиях 2004/2005 года наиболее эффективной была предпосевная обработка семян микроэлементом Zn в виде его солей или комплексонатов.

УДК : (635.21+631.8+631.44)(470.31)

Н.В. Самотаева

## ВЛИЯНИЕ УДОБРЕНИЙ НА ПРОДУКТИВНОСТЬ СОРТОВ КАРТОФЕЛЯ И КАЧЕСТВО ПРОДУКЦИИ НА ДЕРНОВО-ПОДЗОЛИСТЫХ ПОЧВАХ ВЕРХНЕВОЛЖЬЯ

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра растениеводства

Цель исследований – изучить влияние сорта и фона минерального питания на формирование запрограммированных урожаев картофеля и качество полученной продукции. Исследования проводились в 2005 году в двухфакторном полевом опыте. Почва участка – дерново-среднеподзолистая легкосуглинистая, хорошо окультурена с высоким содержанием  $P_2O_5$  и средним  $K_2O$ ,  $pH_{сол}$  – 6,22. В опыте изучали два фактора: А – уровни программируемой урожайности в 15 (без удобрений, контроль), 20, 25, 30, 35 и 40 т/га; В – сорта картофеля: Удача (раннеспелый), Луговской (среднеспелый) и Ласунак (среднепоздний). Площадь делянки 2-го порядка – 14 м<sup>2</sup>, повторность пятикратная, размещение вариантов – расщепленными делянками. Удобрения вносили в один прием – до посадки. Технология возделывания – интенсивная.

В результате исследований выявлено, что наибольшая урожайность по сорту Удача (40,1 т/га) получена в 4-м варианте ( $N_{123}P_{33}K_{182}$ ), что обеспечило прибавку к контролю 9,0 т/га (28,9 %), по сорту Луговской (33,2 т/га) – во 2-ом варианте ( $N_{51}P_0K_{95}$ ), прибавка к контролю 4,7 т/га (16,5 %). По сорту Ласунак также наилучшим оказался 4-й вариант, урожайность – 32,9 т/га, прибавка к контролю – 4,8 т/га (17,1 %). По всем сортам в контроле и на 2-4 фонах сформирован урожай выше запрограммированных уровней. Внесение повышенных доз удобрений на фонах 5 и 6 не обеспечило получение дополнительных прибавок урожая, но существенно повлияло на улучшение качества урожая. Так, содержание крахмала в клубнях на фонах 5 и 6 минерального питания у сорта Удача было на 0,82-1,18 %, у сорта Луговской – на 1,84-3,48 %, у сорта Ласунак на 6 фоне – на 2,15 % выше контрольного варианта. Внесение удобрений увеличивало содержание белка в клубнях только у сорта Удача, в большей мере (на 2,76 %) на 5-ом фоне. Наибольшая окупаемость 1 кг NPK по сорту Удача получена на 4 фоне (26,6 кг клубней на 1 кг NPK), по сортам Луговской и Ласунак на 2 фоне (32,2 и 23,3 кг).

Таким образом, в условиях 2005 года наиболее продуктивным оказался сорт Удача, максимальная урожайность составила 40,1 т/га и была выше, чем у сорта Луговской на 6,9 т/га (20,8 %) и сорта Ласунак на 7,2 т/га (21,9%). Потенциальное плодородие хорошо окультуренных почв Тверской области позволяет получать 28,1-31,1 т клубней с гектара. Более отзывчивым на внесение удобрений является сорт Удача.

А.Н. Семенов

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ  
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ ИОНОВ КАЛЬЦИЯ И МАГНИЯ  
С НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫМ И НЕФРАКЦИОНИРОВАННЫМ  
ГЕПАРИНОМ

Руководители: М.А. Феофанова, И.П. Горелов

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Методом рН-потенциометрического титрования с применением метода математического моделирования изучены кислотно-основные и комплексообразующие свойства логипарина (разновидности низкомолекулярного (НМГ) гепарина). Результаты сопоставлены с данными для нефракционированного (высокомолекулярного) гепарина (ВМГ)\*. За концентрацию гепарина принята мольная концентрация его мономерного звена.

Идентифицированы протонированная форма логипарина  $HL^{3-}$  и наиболее значимые комплексные формы в системах  $M^{2+} - НМГ$  ( $M^{2+} = Ca^{2+}, Mg^{2+}$ ).

Показано, что процессы протонирования НМГ и ВМГ аналогичны, а рассчитанные оценки констант совпадают в пределах ошибки эксперимента. Комплексы же НМГ с кальцием и магнием по степени устойчивости и влиянию на уменьшение равновесной концентрации свободного иона кальция уступают аналогичным комплексным формам с участием ВМГ.

*Расчетная часть выполнена при поддержке канд. хим. наук Л.С. Николаевой канд. хим. наук М.Н. Мамонтова (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, химический факультет).*

---

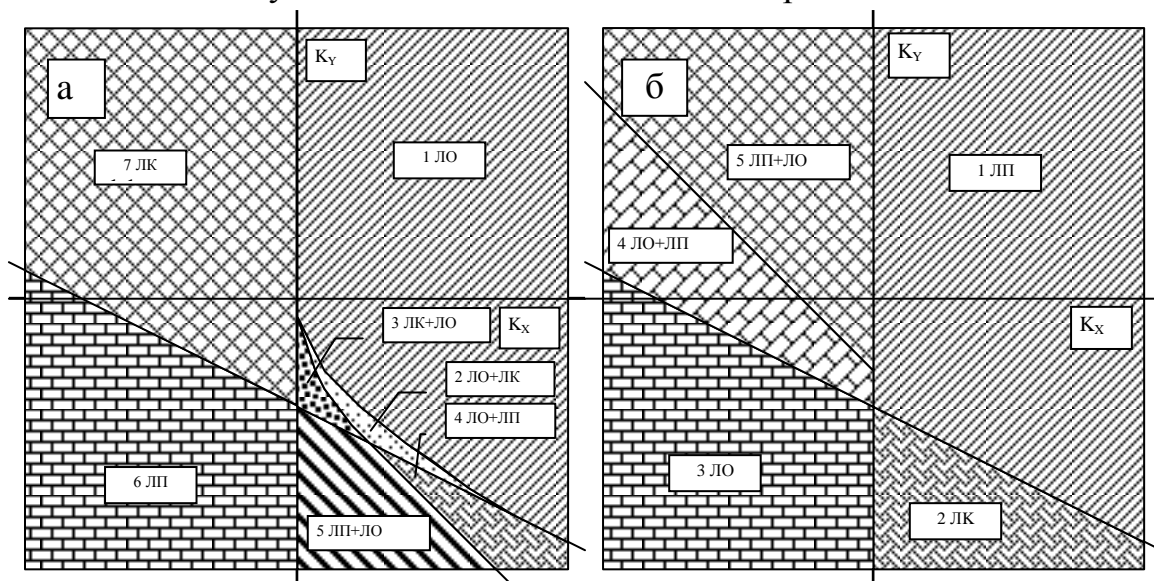
\*Карпухин Л.Е., Феофанова М.А., Николаева Л.С., Мамонтов М.Н., Добрынина Н.А. Комплексообразование ионов кальция и магния с гепарином // ЖНХ. 2006 (в печати).

## АНАЛИЗ МАГНИТОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ АНИЗОТРОПИИ ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ МАГНЕТИКОВ

Руководитель Ю.Г. Пастушенков

Тверской государственный университет  
Кафедра магнетизма

В большинстве работ описание кривых намагничивания для различных типов магнитокристаллической анизотропии (МКА) проводится без учета анизотропии в базисной плоскости и только с учетом направлений легкого намагничивания\*. В данной работе для адекватного описания кривых намагничивания исследована функция энергии МКА  $E_A(\theta, \varphi)$  гексагонального магнетика с учетом четырех констант анизотропии на экстремумы. Кроме направлений легкого намагничивания найдены трудные направления, вдоль которых реализуется максимум энергии МКА. Показано, что в гексагональных магнетиках возможно существование пяти типов МКА: лёгкая ось (ЛО), лёгкая плоскость (ЛП), конус лёгких осей (ЛК), а также сосуществование лёгкой оси и лёгкой плоскости (ЛО+ЛП), лёгкой оси и конуса лёгких осей (ЛО+ЛК). На рисунках представлены магнитные фазовые диаграммы гексагонального магнетика при  $K_3 - |K_4| > 0$  (а) и при  $K_3 - |K4| < 0$  (б) в координатах  $K_x = K_1 / (K_3 - |K_4|)$ ,  $K_y = K_2 / (K_3 - |K_4|)$ . Проведена систематизация кривых намагничивания с учетом найденных типов анизотропии.





УДК: 678.027.3-036.742

С.Н. Смоляков

## ПРОМЫШЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ В ПРОИЗВОДСТВЕ ГРАНУЛЯТА ИЗ ВТОРИЧНОГО ПОЛИОЛЕФИНОВОГО СЫРЬЯ

Руководитель В.А. Никифоров

Тверской государственной технической университет  
Кафедра технологии полимерных материалов

Провели промышленный эксперимент на комплектной технологической линии переработки полимерных отходов, на промплощадке ОАО «ИСКОЖ – Тверь», на базе предприятия ООО «Межрегиональная полимерная группа Олефин».

Основное технологическое оборудование – экструдер ZMG -120 (диаметр шнека 120 мм, длина шнека 3750 мм, рабочая частота вращения шнека 50-70 об\мин, число термостатированных зон и зон охлаждения экструдера 3, марка стали шнека 4140 ROKWELL, азотированная хромированная).

Исследовали зависимости качества гранулированного вторичного полиэтилена от параметров проведения процесса экструзии, состава исходного сырья – отходы полиэтиленовой пленки (вышедшие из употребления упаковочные пленочные изделия для промышленных изделий, мешки, пакеты, полотнища пленки для укрытия плодоовощной продукции) по ТУ 63-473-32-90 «Сырье полимерное вторичное необработанное», а также влияние изменения режима автоматизации и оптимизации отдельных технологических стадий производства на марочность, показатели качества и возможные отклонения от них (по ТУ 63-178-74-88) с учетом производительности и возможностей ее роста для всей производственной линии в целом.

Цель эксперимента – выявление закономерностей изменения характеристик готовой продукции от вышеперечисленных факторов для усовершенствования технологического процесса переработки полимерных отходов, повышения эффективности производства (повышение экономической выгоды за счет стремления к безотходности на фоне решения экологических проблем), качества получаемой продукции посредством построения графиков и кривых зависимостей, оптимизации и автоматизации производства, на основе оборудования ОАО «ЭКОПЛАСТПРОМ», перевезенного из г. Одинцово, Московской области.

ФАЗОВОЕ РАВНОВЕСИЕ В ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМАХ,  
ПРЕДСТАВЛЯЮЩИХ ИНТЕРЕС ДЛЯ НЕФТЕХИМИИ

Руководитель Е.Ф. Новиков

Тверской государственной университет  
Кафедра общей физики

Использование эфиров как топливных присадок возрастает. В настоящее время в качестве таковых широко используются два класса кислородсо-держающих соединений: спирты и эфиры. Они являются основными окислителями жидкого топлива, с помощью которых удается повысить октановое число и значительно снизить содержание СО в выхлопных газах. Многокомпонентное равновесие окислительных эфиров и спиртовых смесей имеет важное.

В данной работе рассматривается фазовое равновесие двух-трехкомпонентных смесей: ТАМЕ + н-гептан + метанол и МТВЕ + н-гептан + 1-гексен при 313 К и атмосферном давлении. На основе найденных в литературе экспериментальных данных по равновесию жидкость – жидкость в исследуемых многокомпонентных смесях был проведен расчет коэффициентов активности составляющих компонентов смесей с помощью модели UNIFAC, построенной на квазихимическом уравнении UNIQUAC. Уравнение UNIQUAC хорошо представляет равновесие как пар–жидкость, так и жидкость–жидкость в многокомпонентных системах, содержащих различные неэлектролиты, например углеводороды, кетоны, сложные эфиры, воду, амины, спирты и т.д.

Основная идея метода UNIFAC состоит в том, что для расчета фазового равновесия изучаемых систем, по которым нет или имеются фрагментарные экспериментальные данные, используются уже имеющиеся данные по коэффициентам активности или фазовому равновесию в других смесях, которые не содержат тех же молекул, но содержат те же самые функциональные группы. Молекулярный коэффициент активности разделяется на две части. Одна часть характеризует комбинаторный вклад, обусловленный различиями в размере и форме молекул, а другая часть – остаточный вклад – учитывает молекулярные взаимодействия. В основе метода UNIFAC лежит уравнение UNIQUAC. В частности, в модели UNIFAC для комбинаторной составляющей коэффициента активности используется соотношение Гуттенгейма–Ставермана из модели UNIQUAC.

Полученные путем расчета коэффициенты активности компонентов рассматриваемых смесей сравнивались с найденными в литературе экспериментальными значениями. Было обнаружено удовлетворительное согласие вычисленных и экспериментальных данных.

В.М. Спиридонова, Е.В. Егорова

## О ПРОЦЕССЕ САМООРГАНИЗАЦИИ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ ЦИСТЕИНА

Руководители: П.М. Пахомов, М.М. Овчинников  
Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Обнаружена новая гелеобразующая система на основе водных растворов цистеина и ионов серебра. Важной особенностью этой системы является протекание в ней процессов самоорганизации и гелеобразования при низком содержании растворенных веществ (~0,02%), а гидрогель при этом обладает тиксотропными и биоактивными свойствами.

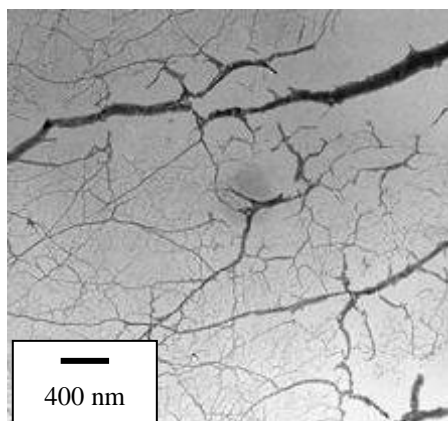


Рис. 1. Микрофотография гидрогеля, полученная методом просвечивающей электронной микроскопии

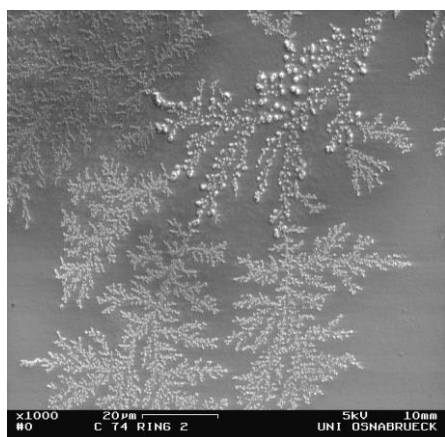


Рис. 2 Микрофотография гидрогеля, полученная методом сканирующей электронной микроскопии

Процессы самоорганизации в водном растворе изучались с помощью методов вискозиметрии, оптической спектроскопии, динамического светорассеяния, электро-спрея и электронной микроскопии в зависимости от концентрации и соотношения исходных компонентов, величины рН, температуры и времени стояния раствора. Путем комплексного анализа системы установлено, что процесс гелеобразования последовательно протекает на трех структурных уровнях:

- 1 – формирование зародышевых кластеров размером 1,5-5,0 нм, представляющих димеры, тримеры и т.д., построенные из молекул меркаптида серебра;
- 2 – формирование и рост фрактальных кластеров размером от 30 нм и выше;
- 3 – коалесценция фрактальных кластеров и образование трехмерной пространственной сетки или перколяционного кластера.

Изучаемый гидрогель является пространственно разветвленным супрамолекулярным полимером (рис.1), а фрактальный характер самоорганизации малых молекул в разбавленном растворе подтверждает рис.2. Исследования нового гидрогеля продолжают как с фундаментальной точки зрения, так и с практической.

*Работа выполнена при поддержке службы DAAD (Германия).*

УДК: 541.123.21.543.422.4

А.Н. Стренакова, Я.М. Халяпина

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МИКРОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА СОСТОЯНИЕ ВОДНОЙ ОСНОВЫ РАСТВОРОВ ХЛОРИДА НАТРИЯ

Руководитель А.В. Каргаполов

Тверская государственная медицинская академия

Кафедра общей и биорганической химии

Микроволновое излучение, частота которого составляет 2,5 ГГц, проникая в воду или в водный раствор, притягивается и поглощается молекулами воды, в результате чего они начинают быстро колебаться, в результате этого генерируется тепло, что приводит к структурно-информационным изменениям свойств воды.

Целью данной работы является установление того, как зависит влияние микроволнового излучения на водную основу растворов хлорида натрия от концентрации.

Для исследования использовался аппаратно-программный комплекс ИКАР, представляющий собой одноканальный ИК спектроанализатор, работающий в диапазоне ИК излучения от 4000 до 800 см<sup>-1</sup>, поделенном на узкие зоны полосовыми фильтрами. Проводился анализ водных растворов хлорида натрия с концентрациями от 10<sup>-1</sup> до 10<sup>-10</sup> моль/л, которые готовились путем последовательного десятикратного разбавления исходного 1 М раствора. Приготовленные пробы подвергались облучению в микроволновой печи в течение 1 мин при выходной мощности 100 Вт. В процессе анализа в кювету из KRS материала аппаратной части системы помещали 20 мкл исследуемого раствора и в течение 30 с проводили измерение. Полученный цифровой материал обрабатывался с помощью математического программирования пакета MATLAB-5,2.

В процессе исследований состояние водной основы в присутствии различного количества хлорида натрия характеризовали с помощью критериев Махаланобиса и Бартлетта. Анализ обработанных результатов эксперимента показал, что максимум расчетного значения критерия Бартлетта при критическом значении (61,6562) наблюдается при концентрации хлорида натрия 10<sup>-1</sup> моль/л – это максимум (66,3053) и минимум (43,6172) – при концентрации хлорида натрия 10<sup>-7</sup> моль/л.

Значения расстояний Махаланобиса убывают практически линейно с уменьшением концентрации хлорида натрия в растворах. Максимум значения (547,706) наблюдается в децимолярном растворе и минимум – в растворе последней степени разведения (39,2261).

Таким образом, установлено, что микроволновое излучение мощностью в 100 Вт оказывает влияние на структуру водной основы растворов хлорида натрия в области малых концентраций.

## ИССЛЕДОВАНИЕ АКТИВНОСТИ ПЕРОКСИДАЗЫ, ИММОБИЛИЗОВАННОЙ НА ИОНООБМЕННЫХ СМОЛАХ

Руководители: Э.М. Сульман, А.И.Сидоров  
Тверской государственной технической университет  
Кафедра биотехнологии и химии

В последние годы значительно увеличилось использование ферментов в качестве промышленных катализаторов. При создании каталитических систем многократного использования на основе ферментов одна из главных проблем – выбор твердого носителя для иммобилизации фермента, который обеспечит его наилучшую стабилизацию. Применение в качестве носителя ионообменной смолы, модифицированной хитозаном, карбодиимидом или глутаровым альдегидом, является достаточно эффективным решением этой проблемы. Такая система может быть успешно применена в реакциях окисления в присутствии перекиси водорода, катализируемых пероксидазой.

В процессе работы были исследованы различные каталитические системы: в качестве носителя использовали катионит с активной группой  $\text{SO}_3\text{H}$  и анионит с активной винилпиридиновой группой на основе стиролдивинилбензола. Для модификации ионообменной смолы применялись альгинат натрия, хитозан, глутаровый альдегид и карбодиимид. Растительным сырьем для получения экстракта, содержащего фермент пероксидазы, был корень хрена. Также были изучены 2 метода нанесения хитозана и сшивающего агента на ионообменную смолу – последовательное нанесение и нанесение смеси компонентов. Эксперименты показали, что последовательное нанесение хитозана и карбодиимида на ионообменную смолу обеспечивает наиболее прочную и стабильную сшивку пероксидазы с носителем. В ходе экспериментов была доказана более надежная стабилизация фермента на носителе карбодиимидом, чем глутаровым альдегидом. Наиболее эффективной является каталитическая система с относительным содержанием хитозана на катионите – 1% и карбодиимида – 4,5%. Активность полученного катализатора остается практически постоянной при многократном применении в реакции окисления фенолов (пирокатехина, фенола и др.).

Полученная каталитическая система может быть также использована для биокаталитической очистки сточных вод и промышленных отходов от опасных для человека фенольных соединений путем окисления их до менее опасных биополимеров.

УДК: 524.000

Б.В. Тулуков

## ПРОБЛЕМА УСТОЙЧИВОСТИ ЗВЕЗДНЫХ СИСТЕМ

Руководитель В.М. Самсонов

Тверской государственный университет  
Кафедра теоретической физики

Проблема устойчивости звездных скоплений является одной из наиболее актуальных и вместе с тем нерешенных. Имеются попытки привлечения понятия антигравитации для объяснения стабильности звездных скоплений. Однако такое объяснение не согласуется с фундаментальными основами современной физической науки. В данной работе предпринята попытка иного объяснения стабильности звездных систем, не выходящая за рамки классической теории гравитации.

Данные наблюдательной астрономии свидетельствуют о том, что плотность звезд в звездном скоплении  $\rho$  обратно пропорциональна расстоянию  $r$  от центра скопления. Имеются данные о массах  $M$  скоплений и их характерных радиусах  $R$ . Однако данные о скоростях звезд по отношению к центру масс скоплений отсутствуют. В данной работе выдвинута гипотеза о том, что величина скорости звезд имеет принципиальное значение для стабильности соответствующей звездной системы. Иными словами, каждому значению текущего радиуса звезды отвечают минимальное и максимальное значения скорости, определяющие интервал стабильности данной звезды в звездном скоплении. Эти скорости отождествляются с первой и второй космическими скоростями, найденными по отношению к центральной области скопления, на границе которой находится данная звезда. При превышении верхнего предела звезда должна покинуть данное скопление, а при скоростях меньших нижнего предела должна проявляться тенденция к столкновению и слиянию звезд.

Перейдем далее к количественным оценкам. Учитывая, что  $\rho \sim r^{-1}$ , выражение для  $\rho$  можно переписать в виде равенства  $\rho = A/r$ , где  $A = M/2\pi r^2$ . Окончательное выражение для допустимого интервала скоростей звезд на расстоянии  $r$  от центра скопления имеет вид

$$0.7\sqrt{4\pi AGr} < V < \sqrt{4\pi AGr},$$

где  $G$  – гравитационная постоянная. Таким образом, интервал допустимых значений скорости должен быть достаточно узким.

УДК : 635.21+631.8+631.559

В.В. Филин

## ВЛИЯНИЕ УДОБРЕНИЙ НА ФОРМИРОВАНИЕ ЗАПРОГРАММИРОВАННЫХ УРОЖАЕВ КАРТОФЕЛЯ И КАЧЕСТВО ПРОДУКЦИИ

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра растениеводства

Цель исследований – выявить влияние фона минерального питания и густоты стояния на формирование запрограммированных урожаев картофеля в Центральном районе РФ. Исследования проводились в 2004 и 2005 годах в полевом двухфакторном опыте в картофельном севообороте фермерского хозяйства в Плавском районе Тульской области. Почва участка – сильно выщелоченный тяжелосуглинистый чернозем с мощностью пахотного горизонта 25 см, гумусового – 97 см. До закладки опыта в почве содержалось: гумуса (по Тюрину) – 6,1 %,  $P_2O_5$  – 118 и  $K_2O$  – 108 мг (по Кирсанову) в 1 кг почвы; рН сол. – 5,5; Н гидр.–2,0 и S–31,2 м-экв. на 100 г почвы, V – 94 %. В опыте изучали 2 фактора: А – фон минерального питания, где удобрения рассчитывали на получение урожаев (5 вар.): 20 т/га (без удобрения, контроль); 25; 30; 35 и 40 т/га; В – густота стояния 40 и 50 тыс./га. Площадь делянки 50 м<sup>2</sup>, повторность пятикратная. Объект исследований – среднеранний сорт Невский. В опыте выполнили все запланированные наблюдения и исследования по современным методикам. Технология рекомендованная для области.

В результате исследований выявлено, что удобрения улучшают фотосинтетическую деятельность растений в агроценозе и повышают урожайность картофеля. Так, в среднем за 2 года при густоте стояния 50 тыс./га урожайность соответственно по фонам составила: 12,5; 19,6; 25,6; 27,4 и 28,8 т/га, а прибавка от удобрений – 56,8; 104,8; 119,2 и 130,4 %. Уменьшение густоты стояния до 40 тыс./га снижает урожайность в среднем по фонам на 7,3 т/га (на 32,0 %). Наибольшая прибавка урожая от увеличения густоты стояния получена на фоне 4 (на 35,0 т/га), она составила 9,0 т/га (48,9 %). Повышение доз удобрений снижает окупаемость 1 кг NPK урожаем клубней с 86,6 кг (фон 2) до 27,5 (фон 5). Повышение густоты стояния увеличивает содержание крахмала в клубнях на 0,1-0,6 % (кроме фона 5). Содержание белка в клубнях в сравнении с контролем возрастает на фонах 3-5 – на 0,73-1,9 %. Повышение доз удобрений сопровождается снижением крахмалистости клубней на 0,4-0,5 %.

Таким образом, наиболее выгодным является возделывание картофеля при густоте 50 тыс./га с внесением расчетных доз NPK на урожай 25 т/га, что обеспечивает получение на 1 кг NPK по 86,6 кг клубней.

К.В. Франц

## ВАЛИДАЦИЯ МЕТОДИКИ КОЛИЧЕСТВЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФЛАВОНОИДОВ В НАСТОЙКЕ ПОЛЫНИ ГОРЬКОЙ

Руководитель С.А. Темникова

Тверской государственный университет  
Кафедра органической химии

С усилением контроля качества лекарственных средств особое значение имеет работа по обеспечению качества лекарственных препаратов на промышленных предприятиях в процессе их производства. Фармацевтические предприятия постепенно вводят предлагаемые Всемирной организацией здравоохранения (ВОЗ) «Правила организации производства и контроля качества лекарственных средств» («Guideline to Good Manufacturing Practice for Medicinal Products and Active Pharmaceutical Ingredients» – GMP).

Валидация (оценка пригодности) методики анализа является одним из новых и перспективных методов химического анализа. Для того чтобы аналитическая методика заняла достойное место в системе обеспечения качества, соответствовала своему назначению, т.е. гарантировала достоверные и точные результаты анализа, предусмотрена процедура валидации аналитических методик.

Цель данной работы – доказать пригодность методики количественного определения флавоноидов в настойке полыни горькой. Этот галеновый препарат выпускается Тверской фармацевтической фабрикой.

Для оценки пригодности методики были использованы следующие валидационные характеристики: внутрилабораторная повторяемость, точность, линейность и робастность.

На основании полученных данных не было выявлено ни одного критического параметра. Проведённая валидация обосновывает применение методики количественного определения флавоноидов в настойке полыни горькой.



## ВЛИЯНИЕ ГАЗООБРАЗНОГО АММИАКА НА ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ ПЛЕНОК ИЗ ПОЛИ (N-ФЕНИЛГЛИЦИНА)

Руководитель И.П. Горелов

Тверской государственный университет

Кафедра неорганической и аналитической химии

При изготовлении рабочего тела газового сенсора в качестве чувствительного элемента была использована пленка из нового ЭПП поли(N-фенилглицина), синтез которого описан в [1]. Было показано, что порог обнаружения нашего сенсора (около 20 *ppb*) значительно превосходит этот параметр для аналогичных конструкций [2]. Высокая чувствительность изготовленного сенсора, вероятно, объясняется химическим взаимодействием молекул аммиака и карбоксильных групп

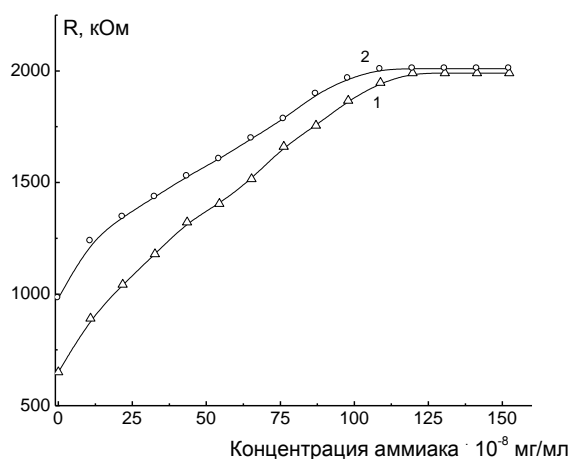


Рис.1. Зависимость сопротивления пленки поли(N-фенилглицина) от концентрации аммиака: 1 – при 20; 2 – при 50°C. Относительная влажность <1 %

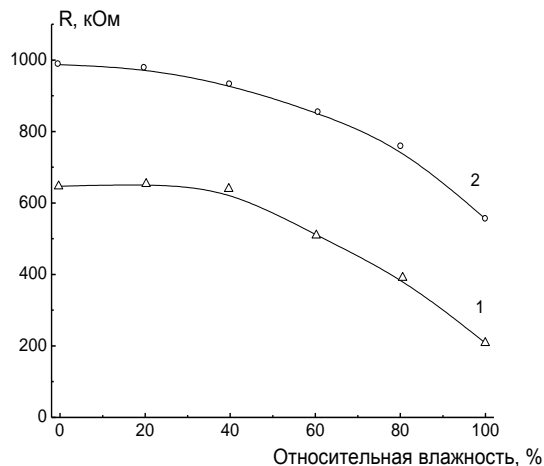


Рис.2. Зависимость сопротивления пленки поли(N-фенилглицина) от относительной влажности воздуха: 1 – при 20; 2 – при 50°C. Концентрация аммиака  $5,44 \cdot 10^{-8}$  мг/мл

полимера. Характеристика сенсора линейна в интервале концентраций аммиака от  $1 \cdot 10^{-7}$  до  $2 \cdot 10^{-6}$  мг/мл (рис.1) и зависит от относительной влажности аммиачно-воздушной смеси (рис.2), что говорит о необходимости ее термостатирования и предварительной осушки.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Холошенко Н.М., Рясенский С.С., Горелов И.П. // Физико-химия полимеров. Тверь, 2005. Вып. 11. С. 221.
2. Matsuguchi M., Okamoto A., Sakai Y. // Sens. Actuators. B. 2003. V. 94. P.46.

С.Ю. Хотеев, С.В. Лапшин, Е.С. Лившиц

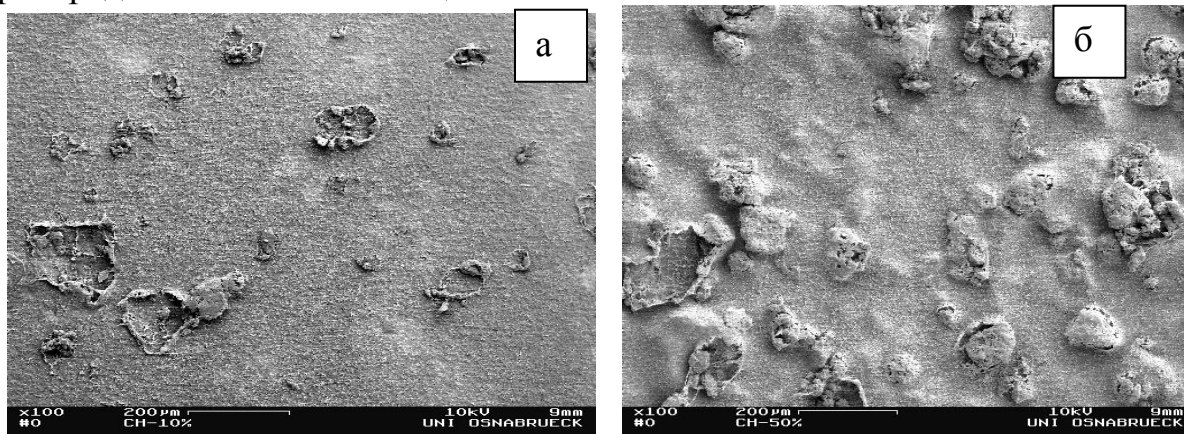
## ПОЛИМЕРНЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ СВЕРХВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛИЭТИЛЕНА, ПОЛУЧЕННЫЕ МЕТОДОМ ГЕЛЬ-ТЕХНОЛОГИИ

Руководители: П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк  
Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Полимерным изделиям могут быть приданы новые свойства при переработке их в композиционные материалы, т.е. материалы с гетерогенной структурой, состоящей из двух и более фаз. Исследования в области получения полимерных пленок, оценка их структуры представляют большой теоретический и практический интерес.

Цель данной работы – получение пористых пленок ксерогелей сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ), наполненных наночастицами монтмориллонита, методом гель-формования, а также исследование их строения с помощью методов ИК спектроскопии и сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Объектами исследования являлись пленки наноконпозитов на основе СВМПЭ и монтмориллонита. Степень наполнения пленок монтмориллонитом варьировалась от 10 до 50%. ИК спектры исследуемых композитов записывали на Фурье-ИК спектрометре «Equinox 55», а микрофотографии поверхности пленок получали на сканирующем электронном микроскопе «Zeiss DSM 962».

Установлено, что с увеличением концентрации наполнителя пористость пленок также растет. На рисунке представлены микрофотографии пленок ксерогелей СВМПЭ с различной степенью наполнения. Видно, что частицы монтмориллонита собираются в агрегаты. Предстоит также решить проблему создания пленок с равномерным распределением наночастиц в объеме СВМПЭ.



Микрофотографии наноконпозитов на основе СВМПЭ и монтмориллонита со степенью наполнения 10 (а) и 50% (б)

КВАНТОВО–МЕХАНИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГРУПП АТОМОВ  
В АЛКАНАХ И АЛКИЛЬНЫХ РАДИКАЛАХ

Руководители: Ю.Д. Орлов, В.В. Туровцев

Тверской государственный университет  
Кафедра общей физики

Для количественного описания взаимного влияния групп атомов в различных химических соединениях можно использовать квантово-механическую теорию атомов в молекулах Бейдера [1]. Такое исследование представляется актуальным по ряду позиций. Во-первых, оно может дать и дает четкое теоретическое обоснование аддитивно-группового подхода. Во-вторых, оно открывает возможность проведения важных уточнений, основанных на понимании изменения характеристик группы. В-третьих, оно четко устанавливает границы применимости группового подхода.

Пакет прикладных программ Gaussian'98 [2] позволяет рассчитывать следующие квантово-механические характеристики соединений в рамках теории Бейдера: энергия группы, полный заряд группы, порядок связи, лапласиан связи, эллиптичность связи. В данной работе произведен анализ изменения приведенных выше характеристик функциональных групп в углеводородах при модификации их строения – удлинения углеводородной цепи и при появлении в углеводородной системе свободной валентности.

Анализ рассчитанных величин энергий группы  $\text{CH}_3$  и эллиптичности связей С-Н для нормальных углеводородов показал, что эти группы можно считать одинаковыми в ряду углеводородов (за исключением этана). Это подтверждает предположение аддитивно-группового подхода. Предполагается, что рассчитанные значения энергий групп (группа  $\text{CH}_3$ ) следует полагать одинаковыми, когда их энергии одинаковы во втором знаке после запятой в атомных единицах. Исходя из данного предположения показано (для углеводородных радикалов), что влияние свободной валентности становится пренебрежимо малым на расстоянии четырех химических связей. При этом энергия группы становится равной соответствующей величине в молекуле.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория. М., 2001.
2. Gaussian 98 (Revision A. 11), M.J. Frisch, and al., Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2001.

УДК 541.64.539

М.А. Шавырина, О.С. Именина, Е.В. Кудряшова

## ИЗУЧЕНИЕ СТРОЕНИЯ ВОЛОКОН ПОЛИАКРИЛОНИТРИЛА, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ГЕЛЬ-ФОРМОВАНИЯ

Руководитель П.М. Пахомов

Тверской государственной университет

Кафедра физической химии

Полиакрилонитрил (ПАН) – один из наиболее распространённых волокнообразующих полимеров, который широко используется для получения углеродных волокон. Исходное белое волокно ПАН является основным прекурсором при изготовлении высокопрочных высоко-модульных углеродных волокон. Как правило, чем лучше механические свойства волокна-прекурсора, тем выше механические характеристики углеродного волокна. В настоящее время во многих областях народного хозяйства и военной промышленности возникла потребность в углеродном волокне с прочностью более 5 ГПа. Один из способов достижения таких высоких прочностных показателей – использование метода гель-формования для создания волокна-прекурсора с хорошими механическими показателями.

Целью настоящей работы являлось исследование изменения структуры высокомолекулярного полимера в процессе формования из него волокна. Объектами исследования служили неориентированные пленки и волокна ПАН ( $M_w=5 \cdot 10^5$ ) с различными упруго-прочностными характеристиками и кратностью вытягивания, которые получали на опытной установке ВНИИСВ. Пленки готовили путем отливки раствора ПАН в диметилсульфоксиде на стекло и последующим осаждением в воде. Изменения в структуре анализировали с помощью метода Фурье-ИК спектроскопии. ИК спектры образцов ПАН записывали в поляризованном свете на спектрометре «Equinox 55» фирмы «Bruker» с использованием поляризатора из KRS-5 материала. Исследуемые волокна укладывали монослоем параллельно друг другу в специальном держателе. Интенсивность выбранных аналитических полос определяли методом базовой линии. В качестве аналитических ИК полос использовали следующие полосы поглощения: полоса с максимумом поглощения на частоте  $2244 \text{ см}^{-1}$ , отвечающая за валентные колебания групп  $C \equiv N$ ; полосы крутильных колебаний метиленовой ( $CH_2$ ) и метиновых ( $CH$ ) групп –  $1230 \text{ см}^{-1}$ , вверных колебаний метиновой ( $CH$ )+маятниковых колебаний метиленовой ( $CH_2$ ) групп–  $1250 \text{ см}^{-1}$ , характеризующие пространственную конфигурацию молекул. Для этих полос рассчитывали дихроичное отношение и находили его зависимость от кратности вытягивания образцов. Анализ характера поглощения в области  $1230\text{--}1250 \text{ см}^{-1}$  показал, что синтезируемый высокомолекулярный ПАН является атактическим полимером. Установлено, что с увеличением кратности вытягивания ориентация молекул в исследуемых образцах увеличивается незначительно.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ N 05-03-08025 ОФИ-П.*

Н.С. Шалагинова, Ю.М. Павлова

## СХЕМЫ РАСЧЁТА СВОЙСТВ ИЗОМЕРОВ ЗАМЕЩЕНИЯ МЕТАНА И ЕГО АНАЛОВ ПО ПОДГРУППЕ

Руководитель В.М. Смоляков

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Получены схемы расчёта физико-химических свойств XYZ-замещённых метана и силана как функции числа заместителей у атома углерода в молекуле. Проведены численные расчёты стандартных энтальпий образования F, Cl, Br-замещённых метана и силана. Для пятивершинных неоднородных графов  $G$  XYZ-замещённых метана можно подсчитать числа подграфов в каждом графе и записать схемы:

$$\Delta_f H^0_{298, газ}(\text{CH}_{4-k-l-m}\text{X}_k\text{Y}_l\text{Z}_m) = a_0 p_0 + a_1 p_1 + a_2 p_2 + a_3 p_3, \quad (1)$$

$$\Delta_f H^0_{298, газ}(\text{CH}_{4-k-l-m}\text{X}_k\text{Y}_l\text{Z}_m) = a'_0 p'_0 + a'_1 p'_1 + \dots + a'_4 p'_4 + \dots + a'_9 p'_9, \quad (2)$$

$$\Delta_f H^0_{298, газ}(\text{CH}_{4-k-l-m}\text{X}_k\text{Y}_l\text{Z}_m \dots) = a''_0 p''_0 + a''_1 p''_1 + \dots + a''_4 p''_4 + \dots + a''_9 p''_9 + a''_{10} p''_{10} + a''_{11} p''_{11} + \dots + a''_{19} p''_{19} \quad (3)$$

В (1)–(3)  $p_0, p_1, \dots, p_3; p'_0, p'_1, \dots, p'_9; p''_0, p''_1, \dots, p''_9, \dots, p''_{19}$  – параметры, выражающиеся через парные и тройные взаимодействия атомов и определяемые из опытных значений для свойства  $P$  галогензамещённых метана и силана;  $a_0, a_1, \dots, a_3; a'_0, a'_1, \dots, a'_9; a''_0, a''_1, \dots, a''_9, \dots, a''_{19}$  – числа параметров схем, определённые через числа подграфов  $G'$ . Методом наименьших квадратов определены численные значения параметров в приближениях по связям и с учетом парных и тройных невалентных взаимодействий соответственно:

* $N_{par}$	N	r	кДж/моль			
			D	$D_A$	$ \varepsilon $	$\varepsilon_{max}$
4	35	0,99858	172,12	194,33	10,58	-40,30 (CF <sub>4</sub> )
10	35	0,99993	7,91	11,08	2,01	-10,03 (CHF <sub>3</sub> )

\* $N_{par}$  – число параметров схемы,  $r$  – коэффициент корреляции,  $D$  – дисперсия,  $D_A$  – дисперсия адекватности,  $|\varepsilon|$  и  $\varepsilon_{max}$  – среднее абсолютное и максимальное отклонение.

Н.С. Шарилина, О.В. Белова, Н.А. Смирнова

## ВЛИЯНИЕ ИОННОЙ СИЛЫ РАСТВОРА НА ПОВЕРХНОСТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЕРОКСИДАЗЫ И ФЕНОЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Руководитель Г.П. Лапина

Тверской государственный университет  
Кафедра биоорганической химии

Многие катионы и анионы при низких концентрациях изменяют стабильность нативных белков. Причем характер их действия в значительной мере зависит от природы белка.

Специфические эффекты электролитов обусловлены сильным предпочтительным связыванием их с молекулами белка (нативными или денатурированными). Все электролиты оказывают влияние на стабильность белков, будучи добавлены к растворителю в больших концентрациях.

Существует представление о том, что электролиты в больших концентрациях оказывают косвенное влияние на стабильность белков путем изменения структуры воды. Меняя стабильность белковых макромолекул, электролиты в значительной степени регулируют и поверхностную активность белковых составляющих.

В работе изучено влияние возрастающих концентраций NaCl (от 0,1 до 0,6 моль/л) на способность адсорбироваться на границе раздела вода–воздух ряда классических поверхностно-активных макромолекул белковой (пероксидаза хрена, пероксидаза льна) и небелковой (фенольные соединения) природы.

Построены изотермы адсорбции для всех изученных природных биополимеров, проанализированы рассчитанные значения  $\Gamma_{\max}$  (максимальной адсорбции),  $h$  (толщины адсорбционного слоя),  $S_0$  (площади, приходящейся на молекулу) в зависимости от концентрации хлорида натрия в объеме водного раствора.

Сделан вывод об определяющей роли электростатических взаимодействий между заряженными радикалами аминокислот различных белков (на примере пероксидазы хрена, пероксидазы льна) в формировании нативной и денатурированной белковой глобулы, а следовательно, и различной поверхностной активностью различных макромолекул белков.

Т.А. Шевченко

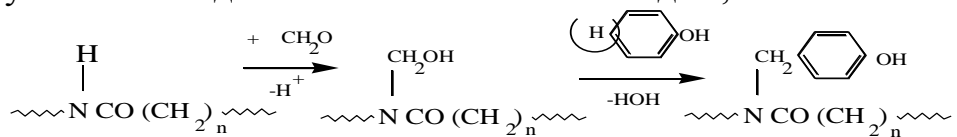
ИССЛЕДОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОЙ МОДИФИКАЦИИ  
ГОМОПОЛИАМИДА-6 И СМЕШАННОГО ПОЛИАМИДА-6,6/6 ПОСЛЕ  
ВВЕДЕНИЯ ОКСИМЕТИЛЬНЫХ И ОКСИБЕНЗИЛЬНЫХ ГРУПП  
С ЦЕЛЮ ПОВЫШЕНИЯ АДГЕЗИОННЫХ И ЭКСПЛУАТАЦИОННЫХ  
СВОЙСТВ ПОЛИАМИДОВ

Руководитель Б.К. Крупцов

Тверской государственной технической университет  
Кафедра технологии полимерных материалов

Сегодня выпускается огромный ассортимент полиамидов (ПА). Широко используется химическая модификация ПА, которая позволяет расширить их применение в различных областях промышленности в качестве клеев и связующих, в производстве композитов, полиамидных нитей и тканей с повышенной адгезией к связующему и других компонентов композиций (шинный корд, текстолиты, стеклотекстолиты со связующим из полиамидов и т.п.).

Модификация заключалась в том, что методом полимераналогичных превращений прививались молекулы формальдегида (оксиметилирование) и фенола совместно с формальдегидом (оксигбензилирование) на макромолекулы полиамида 6 и смешанного полиамида 6,6/6:



Модификация проводилась как в кислой (муравьиная кислота), так и в спиртовой среде (этанол). Из полученных модифицированных образцов изготавливались клеевые растворы в спирте, ими склеивались образцы из металла и различных пород дерева (граб, береза, сосна). Прочность клеевого шва испытывалась на разрывной машине «УММ-20» (МПа). Установлено, что при модификации в спиртовой среде прочностные характеристики образцов выше, чем в кислотной. При изучении процесса модификации выявлена возможность дальнейшего повышения прочностных характеристик клеевых композиций из полиамидов до напряжения разрыва 7 МПа оксигбензилированием. После оксигбензилирования увеличивается также и термостойкость отвержденного полиамида до 165–170<sup>0</sup>С по сравнению с температурой плавления отвержденного оксиметилированного ПА 145-150<sup>0</sup>С.

В ходе проведенных исследований показано, что осуществлённая после оксиметилирования модификация полиамидов (смешанных) фенолом влияет на адгезию. Она значительно растёт при введении оксиметильных групп и незначительно падает при введении более 50% оксигбензильных групп. Введение оксиметильных и оксигбензильных групп повышает адгезию полиамида к различным материалам, увеличивается когезионная и адгезионная прочность клея и клеевого соединения.

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ПЛЕНОЧНЫХ  
МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СВМПЭ, НАПОЛНЕННЫХ  
НАНОЧАСТИЦАМИ МОНТМОРИЛЛОНИТА

Руководитель Т.А. Ананьева

Санкт-Петербургский государственный университет технологии и дизайна

Кафедра технологии химических волокон

В работе получены сорбционные материалы для извлечения щелочных, щелочно-земельных металлов и радионуклидов на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) в виде пленок и блоков. Посредством гель-технологии получали композиционные материалы с высокоразвитой поверхностью, облегчающей доступ к сорбирующему наполнителю. В качестве матрицы использовали СВМПЭ со средней молекулярной массой  $4 \cdot 10^6$ , а наполнителя – монтмориллонит со средним размером частиц 100 нм, который имеет ярко выраженное слоистое строение и содержит в своей структуре катионы щелочных и щелочно-земельных металлов, способные притягивать диполи воды.

Концентрация монтмориллонита оказывала влияние на вязкость наполненных растворов, которую определяли на ротационном вискозиметре «Полимер РПЭ-1М». Вязкость равномерно возрастает с увеличением степени наполнения от 10 до 90%. Для определения общей и поверхностной пористости записывали спектры поглощения образцов на Фурье-ИК спектрометре «Equinox 55». Поверхность наполненных пленок СВМПЭ анализировали на сканирующем электронном микроскопе «JEOL JSM-35C». Параметры пористой структуры, определенные спектроскопическим методом, согласуются с данными, полученными с помощью метода электронной микроскопии. Установлено, что оптимальная пористость пленок достигается при максимальном содержании монтмориллонита 70%.

Исследование сорбционных свойств пористых материалов по отношению к щелочным и щелочно-земельным металлам проводилось из растворов NaOH, KOH с концентрацией 0,1 моль/л и BaCl<sub>2</sub>, MgSO<sub>4</sub>, CaCl<sub>2</sub> с концентрацией 0,05 моль/л. Выявлено, что с уменьшением радиуса гидратированного иона увеличивается сорбционная способность для щелочных металлов. При сорбции щелочно-земельных металлов наблюдалось обращение данной закономерности. Сорбция радионуклидов (цезия-137, стронция-90, иттрия-90) проводилась на наполненных пленках, содержащих 70% монтмориллонита. В качестве сорбента сравнения использовали широко применяемый в практике водоочистки катионит КУ-2-8 в натриевой форме. Данные сорбенты эффективно сорбируют цезий-137 в широком диапазоне pH (3-12). На основании исследований полученные пленочные материалы могут быть рекомендованы для извлечения щелочных, щелочно-земельных металлов, т.е. в процессе подготовки для снижения жесткости воды, а также радионуклидов для очистки загрязненной и технологической воды в теплоносителях АЭС.



## ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРА ОСАДИТЕЛЬНОЙ ВАННЫ ПРИ ФОРМОВАНИИ ПОЛИАКРИЛОНИТРИЛЬНОГО ВОЛОКНА НА ЕГО СВОЙСТВА

Руководители: В.Б. Кваша, В.Л. Циперман

Тверской государственный технический университет

Кафедра технологии полимерных материалов

Полиакрилонитрильное волокно нашло широкое использование в технике и в текстильной промышленности: изготовление объемной пряжи для производства текстильных изделий; получение углеродного волокна, которое широко применяется в ракето- и космостроении\*.

В настоящей работе изучалось влияние параметра осадительной ванны (концентрация растворителя) на свойства формируемого полиакрилонитрильного волокна. Эксперимент проводили на лабораторной микроустановке для формирования МУЛ по известной методике, варьируя концентрацию растворителя от 50 до 80%. У образцов волокна исследовали удельную разрывную нагрузку, разрывное удлинение, начальный модуль, срезы волокна, а также начальную и конечную скорости обрыва волокна на приемной галете. После обработки получены графические зависимости (рис.1-3) влияния концентрации растворителя на свойства формируемого волокна.

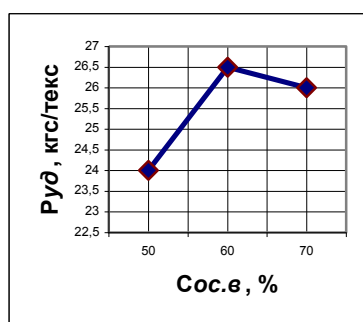


Рис.1. Зависимость удельной разрывной нагрузки от концентрации растворителя

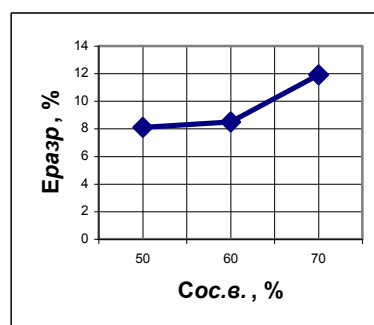


Рис.2. Зависимость разрывного удлинения от концентрации растворителя

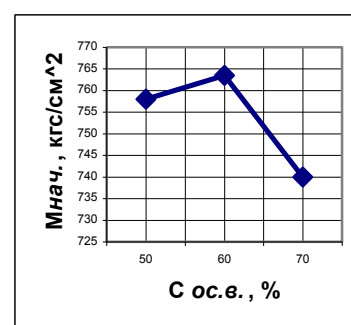


Рис.3. Зависимость начального модуля от концентрации растворителя

Эксперимент показал, что с увеличением содержания растворителя в осадительной ванне свойства полиакрилонитрильного волокна улучшаются до определенного предела, а затем резко ухудшаются. Установлено, что оптимальная концентрация растворителя в осадительной ванне – ~60% (срез имеет слегка овальную форму; удельная разрывная нагрузка 28 кгс/текс; разрывное удлинение 9,3%; начальный модуль 769 кг/мм).

\*Карбоцепные синтетические волокна / Под ред. К.Е. Перепелкина. М., 1973.

ВЛИЯНИЕ СТАТИСТИКИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗВЕНЬЕВ  
ГЕТЕРОЦЕПНОГО ПОЛИМЕРА НА СВОЙСТВА МАКРОМОЛЕКУЛЫ

Руководитель А.С. Павлов

Тверской государственной университет

Кафедра физической химии

Целью данной работы было изучение влияния статистики распределения звеньев в двухбуквенном гетероцепном полимере на особенности перехода клубок – глобула. Несмотря на значительные успехи, достигнутые в исследовании перехода клубок – глобула, в ранних работах имеются и серьезные недостатки. Прежде всего, это короткие цепи, исследуемые методами имитационного моделирования, при этом в образующейся глобуле практически все звенья являются поверхностными. Кроме того, обычно исследуется переход клубок – *рыхлая глобула*, т.е. система находится вблизи от  $\theta$ -точки, хотя и ниже ее, а обычно используемая при этом система потенциалов, когда взаимодействие звеньев одного типа (сорт *A*) носит характер сильного притяжения, а другой тип атомов (сорт *B*) – стерическое отталкивание, перекрестное взаимодействие *A* – *B* носит обычно также характер стерического отталкивания.

В работе расчеты проводились для молекул длиной  $N = 1024$  мономерных звеньев. Моделировалась отдельная цепочка без периодических граничных условий. Использовалась модель свободно-сочлененной цепи с объемными эффектами, состоящая из разнородных звеньев сортов *A* и *B*, распределенных регулярно вдоль цепи. Длины блоков разнородных мономеров одинаковы и варьировались от 1 до 512 (выбиралась из ряда  $2^n$ ). Все связи моделировались как жесткие геометрические ограничения фиксированной длины ( $1\sigma$ ), ван-дер-ваальсовы радиусы всех мономерных звеньев  $\sigma$  считались одинаковыми, а все отличие сортов *A* и *B* сводилось к различной энергии взаимодействия.

Особенностью модели, используемой в работе, является, то что, оба типа блоков в гетерополимере являются гидрофобными. Дальние взаимодействия описывались потенциалом Леннарда–Джонса  $U(r) = 4\varepsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$ . Значение энергетического параметра  $\varepsilon$  для взаимодействий типа *A*–*A*, было выбрано равным 1,0, для взаимодействий *B*–*B*  $\varepsilon_{BB}=0,3$ , а перекрестное взаимодействие  $\varepsilon_{AB}=0,65$ . Приведенная температура в системе варьировалась от 0,1 до 5,0. Для сравнения были определены условия перехода клубок – глобула в гомополимере со значением энергетического параметра  $\varepsilon = 1,0$ ;  $\varepsilon = 0,65$  и  $\varepsilon=0,30$ . В процессе моделирования рассчитывались геометрические характеристики цепи  $\langle S^2 \rangle$ ,  $\langle R^2 \rangle$ , компоненты тензора инерции полимерной молекулы, а также спэны. Кроме того, рассчитывались внутримолекулярный структурный фактор (форм-фактор) и функция радиального распределения плотности относительно центра инерции макромолекулы.

ВЛИЯНИЕ МОРФОЛОГИИ РЕАКТОРНОГО ПОРОШКА  
НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НИТИ ИЗ  
СВЕРХВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛИЭТИЛЕНА

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

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

НИИ синтетического волокна

С помощью метода гель-формования удастся создать волокна из сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) с прочностью ~3 ГПа, что составляет лишь 10% от теоретического предела. Дальнейшее повышение упругопрочностных характеристик волокон СВМПЭ является важной научно-технологической задачей. Определение оптимальных условий получения волокон на всех стадиях гель-формования и ориентационного вытягивания, а также установление связи между строением и механическими свойствами получаемых волокон на этих стадиях – верный путь дальнейшего улучшения их механических показателей. Известно также, что важную роль в достижении высоких прочностных характеристик играет исходный реакторный порошок СВМПЭ. При этом влияние молекулярной массы и молекулярно-массового распределения полимера на механические свойства волокон из него исследовано достаточно хорошо. В то же время влияние морфологии исходного порошка на способность полимера к формованию и конечные механические свойства образца изучено недостаточно.

Цель настоящей работы – изучение влияния морфологии реакторных порошков, полученных при различных условиях полимеризации и на различных катализаторах, на реологические свойства раствора полимера и механические свойства готовых нитей из СВМПЭ. Реакторные порошки СВМПЭ, отличающиеся условиями полимеризации, были получены из Института катализа Сибирского отделения РАН. Полифиламентные нити готовили на опытной установке НИИ синтетического волокна. Упруго-прочностные характеристики нитей определяли из диаграмм растяжения, записанных с помощью разрывной машины «Инстрон-1122». Морфологию реакторных порошков изучали методами сканирующей электронной микроскопии, низкочастотной рамановской спектроскопии, Фурье-ИК спектроскопии и термического анализа. В ходе проведенных комплексных исследований установлено, что наличие образований с фибриллярной структурой в исходном порошке негативно сказывается на способности системы к формованию – в растворе наблюдается большое число «геликов» или гетерогенных областей, препятствующих стабильному формованию. В то же время отсутствие таких областей, более гомогенная морфология реакторного порошка, способствует достижению высоких прочностных показателей у готовой нити.

Ю.Я. Якубович, Н.В. Воробьев

КИСЛОТНО-ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА ЦЕФТРИАКСОНА  
И ЦЕФОТАКСИМА

Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Для анионов ( $An^-$ ) цефалоспоринов, имеющих тиазольную группу, при переходе из нейтральной среды в кислую характерно последовательное протонирование тиазольной и карбоксилатной групп с образованием биполярного иона  $HAn^\pm$  и катиона  $H_2An^+$ . В данной работе методом рН-метрического титрования определены концентрационные константы кислотной диссоциации  $pK_1$  и  $pK_2$ , характеризующие соответственно диссоциацию карбоксильной и протонированной тиазольной групп катионов цефтриаксона ( $H_2Ctx^+$ ) и цефотаксима ( $H_2Cxm^+$ ) при 20 °С на фоне 0.1, 0.4, 0.7 и 1.0 М КСl и  $KNO_3$ . Путем линейной экстраполяции концентрационных значений констант к нулевой ионной силе в соответствии с уравнением Хюккеля

$$pK_a + \frac{A_f (z_{An}^2 - z_{HAn}^2) \sqrt{\mu}}{1 + B_f \alpha \sqrt{\mu}} = pK_a^\circ - \delta \mu$$

получены термодинамические значения констант кислотной диссоциации ( $K_a^\circ$ ), не зависящие от ионной силы ( $\mu$ ) и фонового электролита. Параметр  $\alpha$  (размер иона) вычисляли теоретически. Расчет проведен с помощью программы Chem3D методом РМЗ. Получены значения  $\alpha$  1.2 – 1.6 нм. Значения  $\delta$  для диссоциации карбоксильных групп антибиотиков хорошо коррелируют с литературными данными, относящимися к диссоциации алифатических и ароматических карбоновых кислот.

Равновесие	Фоновый электролит	$pK_a$				$\delta$ ,	$pK_a^\circ$
		$\mu = 1.0$	$\mu = 0.7$	$\mu = 0.4$	$\mu = 0.1$		
$H_2Cxm^+ \leftrightarrow H^+$ + $HCxm^\pm$	КСl	2.14	2.22	2.27	2.30	0.21	2.26
	$KNO_3$	1.99	2.11	2.21	2.29	0.37	
$HCxm^\pm \leftrightarrow H^+$ + $Cxm^-$	КСl	3.58	3.48	3.40	3.32	-0.32	3.36
	$KNO_3$	3.36	3.33	3.31	3.30	-0.10	
$H_2Ctx^+ \leftrightarrow H^+$ + $HCtx^\pm$	КСl	3.11	3.16	3.20	3.25	0.18	3.19
	$KNO_3$	2.93	3.04	3.12	3.22	0.34	
$HCtx^\pm \leftrightarrow H^+$ + $Ctx^-$	КСl	4.30	4.27	4.23	4.19	-0.15	4.24
	$KNO_3$	4.21	4.20	4.19	4.18	-0.06	

Доверительный интервал значений  $pK_a$  в пределах  $\pm 0.01$ .

## **АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ**

<i>Алферов В.В.</i> .....	3
<i>Артёмов М.М.</i> .....	4
<i>Балашова О.А.</i> .....	5
<i>Берсенева Т., Глазунова Т., Дрягина С., Мнацаканова Д., Муравьева Н.</i> .....	6
<i>Богданова А.В.</i> .....	7
<i>Большакова О.В.</i> .....	8
<i>Бурачук Н.В., Рощина И.А., Микин В.М.</i> .....	9
<i>Бурцев А.В.</i> .....	10
<i>Веселов И.Н.</i> .....	11
<i>Волков В.А., Дорофеева Н.А.</i> .....	12
<i>Воловодова А.Ю., Симонова М.В., Тимофеев Д.М.</i> .....	13
<i>Гавриленко А.В.</i> .....	14
<i>Гвозденко М.В.</i> .....	15
<i>Голикова А.Ю., Шавырина М.А.</i> .....	16
<i>Грицунова О.В.</i> .....	17
<i>Груздков Д.В.</i> .....	18
<i>Гурбо Ю.А.</i> .....	19
<i>Гусев П.В.</i> .....	20
<i>Гуськова О.А.</i> .....	21
<i>Гуськова О.В., Думкин Д.В., Титова К.М.</i> .....	22
<i>Данилов А.Ю.</i> .....	23
<i>Демская Л.В.</i> .....	24
<i>Долгова Т.Н.</i> .....	25
<i>Донец А.А.</i> .....	26
<i>Егоров И.В., Лаурентьева Е.В.</i> .....	27
<i>Журавлев О.Е.</i> .....	28
<i>Зезюлина П.А.</i> .....	29
<i>Зубреева А.А.</i> .....	30
<i>Иргискина Е.А.</i> .....	31
<i>Киселева Г.В.</i> .....	32
<i>Киселев Д.А.</i> .....	33
<i>Кожин Р.В.</i> .....	34
<i>Козловская Ю.В.</i> .....	35
<i>Корнеева О.И.</i> .....	36
<i>Коткова А., Субботина О.</i> .....	37
<i>Кошкидько Ю.С.</i> .....	38
<i>Кравченко А.А.</i> .....	39
<i>Кравченко А.А.</i> .....	40
<i>Кульпин Д.А.</i> .....	41
<i>Лапшин С.В., Лившиц Е.С., Шляхова Ю.Н.</i> .....	42
<i>Лебедева Т.В.</i> .....	43
<i>Луговой Ю.В., Долуда В.Ю., Лакина Н.В.</i> .....	44
<i>Маланин М.Н.</i> .....	45
<i>Мальщик М.П., Лихуша П.С., Таланцева Ю.Н.</i> .....	46
<i>Михайлов Д.А.</i> .....	47
<i>Нератова И.В.</i> .....	48
<i>Никитина М.Е.</i> .....	49
<i>Николенко А.Ю.</i> .....	50

<i>Никошвили Л.Ж., Демиденко Г.Н.</i> .....	51
<i>Нилов Д.Ю., Соколов Д.В.</i> .....	52
<i>Нилов Д.Ю., Соколов Д.В., Федин Д.М.</i> .....	53
<i>Новиков И.Е.</i> .....	54
<i>Ожимкова Е.В.</i> .....	55
<i>Павлова Ю.М., Савельева А.А., Нилов Д.Ю., Корольков П.В.</i> .....	56
<i>Пакшвер В.С., Мурсалов Э.Р.</i> .....	57
<i>Папулова Д.Р.</i> .....	58
<i>Першина О.Н.</i> .....	59
<i>Петухов К.С.</i> .....	60
<i>Поленов Ю.М.</i> .....	61
<i>Прятелиев М.В.</i> .....	62
<i>Ратников А.С., Зыков Д.Г.</i> .....	63
<i>Рощина И.А., Микин В.М., Бурачук Н.В.</i> .....	64
<i>Русакова Н.П.</i> .....	65
<i>Рясенский Д.С.</i> .....	66
<i>Сайко В.В.</i> .....	67
<i>Самотаева Н.В.</i> .....	68
<i>Семенов А.Н.</i> .....	69
<i>Смирнов С.С.</i> .....	70
<i>Смоляков С.Н.</i> .....	71
<i>Соловьев Ю.В.</i> .....	72
<i>Спиридонова В.М., Егорова Е.В.</i> .....	73
<i>Стренакова А.Н., Халятина Я.М.</i> .....	74
<i>Тихонов Б.Б.</i> .....	75
<i>Тулуков Б.В.</i> .....	76
<i>Филин В.В.</i> .....	77
<i>Франц К.В.</i> .....	78
<i>Холошенко Н.М.</i> .....	79
<i>Хотеев С.Ю., Латшин С.В., Лившиц Е.С.</i> .....	80
<i>Чернова Е.М.</i> .....	81
<i>Шавырина М.А., Именина О.С., Кудряшова Е.В.</i> .....	82
<i>Шалагинова Н.С., Павлова Ю.М.</i> .....	83
<i>Шариллина Н.С., Белова О.В., Смирнова Н.А.</i> .....	84
<i>Шевченко Т.А.</i> .....	85
<i>Ширшова Е.П., Кузнецов А.Ю.</i> .....	86
<i>Шичкова И.А.</i> .....	87
<i>Явина И.</i> .....	88
<i>Яковлев И.В.</i> .....	89
<i>Якубович Ю.Я., Воробьев Н.В.</i> .....	90

## XIV Региональные Каргинские чтения

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

Тверской государственный университет, Тверской государственный технический университет, Тверская государственная медицинская академия, Тверская сельскохозяйственная академия, Общественный фонд им. академика В.А. Каргина организуют в рамках XIV Региональных Каргинских чтений областную научно-техническую конференцию молодых учёных «Физика, химия и новые технологии».

### Оргкомитет конференции:

Пахомов П.М. – председатель	Панкратов Е.А.
Алексеев В.Г.	Папулов Ю.Г.
Ворончихина Л.И.	Пастушенков Ю.Г.
Горелов И.П.	Педько Б.Б.
Гречишкин Р.М.	Орлов Ю.Д.
Дементьева С.М.	Смирнова Т.И.
Каргаполов А.В.	Смоляков В.М.
Крупцов Б.К.	Сильман Э.М.
Лапина Г.П.	Усанова З.И.
Павлов А.С.	

Конференция состоится в **марте 2007 года**.

Научная программа конференции предусматривает проведение **стендовой сессии** по следующим направлениям:

- агрохимия
- аналитическая химия и новые методы исследования
- биохимия и биофизика
- компьютерная физика и химия
- неорганическая химия
- новые технологии (био-, нано-, гель- и др.) и новые материалы
- органическая химия
- физика твердого тела
- физика и химия высокомолекулярных соединений
- химическая технология
- физическая химия

К участию в конференции приглашаются школьники, студенты, аспиранты и сотрудники учебных заведений и предприятий Тверской области. Возраст участников конференции – **до 30 лет**. Тезисы докладов будут опубликованы в сборнике. Авторы лучших докладов будут награждены памятными призами, а их устные сообщения заслушаны на пленарном заседании.

Представленные на конференцию стендовые доклады должны быть размером не более 1×1 м.

Тезисы докладов и их электронную версию просьба направить не позднее **15 февраля 2007 года** по адресу: 170002, Тверь, Садовый переулок, 35. ТвГУ. Кафедра физической химии. Пахомову П.М.

По вопросам проведения конференции можно обращаться к председателю оргкомитета Павлу Михайловичу Пахомову или Светлане Дмитриевне Хижняк по тел. 36-05-22 доб. 127.

e-mail: [Pavel.Pakhomov@tversu.ru](mailto:Pavel.Pakhomov@tversu.ru); [Svetlana.Khizhnyak@tversu.ru](mailto:Svetlana.Khizhnyak@tversu.ru)

Пример оформления тезисов доклада (1 страница формата А4, шрифт Times New Roman 14, одинарный интервал, поля – 2,5 см со всех сторон, допустимо включение в текст рисунков, графиков, химических формул, схем и списка литературы):

УДК: 538.245

П.А. Зезюлина

## ВЛИЯНИЕ НАПРЯЖЕНИЙ НА МАГНИТНУЮ ДОМЕННУЮ СТРУКТУРУ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ $RFe_{11}Ti$

Руководитель Ю.Г. Пастушенков

Тверской государственный университет

Кафедра магнетизма

Интерметаллические соединения редкоземельных металлов (R) с железом  $RFe_{11}Ti$  интенсивно исследуются в течение последних десятилетий [1]. Особый интерес вызывают обнаруженные в них спин-переориентационные фазовые переходы (СПП). Несмотря на большое число исследований интерметаллидов  $RFe_{11}Ti$ , данные о температурах и типах СПП в них весьма противоречивы. В частности, в работах [2-4] было обнаружено, что в соединении  $DyFe_{11}Ti$  при комнатной температуре, когда соединение в соответствии с имеющимися магнитными фазовыми диаграммами является магнитоодноосным, на поверхности образца наблюдается магнитная доменная структура (ДС).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hu B.-P. // J. Phys. Condens. Matter. 1989. V.1. P. 755.
2. Pastushenkov Yu.G. et al. // J. Magn. Mater. 2002. V. 238. P.215.
3. Никитин С.А. и др. // ФТТ. 2005. Т.47. С.501.
4. Вонсовский С.В. Магнетизм. М., 1971.