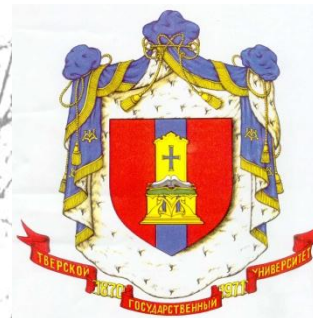




**ФОНД СОДЕЙСТВИЯ РАЗВИТИЮ**

малых форм предприятий в научно-технической сфере



## **XX КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ**

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

**ТВЕРЬ 2013**

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

## **XX КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ**

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

28 марта 2013 года

г. Тверь

**Тезисы докладов**

**ТВЕРЬ 2013**

УДК 54(082)

ББК Г.я431

Р32

**Ответственные за выпуск:**

доктор химических наук П.М. Пахомов  
кандидат химических наук С.Д. Хижняк

**Р32** XX Каргинские чтения: тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2013. – 118 с.

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

Настоящий сборник издан на средства РФФИ (грант № 13-03-06000г).

© Тверской государственный  
университет, 2013  
© Авторы статей, 2013

А.В. Абраменко

## СЕЛЕКТИВНАЯ КАТАЛИТИЧЕСКАЯ КОНВЕРСИЯ ГЛИЦЕРИНА В ПРОПИЛЕНГЛИКОЛЬ

Руководитель Л.Ж. Никошвили

Тверской государственный технический университет

Кафедра биотехнологии и химии

Предприятия, перерабатывающие топливо, производят огромное количество глицерина в качестве побочного продукта.

Глицерин может служить ценным сырьем для производства различных химикатов: спиртов и кислот (которые могут быть использованы для производства тканей, изоляционных материалов и пищевых продуктов), пропиленгликоля, этиленгликоля, а также метана и водорода [1].

Области применения пропиленгликоля разнообразны: химическая, автомобильная, авиационная, лакокрасочная, нефтегазовая. Пропиленгликоль практически не токсичен, поэтому он нашел свое широкое применение в пищевой, фармацевтической, парфюмерной и других отраслях промышленности.

Гидрогенизация глицерина проводится в присутствии различных металлических катализаторов и водорода, таких, как Cu-ZnO, Cu-ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, содержащие кобальт, медь, марганец, молибден и неорганические поликислоты.

Достигается 100% селективность, но существуют определенные недостатки, ограничивающие проведение исследований в лабораторных условиях, таких как, использование высоких температур и давлений [2].

Таким образом, главной задачей является разработка каталитических технологий, позволяющих вести реакцию при более низких температурах и давлениях с использованием концентрированного глицерина с достижением высокой селективности (низкой конверсии по отношению к этиленгликолю и другим побочным продуктам).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Corma A. Chemical Routes for the Transformation of Biomass into Chemicals / A. Corma, S. Iborra, A. Velty // Chem. Rev. – 2007. - Vol. 107. – P. 2411-2502.
2. Low-pressure Hydrogenolysis of Glycerol to Propylene Glycol / M. A. Dasari, P-P. Kiatsimkul, W. R. Sutterlin, G. J. Suppes // Applied Catalysis A: General. – 2005. – V. 281. – P. 225–231.

Е.П. Алексеева

## ГЕЛЕОБРАЗУЮЩИЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСОВ СЕРЕБРА И БЕТА-ЛАКТАМНЫХ АНТИБИОТИКОВ КАК МАТРИЦА ДЛЯ СОЗДАНИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Руководитель П.М.Пахомов

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

В результате исследования комплексообразования при взаимодействии водных растворов натриевых солей бета-лактамных антибиотиков с нитратом серебра был обнаружен эффект гелеобразования между натриевой солью оксациллина и нитратом серебра. Для дальнейшего понимания причины гелеобразования в системе оксациллин-серебро в отличие от других антибиотиков были проведены физико-химические исследования оксациллин-серебряных гидрогелей, их растворов, а также комплексов пенициллиновых и цефалоспориновых антибиотиков с серебром.

Серебряные комплексы антибиотиков были изучены методом динамического светорассеяния. Получено распределение наночастиц по размерам в мольных соотношениях  $Ox a^- : Ag^+$  как 1,75:1, 5:1, 7:1 и 9:1 соответственно. Измерен Z-потенциал каждой системы. На основании полученных данных можно сделать предположение, что гель не образуется в других случаях, поскольку Z-потенциал серебряных комплексов больше, чем Z-потенциал системы оксациллин-серебро.

Была исследована кинетика гелеобразования в оксациллин-серебряном гидрогеле в зависимости от концентрации исходных компонентов и температуры эксперимента. Оптимальное соотношение компонентов в оксациллин-серебряном геле составляет 1,75:1, соответственно  $Ox a^- : Ag^+$ .

Гель, полученный на основе водных растворов нитрата серебра и антибиотика, является удобной комбинированной формой, обладающей лечебными свойствами. Гели показывают большую антимикробную активность в отношении патогенных и условно-патогенных микроорганизмов в отличие от водных компонентов вне геля. Оксациллин-серебряные системы – удобные комбинированные формы антибиотика и серебра, которые обладают антисептическими, противогрибковыми, ранозаживляющими, противовоспалительными свойствами.

Е.В. Андрианова

## СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ – СОЛЕЙ ПИРИДИНИЯ, $\gamma$ - И $\beta$ - ПИКОЛИНИЯ

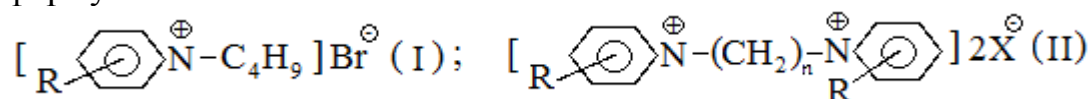
Руководитель. Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

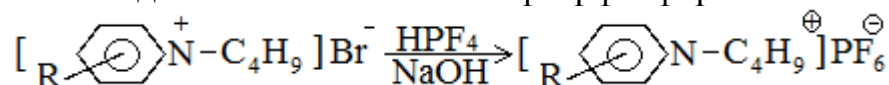
Современный подход к решению проблемы замены летучих органических соединений, используемых в качестве растворителей в органическом синтезе, включает применение ионных жидкостей (ИЖ). Использование ионных жидкостей в качестве новых реакционных или каталитических сред может решить проблему эмиссии растворителей и повторного использования дорогостоящих катализаторов. Ионные жидкости – это соли органических кислот, жидкие при температуре ниже 100° С, содержащие объемный органический катион и разнообразные неорганические или органические анионы. В настоящее время наиболее изученными и описанными в литературе являются ионные жидкости 1,3-диалкилимидазолия, причем в основном это мономерные соли.

В нашей работе синтезированы моно- и бис-четвертичные соли пиридиния,  $\gamma$ - и  $\beta$ -пиколиния и исследованы их физико-химические свойства. Ионные жидкости получены реакцией нуклеофильного замещения ( $S_N 2$ ) при взаимодействии аминов (нуклеофилов) с моно- и дигалоидалканами (субстратами). Реакцию проводили при кипячении в ацетоне в течение 0,5–2 часа при соотношении реагентов амин: алкилгалогенид 1:1 для моногалогидных солей и 2:1 в случае синтеза бис-четвертичных солей. Получены соединения общей формулы I и II:



где R=H; 4-CH<sub>3</sub>; 3-CH<sub>3</sub>. X=Cl; Br. n=2, 3, 4.

Синтезированные соединения представляют собой бесцветные кристаллические вещества, растворимые в воде и органических растворителях. Состав и строение подтверждены данными элементного анализа и ИК спектроскопии. Изучено влияние структуры амина на скорость кватернизации. Установлено, что по реакционной способности амины располагаются в ряд: пиридин >  $\gamma$ -пиколин >  $\beta$ -пиколин. Гексафторфосфаты получены обменной реакцией галоидных солей с 60% гексафторфосфорной кислотой по реакции



В отличие от галоидных солей аминов гексафторфосфаты являются гидрофобными жидкостями, не смешивающимися с водой, представляют интерес как растворители в двухфазных системах.

Я.В. Андрианова

## ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ СОЛЕЙ БИОАКТИВНЫХ МЕТАЛЛОВ РАЗНОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ НА ПРОЦЕСС ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЯ В ВОДНОМ ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОМ РАСТВОРЕ

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

Недавно установлена способность низкоконцентрированных водных растворов L-цистеина и нитрата серебра (ЦСР) к гелеобразованию. Данный процесс может быть инициирован различными электролитами, в результате чего происходит образование тиксотропного гидрогеля. ЦСР и гидрогели на его основе обладают высокой антимикробной активностью. Поэтому представляет большой интерес изучение влияния солей биоактивных металлов на процесс гелеобразования. Цель работы – нахождение минимального концентрационного предела, при котором возможен процесс гелеобразования; установление типа электролитов, для которых возможно образование наиболее прочного гидрогеля; определение влияния различных электролитов на характер пространственной сетки.

ЦСР получают при смешивании водных растворов исходных компонентов концентрации 0,03 М при определенном молярном соотношении. По завершении процесса созревания в ЦСР вводили определенное количество электролитов (хлориды, сульфаты и нитраты  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Co}^{+2}$ ,  $\text{Ni}^{+2}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$  и др.), что приводило к формированию пространственной сетки. Наглядным подтверждением этого являются данные, полученные методом просвечивающей электронной микроскопии, которые показывают, насколько отличаются друг от друга пространственные сетки гелей. Для исследования размера частиц и их агрегатов в ЦСР использовали метод ДСР.

Методом УФ спектроскопии исследовали процесс гелеобразования ЦСР при взаимодействии с солями биоактивных металлов, в результате чего интенсивность полосы поглощения 390 нм, ответственной за образование олигомерных цепочек, либо не изменялась, либо уменьшалась. При взаимодействии с сульфатами интенсивность данной полосы существенно не изменяется, а гидрогели были наиболее прочные. В случае ионов  $\text{Cl}^-$  и  $\text{NO}_3^-$  интенсивность полосы уменьшалась, что объясняется разрушением олигомерных цепей в ЦСР под воздействием анионов. Установлено, что при введении в качестве электролита сульфатов и хлоридов различных металлов возможно получить гидрогель в отличие от нитратов, где гель при любой концентрации не удалось получить. Обнаружено также, что для каждого электролита существует своя критическая концентрация, при которой происходит быстрое структурирование системы, и, регулируя концентрацию электролита и его состав, можно получить прочный гель с заранее заданными свойствами, что безусловно является достоинством данной системы.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы» (2009–2011 гг.), проект № 2.1.1/6867.*

У.Р. Ахметзянова

## КАТАЛИТИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ D-МАЛЬТОЗЫ

Руководитель Л.Ж. Никошвили

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Биомасса все чаще выступает в качестве доступного, экологичного и перспективного возобновляемого сырья, рассматриваемого как альтернатива синтетическим материалам и полезным ископаемым. В химической промышленности на основе биомассы получают различные виды патоки. Например, мальтозная патока служит сырьем для синтеза углеводов, в частности D-мальтозы. Каталитическое гидрирование D-мальтозы приводит к образованию D-мальтита, который может использоваться в производстве диабетических и кондитерских продуктов, в косметической промышленности, а также как промежуточный продукт в синтезе ряда биологически активных веществ.

В качестве традиционных каталитических систем в синтезе сахарных спиртов используются нанесенные никелевые катализаторы (в частности, Ni-Ренея), обладающие рядом недостатков. Ионы никеля в процессе гидрирования могут переходить в раствор, что приводит к снижению активности катализатора и загрязнению целевого продукта никелем. Различные промоторы (Cr, В, Мо, Sn, Fe, Р), используемые для повышения активности Ni-содержащих каталитических систем, также могут вымываться с поверхности носителя. Таким образом, современная технология каталитического гидрирования D-мальтозы не обеспечивает высокой селективности в связи с образованием побочных продуктов.

Альтернативой применению никелевых катализаторов может служить использование рутениевых катализаторов благодаря их высокой стабильности и активности, увеличение которых возможно за счет нанесения металла на углеродные носители и вследствие перераспределения электронной плотности между атомами рутения и атомами углерода.

В рамках данной работы были проведены синтез и исследование каталитических свойств Ru-содержащих наночастиц, стабилизированных матрицей свёрнутого полистирола, в реакции селективного гидрирования D-мальтозы. Показано, что разработанные каталитические системы обеспечивают достаточно высокую активность и селективность (>96% при 100% конверсии), что позволяет рассматривать их в качестве перспективных.





М.В. Бабенко

## ИЗМЕНЕНИЕ ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА ПОЧВЫ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ОТДЕЛЬНЫХ ФРАКЦИЙ СВИНОГО НАВОЗА

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Органическое вещество является важным фактором плодородия почв, оно способствует эффективному поглощению газов, паров воды и растворимых в ней соединений, регулирует ее питательный режим, формирует гумусовый горизонт и выполняет многие другие функции.

В Нечерноземной зоне в дерново-подзолистых почвах содержание органического вещества за последние полвека снизилось примерно на 50%. Такая тенденция связана с резким снижением вносимых в почву доз органических удобрений, выход которых за последние годы резко уменьшился. Одновременно наблюдается образование современных крупных животноводческих комплексов – агрофирм. Такой агрофирмой в Тверской области является ЗАО «Заволжское», в котором содержатся около 100 тыс. голов свиней. От них накапливается примерно 200 тыс. тонн жидкого навоза. С 2008 года в хозяйстве внедрена голландская технология по утилизации получаемого навоза, в соответствии с которой вначале получают твердую и жидкую фракции, после чего их по разному используют. Мы исследовали влияние отдельных фракций свиного навоза ЗАО «Заволжское» на содержание органического вещества дерново-подзолистой почвы (таблица).

Влияние отдельных фракций свиного навоза на содержание и состав органического вещества

| № п/п | Вариант                                      | Сорг.% | С гуминовых кислот, % от общ. С | С фульвокислот % от общ. С | $\frac{C_{гк}}{C_{фк}}$ | С негидр. остаток, % |
|-------|--|--------|---------------------------------|----------------------------|-------------------------|----------------------|
| 1.    | Контроль                                     | 2,10   | 25,5                            | 18,8                       | 1,68                    | 55,7                 |
| 2.    | Навоз свиной на N <sub>200</sub>             | 2,18   | 27,5                            | 20,6                       | 1,33                    | 51,9                 |
| 3.    | Твердая фракция на N <sub>200</sub>          | 2,20   | 26,7                            | 19,4                       | 1,38                    | 53,9                 |
| 4.    | Жидкая фракция на N <sub>200</sub>           | 2,17   | 31,5                            | 16,4                       | 1,92                    | 52,1                 |
| 5.    | Твердая фракция на N <sub>200</sub> + солома | 2,23   | 31,2                            | 15,5                       | 2,01                    | 53,3                 |
| 6.    | Жидкая фракция на N <sub>200</sub> + солома  | 2,18   | 30,8                            | 18,3                       | 1,68                    | 50,9                 |

На всех удобренных вариантах с исследуемыми фракциями свиного навоза как в чистом виде, так и совместно с соломой отмечено увеличение органического вещества на 0,07–0,13 %. Наибольшая прибавка выявлена на вариантах с применением твердой фракции в чистом виде и совместно с соломой. В почве всех вариантов с удобрениями количество гуминовых кислот также несколько возросло, а увеличение содержания фульвокислот наблюдалось не на всех вариантах.

О.В. Балбихина, А.Ю. Карпенков

## МАГНИТНАЯ СИСТЕМА ДЛЯ МАГНИТНЫХ ХОЛОДИЛЬНИКОВ

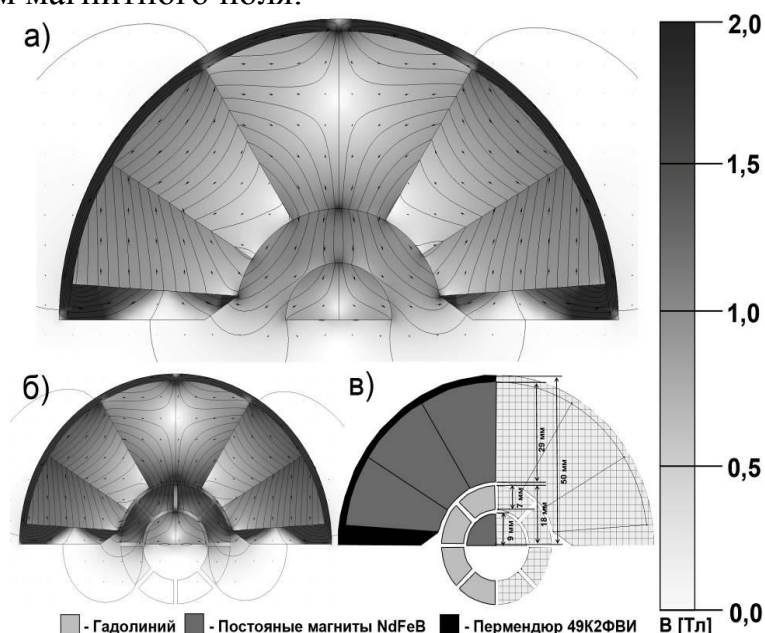
Руководитель К.П. Скоков

Тверской государственной университет  
Кафедра магнетизма

Технология магнитного охлаждения является перспективным методом охлаждения при температурах вблизи комнатных\*. Магнитная система – это ключевой компонент магнитного холодильника (МХ). Магнитные системы, собранные из постоянных магнитов, являются более подходящими для использования в МХ, что обусловливается возможностью создавать компактные МХ\*.

Конструкция и линейные размеры элемента разработанной магнитной системы представлены на рис. 1, в. Результаты моделирования магнитной системы при использовании рабочего тела и без него приведены на рис. 1, б и 1, а.

К преимуществам данной системы можно отнести: а) однородность создаваемого в зазоре магнитного поля; б) непрерывное вращение магнитокалорического материала, что позволяет добиться высокой частоты работы магнитного холодильника; в) непрерывное использование областей с высоким значением магнитного поля.



Конфигурация создаваемого системой магнитного поля: а) без рабочего тела, б) с рабочим телом, в) конструкция и линейные размеры магнитной системы.

\* Bjørk R., Bahl C.R.H., Smith A., Pryds N. // International Journal of Refrigeration. –2010. –V.33. –P.437–448.

О. А. Баранова

## СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА ЧЕРЕЗ СТАДИЮ ОБРАЗОВАНИЯ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛИМЕРА.

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

В настоящее время созданы, описаны и широко применяются разнообразные способы химического синтеза наночастиц многих металлов, в том числе и наночастиц серебра (НЧС). Среди описанных способов крайне редко встречаются сообщения о применении супрамолекулярных соединений, в том числе и супрамолекулярных полимеров как прекурсоров наночастиц.

В работе предложен метод получения НЧС через стадию образования супрамолекулярного полимера на основе L-цистеина и ионов серебра. Водный раствор этого соединения – цистеин-серебряный раствор (ЦСР) и гидрогели на его основе – исследуются в наших работах с 2001 года. В настоящей работе осуществлен и описан ранее неизвестный способ синтеза НЧС на основе ЦСР.

В ходе работы было исследовано влияния концентрации ЦСР и типа восстановителя на размер синтезируемых НЧС. Для исследования влияния концентрации использовались ЦСР с разным разбавлением. Для исследования влияния типа восстановителя были использованы следующие соединения: борогидрид натрия, D-глюкоза, аскорбиновая кислота, гидразин гидрат. Кроме того использовалось УФ-излучение (254нм) для инициации и ускорения процесса образования НЧС на основе ЦСР без внесения дополнительных реагентов. Полученные НЧС исследованы методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), динамического светорассеяния (ДСР) и UV-vis спектроскопии.

В ходе исследования установлено, что уменьшение концентрации ЦСР приводит к уменьшению агрегации НЧС в растворе и незначительному росту размера отдельных частиц (при использовании борогидрида натрия в качестве восстановителя). Наиболее перспективными восстановителями супрамолекулярной гелеобразующей системы (в форме ЦСР) оказались борогидрид натрия и гидразин гидрат. Эти восстановители позволяют сократить время синтеза и получать НЧС определенного размера. Использование УФ-облучения позволяет получать НЧС на основе ЦСР размером порядка 10–20 нм без внесения дополнительных восстанавливающих реагентов.

*Работа выполнена в рамках программы У.М.Н.И.К. (государственный контракт № 6050p/8448 от 30.04.2008).*

Н.В. Батулина

## ЛИХЕНОИНДИКАЦИЯ КАК МЕТОД МОНИТОРИНГА ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

Руководитель А.Ф. Мейсунова

Тверская государственная медицинская академия

Кафедра биологии

Биоиндикация – один из специфических методов мониторинга загрязнения окружающей среды с помощью живых организмов. Эта методика отличается высокой эффективностью, не требует больших затрат и дает возможность характеризовать состояние среды за длительный промежуток времени. Биоиндикаторы не должны быть слишком чувствительными и слишком устойчивыми к загрязнению, должны быть с достаточно продолжительным жизненным циклом и широко распространены по планете, причем каждый вид должен быть приурочен к определенному местообитанию. Лишайники отвечают всем этим требованиям. Кроме того, долговременное воздействие низких концентраций загрязняющих веществ вызывает у лишайников такие повреждения, которые не исчезают вплоть до гибели их слоевищ.

Нами исследовано распространение лишайников в окрестностях завода «Химволокно». Результаты исследований показали, что территория завода является «лишайниковой пустыней». В окрестностях завода обнаружены 3 эпифитных вида лишайника и один эпигейный. К эпифитным видам относятся ксантория настенная (*Xanthoria parietina*), гипогимния вздутая (*Hypogymnia physodes*) и пармелия бороздчатая (*Parmelia sulcata*), эпигейный вид кладония оленья (*Cladonia rangiferina*).

Было выявлено, что численно преобладающим видом является ксантория настенная (*Xanthoria parietina*), которая относится к некрофильным видам и толерантна к загрязнениям окружающей среды. Примерно с одинаковой частотой встречались особи гипогимнии вздутой (*Hypogymnia physodes*) и пармелии бороздчатой (*Parmelia sulcata*), средне чувствительных к загрязнению видов. Самую малочисленную группу (4 особи) представляет вид кладония оленья (*Cladonia rangiferina*), что объясняется её высокой чувствительностью к загрязнению окружающей среды. Обнаружение этого вида лишайников, по нашему мнению, объясняется их ростом в относительной удалённости от территории завода и дороги.

Таким образом, на наш взгляд, целесообразно проводить химический анализ лишайников с территории вблизи завода, а также дальнейшие лишеноиндикационные исследования с целью анализа современной ситуации.

А.А. Беляева, Ю.А. Мельникова

## СИНТЕЗ ТЕТРАФТОРБОРАТОВ И ГЕКСАФТОРФОСФАТОВ БИС-(ДИМЕТИЛАМИД)МЕТИЛФОСФОНОВОЙ КИСЛОТЫ

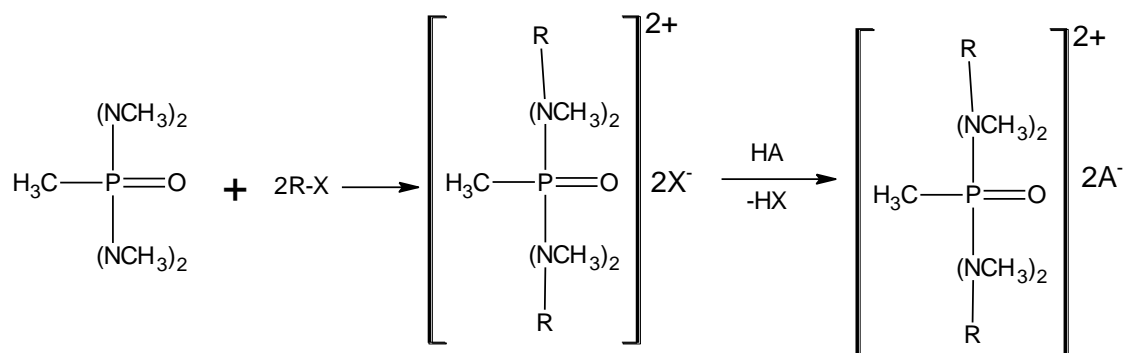
Руководитель О.Е. Журавлев

Тверской государственный университет  
Кафедра органической химии

Устойчивость и химическая инертность ионных жидкостей (ИЖ) наряду со сравнительной доступностью в значительной степени способствовала развитию исследований в области синтеза, катализа и других областях органической химии [1; 2]. Полученные еще в конце XX века ионные жидкости с гексафторфосфат- и тетрафторборат-анионами и различными органическими катионами (четвертичного аммония, диалкилимидазолия и N-алкилпиридиния) принадлежат к классу гидрофобных ионных жидкостей. Гидрофобность гексафторфосфатов и тетрафторборатов является значительным преимуществом при их применении в качестве ИЖ. В литературе не описаны гексафторфосфаты и тетрафторбораты в качестве органического катиона в которых выступает бис-(диметиламид)метилфосфоновая кислота.

Поэтому целью данной работы было получение гексафторфосфатов и тетрафторборатов бис-(диметиламид)метилфосфоновой кислоты и исследование их свойств.

Гексафторфосфаты и тетрафторбораты бис-(диметиламид)метилфосфоновой кислоты были получены из галогенидов путем обмена галогенид-аниона на  $PF_6^-$  и  $BF_4^-$ . Исходные галогениды были получены в результате реакций кватернизации различными алкилгалогенидами:



где, R=CH<sub>3</sub>, C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>, C<sub>6</sub>H<sub>13</sub>, C<sub>8</sub>H<sub>17</sub>, CH<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>, C<sub>12</sub>H<sub>25</sub>; X=Br<sup>-</sup>, I<sup>-</sup>; A=PF<sub>6</sub><sup>-</sup>, BF<sub>4</sub><sup>-</sup>.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shen H-J., Juolen Z.M.A. // Tetrahedron Letters. – 2003. – V.44. – P. 981.
2. Deng Y., Shi F., Beng J. // J. Mal. Catal. A:Chem. – 2001. – V.165. – P. 33.

В.А. Беляков

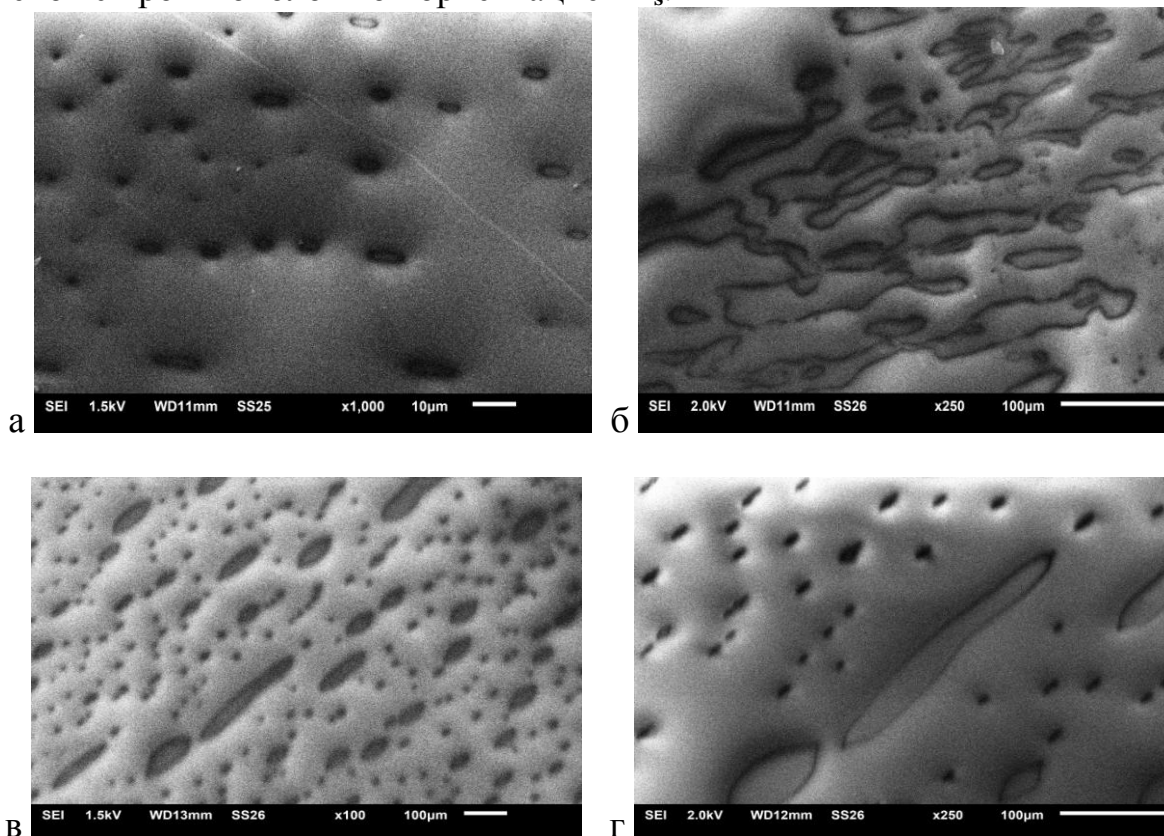
ДОМЕННАЯ СТРУКТУРА КОБАЛЬТ- И ХРОМСОДЕРЖАЩИХ  
КРИСТАЛЛОВ ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА

Руководитель Н.Н. Большакова

Тверской государственный университет  
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Цель работы – исследование влияния примесей ионов кобальта и хрома на доменную структуру кристаллов триглицинсульфата (ТГС).

Доменная структура кристаллов наблюдалась с помощью РЭМ. На рисунке приведены изображения доменной структуры исследуемых кристаллов. Видно, что структура беспримесного ТГС (а) представлена матрицей основного домена, внутри которого рядами расположены зародыши доменов с противоположной ориентацией  $P_s$ .



а – беспримесный ТГС; б –  $Co^{2+} 7 \cdot 10^{-3}$  в.п. ; в, г -  $Cr^{3+} 7 \cdot 10^{-3}$ ,  $Co^{2+} 1,5 \cdot 10^{-3}$  в.п.

Легирование кристаллов ТГС кобальтом и хромом приводит к появлению большого числа линзовидных доменов различных размеров. С увеличением концентрации хрома доменная структура измельчается (в, г).

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ  
ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛОВ  $LiIO_3$ 

Руководитель В.В. Иванов

Тверской государственной университет  
Кафедра физики сегнето – и пьезоэлектриков

Известны три модификации иодата лития: гексагональная ( $\alpha$ ), тетрагональная ( $\beta$ ) и «орторомбическая» ( $\gamma$ ) [1]. Среди большого числа пьезоэлектрических и нелинейно-оптических кристаллов галогенатных соединений, физические свойства которых интенсивно изучались в последние годы, наибольшее применение в прикладной физике нашли кристаллы гексагональной модификации иодата лития ( $\alpha - LiIO_3$ ) [2].

Настоящая работа посвящена исследованию температурной зависимости электропроводности монокристаллов  $LiIO_3$ . Электропроводность монокристалла  $LiIO_3$  исследовалась на постоянном электрическом токе. В качестве источника напряжения использовался ТЕС-13. Электрический ток измерялся усилителем электрометрическим У5-11, на выходе которого подключался вольтметр В7-34А. Образец, находящийся в специальном держателе, помещался в термостат. Температура измерялась термометром с погрешностью  $\pm 0,5$  °С. Температурный интервал измерений составлял 20-80°С. Использовались прижимные электроды. На поверхности образцов прямоугольного сечения были нанесены серебряные электроды методом вакуумного напыления.

Показано, что проводимость растет с ростом температуры по экспоненциальному закону в исследованном интервале температур (20-80°С). При изменении полярности температурная зависимость проводимости практически не меняется. Вычислены значения энергии активации проводимости в исследованном интервале температур.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Блистанов А.А. Кристаллы квантовой и нелинейной оптики. – Учебное пособие для вузов. – М.: "МИСИС", – 2000.
2. Авдиенко К.И., Богданов С.В., Архипов С.М. и др. Иодат лития. Выращивание кристаллов, их свойства и применение.- Новосибирск: Наука, – 1980.



СОДЕРЖАНИЕ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ В КОМПОСТАХ НА ОСНОВЕ  
ОСАДКА СТОЧНЫХ ВОД

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

В последнее время в мире значительно увеличилось количество сточных вод, собираемых посредством канализации города и поселков городского типа. Их состав весьма разнообразен по уровню загрязнения минерального, органического и бактериального происхождения. Все эти продукты содержатся в виде растворов, коллоидов, плавающих и взвешенных веществ. В процессе их очистки получают осветленные воды, поступающие в местные водоприемники, и осадок сточных вод (ОСВ).

ОСВ часто рассматривается как опасный отход, который необходимо утилизировать. Для этого предлагаются различные методы, в том числе посредством сжигания или захоронения. В осадке содержится большой набор макро- и микроэлементов, включая тяжелые металлы. Содержание общего азота, фосфора и калия достигает 12–15 кг/т физической массы, хотя обнаруживаются и особо контролируемые ионы металлов: свинец, хром, кадмий, ртуть и др. В чистом виде осадок вносить в почву не рекомендуют, поскольку он имеет несбалансированный состав основных элементов питания, входящих в него, иногда высокую концентрацию тяжелых металлов, избыточное количество патогенной микрофлоры, яиц гельминтов. ОСВ следует рассматривать как сырьё для приготовления компостов. В качестве наполнителей применяют материалы, имеющиеся в достаточном количестве в конкретном регионе (опилки, торф, птичий помет). Полученные нами компосты содержали больше чем в навозе основных питательных веществ, а количество ТМ в них не превышало ПДК (таблица).

Содержание ТМ в компостах на основе ОСВ и древесных опилок при соотношении ОСВ: опилки 1:3

| Показатели                    | Единицы измерения | Состав компостов |            |                         |  | ПДК   |
|-------------------------------|-------------------|------------------|------------|-------------------------|--|-------|
|                               |                   | ОСВ              | ОСВ+опилки | ОСВ:опилки +биопрепарат | ОСВ:опилки + биопрепарат на основе птичьего помёта |       |
| Через 2 месяца после закладки |                   |                  |            |                         |  |       |
| Свинец                        | мг/кг а.с.в.      | 56,39            | 8,7        | 8,9                     | 9,0  | 130,0 |
| Кадмий                        | -//-              | 2,22             | 0,42       | 0,45                    | 0,52   | 2,0   |
| Цинк                          | -//-              | 477,0            | 105,8      | 112,7                   | 118,5  | 220,0 |
| Медь                          | -//-              | 212,9            | 36,4       | 36,5                    | 38,8   | 132,0 |

Д.В. Боровиков, Е.А. Бровина, О.А. Баранова

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ КОЛИЧЕСТВЕННОГО СОСТАВА НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ В ЛАКТИДЕ ОТ УСЛОВИЙ ХРАНЕНИЯ

Руководители: Т.И. Самсонова, Т.И. Подольская  
ФГУП «ВНИИСВ»

При получении полимолочной кислоты (ПМК) одной из стадий процесса является синтез лактида – циклического эфира двух молекул молочной кислоты (МК). Лактид получают, как правило, из низкомолекулярного полилактида, в результате синтеза в готовом продукте возможно наличие определенного количества примесей не прореагировавшей МК и олигомеров. Присутствие низкомолекулярных соединений (НМС) МК и олигомеров с малой степенью полимеризации в лактиде оказывает негативное влияние на скорость полимеризации и молекулярную массу синтезируемой ПМК. Поэтому, качество лактида определяется содержанием в нем молочной кислоты и её олигомеров.

Настоящая работа посвящена исследованию влияния условий хранения лактида на состав и количество НМС.

Содержание лактида в образцах определяли методом капиллярного электрофореза. Для исследований были взяты очищенный и неочищенный образцы лактида. Образцы хранили в условиях разных температур и влажности, при этом с определенной периодичностью вели мониторинг содержания МК и олигомеров.

Полученные результаты показали, что накопление в лактиде МК и ее олигомеров существенно зависит от температуры и влажности окружающей среды. Высокие температуры и влажность ускоряют гидролиз лактида. При хранении лактида при низких температурах замедление накопления примесей НМС скорее всего происходит не за счет уменьшения скорости реакции, вызванного снижением температуры, а за счет низкого содержания влаги в воздухе. Основной примесью накапливающейся при хранении лактида является линейный димер МК, поэтому, очевидно, первой реакцией протекающей при гидролизе лактида является присоединение одной молекулы воды к одной молекуле лактида с раскрытием его кольца и образованием димера. Образование МК в системе происходит при гидролизе димера, тримера и тетрамера.

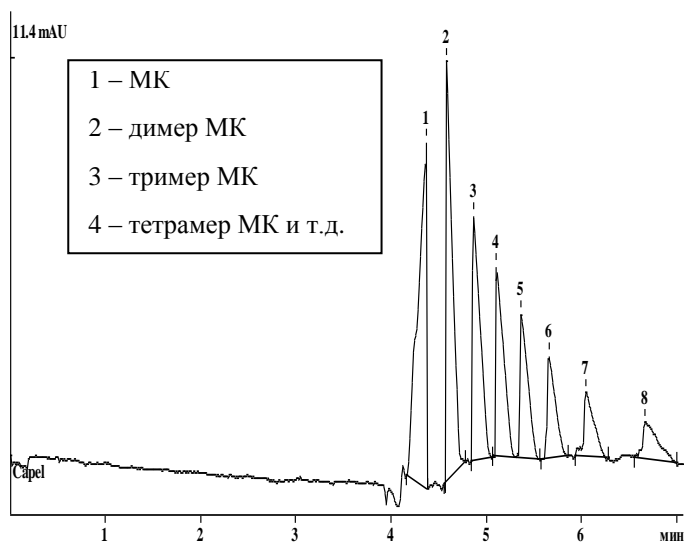
## ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ И ЕЕ ОЛИГОМЕРОВ В ЛАКТИДЕ

Руководители: Т. И. Самсонова, Т. И. Подольская  
ФГУП «ВНИИСВ»

Главным критерием качества лактида-мономера в синтезе полимолочной кислоты, является минимальное содержание молочной кислоты (МК) и её олигомеров. Поэтому определение содержания МК и олигомеров в лактиде является актуальной задачей.

В ходе данной работы разработан и опробован прямой способ качественного и количественного определения МК и ее олигомеров в лактиде методом капиллярного электрофореза (КЭФ). Был применен вариант КЭФ с отрицательной полярностью напряжения, используемый при анализе любых анионов. В состав ведущего электролита был введен бромид цетилтриметиламмония (ЦТАБ) с целью обращения ЭОП в сторону детектора и диэтаноламин (ДЭА) для формирования рН 5,1, необходимого для диссоциации МК и ее олигомеров. Дополнительным компонентом ведущего электролита является ЭДТА, что позволяет корректировать формы пиков. Детектирование вели косвенным способом в УФ-области спектра при 254 нм, поэтому основой буфера для анализа является анион, имеющий заметное поглощение при этой длине волны (нами выбрана бензойная кислота). Приложенное к капилляру напряжение составило 20кВ.

В качестве растворителя использовался ацетонитрил как доступный



Электрофореграмма раствора образца реакционной смеси с начальной стадии синтеза лактида

растворитель, не имеющий поглощения на 254 нм. На рисунке приведен пример электрофореграммы образца лактида со средней стадии его синтеза, иллюстрирующей олигомерный ряд полимолочной кислоты, в том числе и МК.

Таким образом, разработанный способ не требует специальной пробоподготовки образца лактида кроме растворения. К другим преимуществам данного метода относятся экспрессность, простота исполнения и невысокая затрата реагентов.

Е.С. Булюкин, О.А. Подковина

## ВЛИЯНИЕ НЕКОРНЕВЫХ ПОДКОРМОК НА ПРОДУКТИВНОСТЬ ГОЛОЗЕРНОГО ОВСА ПРИ РАЗНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ ВОЗДЕЛЫВАНИЯ

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия  
Кафедра общего земледелия и растениеводства

Инновационный путь развития экономики страны требует более полного использования всех достижений науки. В последние годы на сельскохозяйственном рынке появились новые высокотехнологичные препараты, такие, как гуминовое удобрение Макс-Супергумпт, микроэлементное – Аквадон-Микро и наноматериалы, полученные на основе серебра. Однако их роль в повышении урожая зерновых культур, в том числе голозерного овса, изучена недостаточно. В связи с этим нами была поставлена цель – выявить эффективность применения этих препаратов в технологиях возделывания голозерных сортов овса.

В этой связи нами в 2012 году проведен полевой трехфакторный опыт по следующей схеме: А – сорта: А<sub>1</sub> – Вятский, А<sub>2</sub> – Першерон; В – технологии: В<sub>1</sub> – экологически чистая, без удобрения, В<sub>2</sub> – экологически безопасная, удобрения в расчете на урожай 3т/га, В<sub>3</sub> – интенсивная, удобрения в расчете на урожай 4т/га; С-препараты для некорневых подкормок: С<sub>1</sub> – без подкормки, С<sub>2</sub> – Агругумат Экстра, 1% раствор (АЭ), С<sub>3</sub> – Макс-Супергумат, 1% раствор (МСГ), С<sub>4</sub> – Аквадон-Микро, 1% раствор (АМ), С<sub>5</sub> – наноматериал – АгБион-2, 0,1% раствор (НМ). Объекты исследования – сорта голозерного овса: Вятский и Першерон.

В результате исследований выявлено: 1) применение всех препаратов для некорневых подкормок посевов сорта Першерон существенно снижает численность (на 33,3–60,8%) и массу сорняков (на 48,0–63,2%); 2) некорневые подкормки всеми препаратами, как правило, увеличивают площадь листьев и ФП посева. По экологически чистой технологии в большей мере у обоих сортов эти показатели повышает Агругумат Экстра, по экологически безопасной и интенсивной – Аквадон-Микро; 3) использование всех препаратов для некорневых подкормок повышает густоту продуктивного стеблестоя. Более стабильное влияние по обоим сортам наблюдается от использования Макс-Супергумата. По экологически чистой технологии наибольшее количество продуктивных побегов сформировалось в варианте с АгБион-2. Повышение густоты продуктивного стеблестоя в большей мере обусловлено увеличением продуктивной кустистости; 4) все препараты оказали положительное влияние на урожайность. Наибольшие прибавки урожая получены в варианте с Макс-Супергуматом, в среднем по фонам – 6,3 (Вятский) и 4,5 ц/га (Першерон) (33,3 и 21,0%); 5) самый высокий дополнительный условно чистый доход по сорту Вятский при всех вариантах технологий получен при применении для некорневой подкормки Макс-Супергумат (10 277 руб./га, в среднем), по сорту Першерон – Макс-Супергумат (7 256 тыс.руб./га) и АгБион-2 (7 124 тыс. руб/га).

А.О. Буторин

## ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКИЕ И ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЁНОК $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$

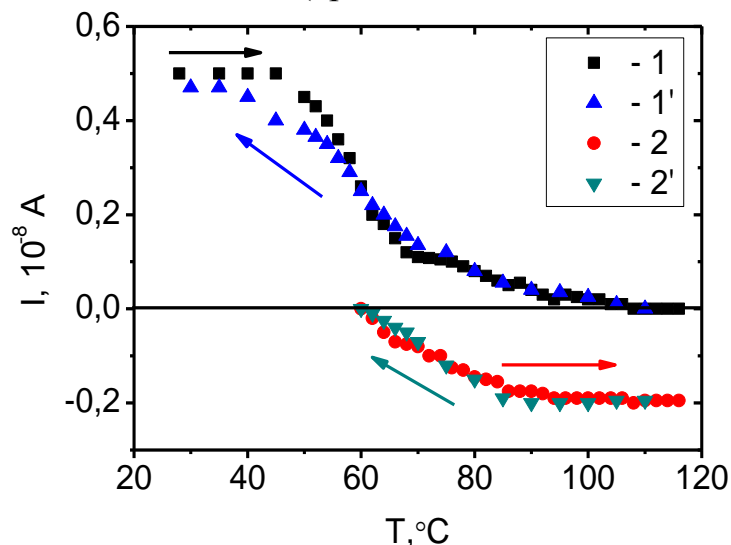
Руководитель: А.В. Солнышкин.

Тверской государственной университет  
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Пленки  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$  являются перспективным материалом для функциональных элементов современной микроэлектроники и сенсорной техники. Цель работы заключалась в изучении фотовольтаических и фотоэлектрических свойств пленок  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ .

Исследования проводились на пленочных структурах  $\text{Al}/\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6/\text{Al}$  полученных методом вакуумного термического испарения в квазизамкнутом объеме (НИИ физики ЮФУ).

На основе амплитудных значений фотоотклика получены его температурные зависимости (рис. 1), которые построены как для сигнала, совпадающего по фазе с опорным, так и для противофазного начального выброса тока. Исследования выполнены как в процессе нагрева (кривые 1 и 2), так и охлаждения (кривые 1' и 2').



Температурные зависимости фотовольтаического отклика пленок  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$

Исследованы фотовольтаические и фотоэлектрические свойства пленочных структур  $\text{Al}/\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6/\text{Al}$  в широком температурном интервале, включающем точку фазового перехода для материала  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ , для случаев собственного и несобственного поглощения света.

На рисунке представлены температурные зависимости фотовольтаического отклика пленок  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ , полученные при использовании света с длиной волны 520 нм (ширина полосы 60 нм): 1-1' — амплитуда фотовольтаического отклика, совпадающего по фазе с опорным сигналом; 2-2' — амплитуда начального выброса фотовольтаического тока, противоположного по фазе к опорному сигналу. Изучены фотовольтаические и

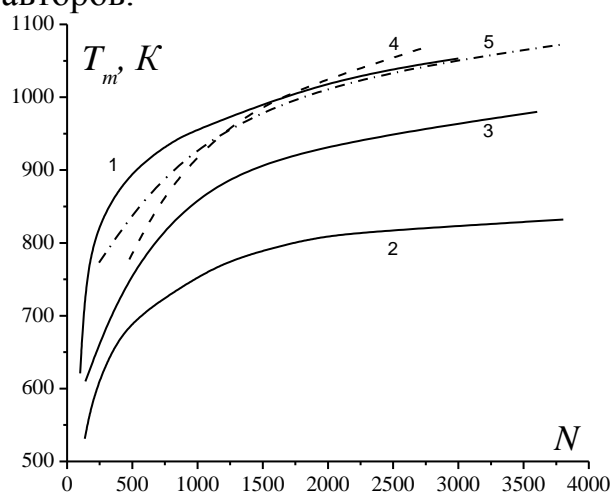
## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В НАНОКЛАСТЕРАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Руководитель В.М. Самсонов

Тверской государственной университет

Кафедра теоретической физики

Металлические нанокластеры, в том числе нанокластеры переходных металлов (Ni, Au и др.) имеют ряд перспектив применения в нанотехнологии, в том числе в нанoeлектронике. Свойства металлических кластеров сильно зависят от их структуры. В частности особые магнитные характеристики нанокластеров Ni и Au проявляются только в том случае, когда последние характеризуются ГЦК-структурой. Кристаллическая структура кластеров разрушается при достижении температуры плавления  $T_m$ , которая, в свою очередь, зависит от размера наночастиц. А.Г. Бембелем\* была разработана компьютерная программа для моделирования наночастиц различной природы, в том числе металлических нанокластеров. Однако эта программа не была в полной мере апробирована. Нами были проведены расчеты размерных зависимостей температуры плавления для нанокластеров Ni и Au с использованием потенциала сильной связи. Из рисунка видно, что наши результаты гораздо лучше согласуются с результатами прямых экспериментов, чем результаты других авторов.



Размерная зависимость  $T_m$  нанокластеров Au. 1 – наши результаты, 2 и 3 – молекулярно-динамические результаты других авторов (Головенько 2012; Zhang Yan-Ning et al. 2003), 4 и 5 – эксперимент (Buffat, Borel 1976; Dick. K. et al. 2002).

\* Бембель А.Г. Дис. «Молекулярно-динамическое моделирование структурных и фазовых превращений в свободных нанокластерах и наночастицах на поверхности твердого тела» канд. физ.-мат. наук, Тверь, Тверской государственной университет, 2012.

Д. В. Васильева

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГЛУТАМИНОВОЙ КИСЛОТЫ С ПОМОЩЬЮ  
СЕНСОРА НА ОСНОВЕ ПОЛИАНИЛИНА

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Глутаминовая кислота ( $\alpha$ -аминоглутаровая) является одной из важнейших аминокислот растительных и животных белков. Контроль её содержания в различных объектах имеет важное значение. Наиболее перспективными для этого, на наш взгляд, являются химические сенсоры. Поэтому цель настоящей работы – создание химического сенсора для определения содержания глутаминовой кислоты в растворе.

Учитывая, что глутаминовая кислота легко окисляется, мы решили для ее количественного определения использовать метод циклической вольтамперометрии (ЦВА). Предварительные эксперименты показали, что использовать для этого платиновые или стеклоуглеродные электроды не возможно, т. к. не удастся получить устойчивые результаты. Поэтому в качестве рабочего электрода (сенсора) мы использовали пленки полианилина (ПАНи) и политолуидина (ПТ).

Синтез ПАНи и ПТ осуществляли методом ЦВА по классической схеме. В процессе синтеза наблюдался постепенный рост катодных и анодных пиков, что свидетельствовало о увеличении толщины пленки электропроводного полимера на поверхности платиновой подложки. Процесс останавливали после 20 циклов сканирования потенциала.

Изготовленные сенсоры использовались для определения методом ЦВА содержания глутаминовой кислоты в растворе. Для этого проводилось циклирование потенциала рабочего электрода в интервале 200 + 1000 мВ в растворах, содержащих глутаминовую кислоту различных концентраций на фоне 0,01 – 1 моль/л соляной кислоты. Наиболее устойчивые результаты получаются при использовании 0,01 М HCl. В процессе циклирования потенциала наблюдались катодные и анодные пики. Величина катодного пика существенным образом зависит от концентрации глутаминовой кислоты.

В качестве сенсора использовали пленку не только ПАНи, но и ПТ, нанесенную на платиновую подложку. Рабочий электрод был синтезирован аналогично электроду с использованием ПАНи. Платиновый электрод с нанесенной пленкой ПТ также показал устойчивую работу.

Исходя из вышеизложенного, можно сделать выводы, что данные сенсоры могут найти практическое применение для анализа содержания глутаминовой кислоты в различных объектах.

ВЛИЯНИЕ РЕЖИМОВ ТЕРМИЧЕСКИХ ОБРАБОТОК  
НА МИКРОСТРУКТУРУ И ПРОЦЕССЫ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ  
ПОСТОЯННЫХ МАГНИТОВ ТИПА R-Fe-Co-B-Al

Руководитель Ю.Г. Пастушенков

Тверской государственной университет

Кафедра магнетизма

На основе сплавов Nd-Fe-B изготавливаются высокоэнергоемкие постоянные магниты (ПМ), обладающие экстремально высокими магнитными характеристиками. Производство редкоземельных ПМ на основе сплавов системы Nd-Fe-B является одной из наиболее динамично развивающихся отраслей промышленности [1]. В настоящее время ведется активный поиск наиболее эффективного состава для магнитного материала на основе сплава Nd-Fe-B и уже известно довольно много модификаций магнитов этого типа с добавлением тяжелых РЗМ, кобальта и ряда других химических элементов [2]. Целью научного поиска является увеличение коэрцитивной силы и температурной стабильности ПМ.

Задачей данного исследования является изучение влияния режимов термических обработок (ТО) на микро- и наноструктуру, фазовый состав, магнитную доменную структуру и магнитные свойства постоянных магнитов RFeCoBAl, где R = Nd, Pr, Gd, Dy, Tb.

ПМ были изготовлены ООО «НПК "Магниты и магнитные системы"» (г.Москва) по стандартной технологии с последующей ТО по двум режимам: 1) 900°C в течение 2 часов (закалка) и 2) 900°C в течение 2 часов с последующим медленным охлаждением до 500°C и дальнейшим охлаждением до комнатной температуры. Экспериментальные исследования микро- и наноструктуры проводились методами оптической, электронной и сканирующей зондовой микроскопии.

Показано, что средний размер зерен в ПМ составляет порядка 22 мкм и существенно не зависит от режима ТО. Однако применение медленного охлаждения приводит к увеличению коэрцитивного поля ( $H_{cl}$ ) постоянных магнитов от 16,2 кЭ до 20,5 кЭ. Такой результат объясняется тем, что при медленном охлаждении происходит диффузия элементов в граничную фазу, что и приводит к росту  $H_{cl}$ .

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Herbst J.F., Croat J.J. Neodymium-iron-boron permanent magnets // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 1991. – V.100. – P. 57–78.
2. Шакин А.В., Лукин А.А., Скуратовский Ю.Е., Добрынин Н.А. Редкоземельные бескобальтовые магнитотвердые материалы с повышенной эксплуатационной стойкостью // Перспективные материалы. – 2011. – №11. С. 269–273.



## ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕРАМИКИ PMN И PMN-20РТ

Руководитель А.В. Солнышкин

Тверской государственной университет  
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

В работе исследованы пироэлектрические свойства образцов керамики магнониобата свинца  $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$  (PMN) и твердых растворов на его основе  $0,8 \text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3 - 0,2 \text{PbTiO}_3$  (PMN-20РТ). Материалы PMN и PMN-20РТ относятся к соединениям, обладающим размытым фазовым переходом (релаксорам) [313]. Максимумы низкочастотной диэлектрической проницаемости приходятся на температуры  $\sim 260$  К (PMN) и 350 К (PMN-20РТ).

На свежеприготовленных образцах керамики PMN толщиной 0,68 мм и PMN-20РТ толщиной 0,72 мм получены петли диэлектрического гистерезиса в интервале температур  $20 \div 120$  °С (рис. 1). В указанном температурном диапазоне для образца керамики PMN зависимости  $P(E)$  линейны и отсутствует остаточная поляризация (рис 1, а), тогда как образцы керамики PMN-20РТ характеризуются наличием макроскопической переключаемой поляризации до температуры  $\sim 80$ °С (рис 1, б).

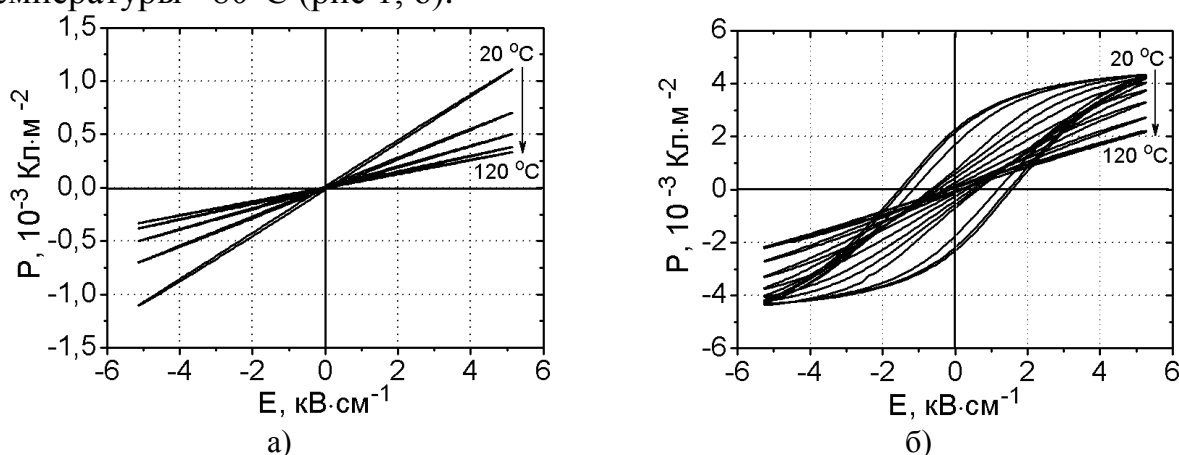


Рис. 1. Петли диэлектрического гистерезиса, полученные методом Соьера–Тауэра для образцов керамики PMN (а) и PMN-20РТ (б)

После воздействия переменного электрического поля исследуемые образцы обнаруживают заметный пироэлектрический отклик, а также в приповерхностной области формируются слои с «замороженной» встречной поляризацией, которые можно объяснить в рамках модели внутренних случайных полей.

О.В. Виноградов

## ТВЁРДОКОНТАКТНЫЙ ИОНОСЕЛЕКТИВНЫЙ ЭЛЕКТРОД НА АЛЮМИНИЙ

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Известно, что для ионометрического контроля соединения  $Al^{3+}$  до сих пор нет надёжного ионоселективного электрода. В литературе встречаются отдельные работы, связанные с изготовлением мембранного ионоселективного электрода с жидкостным внутренним электродом сравнения. Известно так же, что использование вместо внутреннего электрода сравнения электронно-ионного трансдюсера на основе электропроводных полимеров позволяет значительно улучшить метрологические характеристики электрода. Поэтому целью настоящей работы было создание твёрдоконтактного ионоселективного электрода на алюминий с трансдюсером.

Для ионоселективного электрода мы использовали ионообменную мембрану, приготовленную по классической схеме. Мембрана содержала диоктилфталат 55%, поливинилхлорид 40% и электродактивное вещество 5% – комплекс алюминия с ализарином. Для стабилизации потенциала на границе ионоселективная мембрана-токоотвод (с электронной проводимостью) мы использовали трансдюсер на основе полианилина. В качестве токоотвода мы использовали графит. Изготовленный таким образом электрод имел широкий диапазон линейности электродной функции в интервале: 1–6 рС. Крутизна электродной функции составила 19 мВ/рС. Время отклика не превышало 20 секунд, при этом значения потенциала были стабильными. Электрод сохранял работоспособность в интервале температур 15–70<sup>0</sup>С. Рабочий диапазон рН: 2–4. Ионометрическому анализу практически не мешают ионы меди, цинка, кальция, магния и калия. Важной особенностью данного электрода является отсутствие в его конструкции драгоценных металлов, что можно рассматривать как преимущество. Изготовленный электрод был использован при анализе модельных смесей, содержащих  $Al^{3+}$ , при этом взятые и найденные значения находились в хорошем соответствии. Относительная погрешность не превышала 10%. Исходя из вышеизложенного можно считать, что предложенный электрод может найти применение в аналитической практике и имеет хорошие перспективы для коммерциализации.

К.Ю. Володько

## ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ КОМПОСТОВ НА ОСНОВЕ ОСАДКА СТОЧНЫХ ВОД г. ТВЕРИ

Руководитель И.Н. Барановский  
Тверская государственная сельскохозяйственная академия  
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

В процессе очистки сточных канализационных вод получается твердый осадок (ОСВ), который содержит большое количество органического вещества и элементов питания для растений, поэтому может быть использован в качестве удобрения. Однако в нем часто содержится повышенное количество тяжелых металлов (ТМ), что сдерживает его непосредственное применение для внесения в почву. На основе ОСВ целесообразно готовить компосты, а в качестве наполнителей задействовать те органические субстраты, которые имеются в конкретном регионе.

В наших исследованиях такие компосты мы готовили, смешивая ОСВ с опилками и торфом при соотношении ОСВ: торф как 1:2; 1:3 и 1:5. Спустя 2 месяца после закладки определяли их химический состав (таблица).

Химический состав компостов на основе ОСВ

| Показатели                         | Единицы измерения | Состав компостов             |                 |                 |                 |               |               |               |
|------------------------------------|-------------------|------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|---------------|---------------|---------------|
|                                    |                   | контроль (осв в чистом виде) | осв: опилки 1:2 | осв: опилки 1:3 | осв: опилки 1:5 | осв: торф 1:2 | осв: торф 1:3 | осв: торф 1:5 |
| Влажность                          | %                 | 79,6                         | 71,7            | 74,2            | 75,6            | 67,3          | 63,4          | 64,8          |
| Зольность                          | %                 | 42,0                         | 11,1            | 6,45            | 4,1             | 41,57         | 48,7          | 47,18         |
| Кислотность                        | pH                | 7,87                         | 7,38            | 7,36            | 6,98            | 6,55          | 6,48          | 6,45          |
| N общ.                             | %                 | 3,95                         | 2,15            | 2,09            | 2,02            | 3,67          | 3,47          | 3,78          |
| P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> общ. | %                 | 3,33                         | 0,62            | 0,42            | 0,37            | 0,61          | 0,51          | 0,45          |
| K <sub>2</sub> O общ.              | %                 | 0,37                         | 0,15            | 0,11            | 0,09            | 0,16          | 0,15          | 0,14          |
| Подвижное железо                   | мг/100г.          | 36,7                         | 5,3             | 1,9             | 1,2             | 10,1          | 8,1           | 7,3           |
| C-органич. в-ва                    | %                 | 29,0                         | 44,4            | 46,7            | 47,9            | 29,2          | 25,6          | 26,4          |
| C/N                                | разы              | 7,3                          | 20,6            | 22,3            | 23,7            | 7,9           | 7,4           | 7,0           |

В полученных компостах по сравнению с ОСВ содержалось гораздо меньше подвижного железа и исследуемых элементов азотного и зольного питания, но зато они соответствовали требованиям ГОСТа по ТМ. Количество свинца, кадмия, цинка, меди, хрома, марганца, мышьяка и ртути уменьшилось в 4–10 раз. Полученные компосты исходя из их состава можно вносить для удобрения садово-парковых насаждений, а также в полевых севооборотах.

М.С. Воронцов

ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЕ В НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ  
ВОДНЫХ РАСТВОРАХ НА ОСНОВЕ  
N-АЦЕТИЛ-L-ЦИСТЕИНА И  $\text{AgNO}_3$

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

Супрамолекулярные гели с низкой концентрацией привлекают повышенное внимание в связи с перспективами множества применений, включая пересадку органов, транспортировку и контролируемое высвобождение лекарств, фармацевтические препараты и др. Аминокислоты являются интересными кандидатами для гелеобразования, так как они могут самоорганизовываться с использованием различных нековалентных взаимодействий, в том числе Н-связей, электростатических,  $\pi$ - $\pi$  и гидрофобных взаимодействий. Эти взаимодействия могут приводить к формированию организованных супрамолекулярных ансамблей, которые могут связывать большое количество молекул воды при соответствующих условиях.

Недавнее исследование гидрогелей на основе L-цистеина\* показывает, что гелеобразование в системе происходит при очень низкой минимальной концентрации, менее 0,015% объёма и может быть вызвано добавлением электролитов с определенными анионами, щелочей или некоторых неэлектролитов, например, спиртов. L-цистеин является уникальной аминокислотой, имеет три функциональные группы – тиольную, карбоксильную и аминогруппу, расположенные недалеко друг от друга. Механизм гелеобразования и роли каждой группы в процессе не понят полностью. Для уточнения механизма важно узнать условия гелеобразования в различных системах на основе производных цистеина. Обнаружено, что N-ацетил-L-цистеин (НАС) и нитрат серебра также образуют супрамолекулярные гидрогели при низких концентрациях.

В молекуле НАС в отличие от L-цистеина атом водорода аминогруппы замещен на ацетильную группу, которая изменяет кислотно-основные свойства молекулы, распределение заряда в функциональных групп и, как следствие, условия гелеобразования. Гелеобразование в новой системе является одностадийным процессом, происходящем в узком диапазоне рН (2,4–2,6) и концентрации исходных компонентов (0,90–1,75 мМ) при молярном отношении 1:1. Результаты ПЭМ показали, что трехмерные сети геля НАС состоят из нановолокон. Исследования геля на основе системы НАС- $\text{AgNO}_3$  с помощью различных методов (УФ- и ИК спектроскопии, динамическое рассеяние света, ПЭМ) позволило предложить механизм гелеобразования в этой супрамолекулярной системе.

---

\* Овчинников М.М., Хижняк С.Д., Пахомов П.М. // Журнал структурной химии. – 2011. – Т. 52. – С. 1167.

## МОДИФИКАЦИЯ УГЛЕРОДНЫХ ВОЛОКОН НАНО- И МИКРОЧАСТИЦАМИ ВИСМУТА

Руководитель Е.В. Саклакова

Санкт-Петербургский университет технологии и дизайна

Кафедра Наноструктурных, волокнистых и композиционных материалов им. А.И. Меоса

В последние годы особенно интенсивно развивается новая группа углеродных волокнистых материалов, содержащих в своем составе металлы и их соединения. Несмотря на исследования влияния различных факторов на сорбцию металлов углеродными сорбентами, механизм процесса во многих случаях окончательно не установлен. Так же открытым является вопрос о том, в какой форме сорбируются металлы [1; 2].

В данной работе проведено исследование сорбции висмута активированными углеродными волокнами (АУВ). Изучены зависимости сорбционной емкости (СЕ) и степени извлечения (А) от концентрации исходного раствора соли висмута, при различном времени сорбции и температуре. В качестве сорбента выбрано активированное углеродное волокно со следующими характеристиками: объем сорбционного пространства  $0,3 \pm 0,01$  см<sup>3</sup>/г, влажность  $25 \pm 1$  %. Сорбцию проводили из водного раствора основного нитрата висмута, с концентрацией от 0,005 до 0,1 моль/л, при температурах от 22 до  $42 \pm 2$ °С. Так же варьировалось время контакта сорбента с раствором соли от 5 минут до 24 часов.

Закономерности адсорбции висмута при разных условиях

| Характеристика | 22 ± 2 °С                     |                             |                               |                             | 42 ± 2 °С                     |                             |                               |                             |
|----------------|-------------------------------|-----------------------------|-------------------------------|-----------------------------|-------------------------------|-----------------------------|-------------------------------|-----------------------------|
|                | 10 минут                      |                             | 24 часа                       |                             | 10 минут                      |                             | 24 часа                       |                             |
|                | С <sub>исх</sub> 0,005 моль/л | С <sub>исх</sub> 0,1 моль/л | С <sub>исх</sub> 0,005 моль/л | С <sub>исх</sub> 0,1 моль/л | С <sub>исх</sub> 0,005 моль/л | С <sub>исх</sub> 0,1 моль/л | С <sub>исх</sub> 0,005 моль/л | С <sub>исх</sub> 0,1 моль/л |
| СЕ, мг/г       | 44                            | 688                         | 41                            | 486                         | 28                            | 244                         | 47                            | 204                         |
| А, %           | 46                            | 32                          | 43                            | 22                          | 29,2                          | 11                          | 49                            | 9,3                         |

С ростом концентрации исходного раствора, возрастает сорбционная емкость и степень извлечения. Для ряда образцов увеличение времени сорбции приводит к снижению сорбционной емкости и степени извлечения, а для некоторых образцов напротив, наблюдается снижение этих показателей. Так же было отмечено уменьшение сорбционной емкости и степени извлечения висмута с увеличением температуры.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лысенко А.А. Структура и свойства металлосодержащих композитов на основе углеродных активированных волокон [текст] /А.А. Лысенко // Физикохимия полимеров: сб. науч. тр. ТГУ. Вып. 4. – Тверь, 1998. – С. 52.
2. Лысенко А.А. Адсорбция ионов металлов на углеродных волокнах с различной пористостью и удельной поверхностью [текст] /А.А. Лысенко // Междунар. конф. по коллоидной химии и физико-химической механике, 4 - 8 окт. 1998. – М., 1998. – 403 с.

Н. А. Горбачева

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОГЛОЩЕНИЯ ИОНОВ МЕТАЛЛОВ  
ПОЛИАНИЛИНОМ

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Полианилин (ПАНИ) широко используется для создания композиционных материалов, сенсоров. Для этих целей в основном используют ПАНИ, допированный органическими и неорганическими кислотами. Это обусловлено тем, что наибольшую электропроводимость данный полимер имеет в допированном состоянии. При этом анионы кислот удерживаются в основном за счет ионной связи, образованной с атомами азота. В то же время известно, что многие каталитические металлы способны образовывать устойчивые комплексы с различными аминосоединениями, поэтому для придания новых свойств ПАНИ и его аналогам интересно оценить комплексообразование ионов меди с ПАНИ. Следовательно, целью настоящей работы была оценка адсорбированной способности ПАНИ ионов меди.

Известно, что ПАНИ может находиться при различных степенях окисленности и различных степенях допирования. Очевидно, что этот фактор может существенным образом повлиять на адсорбционные способности ионов меди, потому мы использовали ПАНИ в форме эмеральдина (Э) и лейкоэмеральдина (ЛЭ). Синтез Э ПАНИ осуществляли по классическому методу из подкисленного раствора анилина с использованием персульфата аммония. Полученный таким образом ПАНИ был отмыт, высушен, переведен в соответствующую форму ЛЭ путем его обработки восстановителем – гидразин гидратом. Степень допирования каждой из этих форм изменяли путем обработки либо соляной кислотой, либо концентрированным раствором аммиака. Для изучения адсорбции мы обработали указанные формы ПАНИ 0,5 М раствором  $\text{CuCl}_2$ , осадок отделили от матричного раствора и анализировали на содержание меди. Было выяснено, что наилучшими сорбционными свойствами по отношению к ионам меди обладает депротонированный ЛЭ, меньшими – протонированный Э. Вероятно, это можно объяснить основностью атома азота в форме ЛЭ по сравнению с Э.

Обнаруженный эффект сорбции ионов меди ПАНИ может быть использован для создания новых композиционных материалов.

*Работа выполнена при поддержке программы стратегического развития ТвГУ, проект № 2.1.2.5.*

А.Н. Громов

## ВЛИЯНИЕ АГРОГУМАТА КАЛИЯ НА СОДЕРЖАНИЕ ПОДВИЖНЫХ ФОРМ ЭЛЕМЕНТОВ ПИТАНИЯ В ПОЧВЕ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия  
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

В современных технологиях возделывания сельскохозяйственных культур широкое применение находят различные агрохимикаты – биостимуляторы. Одним из перспективных препаратов подобного действия является гумат калия. Сырьем для получения гуматов служат субстраты с высоким содержанием органического вещества: торф, сапрпель, каменный уголь. Технология получения их заключается в обработке выбранного материала слабыми растворами щелочей. Готовый продукт в десятки раз физиологически более активен, чем исходное сырье.

За последние годы при производстве гуматов стали использовать принцип механохимии, когда проводится механическое воздействие на исходные органические материалы с целью их максимально возможного измельчения. В результате происходит увеличение поверхности обработанного твердого тела за счет получения мельчайших частиц, что оказывает влияние на биологическую активность гуматов.

Мы исследовали эффективность гумата калия в звене полевого севооборота. Первой культурой шла вико-овсяная смесь. Полученные данные по питательному режиму, который складывался в почве по вариантам опыта, свидетельствуют о его заметном преимуществе на удобренных вариантах (таблица).

Влияние агрогумата калия на питательный режим дерново-подзолистой почвы, мг/кг почвы, 2012 год

| N<br>п/п | Вариант опыта                               | Средние значения из 3-х определений за сезон |                 |                               |                  |
|----------|---|--|-----------------|-------------------------------|------------------|
|          |   | NH <sub>4</sub>                              | NO <sub>3</sub> | P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> | K <sub>2</sub> O |
| 1        | Контроль                                    | 9,2  | 5,7             | 160,3                         | 117,6            |
| 2        | Агрогумат 300 кг/га                         | 10,1   | 6,6             | 244,6                         | 121,0            |
| 3        | Агрогумат 500 кг/га                         | 12,1   | 7,4             | 250                           | 127,3            |
| 4        | Агрогумат 300 кг/га+NPK                     | 12,3   | 8,3             | 243                           | 128,0            |
| 5        | Агрогумат 500 кг/га+NPK                     | 11,6   | 10,0            | 244,6                         | 133,6            |
| 6        | Прибавка на удобренных вариантах к контролю | 0,9-3,1                                      | 0,8-4,4         | 82,7-89,3                     | 3,4-16,0         |

Самая высокая урожайность (31,2 ц/га кор. ед.) получена в пятом варианте.

А.А. Гусаров

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ КИСЛОТ И СОЛЕЙ НА РАСТВОРИМОСТЬ  
КАЛЬЦИЯ ГЛЮКОНАТА И РАЗРАБОТКА  
ЕГО СТАБИЛЬНОГО 10% РАСТВОРА

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Кальций является неотъемлемым элементом тканей и жидкостей организма. Соли кальция довольно давно и успешно используются как лекарственные и лечебно-профилактические препараты в случае дефицита кальция: при беременности, переломах, длительной иммобилизации больных, вегетативных расстройствах, аллергических заболеваниях, кровотечениях. Из всех существующих лекарственных форм наиболее эффективной является 10% раствор кальция глюконата для инъекций.

Нами изучено влияние органических кислот и их солей на растворимость кальция глюконата и установлена возможность ее повышения. Показано, что в присутствии яблочной, молочной, лимонной кислот растворимость кальция глюконата возрастает до 9,80, 14,8 и 16 % соответственно.

Изучено влияние кальциевых солей молочной и аскорбиновой кислот и показано, что в их присутствии растворимость кальция глюконата возрастает до 11,5 и 9,35%.

*Работа выполнена при поддержке гранта ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 годы (Соглашение № 14.В37.21.0653).*

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вергейчик Е.Н. // Вопросы биологической, медицинской и фармацевтической химии. – 2007. – №2. – С. 16–18.
2. Губанова Л.Б. Разработка, исследование и маркетинг новой фармацевтической продукции. – Пятигорск, 2006. – Вып. 61. – С.285–287.



Д.А. Гусев

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТРИБОТЕХНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК  
ПОЛИТЕТРАФТОРЭТИЛЕНА

Руководитель В.В. Измайлов

Тверской государственной технической университет  
Кафедра прикладной физики

Политетрафторэтилен (ПТФЭ) нашел широкое распространение не только благодаря жаропрочности, химической и биологической инертности, но и во многом благодаря своим антифрикционным свойствам. Согласно молекулярно-механической теории трения коэффициент трения при упругом контактировании поверхностей деталей, составляющих пару трения, выражается формулой

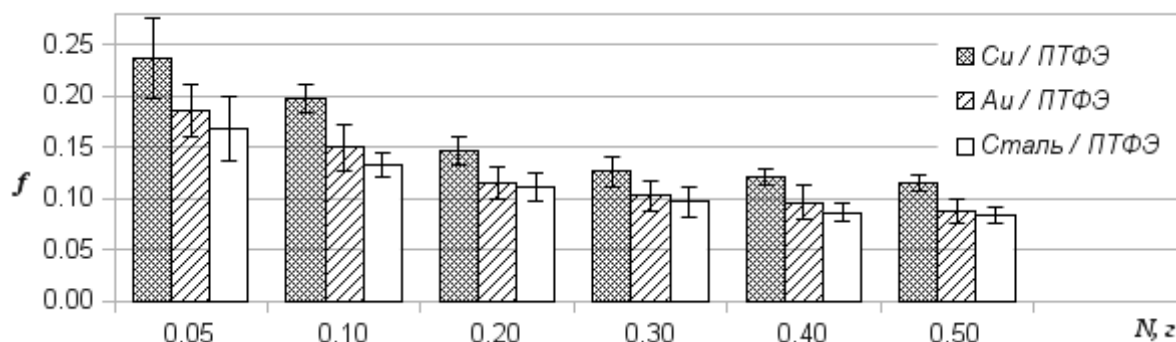
$$f = \tau_0/p_r + \beta,$$

где величины  $\tau_0$  и  $\beta$  с известным приближением можно считать константами данной пары трения,  $p_r$  – нормальное давление в контакте.

При определении величин  $\tau_0$  и  $\beta$  распространенным способом на одношариковом трибометре возникают проблемы, связанные с реологическими свойствами фторопласта. Кроме того, в ряде экспериментов установлено, что именно в тонких поверхностных слоях фторопласта проявляется аномально низкое сопротивление сдвигу. В связи с этим представилось интересным определить триботехнические константы в условиях упругого контактирования при предельно низких нагрузках по методике и на приборе\*, ранее успешно применявшихся для исследования адгезионных свойств тонких поверхностных пленок и покрытий.

Плоский образец ПТФЭ был исследован в парах трения со сферическими инденторами из меди, золота и инструментальной стали. Результаты исследований представлены в таблице и на рисунке.

| Материал индентора | $\tau_0$ , МПа  | $\beta$           |
|--------------------|-----------------|-------------------|
| <i>Cu</i>          | $0,95 \pm 0,03$ | 0                 |
| <i>Au</i>          | $0,74 \pm 0,01$ | 0                 |
| <i>Сталь</i>       | $0,62 \pm 0,05$ | $0,010 \pm 0,009$ |



\* Патент РФ № 2150688. Способ определения коэффициента трения покоя поверхностных слоев материала / В.В. Измайлов, А.Ф. Гусев, И.Н. Нестерова, А.А. Иванова; опубл. 10.06.2000. Бюл. № 16.

А.В. Густова

ПОЛУЧЕНИЕ АРОМАТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ МЕТОДОМ  
КАТАЛИТИЧЕСКОГО ГИДРОДЕОКСИГЕНИРОВАНИЯ МОНОМЕРОВ  
ЛИГНИНА

Руководитель Л.Ж. Никошвили  
Тверской государственной технической университет  
Кафедра биотехнологии и химии

Древесная биомасса – привлекательная сырьевая база для производства транспортного топлива. Лигнин как один из основных компонентов древесной биомассы может быть превращен в бионефть методом быстрого пиролиза. Бионефть содержит сложные смеси кислородсодержащих соединений (карбоновые кислоты, альдегиды, кетоны, фураны, сахара, углеводы и воду), присутствие которых приводит к снижению стабильности и теплотворной способности, а также повышению кислотности, вязкости и коррозионной активности. Дополнительная обработка бионефти методами каталитической гидроочистки может значительно улучшить ее качество.

Гидродеоксигенирование (ГДО) является основной реакцией во время гидроочистки биомассы, в ходе которой происходит удаление кислорода из органических соединений в составе  $H_2O$ . Таким образом снижается содержание кислорода в продукте и тем самым повышается его экологическая безопасность.

В данном исследовании проводилось каталитическое ГДО одного из мономеров лигнина–анизола (метоксибензола). Были исследованы Pt- и Pd-содержащие системы на основе  $Al_2O_3$ . Массовая доля металла в катализаторах составляла 5%. Процесс проводился в стальном реакторе полупериодического действия PARR 4307 (USA) при температуре 573 К и давлении  $H_2$  10 МПа. Полученные результаты показали, что основными продуктами являются фенол, о-крезол, 2,6-ксиленол, бензол и циклогексан. Кроме того, в катализате был обнаружен циклогексанон, появление которого среди продуктов реакции указывает на частичное гидрирование ароматического кольца. Анализ данных конверсии анизола показал, что основной реакцией является трансметилирование, кроме того имеют место разрыв связи С-О в продуктах и реакция гидрирования.

Полученные в результате процесса соединения могут использоваться в качестве высокооктановых добавок к дизельным и бензиновым топливам.

О.Ю. Дицина

КИНЕТИКА РЕАКЦИЙ АРОМАТИЧЕСКИХ  
АМИНОКИСЛОТ СО СЛОЖНЫМИ ЭФИРАМИ

Руководитель Н.В. Калинина

Ивановский государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Амиды карбоновых кислот находят широкое применение в качестве лекарственных, биологически-активных, поверхностно-активных веществ, мономеров в синтезе термостойких полимеров. Реакционной способности алифатических аминокислот в амидообразовании посвящено много работ, вместе с тем, кинетические закономерности реакций образования амидной связи с участием аминокислот (АБК) изучены недостаточно, хотя они представляют интерес, как с практической точки зрения, так и для исследования общих закономерностей ацильного переноса.

В данной работе спектрофотометрическим методом изучена кинетика реакций *n*- и *m*-АБК с пикрилбензоатом (ПКБ) и *n*-нитрофенилацетатом (НФА) в системе вода (40 масс.%)–1,4-диоксан. За скоростью реакции следили по изменению концентрации продуктов – нитрофенолят-ионов при 400 нм. Наблюдаемые константы скорости реакций рассчитывали по методу Гуггенгейма. В условиях опытов (рН=9.5) единственной реакционно-способной формой АБК была анионная, при этом вклад нейтральной формы в скорость ацилирования пренебрежимо мал. Для учета параллельного протекания гидролиза ацилирующего агента проводили серию, включающую 5-6 кинетических опытов, при разных начальных концентрациях АБК. Константы скорости ацилирования  $k_{ac}$  определяли как угловой коэффициент концентрационной зависимости наблюдаемых констант скорости.

Значения  $k_{ac}$  реакций *n*-АБК с НФА и ПКБ составили 0.0311 и 0.117 л·моль<sup>-1</sup>·с<sup>-1</sup> соответственно. Более высокая реакционная способность ПКБ по сравнению с НФА обусловлена меньшей основностью его уходящей группы. Значение  $k_{ac}$  реакции *m*-АБК с ПКБ равно 0.430 л·моль<sup>-1</sup>·с<sup>-1</sup>. Увеличение скорости ацилирования *m*-АБК по сравнению с *n*-АБК наблюдается и в других реакционных сериях, например, при их взаимодействии с бензоилхлоридом и сульфонилхлоридами.

Реакционная способность АБК существенно ниже, чем алифатических аминокислот в аналогичных условиях ( $k_{ac}$  реакции глицина с НФА составляет 1.05 л·моль<sup>-1</sup>·с<sup>-1</sup>). Причиной этого является электронное действие ароматического кольца, снижающее отрицательный заряд на атоме азота, что приводит к уменьшению основности и нуклеофильной реакционной способности аминогруппы АБК.

Ю.Э. Жигалова

## АГРОЭКОЛОГИЧЕСКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ЗЕМЛЕПОЛЬЗОВАНИЯ ОХОТХОЗЯЙСТВ ТВЕРСКОЙ ОБЛАСТИ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия  
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Тверская область располагает самой большой площадью охотничьих угодий среди областей Центрального Нечерноземья РФ. Считается, что они составляют 8,2 млн. га, при общей площади области в 8,4 млн. га.(98%). Сами охотничьи угодья подразделяются на три категории: первая – угодья, предоставленные в пользование охот пользователю для организации и ведения охотничьего хозяйства; вторая- угодья общего пользования, не предоставленные в пользование; третья- угодья, закрытые для охоты (особо охраняемые природные территории). Землепользование охотхозяйств представлено разнообразными лесными угодьями с хвойным и лиственным древостоем, а также открытыми пространствами в виде полей, лугов, залежных земель, болотами, озёрами и водотоками.

Для любителей охоты важно, чтобы добытые ими трофеи были здоровые особи, имели хорошую упитанность. Во многом это связано с качеством поедаемого животными корма, что, в свою очередь, зависит от агроэкологической характеристики почв, на которой произрастает растительная биомасса, а также от качественных показателей выпиваемой воды. Исходя из этого мы исследовали землепользование ряда охотничьих хозяйств и состав воды водоёмов, расположенных в их пределах. О содержании в почвах ТМ можно судить по данным таблицы.

Содержание ТМ и мышьяка в почвах охотничьих хозяйств Тверской области, 2009–2011 гг., мг/кг почвы

| № п/п | Административные районы охотхозяйств | Свинец | Кадмий    | Ртуть    | Медь | Цинк | Мышьяк |
|-------|--------------------------------------|--------|-----------|----------|------|------|--------|
| 1     | Калининский район                    | 6,7    | не обнар. | не обнар | 6,9  | 50   | 1,5    |
| 2     | Лихославльский район                 | 3,6    | не обнар. | 0,022    | 5,4  | 25   | 0,3    |
| 3     | Осташковский район                   | 3,0    | 0,098     | 0,073    | 6,0  | 38   | 0,5    |
| 4     | Спировский район                     | 5,5    | 0,04      | 0,085    | 4,5  | 13   | 0,02   |
| 5     | Старицкий район                      | 3,0    | 0,18      | 0,019    | 5,7  | 25   | 0,59   |
| 6     | Торжокский район                     | 4,9    | не обнар. | 0,024    | 2,7  | 5    | 0,3    |
|       | В среднем по пахотным землям области | 32,0   | 0,5       | 2,1      | 33,0 | 55   | 2,0    |

В целом полученные нами данные агроэкологической характеристики почв и водоемов охотхозяйств свидетельствуют, что по всем исследуемым показателям они соответствуют требованиям НД или ГОСТа.

Е.В. Журавлев, Г.А. Демичев

## КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ В СИСТЕМЕ ГЕПАРИН-АМПИЦИЛЛИН В СРЕДЕ ФИЗИОЛОГИЧЕСКОГО РАСТВОРА

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Сегодня актуально прогнозирование возможного совместного использования лекарственных веществ различной биологической направленности в клинической медицине и терапии. Цель работы – исследование ионных равновесий с участием гепарина и антибиотика пенициллинового ряда – ампициллина, которые часто применяются в комплексе.

Методами рН-метрии и математического моделирования исследовано взаимодействие высокомолекулярного гепарина с ампициллином в водном растворе при 37°C на фоне 0.15 М NaCl. Обнаружено образование комплексных форм различного состава и устойчивости. Определены константы устойчивости комплексов.

Исследованы химические свойства равновесия в подсистемах: NaAmp-NaCl-H<sub>2</sub>O, Na<sub>4</sub>Hep – NaCl – H<sub>2</sub>O.

Все расчеты моделей равновесий производились по разработанным алгоритмам, реализованным в универсальной компьютерной программе New DALSFЕК (КСМ Soft, 2000 г.). После обработки кривых титрования водного раствора NaAmp – NaCl – H<sub>2</sub>O и Na<sub>4</sub>Hep – NaCl – H<sub>2</sub>O в первом случае получена модель, включающая три протонированные формы: HAmp, H<sub>2</sub>Amp<sup>+</sup>, H<sub>3</sub>Amp<sup>2+</sup>, во втором – одна протонированная форма HHep<sup>3-</sup>. Рассчитанные оценки соответствующих констант совпадают с литературными данными.

Взаимодействие гепарина с ампициллином исследовано по данным рН-метрического титрования растворов Na<sub>4</sub>Hep – NaAmp – H<sub>2</sub>O – NaCl в интервале  $2.3 \leq \text{pH} \leq 8.0$  при соотношении компонентов 1:1.

В системе обнаружены протонированные комплексы состава H<sub>2</sub>HepAmp<sup>3-</sup>, H<sub>3</sub>HepAmp<sup>2-</sup> и средний комплекс состава AmpHep<sup>5-</sup>, определены логарифмы констант образования комплексов. Как следует из полученных результатов, в широком интервале рН доминирует комплексная форма состава H<sub>2</sub>HepAmp<sup>3-</sup>.

*Работа выполнена в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 гг.».*

## ВЛИЯНИЕ ГУМИНОВЫХ ПРЕПАРАТОВ НА АГРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЧВЫ И УРОЖАЙНОСТЬ КАРТОФЕЛЯ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Одним из наиболее перспективных видов органических удобрений, содержащих водорастворимые соли гуминовых веществ, являются гуматы. Они активно применяются в системе земледелия США, стран Западной Европы и Азии. Гуматы – биологически активные растворимые органические вещества, входящие в состав гумуса – основного качественного показателя плодородия почвы.

Данные многих исследований показывают, что гуминовые удобрения проявляют и защитные свойства. Они снижают загрязнённость почв радионуклидами, уменьшают фитотоксичное действие гербицидов, проявляют адсорбционные свойства по отношению к вредным примесям.

Мы исследовали удобрительное действие гумата калия при внесении под контроль. В использованном удобрении содержалось 61,2% органического вещества, 1,96 % общего азота, 0,21% фосфора и 9,75% общего калия. На водорастворимые формы гумусовых кислот приходилось 28,75% от общего содержания углерода удобрения. Полученная на опыте урожайность клубней картофеля свидетельствует (таблица), что исследуемые дозы агрогумата в

Урожайность картофеля на вариантах с агрогуматом калия

| № | Вариант опыта          | Средняя урожайность, ц/га | Прибавка к контролю ц/га | Внесено в почву в составе удобрений NPK, кг | Окупаемость 1кгNPK прибавкой урожая, кг |
|---|------------------------|---------------------------|--------------------------|---|---|
| 1 | Контроль без удобрений | 168                       | -                        | -   | -                                       |
| 2 | Агрогумат–100кг/га     | 195                       | 27                       | 10,5  | 257                                     |
| 3 | Агрогумат–300кг/га     | 213                       | 45                       | 31,5  | 142                                     |
| 4 | Агрогум,100кг+NPK      | 215                       | 47                       | 132,5                                       | 35                                      |
| 5 | Агрогум,300кг+NPK      | 248                       | 80                       | 153.5                                       | 52                                      |

чистом виде обеспечили прибавку урожая картофеля на 27–45 ц/га и на 47–80 ц/га при совместном использовании агрогумата с минеральными удобрениями.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЛИТЕЛЬНОСТИ РАЗМОЛА НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ  $Fe_7Re_3(C,B)$  и  $Fe_7Mo_3$ 

Руководитель К.П. Скоков

Тверской государственной университет  
Кафедра магнетизма

В новом тысячелетии, с ростом цен на редкоземельные металлы несколько новых классов материалов на основе композиционных структур стали привлекать внимание исследователей, работающих в области прикладного металловедения а также ученых, занимающихся решением фундаментальных проблем.

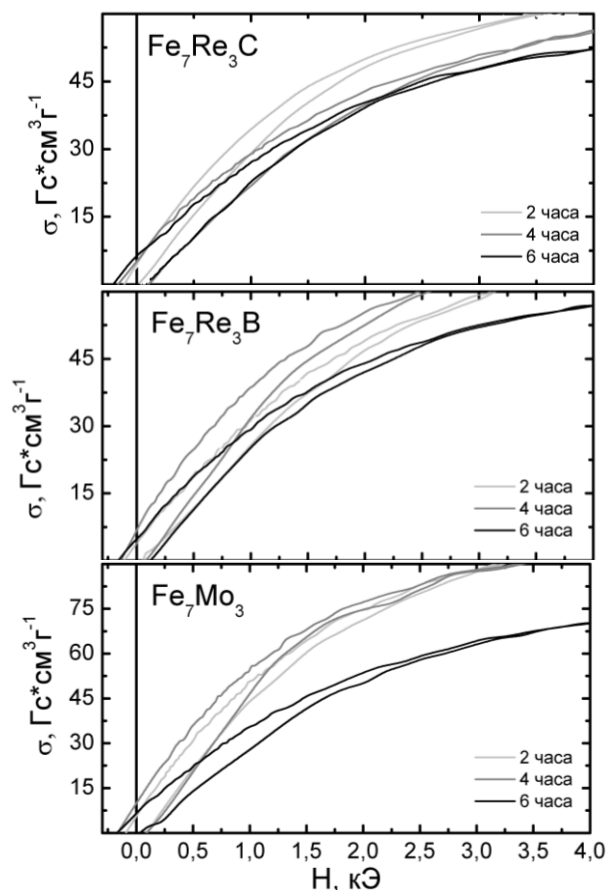
В данной работе приводятся результаты исследования влияния длительности размола на формирование коэрцитивного состояния в смеси порошков железа и  $Mo, Re$ .

На рисунке представлены полевые зависимости намагниченности для образцов, полученных размолом длительностью 2,4 и 6 часов. Как видно из графиков, намагниченность образцов с увеличением времени размола плавно уменьшается. Это может быть объяснено появлением наведенной анизотропии в образцах, что связано с формированием слоистой структуры частиц путем механосинтеза.

Результаты измерений  $H_c$  сведены в таблицу:

| Состав      | $H_c$ , Э (2 часа) | $H_c$ , Э (4 часа) | $H_c$ , Э (6 часов) |
|-------------|--------------------|--------------------|---------------------|
| $Fe_7Re_3C$ | 108                | 162                | 201                 |
| $Fe_7Re_3B$ | 100                | 143                | 160                 |
| $Fe_7Mo_3$  | 96                 | 150                | 160                 |

Анализ данных показывает, что максимальная коэрцитивная сила наблюдается в композите  $Fe_7Re_3C$  после 6 часов размола и составляет 201 Э.



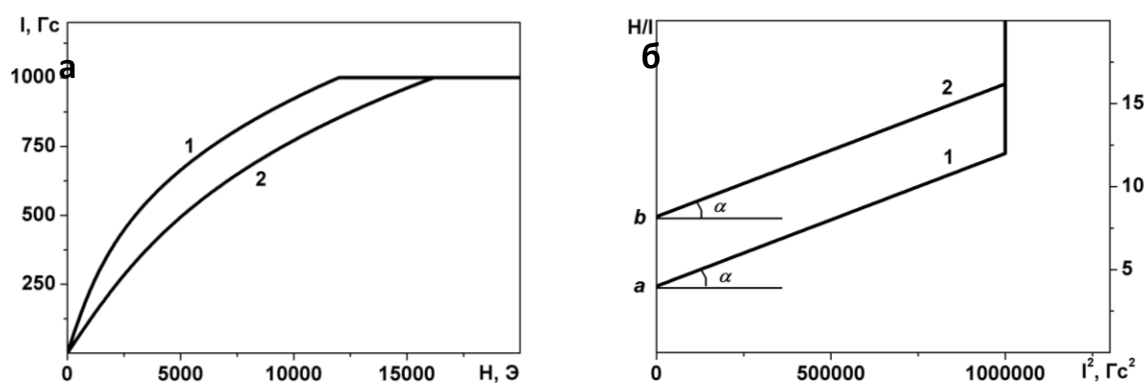
Полевые зависимости намагниченности для образцов, полученных в зависимости от времени размола

УЧЕТ ФАКТОРА ФОРМЫ ОБРАЗЦА В МЕТОДЕ СЕКСМИТА–ТОМПСОНА  
ДЛЯ МАГНЕТИКОВ С РАЗЛИЧНЫМ ТИПОМ МКА

Руководитель М.Б. Ляхова

Тверской государственный университет  
Кафедра магнетизма

Метод Сексмита–Томпсона\* для определения величины первых двух констант магнитокристаллической анизотропии (МКА) по кривой намагничивания в трудном направлении традиционно применяется для одноосных кристаллов с МКА типа «легкая ось», причем при построении кривых намагничивания учитываются только процессы вращения вектора  $I_S$  (кривые 1 на рисунке). Однако при анализе кривых намагничивания, измеренных в открытой магнитной цепи, необходимо учитывать наличие собственного размагничивающего поля образца и его фактора формы ( $N$ ) (кривые 2 на рисунке).



Модельные (а) и перестроенные (б) кривые намагничивания в магнитном поле  $H \perp c$ .  
Характеристики образца:  $K_1 = K_2 = 2 \cdot 10^6$  эрг/см<sup>3</sup>,  $I_S = 10^3$  Гс,  $N = 4 \pi/3$

В данной работе показано, что метод Сексмита–Томпсона применим для расчета значений  $K_1$  и  $K_2$  кристаллов цилиндрической симметрии с различными типами МКА. Если оси, перпендикулярные оси  $c$  кристалла, не являются легчайшими, то для кривой намагничивания, измеренной в открытой магнитной цепи в поле  $H \perp c$  и перестроенной в координатах « $H/I$ »–« $I^2$ » (кривая 2 на рисунке б), справедливы формулы

$$K_1 = \frac{(b - N) I_S^2}{2}; \quad K_2 = \frac{\operatorname{tg} \alpha I_S^4}{4}.$$

\*Sucksmith W., Thompson F.R.S., Thompson J.E. The Magnetic Anisotropy of Cobalt // Proceedings of the Royal Society A. – 1954. – V.225. – P.362–375.



С.Ю. Золотухина

## РОЛЬ КАТИОНОВ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ L-ЦИСТЕИНА И НИТРАТА СЕРЕБРА

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

Изучение процессов гелеобразования – актуальная проблема для современной фундаментальной и прикладной науки. Гидрогели на основе водных растворов L-цистеина и  $\text{AgNO}_3$  обладает супрамолекулярным строением, а исходные компоненты являются биологически активными веществами и могут быть использованы в медицине. Для инициации процесса гелеобразования и усиления лечебного эффекта в цистеин-серебряный раствор (ЦСР) могут быть введены различные электролиты. Кобальт, как катион в электролите, повышает активность гидролитических ферментов, увеличивает синтез нуклеиновых и мышечных белков, улучшает работу кроветворных органов. Железо необходимо для синтеза гемоглобина, в котором сосредоточено более половины его запасов в организме. Никель – микроэлемент, влияющий на процессы кроветворения и участвующий во многих окислительно-восстановительных процессах в организме.

Цель нашей работы – изучить процесс самоорганизации в ЦСР методом УФ-спектроскопии и найти те концентрационные значения сульфат-ионов ( $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ) в электролитах, при которых в ЦСР происходит процесс гелеобразования.

В ходе выполнения работы было установлено, что образование гидрогелей происходит в очень узком концентрационном диапазоне исходных компонентов и может быть инициировано путём введения в ЦСР различных сульфат-ионов. В настоящее время продолжается работа по изучению процесса гелеобразования в ЦСР при введении в него других электролитов с использованием методом УФ-спектроскопии, динамического светорассеяния и реологических испытаний.

## МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛИ ДЛЯ УВЕЛИЧЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРОИЗВОДСТВА И ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЭНЕРГИИ

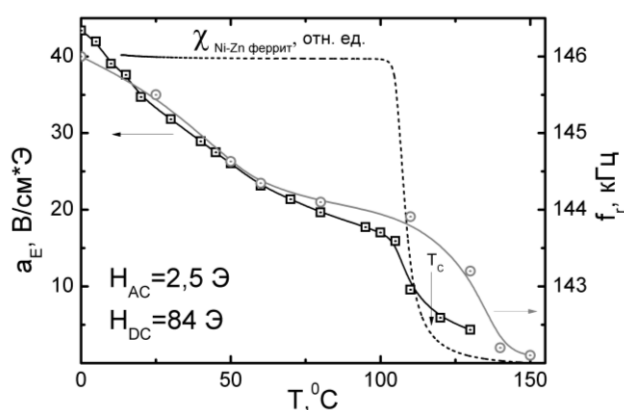
Руководитель К.П. Скоков

Тверской государственной университет  
Кафедра магнетизма

Многослойные планарные структуры, содержащие слои феррита и пьезоэлектрика, проявляют аномально большой магнитоэлектрический эффект, что делает их перспективными для разработки преобразователей в технологии беспроводной передачи энергии. В работе приводятся результаты экспериментальных исследований магнитоэлектрических (МЭ) свойств слоистых гетероструктур ЦТС-46 и Ni-Zn феррита.

Исследованы температурные зависимости МЭ отклика и частоты пьезомеханического резонанса. Исходя из экспериментальных исследований, были рассчитаны значения коэффициента магнитоэлектрического преобразования  $\alpha_E$ . Графики результатов измерений представлены на рисунке. Как видно, вблизи температуры Кюри магнитоактивной фазы наблюдается резкий спад магнитоэлектрического отклика и частоты резонанса. Для объяснения данных эффектов были проведены измерения магнитострикции при различных температурах на образце никель-цинкового феррита. Анализ данных показал, что величина продольной магнитострикции с ростом температуры уменьшается с  $28 \cdot 10^{-6}$  при  $25^\circ\text{C}$  до  $22 \cdot 10^{-6}$  при  $200^\circ\text{C}$ . Это приводит к уменьшению деформаций гетероструктуры и, следовательно, к уменьшению МЭ отклика.

Проведенные исследования температурного поведения магнитоэлектрических гетероструктур позволили определить верхний рабочий диапазон для устройств, разрабатываемых на основе данных преобразователей.



Температурные зависимости МЭ коэффициента преобразования, частоты пьезомеханического резонанса для гетероструктуры и АС-магнитной восприимчивости для Ni-Zn феррита

Р.П. Иванов

ПОВЫШЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ СТАБИЛЬНОСТИ МАГНИТНЫХ  
ХАРАКТЕРИСТИК НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ  
СПЛАВОВ SmZrCoCuFe

Руководитель М.Б. Ляхова

Тверской государственный университет  
Кафедра магнетизма

Сплавы SmZrCoCuFe являются основой для создания высокоэнергоемких постоянных магнитов. Ранее\* было показано, что высокие значения важнейших магнитных характеристик сплава обусловлены наноразмерной «ячеистой» структурой этих материалов. Формирование высококоэрцитивного состояния с высокой температурной стабильностью происходит в процессе цикла термических обработок (ТО). Варьирование технологических режимов ТО приводит к значительному изменению параметров микро- и наноструктуры образцов, что влияет на величину структурно-чувствительных характеристик материала (например коэрцитивную силу  $H_{ci}$ ).

В данной работе представлены результаты исследования гетерогенных сплавов системы SmZrCoCuFe с завышенным содержанием меди. Увеличение меди способствует росту не только коэрцитивной силы, но и ее температурной стабильности в интервале от комнатной температуры до 400°C. В работе методом вибрационного магнитометра измерены петли гистерезиса образцов в указанном интервале температур. Проведен анализ температурных зависимостей удельной остаточной намагниченности и коэрцитивной силы.

Исследования микро- и наноструктуры были выполнены на оптическом и сканирующем зондовом микроскопах. Показано, что все образцы являются гетерогенными и содержат три макроскопических структурных составляющих. Каждая составляющая в высококоэрцитивном состоянии характеризуется регулярной наноразмерной «ячеистой» структурой. Границы «ячеек» служат центрами задержки смещения доменных границ при перемагничивании.

---

\* Ляхова М.Б., Семенова Е.М., Супонев Н.П., Иванов Р.П. Влияние наноструктуры на процессы перемагничивания гетерогенных сплавов типа R-Zr-Co-Cu-Fe. Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов: межвуз. сб. науч. тр. Тверь: Твер. гос. ун-т, 2011. Вып. 3. С.114-119.

Н.В. Ильяшенко

ИЗУЧЕНИЕ ФЕНОЛЬНОГО СОСТАВА  
*POTENTILLA ERECTA* (L.) RAEUSCH. МЕТОДОМ ВЭЖХ

Руководители: П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк  
Тверская государственная медицинская академия  
Кафедра биологии

Лапчатка прямостоячая (*Potentilla erecta* (L.) Raeusch.) используется в лечебных целях при различных воспалительных заболеваниях желудочно-кишечного тракта, кишечных кровотечениях. Для исследования корневища *P. erecta* собраны в летний период 2009–2011 годов на территории г. Твери и Тверской области в местах с различной степенью антропогенного воздействия. Фенольные соединения (ФС) являются доминирующими в изучаемом сырье, на их долю приходится основной медицинский эффект. Существенный вклад в фармакологическую активность образцов корневищ *P. erecta* вносят дубильные вещества (12,7–35%). Поэтому целью работы было определение методом ВЭЖХ состава ФС.

Посредством качественных реакций в извлечениях *P. erecta* установлено наличие следующих ФС: гидролизуемые и конденсированные дубильные вещества, сапонины, флавоноиды.

При проведении исследований методом ВЭЖХ использовали систему «Alliance 2695» с 2996 PDA с колонкой Nova-Pak C18 4 $\mu$ m 3,9x150 mm Column. Подвижная фаза: смесь 15% ацетонитрила и 85% 10 mM H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>. Условия анализа: скорость потока – 0,53 мл/мин; температура колонки – 25°C; детектирование проводилось при 270 нм; объем пробы, вводимой в хроматограф, 10 мкл. С целью калибровки прибора готовили серию растворов стандартных образцов в 70% этиловом спирте – лютеолина, кофейной кислоты, кверцетина, арбутина, ликуразида, рутина, галловой кислоты, гидрохинона, резорцина, пирокатехина. Подготовка растений к анализу заключалась в приготовлении экстрактов образцов на водяной бане.

В экстрактах, выделенных из корневища *P. erecta* идентифицирован ряд ФС в разном качественном и количественном соотношении в зависимости от места сбора растений: арбутин, фенолокислоты (галловая кислота), флавоноиды (рутин), гидрохинон. Обнаружено сходство в хроматограммах образцов корневищ, собранных в фоновой и частично удаленной от экологического узла напряженности зонах.

Таким образом, наиболее лабильными были следующие фракции *P. erecta*: простые ФС, фенолгликозиды, фенолокислоты. ВЭЖХ анализ доказал зависимость фенольного состава образцов *P. erecta* от места сбора растений.

О.Б. Кличева

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ВОДОРАСТВОРИМЫХ  
ПРОИЗВОДНЫХ ХИТОЗАНА *ВОМБУХ МОРИ*

Руководитель С.Ш.Рашидова

Институт химии и физики полимеров АН РУз

Наличие в молекуле полисахаридов, в частности хитозана (ХЗ), различных по реакционной способности функциональных групп обуславливает возможность получения его водорастворимых производных – карбоксиметилхитозанов (КМХЗ), обладающих рядом уникальных свойств, позволяющих использовать их в различных областях медицины и сельского хозяйства [1].

Карбоксиметилхитозан был получен в среде изопропилового спирта (ИПС) с добавкой монохлоруксусной кислоты (МХУК) и представляет собой растворимый полиамфолит в зависимости от степени замещения [2]. Содержание азота в образцах ХЗ и КМХЗ определяли по методу Дюма, значение которого снижается при переходе к карбоксиметилхитозану, что и должно иметь место, поскольку массовая доля азота в КМХЗ ниже, чем в ХЗ. По данным элементного анализа содержание азота в исходном хитозане составляет 7,80 %, а в полученном КМХЗ – 4,16%.

В результате изучения реакции карбоксиметилирования хитозана в зависимости от продолжительности реакции выявлено, что содержание карбоксиметильных групп полученных образцов КМХЗ увеличивается. Таким образом, имеется возможность получения образцов КМХЗ с регулируемым содержанием карбоксиметильных групп [3].

Сорбционные исследования выявили довольно существенное различие между сорбционной способностью и удельной поверхностью образцов. Обнаружено, что для образцов КМХЗ наблюдается увеличение сорбционной способности по сравнению с исходным хитозаном. Так для исходного образца ХЗ (при 80% отн. вл. 3,60%,  $S_{уд}$  47,31), а для КМХЗ (при 80% отн. вл. 16,00%,  $S_{уд}$  83,24). Повышенные значения для КМХЗ позволяют считать, что данные образцы в связи с наличием функциональных ионогенных групп обладают повышенной склонностью при взаимодействии с водой. Это является важным показателем для полученных растворов КМХЗ.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гамзазаде А. И. // Дис... д-ра хим. наук – М.: РГБ, 2005.
2. Рашидова С.Ш., Кличева О.Б., Милушева Р.Ю., Холмуминов А.А. // Узб. хим. журнал. – 2010. – №1. – С.26–30.
3. Кличева О.Б., Рашидова С.Ш. // Узб. хим. журнал. – 2011. – С.107–110.

Е.В. Кныш, М.С. Демидова

ТЕОРЕТИКО-ГРАФОВАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ АДДИТИВНЫХ СХЕМ  
РАСЧЕТА АЛКИНОВ И АМИНОВ

Руководитель М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Феноменологические методы – эффективный инструмент исследования закономерностей, связывающих свойства веществ со строением молекул. Они реализуются в виде аддитивных схем расчета и прогнозирования, которые успешно применяются в гомологических рядах

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

В работе проведена оценка состояния численных данных по энтальпии образования алкинов и аминов, а также дана теоретико-графовая интерпретация аддитивных схем расчета. Так, например, для алкинов имеем

$$P_{C_nH_{2n}} = a + nb + p_2\Gamma_{CC} + p_2^*\Gamma_{CC}^* + R\Delta_{CCC} + p_3\tau_{CC}^* + p_4\omega_{CC}^* + p_5\nu_{CC}^*$$

где

$$a = r_{C\equiv C} + (n-2)r_{C-C}, \quad b = (2n-2)r_{C-H} - (n-2)r_{C-C}$$

где  $\Gamma_{CC}^*$ ,  $\tau_{CC}^*$ ,  $\omega_{CC}^*$ ,  $\nu_{CC}^*$  – эффективные взаимодействия пар атомов С соответственно через один атом, два, три и четыре атома во фрагментах  $C\equiv C-C$ ,  $C\equiv C-C-C$ ,  $C\equiv C-C-C-C$ ,  $C\equiv C-C-C-C-C$ ;  $\Delta_{CCC}$  – эффективный вклад взаимодействия тройки атомов С около одного и того же скелетного атома;  $r_{C\equiv C}$  – вклад связи  $C\equiv C$ ;  $r_{C-C}$  и  $r_{C-H}$  – соответственно вклады связи С-С и С-Н и т.д.

В результате проделанной работы были проанализированы графические зависимости свойств вещества – степень замещения  $l$  и др., выведены рабочие схемы, проведены численные расчеты по энергиям разрыва связей выбранных соединений. Там, где можно сделать сопоставления, эти расчёты согласуются с экспериментом.

И.В. Кобилинский

СОЗДАНИЕ ИОНОСЕЛЕКТИВНОГО ЭЛЕКТРОДА С ОТКЛИКОМ  
НА ДРОТАВЕРИНА ГИДРОХЛОРИД  
(НО-ШПА)

Руководитель Г.И. Мантров

Тверской государственной университет,  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Дротаверина гидрохлорид принадлежит к группе лекарственных средств, обладающих спазмолитической активностью и является основным действующим веществом препарата «НО-ШПА».

В литературе описан метод количественного определения дротаверина гидрохлорида в биологических жидкостях, основанный на использовании высокоэффективной жидкостной хроматографии. Метод является достаточно точным и селективным, но в большинстве случаев труднодоступным вследствие дороговизны оборудования.

Универсальным, доступным и чувствительным методом количественного определения лекарственных препаратов в готовых лекарственных формах, промышленном химико-фармацевтическом сырье и полупродуктах, и в ряде других объектов является потенциометрия с ионоселективными электродами.

Электродноактивное соединение получали осаждением дротаверина и раствора фосфорновольфрамовой и фосфорномолибденовой кислот, осадок отделяли центрифугированием и высушивали при комнатной температуре под тягой.

В качестве титранта в методе потенциометрического титрования использовали фосфорновольфрамовую и фосфорномолибденовую кислоты.

Электродная функция изготовленных электродов представляет собой прямую в интервале рС 1–3, 1–4. Линейность электродной функции была подтверждена с использованием критерия Фишера. При этом крутизна функции составила 54 и 56 мВ/рС. Рабочий диапазон рН составил 4–6,8 единиц рН, что вполне приемлемо для большинства практических задач. Время отклика не превышает 45 с.

Таким образом, применение в качестве титранта фосфорновольфрамовой и фосфорномолибденовой кислот позволяет изготавливать надёжные ионоселективные электроды с откликом на дротаверина гидрохлорид.

Н.И. Копич

## ТИТРИМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ МЕДИ С ПОМОЩЬЮ КОМПЛЕКСОНОВ

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Одна из основных проблем сегодня – охрана окружающей среды, снижение вредного воздействия на нее различных отраслей промышленности и сельского хозяйства.

Известен способ определения меди с помощью этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТА) в присутствии мурексида как металлоиндикатора: анализируемый раствор медной соли, содержащий не более 20 мг меди в 100 мл, нейтрализуют добавлением аммиака в небольшом избытке до рН около 8. При нейтрализации слабокислых растворов рекомендуется добавлять небольшое количество хлорида аммония, чтобы рН раствора не слишком повысился. После прибавления индикатора титруют установленным раствором комплексона до изменения окраски из желтой в фиолетовую.

К недостаткам этого метода следует отнести использование в качестве комплексона этилендиаминтетрауксусной кислоты, загрязняющей окружающую среду; титрование осуществляется в нейтральной среде (рН=7-8).

Нами предложен способ титриметрического определения меди с помощью иминодиянтарной кислоты (ИДЯК) в присутствии металлохромного индикатора. Для повышения избирательности метода и точности анализа в качестве комплексона была применена иминодиянтарная кислота (ИДЯК), а в качестве металлохромного индикатора – этилтимоловый синий А. Основной особенностью индикаторов класса сульфоталеинов является способность образовывать окрашенные комплексы прежде всего с медью, а кроме нее лишь с железом (III) и торием.

В случае применения индикатора мурексида удастся определить лишь сумму металлов, находящихся в растворе, тогда как использование этилтимолового синего А обеспечивает определение индивидуального содержания меди.

*Работа выполнена при поддержке гранта ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы (Соглашение № 14.В37.21.0653) и программы «У.М.Н.И.К.».*



П.А. Коробейников

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ  
КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Руководитель Ю.Д. Орлов

Тверской государственной университет  
Кафедра общей физики

Квантово-механическая «теория атомов в молекулах» (QTAIM) Р. Бейдера [1] позволяет представить соединение в реальном пространстве в виде совокупности фрагментов, так называемых эффективных «топологических» атомов. Границы таких атомов определяются из равенства нулю потока вектора градиента электронной плотности. Так же в рамках QTAIM можно вычислить, исходя из стандартных квантово-механических выражений, различные свойства для выделенных фрагментов. Это, в свою очередь, позволяет исследовать взаимное влияние атомов и фрагментов в соединении

Особый интерес представляет изучение электронного строения соединений со свободной валентностью – свободных радикалов ( $R^\bullet$ ) – в связи с их высокой реакционной способностью.  $R^\bullet$  участвуют в цепных реакциях, протекающих в технологических, биологических и природных процессах, в том числе в процессах горения и детонации.

В настоящей работе проведено исследование распределения электронной плотности в гетероциклических молекулах и радикалах. Оптимизация геометрии соединений была проведена с помощью пакета прикладных программ Gaussian'03 [2] с использованием метода функционала плотности B3LYP в базисе 6-311++G(3df, 3pd). Электронные характеристики отдельных атомов были рассчитаны с помощью программы AIMALL [3]. Далее характеристики отдельных атомов были отнесены к атомным группам -O-, -C<sup>•</sup>H- и -CH<sub>2</sub>-.

Проведено сравнение электронных характеристик, полученных для гетероциклических соединений, с характеристиками циклоалканов и циклоалкилов. Выявлена дальность влияния гетероатома и свободной валентности в циклическом соединении. Выделены переносимые группы в гетероциклах.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория. – М.: Мир, 2001.
2. Gaussian 03. Revision E.1./M.J.Frisch et.al./, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2003.
3. AIMALL (version 12.11.09), Todd A.Keith 2012 (aim.tkgristmill.com).

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ ИНДОМЕТАЦИНА МЕТОДОМ  
ИК СПЕКТРОСКОПИИ

Руководитель: Н.В. Баранова

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Известно<sup>\*</sup>, что твердый индометацин существует в нескольких кристаллических модификациях и аморфном состоянии, из которых при нормальных условиях стабильной является  $\gamma$ -форма. Согласно структурным данным в элементарной ячейке кристалла находятся 2 молекулы индометацина, которые образуют циклические димеры посредством водородных связей.

В ИК спектре индометацина можно выделить следующие характеристические полосы поглощения: поглощение карбонильной группы, с которым перекрываются узкие полосы валентных колебаний групп  $-\text{CH}_3$  и  $-\text{CH}_2$ ; поглощение метоксигруппы, ароматического кольца, индолил – радикала и карбонильной группы.

В спектре индометацина полосы поглощения валентных колебаний обеих  $\text{C}=\text{O}$  групп сдвинуты в область более высоких частот (2910 вместо 2850  $\text{cm}^{-1}$ ). Наблюдается заметный высокочастотный сдвиг валентных колебаний  $\text{OH}$ -группы (3379 вместо 3300  $\text{cm}^{-1}$ ).

Эти изменения в ИК спектре свидетельствуют о том, что в данных условиях происходит ослабление системы водородных связей в индометацине или образование новых, более прочных. Уширение полос внутримолекулярных колебаний может быть обусловлено начавшимся процессом разупорядочения кристаллической решетки и исчезновением трансляционной симметрии. Возможно, возникают отдельные области метастабильной аморфной фазы препарата в присутствии КВг.

Природа этого взаимодействия пока не совсем ясна и требует дальнейших исследований.

---

\* Федотов А. П., Шахтшнейдер Т. П., Чесалов Ю. А., Суров Е. В. О влиянии таблетирования с бромидом калия на ИК спектры поглощения индометацина // Химико-фармацевтический журнал. – 2009. - № 1 – С. 50–52.

М.В. Крисковец

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК УГЛЕРОДНЫХ ВОЛОКОН-ПРЕКУРСОРОВ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ БУМАГ

Руководитель: А.А.Лысенко

Санкт-Петербургский государственный университет технологии и дизайна  
Кафедра наноструктурных, волокнистых и композиционных материалов им А.И.Меоса

В настоящее время в научном и практическом плане представляет существенный интерес разработка и изучение свойств угле-графитовых бумаг. Такие бумаги используются в качестве электродов в разных физико-химических процессах и, в частности, в качестве электродов в водородных топливных элементах [1; 2].

В качестве исходных волокон, из которых могут быть сформированы угле-графитовые бумаги используются углеродные резаные волокна различной природы. В настоящей работе исследовано удельное объёмное электрическое сопротивление ( $\rho_v$ ) графитированных волокон из полиакрилонитрила (ПАН) и гидратцеллюлозы (ГЦ). Объёмное электрическое сопротивление измеряли 4-х контактным методом в ячейке Ван дер Пау. Результаты представлены в виде таблицы (см. табл 1).

Исследования показали, что на электрическое сопротивление сильное влияние оказывает длина резки. Так при длине резки углеводородного волокна (УВ) из ПАН в 10 мм  $\rho_v=26,51$  мОм\*см, а при резки в 5 мм  $\rho_v=53,33$  мОм\*см. Также установили, что наибольшей электропроводностью обладают волокна из полиакрилонитрила.

Таблица 1. Удельное объёмное электрическое сопротивление, мОм\*см

|                   | Волокно 1 |       | Волокно 2 |       | Волокно 3 |       | Волокно 4 |       | Волокно 5 | Волокно 6 |       | Волокно 7 |
|-------------------|-----------|-------|-----------|-------|-----------|-------|-----------|-------|-----------|-----------|-------|-----------|
| Материал          | ПАН       |       | ПАН       |       | ПАН       |       | ГЦ        |       | ГЦ        | ГЦ        |       | ГЦ        |
| Длина волокна, см | 0,5       | 1     | 0,5       | 1     | 0,5       | 1     | 0,5       | 1     | 1         | 0,5       | 1     | 1         |
| $\rho_v$ , мОм*см | 53,33     | 26,51 | 69,87     | 45,23 | 71,85     | 82,52 | 109,11    | 45,15 | 82,87     | 50,87     | 42,59 | 129,09    |

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лысенко В.А. и др. // Дизайн, материалы, технология, 2010. №1. С. 50–53.
2. Лысенко А.А. и др. // Дизайн, материалы, технология, 2008. №3. С. 42–48.

Н.И. Кротова

СТАБИЛИЗАЦИЯ МАГНИТНЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ВОДНОЙ ОСНОВЕ  
ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫМИ ВЕЩЕСТВАМИ

Руководитель Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет  
Кафедра органической химии

Магнитные жидкости (феррожидкости, ферроколлоиды) – это сложные дисперсные системы, состоящие из частиц дисперсионной фазы (магнитных частиц) взвешенных в жидких носителях.

В настоящее время наиболее изучены и получили широкое практическое применение магнитные жидкости на углеводородной основе. Однако во многих случаях предпочтительнее использовать магнитные жидкости на водной основе, например, при сепарации немагнитных материалов.

В настоящей работе проведены исследования по получению устойчивых магнитных жидкостей за счёт использования в качестве стабилизаторов анионных поверхностно-активных веществ (ПАВ) общей формулы  $A^- N^+ H_3 CH_2 CH_2 OH$  где  $A^-$ : олеат  $C_{17}H_{33}COO^-$ , лаурат  $C_{11}H_{23}COO^-$ , капринат  $C_9H_{19}COO^-$ . Концентрация ПАВ составляла  $10^{-1}-10^{-3}$  моль/л, концентрация дисперсной фазы составляла 1–10% масс.%. Магнетит,  $Fe_3O_4$  получали химической конденсацией, заключающейся в быстрой нейтрализации солей двух- и трёхвалентного железа избытком водного раствора аммиака. Образующийся в ходе реакции осадок состоял из наночастиц магнетита размером 10–25 нм. Предварительно были проведены исследования по адсорбции индивидуальных ПАВ на магнетите с целью модифицирования поверхности. Опыты по адсорбции проводили в динамических условиях и при наложении УЗ-колебаний, что позволяло в данном случае одновременно осуществлять и диспергирование магнетита. Модифицированные порошки магнетита были использованы для получения магнитной жидкости на водной основе. Седиментационную устойчивость магнитных жидкостей (0,5 масс.%) исследовали нефелометрическим методом. Как следует из результатов исследований, модифицирование порошка магнетита ПАВ заметно изменяет кинетику седиментации магнитной суспензии в воде: время оседания магнетита на порядок меньше, чем в случае с немодифицированной дисперсной фазой. Магнитные жидкости, полученные в данной работе устойчивы, в течение 30 суток.

Д.М. Кротова

## ВЛИЯНИЕ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ И ПИРИДИНИЕВЫХ СОЛЕЙ НА КОРРОЗИЮ МЕТАЛЛОВ

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственной университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Используемые для защиты оборудования ингибиторы кислотной коррозии – это в основном азотсодержащие соединения, способные при адсорбции на поверхности металла образовывать защитный слой. Однако эффективность защитного действия подавляющего количества промышленных ингибиторов не соответствует требованиям нормативных документов.

Синтезированы соли на основе диметиламиноэтанола: додецилдиметил(2-оксиэтил)аммоний хлорид (ДМА хлорид) и ундецилкарбонилоксиэтилтриметиламмоний иодид (ДДМА иодид).

Исследование проводили с помощью коррозиметра «Эксперт-004». Прибор снимает значения поляризационного сопротивления каждые 30 минут и по изменению поляризационного сопротивления на металле в сравнении с первым измерением можно судить о процессе коррозии на образцах.

Исследована ингибирующая способность ДМА хлорида, ДДМА иодида и додецилоксикарбонилметилпиридиния хлорида. Установлено, что в нейтральной среде защитный эффект данных ЧАС проявляется слабо, их использование в качестве ингибиторов коррозии цветных металлов нецелесообразно, поскольку защитный эффект растворов ЧАС близок к 0. Для стали (Ст20) значение защитного эффекта оказалось несколько выше 1. В кислой среде исследованные соли ингибируют кислотную коррозию стали (Ст20), чугуна (СЧ20), алюминия (АЛ9) и латуни (Л63). Показано, что ДДМА иодид проявляет наиболее высокие ингибирующие свойства на стали Ст20 и соответственно равен 6 в 0,5% растворе соли, а в 2% растворе – 16. В связи с тем что исследуемые вещества проявили наибольший ингибирующий эффект на образцах Ст20, были проведены еще несколько испытаний с использованием образцов стали в более агрессивной среде с использованием весового метода определения скорости коррозии. Из полученных экспериментальных данных сделан вывод, что ингибирование с применением ЧАС эффективно в условиях кислотной коррозии.

## ХИМИЧЕСКИЙ МУСКУЛ

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Известно, что многие электропроводные полимеры, например ПАНи, могут под действием электрического тока многократно изменять степень окисленности. Степень окисленности влияет на структура ПАНи, что может привести к изменению размера макромолекулы (за счет изменения конформации). На этом эффекте можно построить преобразователи электрической энергии в механическую (своего рода электрохимический актуатор). Поэтому цель настоящей работы – проверка возможности использования ПАНи в качестве рабочего тела электрохимического актуатора (ЭХА).

Поскольку предполагалось, что относительное изменение размеров макромолекул будут иметь небольшое значение для фиксации этих явлений, был построен актуатор по принципу биметаллической пластины, с той разницей что в качестве подложки использовалась тонкая палладиевая фольга, покрытая с одной стороны пленкой ПАНи. Процесс нанесения пленки ПАНи осуществляли в классическом варианте методом ЦВА из подкисленного раствора анилина. После этого ЭХА длиной около 4 см был погружен в децимолярный раствор соляной кислоты в качестве рабочего электрода. Потенциал его задавался при помощи потенциостата в интервале  $-200$   $+800$ . Наблюдение за изменением положения ЭХА осуществляли при помощи микроскопа, совмещенного с веб камерой. Было установлено, что изменение потенциала ЭХА способствует изменению (изгибанию и распрямлению) последнего. Очевидно, это можно объяснить изменением конформации макромолекулы в окисленном и восстановленном состоянии. Наибольшее изменение наблюдалось в интервале от  $-100$  до  $-30$  мВ относительно хлорсеребряного электрода. Циклические изменения положения ЭХА происходят достаточно быстро. В проведенном эксперименте исследовался диапазон изменения скоростей потенциала в интервале от 10 мВ/с до 600 мВ/с. Во всех случаях пропорциональная зависимость положения изменения кривизны ЭХА от текущего значения его потенциала. Обнаружено, что в восстановленной форме ПАНи изгибает ЭХА в сторону металлической подложки, а в окисленной – в сторону слоя ПАНи.

Изготовленная модель ЭХА позволяет прогнозировать возможность использования ПАНи для изготовления устройств механического перемещения для микроэлектроники, нанороботов и т.п.

## ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ПРОВОДИМОСТЬ КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ PVDF С УГЛЕРОДНЫМ НАПОЛНЕНИЕМ

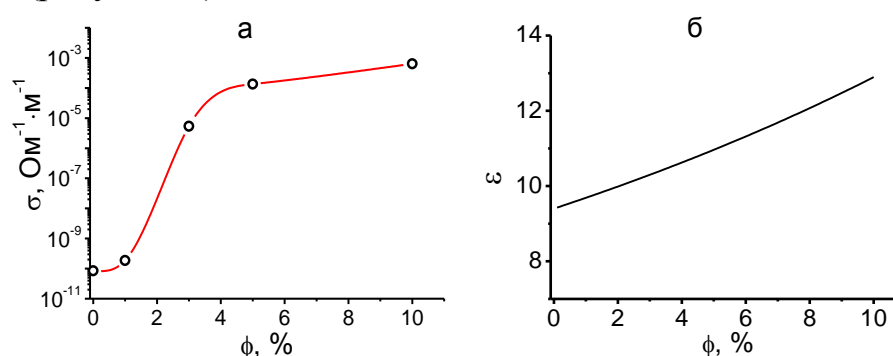
Руководитель А.В. Солнышкин

Тверской государственный университет  
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Одним из перспективных направлений исследований последних лет является создание полимерных композитов, наполненных наночастицами углерода (углеродными нанотрубками, нановолокнами, сажами, графенами и др.). Созданию электропроводящих композитов на основе фторопластов посвящено крайне малое число работ, несмотря на их высокие эксплуатационные свойства (гидрофобность, термическую, атмосферную, радиационную и хемостойкость) и способность перерабатываться через расплав и раствор.

В настоящей работе проведены исследования электропроводности композитных пленок на основе PVDF с включениями технического углерода и углеродных нанотрубок, а также исследования их диэлектрических свойств. Образцы композита на основе PVDF, содержащего электротехническую сажу (технический углерод) и углеродные нанотрубки, получены методом кристаллизации из раствора. Толщина пленочных образцов варьировалась в пределах  $30 \div 70$  мкм, с 1 – 10 % содержанием углеродного наполнителя.

Замечено, что проводимость композитов с включениями технического углерода и углеродных нанотрубок растет с увеличением процентного состава углеродного наполнителя. Определен порог перколяции для исследуемых образцов, который лежит в диапазоне от 1 до 3 массовых % углеродного наполнителя (рисунок, а).



Зависимость проводимости композитов (а) и тангенса угла диэлектрических потерь (б) от процентного содержания углеродного наполнителя

Обнаружено значительное увеличение диэлектрической проницаемости и тангенса угла диэлектрических потерь в исследуемых структурах при наличии включений технического углерода и углеродных нанотрубок, превышающих 1% (рисунок, б), что связано с вкладом проводимости в диэлектрический отклик композитных материалов.

Г.С. Куликов, П.Н. Крылов, М.Б. Султанов

## ЭНЕРГИИ РАЗРЫВА СВЯЗИ. ОСНОВНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ

Руководитель М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Энергия разрыва связи – одна из энергетических характеристик обуславливающая стабильность молекул и вещества в целом. Экспериментальные сведения по энергиям связей в различных классах органических (и иных) соединений скудны и порой разноречивы. Поэтому необходимо развитие расчетных методов их определения и предсказания.

Целью настоящей работы является установление через аналитические выражения и/или графические зависимости количественных корреляций «структура-свойство» в выбранных соединениях. В качестве объектов исследования были взяты алкины, алкены и амины.

Для решения поставленной задачи проведена оценка состояния численных данных исследуемых веществ, а также выявлены отдельные закономерности.

В результате проделанной работы были проанализированы графические зависимости свойства вещества – степень замещения  $l$ , которые служат ценным дополнением к расчетно-аналитическому исследованию.

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

Анализ числовых данных по энергиям разрыва связей в исследуемых соединениях, их сопоставление и упорядочение по рядам сходных молекул позволили выявить определенные закономерности. Проведены численные расчеты по энергиям разрыва связей выбранных соединений. Там, где можно сделать сопоставления, эти расчёты согласуются с экспериментом.



СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА БИОИОДОСТУПНОСТИ  
МОЛЕКУЛ И АНИОНОВ  $\alpha$ -АМИНОКИСЛОТ И ИХ БЕНЗАМИДОВ

Руководитель Н.В. Калинина

Ивановский государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Исследования реакционной способности  $\alpha$ -аминокислот в процессах N-ацилирования показывают, что в нейтральных и слабощелочных средах основной реакционноспособной формой являются анионы аминокислот [1]. В связи с важным значением реакций ацильного переноса с участием аминокислот как в живых организмах, так и в синтезе биологически активных препаратов, представляло интерес выявить влияние ионизации карбоксильной группы  $\alpha$ -аминокислот и их N-ацильных производных на биологическую активность этих соединений. С этой целью с помощью процедуры *QSAR Properties* пакета *HyperChem 7.52*. [1] были определены дескрипторы молекулярных и анионных форм ряда  $\alpha$ -аминокислот и их бензамидов. Было установлено, что все рассматриваемые молекулы и анионы имеют молекулярную массу менее 350 а.е.м.; липофильность всех веществ составляет менее 3,5; количество доноров водородной связи не превышает 3; и уменьшается на 1 в результате диссоциации карбоксильной группы, а число акцепторов Н-связи составляет не более 4. Ионизация карбоксильной группы рассматриваемых веществ приводит к некоторому росту липофильности, например в случае бензамида глицина  $\log P$  увеличивается с 0.6 до 2.1, для бензамида  $\alpha$ -аланина – с 1.2 до 2.6. Остальные рассчитанные параметры - молекулярный объем, рефракция, поляризуемость, энергия водородной связи несколько снижаются в случае анионных форм аминокислот и амидов.

Расчет показал, что молекулярные дескрипторы всех соединений соответствуют не только критериям Липински, но и более жестким требованиям, предъявляемым в работе [2], в связи с чем как молекулы, так и анионы можно отнести к биодоступным веществам, причем биодоступность анионных должна быть несколько выше, чем неионизированных молекул.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. HyperChem™ Release 7.52 for Windows. Molecular Modeling System. Seriennr. 12–750–1503700446. – Gainesville: Hypercube Inc., 2005.
2. Teague S.J, Davis A.M., Leeson P.D., Oprea T. *Angew. Chem. 4 Int. Ed.*, 1999. V. 38. P. 3743.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОНСТАНТ АНИЗОТРОПИИ СПЛАВОВ  $Dy_{1-x}Nd_xCo_{4.5}Cu_{0.5}$   
И  $DyCo_{5.2-x}Cu_x$  МЕТОДОМ СЕКСМИТТА–ТОМСОНА ПРИ ВЫСОКИХ  
ТЕМПЕРАТУРАХ, В ОБЛАСТИ АНИЗОТРОПИИ «ЛЕГКАЯ ОСЬ»

Руководитель О.Б. Дегтева

Тверской государственный университет  
Кафедра магнетизма

Ранее было установлено, что в сплавах  $DyCo_{5.2-x}Cu_x$  ( $x=0.25;0.5;1.0$ ) при повышении температуры наблюдаются спонтанные спин – переориентационные переходы (СПП) типа «ЛП – ЛО», а в сплавах  $Dy_{1-x}Nd_xCo_{4.5}Cu_{0.5}$  ( $x=0.2;0.4;0.8$ ) такие же переходы типа «ЛК – ЛО»\*.

Поскольку при комнатной температуре они обладают неодноосной анизотропией, то применение стандартного метода Сексмитта – Томсона для определения эффективных констант магнитокристаллической анизотропии затруднительно.

В данной работе представлены данные магнитных измерений двух указанных групп сплавов, полученные при температурах выше температур СПП, на основании которых рассчитаны значения констант анизотропии  $K_1$  и  $K_2$  для каждого из указанных составов. Выявлены закономерности зависимостей  $K_1(x)$  и  $K_2(x)$  от содержания в сплавах неодима и меди, соответственно. Обнаружена особенность изменения соотношений между значениями  $K_1$  и  $K_2$  для каждого состава при изменении температуры. Существование в сплавах СПП наглядно проиллюстрировано микрофотографиями поверхностной доменной структуры сплавов, которая существенно изменяется при повышении температуры от 20<sup>0</sup>С до 100–150<sup>0</sup>С.

---

\* О.Б.Дегтева, А.Г.Пастушенков, Н.П.Скоков, А.Ю.Соколов. Магнитные свойства, доменная структура и особенности спонтанных спин-ориентационных переходов сплавов  $Dy_{1-x}Nd_xCo_{4.5}Cu_{0.5}$ . // Горный информационно-аналитический бюллетень. Отдельный выпуск 1. Функциональные металлические материалы. Сырьевая база, магнитные материалы и системы. – М.: Издательство Московского государственного горного университета – 2007. – № ОВ1. С.392–403.

П.С. Лихуша

## ПОДБОР ОПТИМАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ В КАЧЕСТВЕ НОСИТЕЛЯ ДЛЯ ИММОБИЛИЗОВАННОЙ ОРТО-ДИФЕНОЛОКСИДАЗЫ (О-ДФО)

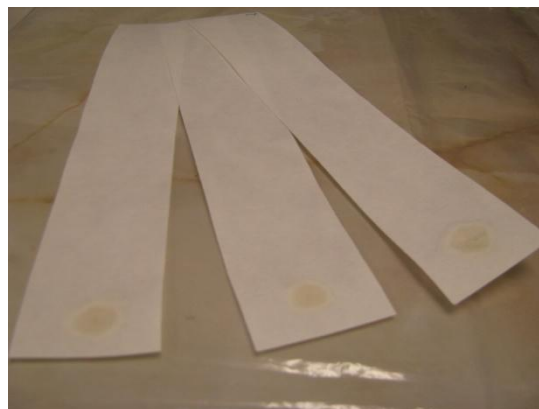
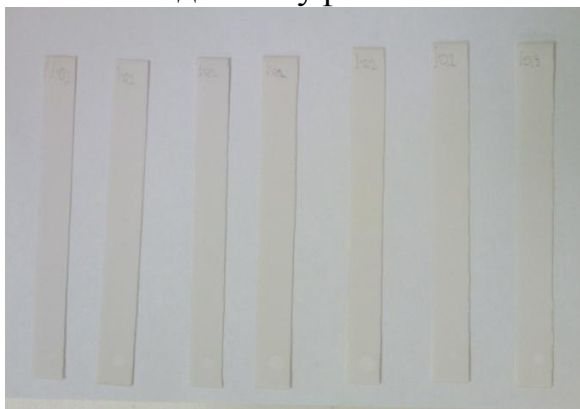
Руководитель Г.П. Лапина

Тверской государственный университет

Кафедра физико-химической экспертизы биоорганических соединений

Для иммобилизации ферментов путём адсорбции используются аниониты, катиониты и «нейтральные» адсорбенты, которые не являются чётко выраженными ионитами. В своём исследовании мы выбрали «нейтральные» адсорбенты, а именно фильтровальную бумагу и силуфоловые пластинки, представляющие собой полимерную пластинку, покрытую закреплённым слоем силикагеля и люминесцентного индикатора.

На две полоски фильтровальной бумаги наносили 10 капель САЧ (сывороточный альбумин человека) – коммерческий препарат (концентрация  $2,2 \cdot 10^{-5}$  М, сухое вещество содержит не более 6% воды по массе), 20 капель экстракта о-ДФО и дополнительно 10 капель раствора бензидина (с концентрацией  $1,08 \cdot 10^{-3}$  М). Капли наносились поочередно с последующим высушиванием. Диаметр пятен от капель составил примерно 4 мм и 6 мм в первом и во втором случаях соответственно. Такая же методика была применена и для силуфоловых полосок.



Внешний вид тестовых систем иммобилизованной о-дифенолоксидазы льна на пластинках Силуфола и фильтровальной бумаги.

В итоге получили тест-системы для повышения эффективности контроля качества продукта на присутствие перекисных соединений и удлинения срока хранения. Они довольно компактны, анализ проводится быстро и экономически выгодно. Полученные тест-системы характеризуются экспрессностью и компактностью.

## ЭТИЛЕНДИАМИНДИАНТАРНАЯ КИСЛОТА КАК РЕАГЕНТ В ФОТОМЕТРИЧЕСКОМ ОПРЕДЕЛЕНИИ НИКЕЛЯ

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственной университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Фотометрический метод анализа широко используется для решения проблем технологического контроля, в санитарно-гигиеническом анализе. Метод имеет низкий предел обнаружения металлов при относительной ошибке определений в пределах 1–2%.

В литературе описан способ определения никеля с помощью этилендиаминтетрауксусной кислоты, состоящий в проведении колориметрического определения никеля при рН 4,55–6,82 в области поглощения 580–750 нм. Никель можно надежно определить в концентрации от 40 до 5000 мкг/100 мл.

К недостаткам этого способа следует отнести использование ЭДТА, который загрязняет окружающую среду [1].

Нами предложен метод определения никеля с использованием экологически безопасного комплексона этилендиаминдиантарной кислоты (ЭДДЯК) и расширение интервала рН [2]. Такой метод позволяет определять содержание никеля в растворе в диапазоне рН 1,76–7,80.

*Работа выполнена при поддержке гранта ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы (Соглашение № 14.В37.21.0653).*

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Metsaerinne S., Tuhkanen T., Aksela R. Photodegradation of Ethylenediaminetetraacetic Acid (EDTA) and Ethylenediamine Disuccinic Acid (EDDS) within Natural UV Radiation Range // Chemosphere. 2001. – V. 45. – P. 949–955.

2. Фотоколориметрическое определение никеля с помощью комплексонов: Ноу-хау 01–28–2012/ Логинова Е.С., Никольский В.М. Заявл. 15.09.12; зарег. 17.11.2012.

О.Ю. Ляшко, Р.А. Яковлева, А.А. Якубовская

ИЗМЕНЕНИЕ БИОХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА РАСТЕНИЙ СВЕКЛЫ  
СТОЛОВОЙ ПОД ДЕЙСТВИЕМ БОРСОДЕРЖАЩИХ КОМПЛЕКСОВ

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

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Бор относится к числу микроэлементов, поглощаемых растениями в виде анионов, обладающих способностью образовывать хелатные комплексы с некоторыми лигандами. При этом значительная часть борат-анионов растения содержится в клеточной стенке в составе комплексов с пектиновыми веществами. Однако о возможности координации бора в анионной форме с другими органическими лигандами (аминокислотами, пептидами и веществами типа комплексонов) имеются немногочисленные данные. Поэтому целью стало сравнительное изучение биологической активности борной кислоты и соединений хелатного типа в условиях мелкоделяночного опыта. Исследования проводились на экспериментальном участке кафедры агрохимии, почвоведения и агроэкологии Тверской ГСХА. Общая площадь составила 60 м<sup>2</sup>. Семена столовой свеклы сорта «Красный шар» на 24 часа замачивали в растворах Н<sub>3</sub>ВО<sub>3</sub>, этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТУК), этилендиаминдиантарной кислоты (ЭДДЯК), иминодиантарной кислоты (ИДЯК) с концентрацией 1,5·10<sup>-3</sup> моль/л, а также в растворах, содержащих совместно комплексоны в концентрации 1,5·10<sup>-3</sup> моль/л и эквимольные количества Н<sub>3</sub>ВО<sub>3</sub>. Семена высевали на делянки площадью 1 м<sup>2</sup> в трехкратной повторности для каждого варианта опыта. Контролем служили семена, замоченные в Н<sub>2</sub>О dest. Растения трижды в течение вегетационного периода обрабатывали указанными растворами, а контрольные делянки – дистиллированной водой из расчета 100 мл /м<sup>2</sup>.

В ходе проведенных анализов было установлено, что наибольшее суммарное количество хлорофиллов а и b (113,7 и 114,9 мг/100 г), каротиноидов (70,5 и 70,9 мг/100 г) образовалось в листьях, обработанных ИДЯК и Н<sub>3</sub>ВО<sub>3</sub>. По сравнению с контролем применение ЭДДЯК способствовало увеличению аскорбиновой кислоты в корнеплодах свеклы на 10 мг/100 г, а в комплексе с бором – на 8,4 мг/100 г соответственно. Таким образом, использование хелатных комплексов бора наряду с борной кислотой приводит к активному синтезу пигментов в листьях и накоплению витамина С в корнеплодах столовой свеклы. При этом урожайность данной культуры в среднем на 10-30% выше по отношению к контрольному.

А.С. Макарова

## ВОЗМОЖНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ ФЕРМЕНТОВ КЛАССА ЛИПАЗ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ БИОДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА

Руководитель Л. Ж. Никошвили

Тверской государственный технический университет  
Кафедра биотехнологии и химии

Биодизель – это не только востребованное топливо, но и перспективный источник энергии. Биодизельное топливо имеет большое число преимуществ по сравнению с дизельным топливом, к которым можно отнести высокое цетановое число, биологическую безопасность, малое количество выбросов вредных веществ, таких, как углекислый газ, продукты неполного сгорания углеводородов, твердые частицы. Но кроме достоинств есть и недостатки: разрушение деталей двигателя под воздействием компонентов биотоплива, более высокий уровень выбросов оксидов азота.

Существуют несколько поколений биотоплив: первое поколение – метиловые эфиры жирных кислот, получаемые путем переэтерификации; второе поколение – Green дизель; третье поколение – это топливо, из целлюлозы получаемое путем ферментативного разложения.

Green дизель получают путем гидролиза триглицеридов до жирных кислот, которые в дальнейшем подвергаются дезоксигенированию.

Необходимо отметить, что в отличие от метиловых эфиров жирных кислот биотопливо 2-го поколения (Green дизель) – это продукт, который не зависит от происхождения сырья, легко смешивается с обычным топливом. Кроме того, одно из важнейших преимуществ Green дизеля по сравнению с биодизельным топливом и синтетическим дизельным топливом – это отсутствие  $O_2$ , что повышает стабильность топлива при хранении, и высокое цетановое число.

Получение жирных кислот из триглицеридов можно осуществлять химическим гидролизом. Химический гидролиз триглицеридов является каталитическим процессом. В качестве катализаторов используют оксиды металлов ( $CaO$ ,  $MgO$ ,  $ZnO$  и т.д.), а также вещества, которые содержат или образуют в условиях реакции ионы  $H^+$  или  $OH^-$ . Большую роль в этом отношении играет резкое увеличение степени диссоциации воды с ростом температуры.

Альтернативой химическому гидролизу является ферментативный гидролиз, осуществляемый с помощью ферментов класса липаз. Ферменты расщепляют жирные кислоты более быстро и в достаточно мягких условиях при оптимальных температурах и pH. Выявление особенностей структуры и функционирования липолитических ферментов становится особенно актуальным в связи с их биологической ролью, а также предоставляет новые возможности для создания источников биотоплива.

## СТРУКТУРА ПЬЕЗОКЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ ЦИРКОНАТА-ТИТАНАТА СВИНЦА

Руководитель О.В.Малышкина

Гимназия №12, г. Тверь

Тверской государственной университет

Кафедра технической физики и инновационных технологий

В работе исследовалась структура пьезоэлектрических керамик (цирконата-титаната свинца – ЦТС-19, цирконата-титаната бария-свинца (ЦТБС-3) и цирконата-титаната свинца с добавлением натрия и висмута (ЦТСНВ-1)), с использованием растрового электронного микроскопа (РЭМ) – структура боковых сколов и химический состав; а с использованием атомно-силового микроскопа (АСМ) – рельеф поверхности полярного среза. Для выявления структуры зерен методом АСМ поверхность подвергалась травлению раствором фтористой и азотной кислот в течение 20 секунд.

При сравнении спектров (в весовых процентах), полученных в результате химического анализа на РЭМ и рассчитанных по химическим формулам керамик, установлено повышенное содержание кислорода и пониженное содержание свинца во всех исследуемых образцах. Данный результат объясняется технологическим режимом спекания пьезоэлектрических керамик.

Обращает на себя внимание различие в размерах зерен керамик разного состава на полярной поверхности (рис.1). На боковых сколах такая зависимость не выявлена (рис. 2). Наблюдаемое различие в размерах зерен на протравленной поверхности может быть связано с разной скоростью травления границ зерен у керамик различных составов.

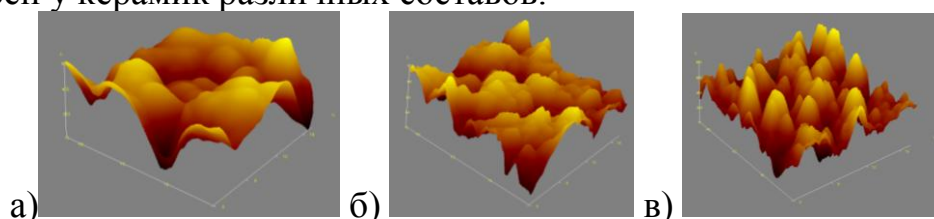


Рис.1. Рельеф травленной поверхности полярного среза пьезокерамик ЦТС-19 (а), ЦТБС-3 (б) и ЦТСНВ-1 (в), полученное на АСМ. Размер поля 20x20 мкм

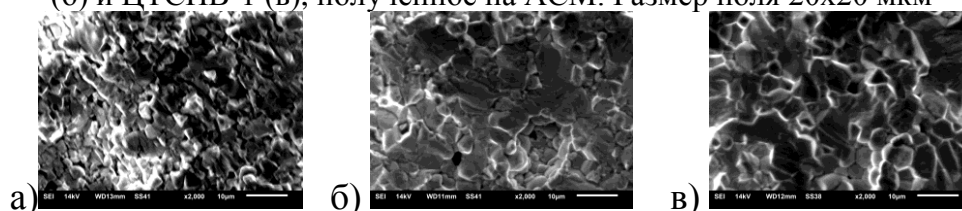


Рис. 2 Изображение боковой поверхности пьезокерамик ЦТС-19 (а), ЦТБС-3 (б) и ЦТСНВ-1 (в), полученное на РЭМ. Увеличение x 2000

А.А. Миронов, О. Дибуа Кат Констант

## ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНОЙ ВОЛОКНИСТОЙ НАСАДКИ ДЛЯ БИОХИМИЧЕСКОГО ОКИСЛЕНИЯ ПРОМЫШЛЕННЫХ ВЫБРОСОВ

Руководитель Витковская Р.Ф.

Санкт – Петербургский государственный университет технологии и дизайна

Неизбежными результатами большинства технологических процессов является выброс в атмосферу, который часто превышает нормативные требования предельно допустимых концентраций, несоблюдение которых может быть угрозой как для человека, так и для окружающей среды.

Биологические методы очистки в большинстве случаев применяются для удаления загрязнений из почвы и сточных вод, но в последнее время их применение стало намного шире и их можно считать наиболее перспективными. Основные преимущества биологических методов – низкие затраты и отсутствие особых условий для работы аппаратов, таких, как температура и давление.

Одним из основных аппаратов биологической очистки воздуха является биофильтр, а главной составляющей биофильтра – насадка. Наиболее перспективным исходным материалом для создания принципиально новых контактных устройств являются полимерные волокнистые материалы.

Предложена конструкция насадки, состоящая из дистанционированных полимерных сетчатых дисков, выполненных трикотажным способом. Исследованы энергетические свойства насадки, в частности, аэрогидродинамическое сопротивление как сухой, так и смоченной насадки, удерживаемость жидкости насадкой. Испытания проводились в аппарате диаметром 108 мм в диапазоне нагрузок по газу от 0 до 1,2 м/с в системе вода-воздух и плотностях орошения 0,06; 0,119; 0,179 м<sup>3</sup>/(м<sup>2</sup>·ч).

На основании экспериментальных данных получены эмпирические зависимости для расчета коэффициентов аэро- и гидродинамического сопротивления насадки. Определена эффективность биохимического окисления бутанола в диапазоне концентраций 50–200 мг/м<sup>3</sup> в газовой смеси, что соответствует его концентрациям в газовой смеси лакокрасочного производства при скоростях газа 0,07 – 0,1 м/с в колонном аппарате диаметром 150 мм.

Полученные данные свидетельствуют о перспективности использования разработанного полимерного волокнистого устройства в качестве насадки биофильтров для биохимической очистки промышленных выбросов.



Т.А. Морозихина

## СИНТЕЗ ГЕКСАФТОРФОСФАТОВ N-АЛКИЛПИРИДИНИЯ И ИХ ТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

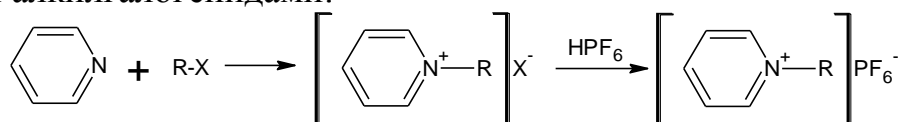
Руководитель О.Е. Журавлев

Тверской государственной университет  
Кафедра органической химии

Гексафторфосфаты четвертичного аммония, диалкилимидазолия и N-алкилпиридиния, полученные еще в начале 90-х годов XX века, принадлежат к классу гидрофобных низкотемпературных ионных жидкостей (ИЖ)\*. Устойчивость и химическая инертность этих органических соединений наряду с коммерческой доступностью в значительной степени способствовали развитию исследований в области синтеза, катализа и других областях органической химии. Гидрофобность гексафторфосфатов является значительным преимуществом при их применении в качестве ИЖ. Учитывая, что в некоторых процессах органической химии приходится использовать ИЖ при повышенных температурах, важным становится вопрос их стабильности.

Поэтому целью данной работы было исследование термической стабильности гексафторфосфатов N-алкилпиридиния.

Гексафторфосфаты N-алкилпиридиния были получены из галогенидов N-алкилпиридиния, путем метатезиса галогенид-аниона на  $\text{PF}_6^-$ . Исходные галогениды были получены в результате реакций кватернизации пиридина различными алкилгалогенидами:



где, R=CH<sub>3</sub>, C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>, C<sub>6</sub>H<sub>13</sub>, C<sub>8</sub>H<sub>17</sub>, C<sub>10</sub>H<sub>21</sub>, C<sub>12</sub>H<sub>25</sub>, C<sub>16</sub>H<sub>33</sub>; X=Br<sup>-</sup>, I<sup>-</sup>

Термическую стабильность гексафторфосфатов N-алкилпиридиния изучали методом термогравиметрии. Для сравнения была изучена термическая стабильность исходных галогенидов N-алкилпиридиния. Нами показано, что замена галоид-иона на объемный октаэдрический анион  $\text{PF}_6^-$  приводит к повышению температуры плавления солей (что не позволяет отнести исследованные соединения к низкотемпературным ионным жидкостям) и температуры разложения. В общем случае гексафторфосфаты устойчивы до 300–350<sup>0</sup>С и постепенно разлагаются в интервале 350–450<sup>0</sup>С. Галогениды N-алкилпиридиния устойчивы лишь до 150–190<sup>0</sup>С и быстро разлагаются в интервале 190–270<sup>0</sup>С.

\* 1. Кустов Л.М., Васина Т.В., Ксенофонов В.А. // Рос. хим. ж. – 2004. Т. XLVIII, №6. – С. 13.

## РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УМЕРЕННО КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ РАСТВОРОВ СМЕСЕЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ С ПОЛИАКРИЛОНИТРИЛОМ И ЦЕЛЛЮЛОЗЫ С ХИТИНОМ В ИОННЫХ ЖИДКОСТЯХ

Руководители: Н.П.Новоселов<sup>1</sup>, А.М. Бочек<sup>2</sup><sup>1</sup> Санкт – Петербургский государственный университет технологии и дизайна,<sup>2</sup> Институт высокомолекулярных соединений Российской академии наук (ИВС РАН)

В последние годы интенсивно изучаются ионные жидкости (ИЖ), в которых можно растворять природные и синтетические полимеры, что, в свою очередь, позволяет получать композитные полимерные материалы через смешение полимеров в общем растворителе. С целью создания композитных волокон и пленочных материалов с регулируемыми физико-механическими свойствами изучены реологические свойства растворов смесей целлюлозы с гибкоцепным синтетическим полимером - полиакрилонитрилом (ПАН) в смешанном растворителе 1-бутил-3-метилимидазолий хлориде (БМИХл) с диметилформамидом (БМИХл – ДМФА), а также целлюлозы с хитином в 1-бутил-3-метилимидазолий ацетате (БМИАц). Растворы смесей целлюлозы с хитином получали путем смешения предварительно раздельно приготовленных растворов двух полимеров в БМИАц, а смеси целлюлозы с ПАН – путем смешения раствора целлюлозы в БМИХл с раствором ПАН в ДМФА.

Показано, что кривые течения 3% (мас.) растворов изученных полимеров представляют собой неполные кривые течения неньютоновских жидкостей. Вязкость раствора целлюлозы больше вязкости раствора хитина в БМИАц и больше вязкости раствора ПАН в БМИХл – ДМФА. Наблюдаемые различия в вязкости целлюлозы и хитина в БМИАц обусловлены разным химическим строением полисахаридов, молекулярной массой и особенностями взаимодействия с молекулами растворителя. В случае растворов смесей целлюлозы с ПАН в БМИХл – ДМФА, различия в вязкости обусловлены также и разной равновесной жесткостью макромолекул двух полимеров.

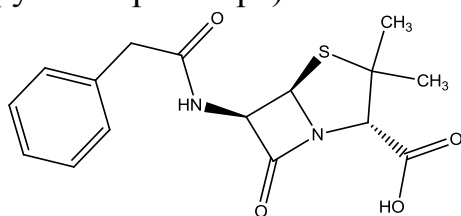
Установлено, что при смешении целлюлозы с ПАН наблюдаются отрицательные отклонения вязкости от аддитивных значений. В случае смесей целлюлозы с хитином в БМИАц наблюдаются отрицательные и положительные отклонения вязкости от аддитивных величин. При введении в раствор целлюлозы до 40% хитина наблюдаются отрицательные, а при большем содержании хитина в смесях – положительные отклонения вязкости. На основании температурных зависимостей были рассчитаны значения теплоты активации вязкого течения растворов  $E_a$ , значения которых также изменяются нелинейно в зависимости от состава смесей. Отклонения вязкости и значений  $E_a$  при введении в растворы целлюлозы хитина и ПАН указывают на существенную перестройку структуры растворов изученных полимерных композитов. Показано, что из растворов целлюлозы в ИЖ с добавками хитина и ПАН методом мокрого формования можно получать пленочные композитные материалы. Методом термогравиметрического анализа (ТГА) изучены теплостойкие свойства композитов целлюлозы с ПАН. Установлено, что введение ПАН в матрицу целлюлозы приводит к изменению температурных условий начала разложения композитных материалов и протекающих в матрице химических реакций.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СЕРЕБРА(I) С АНИОНАМИ БЕНЗИЛПЕНИЦИЛЛИНА И ОКСАЦИЛЛИНА

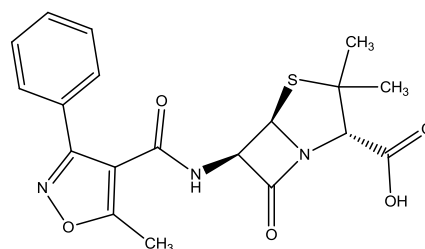
Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Потенциометрическим методом исследовано взаимодействие ионов  $\text{Ag}^+$  с анионами бета-лактамных антибиотиков бензилпенициллина ( $\text{Vzp}^-$ ) и оксациллина ( $\text{Oxa}^-$ ). Проведено титрование 0,03 моль/л раствора  $\text{AgNO}_3$  на фоне 0,1 моль/л раствора  $\text{KNO}_3$  растворами натриевых солей бензилпенициллина (0,1114 моль/л) и оксациллина (0,0868 моль/л) в присутствии двух индикаторных электродов: серебряного (регистрация концентрации свободных ионов  $\text{Ag}^+$ ) и стеклянного (регистрация pH титруемого раствора).



Бензилпенициллин



Оксациллин

Введение в раствор пенициллинов вызывает уменьшение значений потенциала серебряного электрода по сравнению с теоретическими, что говорит о связывании ионов серебра анионами пенициллинов в комплексы. В обоих случаях в ходе титрования pH остается постоянным и находится в нейтральной области. Следовательно, образование комплексов не приводит к вытеснению протонов функциональных групп анионов  $\text{Vzp}^-$  и  $\text{Oxa}^-$ . Полученные потенциометрические зависимости анализировали с использованием специализированной программы New DALSFEK. Расчет показал возможность образования комплексов  $\text{AgVzp}$ ,  $\text{AgVzp}_2^-$ ,  $\text{Ag}_2\text{Oxa}^+$ ,  $\text{AgOxa}$ ,  $\text{AgOxa}_2^-$ . Поскольку образование биядерных комплексов отмечено для оксациллина и не отмечено для бензилпенициллина, можно предполагать, что изоксазольная группа оксациллина способна координировать ионы серебра. Рассчитаны соответствующие константы образования комплексов:  $\lg\beta(\text{AgVzp}) = 2.21 \pm 0.01$ ,  $\lg\beta(\text{AgVzp}_2) = 3.91 \pm 0.02$ ,  $\lg\beta(\text{Ag}_2\text{Oxa}) = 4.89 \pm 0.01$ ,  $\lg\beta(\text{AgOxa}) = 2.88 \pm 0.01$ ,  $\lg\beta(\text{AgOxa}_2) = 5.43 \pm 0.01$ .

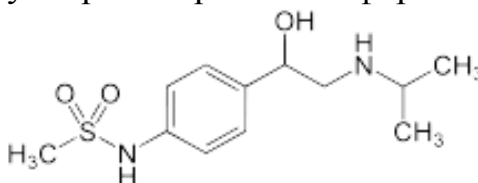
В.В. Новикова

## РАСЧЕТ ХИМИЧЕСКИХ РАВНОВЕСИЙ В СИСТЕМАХ С УЧАСТИЕМ СОТАЛОЛА В СРЕДЕ ФИЗИОЛОГИЧЕСКОГО РАСТВОРА

Руководитель М. А. Феофанова

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Соталол — лекарственное средство, обладающее антиангинальным, антиаритмическим и гипотензивным действием. Оказывает двойное действие как неселективный бета-адреноблокатор и ингибитор калиевых, кальциевых каналов. С химической точки зрения соталол гетерофункциональное соединение, содержащее бензольное кольцо с двумя заместителями в пара положении, замещенное аминогруппой и углеводородным радикалом, содержащим гидроксогруппу в протонированной форме:



Цель исследования – изучение кислотно-основных свойств соталола, а также ионо-молекулярных равновесий с участием ионов биометаллов и соталола. Из биометаллов были выбраны кальций и магний так как ионы кальция и магния играют важную роль в регуляции различных процессов жизнедеятельности организма. В связи с обилием физиологических функций в организме магний обладает множеством клинических эффектов, позволяющих использовать его в качестве лекарственного средства при сердечно-сосудистых заболеваниях. Дефицит магния приводит к дестабилизации клеточной мембраны. Наиболее распространен алиментарный дефицит магния из-за образования невсасываемых комплексов магния.

В работе исследован соталол, выделенный из лекарственной формы, чистота которого была подтверждена методами элементного анализа и термогравиметрического анализа. По данным рН-метрического титрования в среде физиологического раствора (ионная сила 0,15 NaCl и  $t^{\circ}=37\text{ C}^{\circ}$ ) с использованием методов математического моделирования (AVTORQVIL и HYPERQVAD) изучены кислотно-основные свойства соталола, получены логарифмы констант образования комплексов с металлами, определен их стехиометрический состав, построены диаграммы равновесий.

Изучение процессов комплексообразования в указанных системах позволит варьировать дозу лекарственных веществ, что в конечном итоге может привести к уменьшению экономических затрат на приобретение препаратов, а также к уменьшению побочных эффектов.

Ю.Г. Оленева

## ВОЗДЕЙСТВИЕ НЕКОТОРЫХ СОЛЕЙ НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ РЯСКИ МАЛОЙ

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

Химический состав и морфологические характеристики гидрофитов могут служить показателями, характеризующими состояние экосистемы. Наличие в водоеме поллютантов и тяжелых металлов определяется биомониторинговыми организмами, чувствительными к данным загрязнителям.

Для модельного эксперимента была взята популяция ряски малой. В лабораторных условиях растения были помещены в емкости с растворами солей тяжелых металлов с концентрациями 0,5 и 0,2% ( $\text{CoSO}_4$ ,  $\text{NiSO}_4$ ,  $\text{CuSO}_4$ ,  $\text{ZnSO}_4$ ). Отмечены нарушения листецов ряски: изменения окраски, некрозы, а также отмирание растений на третий день эксперимента. Для ИК спектрального анализа образцы растений отбирались ежедневно, их промывали и высушивали при  $t=40^\circ\text{C}$ . Регистрация спектров осуществлялась на спектрометре «Equinox 55» («Bruker»). Для УФ-спектрального анализа были приготовлены водные экстракты ряски, далее проводили опыт по методу Фолина–Чокальтеу.

ИК спектральный анализ показал, что листецы ряски способны к аккумуляции ионов тяжелых металлов. Основные изменения в ИК спектрах образцов ряски при воздействии поллютантов отмечены в области  $400\text{--}700\text{ см}^{-1}$ :  $655$ ,  $620$ ,  $605$ ,  $581\text{ см}^{-1}$  (под действием  $\text{Hg}_2\text{SO}_4$ ) и  $619$ ,  $534\text{ см}^{-1}$  (под действием  $\text{NiSO}_4$ ); интенсивность полос поглощения напрямую зависит от времени пребывания растений в растворе солей металлов. Поскольку растения находились в угнетенном состоянии проявились изменения в интенсивности полос поглощения, соответствующих белкам, жирам, углеводам:  $1737$  ( $\nu_{\text{C=O}}$ ),  $1634$  ( $\nu_{\text{C=O}}$ ),  $1064$  ( $\nu_{\text{C-OH}}$ ),  $1319$  ( $\delta_{\text{CH}_2}$ ),  $1118$  ( $\delta_{\text{C-C-C}}$ )  $\text{см}^{-1}$ . Морфологические изменения листецов ряски обнаружены с помощью оптической микроскопии (микроскоп «Neophot 30»).

С помощью УФ спектроскопии («Evolution Array» фирмы «Thermo») подтверждено наличие фенольных соединений, а также определено их количественное содержание в образцах ряски малой.

Методом ИК спектроскопии установлено, что ряска малая является тест-организмом на присутствие ионов тяжелых металлов в водоеме.

Ю.А. Орликова

## ХИМИЧЕСКАЯ МЕТАЛЛИЗАЦИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ – КОМПЛЕКСНЫХ СОЛЕЙ ПАЛЛАДИЯ

Руководитель Л.И. Ворончихина

Тверской государственной университет

Кафедра органической химии

Металлизированные диэлектрические материалы, поверхность которых полностью или частично покрыта металлом, сочетая полезные свойства диэлектрика и металла, обладают уникальными свойствами и находят широкое применение во многих областях.

Среди всех известных способов металлизации химическая металлизация в растворе является наиболее доступным и удобным способом нанесения тонкого слоя металла на подложку и имеет ряд преимуществ перед другими методами.

Основные работы за последние годы по упрощению технологии нанесения покрытия ведутся в направлении сокращения числа стадий и совмещения нескольких операций в одну. В связи с этим в настоящей работе на примере химического никелирования различных диэлектрических материалов (ткани, волокна, порошки) применен метод прямого активирования с использованием ионных жидкостей, содержащих  $\text{PdCl}_4^-$  – анион.

Ионные жидкости общей формулы  $[\text{R}_4\text{N}]_4\text{PdCl}_4$  получены двумя способами: твердофазным синтезом и метатазисом.

Соединения представляют собой окрашенные кристаллические вещества, нерастворимы в воде, термически устойчивые (до 200 °С).

Для упрощения технологического процесса в данной работе процесс активирования был совмещен с травлением поверхности за счет использования ионных растворов комплексных солей палладия в HCl конц. Химическое никелирование проводили из щелочных растворов.

Металлизированные материалы имели сплошное, блестящее светло-серое металлическое покрытие с содержанием фосфора 6–7 % масс (данные РФА).

## ПРОЦЕССЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ КЕРАМИКИ СИСТЕМЫ ЦТС

Руководитель Н. Н. Большакова

Тверской государственной университет  
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Цель работы – исследование процессов переключения сегнетокерамики системы ЦТС, обладающей различным отношением  $Zr/Ti$ .

Образцы представляли собой диски диаметром 10 мм с электродами из серебряной пасты, нанесенными методом вжигания. Содержание циркония в образцах менялось от 0,41 до 0,61 моль. %. Сюда вошли составы, лежащие в морфотропной области диаграммы состояний.

В данной работе использовался метод эффекта Баркгаузена\*. Электрическое поле прикладывалось в направлении  $[001]$ . Его изменение соответствовало одноступенчатому прохождению кривой поляризации. Подаваемое напряжение контролировалось с помощью универсального вольтметра В7-26. В качестве источника напряжения использовалась батарея «Молния», которая помещалась в блок питания. Исследования проводили при комнатной температуре.

Установлено, что поля старта скачков Баркгаузена для всех исследованных составов лежат в пределах от 80 до 100 В/см. В интервале полей от 100 до 1400 В/см кривая полевой зависимости скачков переполаризации монотонно возрастает. При дальнейшем увеличении поля наблюдается существенный рост числа скачков переключения. Следует отметить, что с увеличением напряжённости приложенного к образцу поля скорость следования скачков переполаризации и их амплитуда увеличиваются. Это свидетельствует об интенсификации процессов переключения керамики в высоких полях. При увеличении отношения  $Zr/Ti$  удельное число скачков переключения возрастает, проходит через максимум для составов, лежащих в морфотропной области диаграммы состояния, и уменьшается для составов с преимущественно ромбоэдрическим искажением решётки.

---

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

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМА  
АЦИЛИРОВАНИЯ п-АМИНОБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ  
БЕНЗОИЛХЛОРИДОМ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ

Руководитель Л.Б. Кочетова

Ивановский государственный университет  
Кафедра органической и физической химии

Изучение реакционной способности аминокислот (алифатических и ароматических) в их N-ацилировании и механизма указанной реакции является весьма важным для понимания механизмов образования пептидной связи в живом и оптимизации условий синтеза продуктов N-ацилирования.

Методом RHF/6-31G\* проведено квантово-химическое моделирование механизма реакции п-аминобензойной кислоты (п-АБК) с бензоилхлоридом (БХ) в газовой фазе. Построен фрагмент трехмерной поверхности потенциальной энергии (ППЭ) реакции в координатах расстояния между атомами, образующими связь в продукте: азота п-АБК и углерода хлорангидридной группы БХ ( $r_{C-N}$ ), а также угла атаки нуклеофила – п-АБК карбоксильную группу ( $\angle C_{Ar}CN$ ).

Анализ результатов моделирования показал, что маршрут реакции представляет собой фронтальную атаку нуклеофила на  $-COCl$  группу. При сближении молекул реагентов угол атаки изменяется от  $100^\circ$  до  $110^\circ$ . Процесс протекает в одну стадию; на ППЭ имеется единственная седловая точка, соответствующая переходному состоянию реакции, на маршруте отсутствуют минимумы, соответствующие образованию интермедиатов, что указывает на протекание реакции по бимолекулярному согласованному механизму.

Рассчитаны структурные параметры активированного комплекса реакции. Реакционный центр в активированном комплексе представляет собой искаженный тетраэдр.

Произведена оценка энергии активации реакции, которая оказалась значительно выше экспериментальной, что связано с тем, что моделирование проводилось для газофазного процесса.



А.И. Пичугина

КИНЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РАСТВОРЕНИЯ СУЛЬФИДА  
НИКЕЛЯ (II) В СЕРНОЙ КИСЛОТЕ

Руководитель В.И. Луцик

Тверской государственный технический университет  
Кафедра химии

Исследование проведено методом вращающегося диска [1], который позволяет рассчитать скорость растворения сульфида никеля при одновременном изменении влияющих факторов. В эксперименте использовали компактные образцы, приготовленные из синтезируемого порошка NiS [2]. Диски из порошкообразного сульфида изготовлены по методике [1]. Их общая пористость не превышала 4%.

Скорость растворения NiS ( $W$ , моль/дм<sup>2</sup>с) оценивали по количеству катионов Ni<sup>2+</sup>, переходящих в раствор за определенное время.

Изучена зависимость  $\lg W - \lg C$  в диапазоне  $C$  0,006 – 6 моль-экв/дм<sup>3</sup>. Для области  $x$  концентраций серной кислоты 0,15 – 2,0 моль-экв/дм<sup>3</sup> в диапазоне температуры 323–293 К, при частоте вращения диска 1,6 и 10 с<sup>-1</sup> получена адекватная модель

$$W = 7,94 \cdot 10^{-5} \cdot c^{0,06} \cdot e^{-1467/T} \omega^0 \cdot \tau^0.$$

Порядок по кислоте близок к нулю. Частота вращения диска и продолжительность процесса не влияют на скорость перехода никеля в раствор. Константа скорости равна  $5,8 \cdot 10^{-7}$  при 298 К. Значение эффективной энергии активации  $E_a = 12,2$  кДж/моль. Анализ основных кинетических параметров показывает, что процесс протекает в кинетическом режиме.

Проведено сравнение характеристик процесса растворения сульфида никеля в серной кислоте с ранее полученными в азотной кислоте. В окисляющей среде (HNO<sub>3</sub>) скорость растворения в 2,5 раза выше, чем в H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, где реализуется гидролитический механизм взаимодействия.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Луцик В.И. Кинетика гидролитического и окислительного растворения сульфидов металлов / В.И. Луцик, А.Е. Соболев. Тверь: ТГТУ, 2009.
2. Руководство по неорганическому синтезу / под ред. Г.Брауэра: в 6 т. М.: Мир, 1985.– Т.5.

А.А. Плисова

## ИОНОСЕЛЕКТИВНЫЙ ЭЛЕКТРОД ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОДЛИННОСТИ АМИНОГЛИКОЗИДОВ

Руководители: В.М. Никольский, Г.И. Мантров  
Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Экспрессное количественное определение антибиотиков в биологических жидкостях и лекарственных формах позволяет быстро и надежно исследовать эти препараты как при контроле соблюдения требований технологии в процессе изготовления, так и при предпродажном контроле подлинности этих лекарственных средств.

Потенциометрические методы с использованием ионоселективных электродов (ИСЭ) выгодно отличаются простотой и экспрессностью анализа.

Цель данной работы – создание ИСЭ с откликом на 2-дезоксид-стрептамин, практическая апробация этого электрода при определении действующего вещества. В качестве объектов исследования выбраны сульфат амикацина, сульфат канамицина и сульфат гентамицина. Эти антибиотики содержат общие структурные элементы – аминсахара, соединенных гликозидной связью с агликоновым ферментом.

Нами осуществлен синтез ионоселективных мембран, содержащих в качестве электродно-активного вещества ионный ассоциат амикацина с фосфорномолибденовой кислотой, создан на базе этих мембран ионоселективный электрод с откликом на амикацин.

Электродноактивные вещества (ЭАВ) получали осаждением амикацина из водных растворов фосфорномолибденовой кислотой.

Для исследования электродной функции измеряли ЭДС ячейки с использованием растворов амикацин-сульфата различных концентраций.

Для подтверждения практического применения созданного ИСЭ, содержащего в качестве электродно-активного вещества ионный ассоциат амикацина с фосфорномолибденовой кислотой, измеряли ЭДС ячейки с использованием растворов канамицина сульфата и гентамицина сульфата различных концентраций.

Применение созданного ИСЭ позволяет эффективно осуществлять экспресс-анализ аминогликозидов в 2–4 раза быстрее, чем стандартные методики.

А.А. Погудкина

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДАВЛЕНИЯ НА ПРОЦЕСС КОМПАКТИЗАЦИИ РЕАКТОРНЫХ ПОРОШКОВ СВМПЭ

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

Получение высокомолекулярных и высокопрочных нитей из сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) по безрастворному методу – процесс, основанный на сочетании нового поколения традиционных крупнотоннажных полимеров и нетрадиционных приемов их формования. Основной проблемой в рассматриваемом способе формования СВМПЭ, требующей научного исследования, в настоящее время остается успешное проведение всех основных стадий твердофазного формования реакторного порошка СВМПЭ (компактизация, монолитизация и последующая ориентационная вытяжка).

Цель настоящей работы – изучение влияния величины приложенного давления при комнатной температуре на морфологию компактируемого реакторного порошка СВМПЭ и определение оптимальных условий его компактизации.

Объект исследования – реакторный порошок СВМПЭ со средневязкостной молекулярной массой  $M_n 4,3 \times 10^6$  г/моль, синтезированный в Институте катализа им. Г.К. Борескова СО РАН с помощью титан-магниевого катализатора ТС-71.

В результате проделанной работы методами сканирующей электронной микроскопии было исследовано влияние приложенного давления на процесс компактизации реакторного порошка СВМПЭ. Установлено, что на первой стадии сжатия частицы порошка приходят в контакт друг с другом, в результате чего насыпная плотность порошка возрастает. При достижении достаточного количества контактов между частицами начинается их пластическая деформация (давление выше 30–60 МПа), что ведет к дальнейшей компактизации реакторного порошка.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках гос. задания ТвГУ на выполнение НИР «Разработка и освоение гель-технологий нового типа как основы создания сверхвысокопрочных волокон и лекарственных препаратов» (приказ №2596 от 3.11.2011 г.).*

Е. Посадова

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ  
 $SR_xBA_{1-x}NB_2O_6$  РАЗНОГО СОСТАВА

Руководитель О.В.Мальшкينا

Тверской государственной университет

Кафедра технической физики и инновационных технологий

Целью настоящей работы являлось исследование диэлектрических свойств кристаллов ниобата бария-стронция (SBN) в зависимости от содержания стронция в кристалле. Частотные зависимости емкости и тангенса угла диэлектрических потерь измерялись для образцов монокристалла SBN с  $x = 0,26; 0,35; 0,50; 0,61$  и  $0,70$  для поляризованных и неполяризованных образцов. Показано, что поляризация приводит к уменьшению диэлектрических потерь. По всей видимости, это происходит за счет «закрепления» дипольных моментов элементарных ячеек в процессе поляризации.

Вид диаграмм дисперсии комплексной диэлектрической проницаемости  $\epsilon''(\epsilon')$  не соответствует «классическим» представлениям (рисунок), следующим из теорий Дебая, Коула-Коула, Гаврильяка-Негами. Т.е. они не имеют вид полуокружности или дуги окружности. Сложные зависимости  $\epsilon''(\epsilon')$  означают наличие у материала набора времен релаксаций. Таким образом, происходит плавное перекрытие одного механизма диэлектрического отклика другим при изменении частот. Вид дисперсии, подобный кривой 2 на рис.1, соответствует наличию у материала поверхностного («барьерного») слоя\*, возникающего, по всей видимости, в процессе поляризации образца.

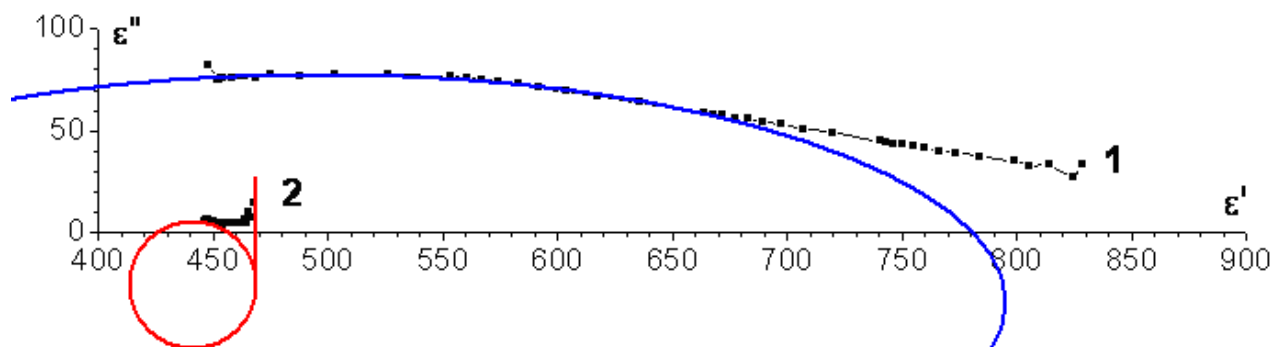


Диаграмма дисперсии  $\epsilon$  и ее интерпретация для поляризованного образца SBN50. Кривая 1 – неполяризованный образец, 2 – после поляризации.

\* Jonscher A.K. Universal relaxation law. London. 1996. 415 p.

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  
АЛАНИНСОДЕРЖАЩИХ КРИСТАЛЛОВ ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА

Руководитель Н.Н. Большакова

Тверской государственной университет  
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Цель работы – исследование влияния примеси L- $\alpha$ -аланина на диэлектрические свойства и процессы переполяризации кристаллов триглицинсульфата (ТГС).

Измерение емкости образцов проводилось с помощью моста Е7-4. Процессы переполяризации кристаллов триглицинсульфата изучены с помощью схемы, предложенной Сойером и Тауэром.

Установлено, что при  $T=25^{\circ}\text{C}$  с увеличением концентрации L- $\alpha$ -аланина значения диэлектрической проницаемости ( $\epsilon$ ) для монокристаллов АТГС убывают от 60 до 5, переключаемой поляризации ( $P$ ) – от 3,1 до 1,3 мкКл·м<sup>-2</sup>. Величины коэрцитивных полей ( $E_c$ ) колеблются от 500 до 900 В·см<sup>-1</sup>, при этом однозначная концентрационная зависимость не прослеживается. Для беспримесного кристалла ТГС петля диэлектрического гистерезиса прямоугольна и практически не искажена. В случае образцов АТГС симметрия петель нарушается: они униполярны и смещены по координатным осям. Это свидетельствует о преимущественной ориентации доменов одного из направлений вектора спонтанной поляризации.

В интервале температур от 24 до 50 $^{\circ}\text{C}$  кривая  $\epsilon(T)$  монотонно возрастает. С дальнейшим увеличением температуры кривая  $\epsilon(T)$  резко возрастает и проходит через максимум при  $T=52^{\circ}\text{C}$ . Рост концентрации L- $\alpha$ -аланина способствует повышению искажения петли гистерезиса кристаллов АТГС. С увеличением температуры от 20 до 48 $^{\circ}\text{C}$  петли диэлектрического гистерезиса уменьшаются по площади и при дальнейшем нагревании до 52 $^{\circ}\text{C}$  вырождаются в прямую линию. Ход зависимостей  $P(T)$  и  $E_c(T)$  существенно не отличается от известных в литературе для фазовых переходов второго рода.

## ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТОСТРИКЦИИ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ $\text{ErCo}_2$

Руководитель Ю.Г. Пастушенков

Консультант Д.Ю.Карпенков

Тверской государственный университет

Кафедра магнетизма

Цель данной работы – определение магнитоупругих характеристик (продольной, поперечной и объемной магнитострикции, теплового расширения) в области магнитного фазового перехода ферримагнетизм-парамагнетизм в ферримагнитном интерметаллическом соединении  $\text{ErCo}_2$ . Соединение  $\text{RCo}_2$  относится к кубическим фазам Лавеса и является двухподрешеточным магнетиком. В нём 3d-электроны делокализованы и образуют 3d-зону, тогда как 4f-электроны локализованы и создают эффективное обменное поле, которое действует на подрешётку Co, вызывая её в магнитное упорядочение. Поэтому в кубических интерметаллидах  $\text{RCo}_2$  (в

отличие от  $\text{RFe}_2$ , где преобладает одноионная магнитострикция (МС)) реализуются два механизма МС. Помимо одноионной (анизотропной) МС возникает большая по величине объемная (изотропная) магнитострикция [1; 2]. Это явление было подробно изучено нами при измерении продольной, поперечной и объемной (рисунок) магнитострикции поликристаллического образца интерметаллического соединения  $\text{ErCo}_2$  в полях до

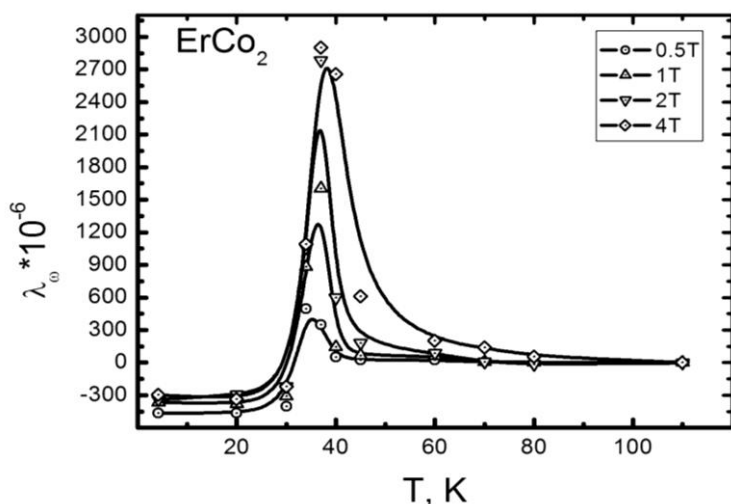


Рис.1. Температурная зависимость объемной магнитострикции  $\text{ErCo}_2$

100 кЭ в температурном интервале 4.2–120К.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gratz E., Markosyan A.S. J. Phys.: Condens. Matter 13 (2001) R385–R413. Physical properties of  $\text{RCo}_2$  Laves phases.
2. Belov K.P. Magnetostriction Phenomena and Their Technical Applications. – М., 1987.

И.И. Рыбаков

ПОЛИАНИЛИНОВАЯ ПЛЁНКА В КАЧЕСТВЕ РАБОЧЕГО  
ЭЛЕКТРОДА ДЛЯ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ  
НЕКОТОРЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ

Руководитель С.С.Рясенский

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Аналитический контроль лекарственных препаратов, в частности витаминов, не удается осуществить методом вольтамперометрии с использованием металлических электродов. Пленка из полианилина в качестве рабочего электрода в вольтамперометрии способствует повышению стабильности анализа некоторых органических веществ. По-этому целью настоящей работы являлось использование пленки полианилина на платиновой подложке в качестве рабочего электрода для вольтамперометрического определения аскорбиновой кислоты (витамин С) и тиамин хлорида (витамин В1).

К сожалению, полианилин – это электропроводный полимер, который не растворяется в обычных органических растворителях. Поэтому для нанесения на платиновую подложку пленки полианилина мы использовали метод электрохимического синтеза в режиме циклической вольтамперометрии (ЦВА). Для получения механически прочной пленки циклирование потенциала повторяли не менее 10 раз. Полученный таким образом рабочий электрод использовали для вольтамперометрического определения витаминов С и В1. Анализ осуществляли также в режиме ЦВА. В качестве фонового электролита использовали 0,1 М раствор HCl. Оказалось, что на кривой ЦВА с увеличением концентрации витаминов 2-анодный пик, характерный для полианилина, существенно уменьшается. Вероятно, это можно объяснить тем, что, адсорбируясь на поверхности полианилина, витамины взаимодействуют с ним и частично восстанавливают аминокислотные группы полианилина до финилендиаминовых. Поэтому после изменения направления развертки из анодной области в катодную катодный пик уменьшается. Обнаружена обратно-пропорциональная зависимость величины этого пика от концентрации витаминов. Диапазон линейности находится для витамина С  $1,11 \cdot 10^{-3} - 2,17 \cdot 10^{-2}$  М, а для витамина В1  $5,23 \cdot 10^{-4} - 1,02 \cdot 10^{-2}$  М.

Таким образом, предложенная методика может найти применение в аналитической практике для определения витаминов С и В1 в готовых лекарственных формах.

А.А. Саакян, И.В. Теплов

## КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ АНТИБИОТИКОВ ПЕНИЦИЛЛИНОВОГО РЯДА МЕТОДОМ ТОНКОСЛОЙНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Количественное определение антибиотиков требует длительного времени и не позволяет провести экспериментальный анализ на содержание основного вещества в некоторых формах. В литературе описаны работы, связанные с качественным анализом антибиотиков методом тонкослойной хроматографии. В то же время известно, что тонкослойная хроматография может быть реализована как в качественном, так и количественном анализе. Поэтому целью исследования является количественное определение методом тонкослойной хроматографии антибиотиков пенициллинового ряда: оксациллин, бензилпенициллин. Для подбора оптимального состава элюента были проведены предварительные эксперименты, которые показали, что одним из оптимальных составов элюента можно считать смесь бутанол-уксусная кислота-вода. При подборе состава элюента мы ориентировались на величину  $R_f$ .

Для визуализации полученных хроматографических зон нами были использованы два способа: окрашивания в парах йода и под действием нингидрина. Оба способа дали удовлетворительные результаты, однако окрашивание при помощи нингидрина было более устойчивым. В этих условиях были получены следующие величины  $R_f$ : для оксациллина – 0,47, для бензилпенициллина – 0,21. Большие различия в этих величинах позволяют определить смесь таких антибиотиков при совместном присутствии. Для количественного определения мы воспользовались методом калибровочного графика, полученного при анализе серии растворов антибиотиков различной концентрации. После проведения хроматографирования и визуализации хроматографических зон мы использовали метод оптического денситометрирования для построения калибровочного графика. Этот калибровочный график позволил нам определить содержание антибиотиков в готовых лекарственных формах. Эксперимент показал высокую надежность полученных результатов. Предложенная методика позволяет быстро и эффективно определять содержание изучаемых антибиотиков в готовых лекарственных формах, что может быть использовано для обнаружения фальсификатов в лекарственных формах.



Т.Ю. Селина

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ УФ СПЕКТРОСКОПИИ И ДИНАМИЧЕСКОГО СВЕТОРАССЕЯНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ АГРЕГАЦИИ ЧАСТИЦ ПОРОШКОВ В ВОДНОЙ СУСПЕНЗИИ

Руководитель П.М.Пахомов

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

При использовании различных порошков в качестве наполнителей основным вопросом является способность их частиц к агрегации. Размеры частиц агрегатов определяются различными методами, в частности просвечивающей и высокоразрешающей растровой электронной микроскопией, рентгеноструктурным анализом, позитронной аннигиляционной спектроскопией и др. Однако, несмотря на многочисленные исследования, вопрос о соответствии и адекватности используемых методик остается открытым. Одной из причин этого является тот факт, что в настоящее время существует достаточно мало работ, в которых размеры частиц определялись бы одновременно различными методами.

Поэтому цель нашей работы – анализ агрегации частиц порошков наполнителей при помощи двух независимых друг от друга – метода УФ спектроскопии, разработанного в лаборатории спектроскопии ТвГУ, и метода динамического светорассеяния, а также изучение влияния ультразвуковой обработки на процессы агрегации частиц в растворе.

В работе были исследованы порошки карбоната кальция фирмы «Iokal», талька фирмы «Finntalk 15M», монтмориллонита фирмы «Geltech», а также натриевого и калиевого монтмориллонитов. Данные порошки были выбраны как наиболее распространенные при изготовлении различных наполненных материалов, суспензий и др. Также известно, что исследуемые порошки различаются по форме и размерам исходных частиц.

Анализ экспериментальных результатов для суспензий, приготовленных с участием ультразвука, и для суспензий, полученных без ультразвуковой обработки, показал, что при одной и той же концентрации размер частиц агрегатов в суспензии, обработанных ультразвуком, больше, чем необработанных. Так, для суспензии монтмориллонита, полученной при ультразвуковой обработке, средний размер частиц при концентрации 0,125% составляет 900 нм, а без обработки ультразвуком – 640 нм. Причем оба независимых метода дают практически совпадающие результаты во всем диапазоне исследуемых концентраций. Таким образом, можно сделать вывод о том, что в данном случае в водных суспензиях исследуемых порошков ультразвук способствует объединению частиц в агрегаты, а метод УФ спектроскопии является достаточно эффективным и может быть использован для определения размеров частиц наполнителя в водных суспензиях.

А.В. Сергеева, Е.А. Смирнова

## МОНОМЕРЫ ДЛЯ ГАЗОЖИДКОСТНОЙ ПОЛИКОНДЕНСАЦИИ

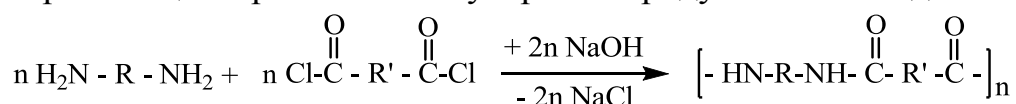
Руководитель Е.И. Лагусева

Тверской государственной технической университет

Кафедра технологии полимерных материалов

Газожидкостная поликонденсация (ГЖПК) – двухфазный гетерогенный процесс синтеза гетероцепных полимеров методом гетерополиконденсации, реакционная зона которого локализована на границе раздела жидкость–газ. Отличительная черта способа: реакционной фазой (фазой, со стороны которой происходит рост полимерной плёнки) служит только одна жидкая фаза\*.

Поскольку на границе раздела фаз протекают процессы гетерополиконденсации, для реализации ГЖПК в состав реакционной системы должны входить ацилируемые (жидкая фаза), ацилирующие (газовая фаза) мономеры и акцептор низкомолекулярного продукта поликонденсации:



Мономеры газовой фазы в исходном состоянии могут быть газообразными, жидкими или твёрдыми, но в условиях процесса поликонденсации должны иметь достаточно высокую упругость паров. Особую ценность представляют дихлорангидриды фталевых кислот (изо- и терефталоилхлорид), производство которых организовано в промышленном масштабе.

Основное сопротивление диффузионному потоку мономеров к реакционной зоне сосредоточено в жидкой фазе, поэтому ацилируемые мономеры должны обладать высокой активностью функциональных групп и их реакционных центров и достаточной поверхностной активностью. Этим требованиям, как показал опыт, в наибольшей степени удовлетворяют алифатические диамины с числом углеродных атомов не менее четырёх, циклоалифатические диамины, взятые в жидкой фазе, дихлорангидриды ароматических и низших алифатических дикарбоновых кислот, взятые в газовой фазе. Худшие результаты показывают ароматические диамины.

В качестве носителя жидкой фазы в процессах газожидкостной поликонденсации с кинетической и экологической точек зрения предпочтительно использовать воду. Однако такой выбор ограничивает число мономеров, используемых в процессе. Из двух конкурирующих реакций (поликонденсация и омыление), в которые способен вступать мономер, последний должен вступать в реакцию поликонденсации со скоростью, во много раз превышающей скорость его дезактивации в результате гидролиза.

В процессе данной работы создана база данных мономеров для газожидкостной поликонденсации с целью расширения круга мономеров для процесса и выявления производителей мономеров.

\* Никифоров В.А., Панкратов Е.А., Лагусева Е.И., Березкин А.В. *Газожидкостная поликонденсация*. Тверь: ТГТУ, 2004.

## ДАТЧИК ТЕПЛА НА ОСНОВЕ ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА

Руководитель О.В.Мальшкіна

Гимназия №12, г. Тверь

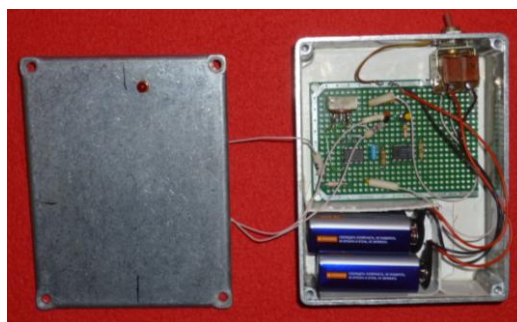
Тверской государственной университет

Кафедра технической физики и инновационных технологий

К настоящему времени разработано большое количество предложений по принципу построения преобразователей электрической энергии на основе пьезоэлектрического эффекта, которые составляют особый класс приборов микросистемной техники\*. В то же время вопрос об использовании пироэлектрических материалов в качестве автономных преобразователей энергии остается в стадии разработки.

Цель настоящей работы – создание устройства, которое реагирует на изменение температуры. В основе его работы которого лежит пироэлектрический эффект. В качестве материала пиродатчика использовалась сегнетоэлектрическая керамика на основе ЦТС-19 (пироэлектрический коэффициент  $5,16 \cdot 10^{-4}$  Кл/(м<sup>2</sup>·К)).

Устройство «датчик тепла» (рисунок) работает следующим образом. Пироэлектрический датчик механически закреплен на крышке корпуса и имеет хороший тепловой контакт с корпусом, выполненным из материала, имеющего высокую теплопроводность (сплав алюминия). Корпус является также одним из электродов цепи усилителя сигнала. Второй выход пиродатчика подключен к усилителю – преобразователю ток–напряжение на базе операционного усилителя (ОУ). Для фиксации пиротока использовался светодиод. Так как ОУ имеет малую нагрузочную способность и не может непосредственно управлять светодиодом, применен усилитель мощности на базе ОУ средней точности с усилителем тока. В перспективе вместо светодиода подобным «датчиком тепла» можно управлять любым устройством, срабатывающим от тока малой мощности.



\*. Нанотехнологии в электронике / под ред. Ю.А. Чаплыгина. М.: Техносфера, 2005.

В.Е. Ситникова

ОЦЕНКА РАЗМЕРОВ РАССЕИВАЮЩИХ ЧАСТИЦ НАПОЛНИТЕЛЯ  
ВНУТРИ ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЫ МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ КР

Руководитель П.М.Пахомов

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Все большие объемы в настоящее время занимает производство различных полимерных композитов, смесей и пористых материалов. Для исследования их структуры в лаборатории спектроскопии ТвГУ был разработан ИК спектроскопический метод определения размеров рассеивающих частиц. Для проявления эффекта рассеяния в спектре образца необходимо, чтобы показатель преломления и плотность полимера и наполнителя отличались как можно больше. Цель данной работы состоит в оценке возможности применения КР спектроскопии для характеристики размеров частиц наполнителя.

В работе исследовались полимерные композитные материалы на основе ПВХ с наполнителями различной природы. КР спектры пленок записывались на КР спектрометре «Nogiba» в диапазоне частот  $1000\text{--}5000\text{ см}^{-1}$ . Толщина пленок составляла около 10 мкм. Размеры и распределение частиц в объеме полимерной матрицы контролировали с помощью методов оптической микроскопии (снимки получали на оптическом микроскопе «Olimpus») и электронной сканирующей микроскопии (микроснимки получали на микроскопе «Hitachi SU8000»). Анализ микроскопических снимков с целью определения распределения частиц в объеме полимерного материала и на поверхности пленки осуществляли с помощью программы «Image Pro». Кроме того, для контроля средних размеров частиц наполнителя и их распределения исследуемые образцы анализировали методом ИК спектроскопии. ИК спектры полимерных пленок записывали на FTIR спектрометре «Equinox 55» (фирмы «Bruker») в диапазоне частот  $400\text{--}7000\text{ см}^{-1}$ .

Исследования показали, что в КР спектрах наполненных образцов ПВХ проявляется эффект дифракционного рассеяния и тем больше, чем выше концентрация наполнителя в матрице. Оценка размеров частиц наполнителя по ранее разработанной методике показала, что экспериментальные данные, находятся в хорошем соответствии с данными полученными с помощью ИК спектроскопии, оптической и сканирующей электронной микроскопии.

*Работа выполнена в рамках проекта German-Russian Interdisciplinary Science Center (G-RISC) № C-2021a-2.*

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ В РАМКАХ QТАИМ  
МОЛЕКУЛ ГОМОЛОГИЧЕСКОГО РЯДА  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{C}\equiv\text{CH}$ 

Руководители: Ю.Д. Орлов, В.В. Туровцев  
Тверской государственный университет  
Кафедра общей физики

Наиболее удобным инструментом исследования электронной плотности соединений является квантово-механическая «теория атомов в молекуле» (QТАИМ), созданная Р. Бейдером. В рамках данной теории электронная плотность молекулы разбивается на «топологические» атомы» ( $\Omega$ ), границы которых определяются поверхностями нулевого потока вектора градиента электронной плотности. Актуальным является исследование взаимного влияния групп атомов в соединениях. Это, во-первых, дает четкое теоретическое обоснование аддитивно-группового подхода, во-вторых, открывает возможность проведения важных уточнений, основанных на понимании изменения характеристик группы, и, в-третьих, позволяет четко устанавливать границы применимости группового подхода.

В настоящей работе исследовалось распределение электронной плотности в молекулах алкинов  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{C}\equiv\text{CH}$ , где  $n=0\div 9$ . Для оптимизации геометрического строения соединений использовался пакет программ Gaussian'03 [2] с методом B3LYP в базисе 311++G(3df,3pd).

Характеристики электронной плотности атомов и групп (заряд, энергия и объем) получены с помощью программы AIMALL [3]. Заряд, энергия и объём атомных групп  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{C}\equiv\text{CH}$  были найдены суммированием электронных характеристик составляющих их атомов.

Было изучено электронное строение атомного фрагмента  $\text{C}\equiv\text{CH}$ , его влияние на группы  $\text{CH}_2$  и  $\text{CH}_3$ , а также определено затухание индуктивного эффекта, вызванного этим фрагментом, вдоль углеводородной цепи. Проведено сравнение результатов, полученных для рассмотренного ряда алкинов, с углеводородами нормального строения. Определены стандартные группы. Выявлены переносимые группы (а также парциальные свойства групп) между молекулами гомологических рядов  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{C}\equiv\text{CH}$  и  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. М.: Мир. 2001.
2. Gaussian 03. Revision E.1./M.J. Frisch et.al, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2003.
3. AIMALL (version 12.11.09), Todd A. Keith 2012 (aim.tkgristmill.com)

М.И. Скобин, Т.В. Крюков, И.А. Тормозов, Б.А. Кустарёв, Е.М. Соколова

СМЕШАННОЛИГАНДНОЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ИОНОВ  $\text{Cu(II)}$ ,  $\text{Ni(II)}$  И  $\text{Co(II)}$  С ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫМ ГЕПАРИНОМ И НЕКОТОРЫМИ АМИНОКИСЛОТАМИ

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственной университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Настоящее исследование относится к циклу работ, направленных на изучение сложных ионо-молекулярных равновесий с участием ионов биометаллов и полимерного биолганда гепарина, а также низкомолекулярных биологически-активных веществ.

Смешаннолигандное комплексобразование ионов  $\text{Cu(II)}$ ,  $\text{Ni(II)}$ ,  $\text{Co(II)}$  с высокомолекулярным гепарином и аминокислотами (глицин, аргинин) исследовалось с помощью традиционных методов – рН-метрического титрования (фоновый электролит 0.15 М NaCl; температура 37°C) и метода математического моделирования химических равновесий (алгоритмы AUTOEQUIL и HYPERQUAD 2008). Учитывая, что высокомолекулярный гепарин образует с ионами  $\text{Cu(II)}$ ,  $\text{Ni(II)}$  и  $\text{Co(II)}$  только монолигандные комплексы, а также учитывая, что мономерное звено гепарина хотя и выступает в данном случае в качестве четырехдентатного лиганда, ряд факторов (конформация полимерной цепи, стерические факторы) все же может обуславливать возможность образования смешаннолигандных металлокомплексов. Величины десятичных логарифмов констант образования смешаннолигандных комплексов с участием ионов  $\text{Cu(II)}$ ,  $\text{Ni(II)}$ ,  $\text{Co(II)}$ , высокомолекулярного гепарина(Hep), а также глицина(Gly), аргинина(Arg) приведены в таблице:

| Форма      | $\lg\beta$ |
|------------|------------|
| CuGlyHep   | 15,84±0,03 |
| CuOHGlyHep | 22,29±0,02 |
| NiGlyHep   | 9,60±0,06  |
| CoGlyHep   | 9,17±0,06  |
| CuArgHep   | 20,05±0,04 |
| CuHArgHep  | 27,23±0,06 |
| NiHArgHep  | 20,60±0,05 |
| CoArgHep   | 12,57±0,21 |
| CoHArgHep  | 16,59±0,10 |
| CoOHArgHep | 21,73±0,18 |

Как видно из данных таблицы, для всех исследованных систем характерно образование сходного набора комплексных форм, устойчивость которых различна и в целом согласуется с общеизвестными представлениями. Особый интерес представляют синтез и структурные исследования идентифицированных металлокомплексов.

*Работа выполнена в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2012-2013 гг.»*

М.И. Скобин, Т.В. Крюков, И.А. Тормозов, Б.А. Кустарёв, Е.М. Соколова

СИНТЕЗ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ  
МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСОВ ГЕПАРИНА С ИОНАМИ НЕКОТОРЫХ  
РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственной университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Данная работа является одним из завершающих этапов цикла исследований, направленных на изучение возможности получения антикоагулянтного препарата, сочетающего в себе свойства антикоагулянтов различных групп – прямого (гепарин) и непрямого (ионы лантаноидов) действия. Прежде всего с помощью методов рН-метрического титрования и математического моделирования химических равновесий было изучено комплексообразование высокомолекулярного гепарина с рядом ионов лантаноидов ( $\text{Ln}^{3+}$ :  $\text{La}^{3+}$ ,  $\text{Pr}^{3+}$ ,  $\text{Nd}^{3+}$ ,  $\text{Sm}^{3+}$ ,  $\text{Eu}^{3+}$ ,  $\text{Gd}^{3+}$ ,  $\text{Tb}^{3+}$ ,  $\text{Tm}^{3+}$ ,  $\text{Ho}^{3+}$ ). Модели комплексообразования показали, что вплоть до нейтральной величины рН в рассмотренных системах доминируют средние гепаринаты, далее по мере защелачивания раствора процессы гидролиза усиливаются, что приводит к образованию смешаннолигандных гидроксокомплексов. Логарифмы констант образования средних гепаринатов празеодима, неодима и тербия имеют сопоставимые значения. Для дигидроксогепаринатов РЗЭ наблюдается монотонный рост величин логарифмов констант образования комплексов, что может указывать на преимущественно ионный тип связи М-Л. Зависимость устойчивости средних гепаринатов РЗЭ имеет S-образный характер, искажаясь, однако, в случае ионов тербия и гадолиния.

Для выделения в твердом виде гепаринатов лантаноидов нами была применена методика, описанная в НОУ-ХАУ. Методика получения твердых металлокомплексов гепарина (Регистрационный номер 01-021-2012 от 28 июля 2012 г.).

Согласно данным элементного анализа, нами были выделены средние гепаринаты состава  $\text{NaLnHep} \cdot n\text{H}_2\text{O}$  ( $n = 5-9$ ). Результаты термогравиметрического анализа свидетельствуют о том, что дегидратация выделенных комплексов протекает ступенчато. Следовательно, некоторые связанные молекулы воды являются внутрисферными. На основании результатов ИК спектроскопии сделаны выводы о характере связи Me–O в комплексе. Различия в конформационно-чувствительной области ИК-спектров металлокомплексов гепарина с ионами  $\text{Ln}^{3+}$  свидетельствуют о наличии структурных особенностей гепаринатов ионов  $\text{Ln}^{3+}$  друг относительно друга.

*Работа выполнена в рамках ФЦП «Научные и научно- педагогические кадры инновационной России на 2012-2013 гг.»*

К.В. Смирнова

## ВАРИАБЕЛЬНОСТЬ НЕКОТОРЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ СЕРДЕЧНОЙ АКТИВНОСТИ У РАБОТНИКОВ УМСТВЕННОГО ТРУДА

Руководитель А.Я. Рыжов

Тверская государственная медицинская академия

Кафедра биологии

Принимая во внимание исключительно высокую чувствительность человеческого организма к любым стрессовым факторам, необходимо при любом исследовании стремиться к стандартизации условий. При изучении работы сердечно-сосудистой системы учитывается вариабельность сердечного ритма (ВСР). Технология предполагает изучение параметров работы сердца в короткие и длительные промежутки времени.

Цель работы – определение возрастных особенностей некоторых значимых параметров ритма сердца у женщин-преподавателей вуза трех возрастных групп. Первая группа объединяла женщин в возрасте 22–44 лет; вторая – 45–59 лет; третья – 60 лет и старше. Каждая группа состояла из 8 человек. Регистрация показателей работы сердца, в том числе пульсового и артериального давления, осуществлялась в течение 5 минут, что соответствовало 300–500 кардиоциклам. Исследование проводилось однократно в условиях относительного покоя в положении лежа. Запись велась с помощью пульсотометра «О-84» с фотодатчиком и специальным преобразователем, выводившим данные на компьютер. Статистическая обработка проводилась с помощью программы «PULSE». Нами установлено, что пульсовое давление имеет относительно одинаковые показатели у представительниц всех трех групп, но с тенденцией к некоторому повышению с увеличением возраста наблюдаемых. Систолическое давление также повышается по мере увеличения возраста испытуемых. Показатели диастолического давления, наблюдаемые в первой группе, достоверно ниже, чем во второй и третьей группах. Таким образом, нами не обнаружена корреляция между возрастом и повышением показателями активности сердца.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Яблучанский Н.И. Вариабельность сердечного ритма: в помощь практическому врачу / Н.И. Яблучанский, А.В. Мартыненко. – Харьков, 2010.
2. Hinojosa-Laborde C. Gender Differences in Sympathetic Nervous System Regulation / C. Hinojosa-Laborde, I. Chappa, D. Lange, J.R. Haywood // Clin. Exp. Pharmacol. Physiol. – 1999. – V. 26, № 2. – P. 122–126.



А. М. Смолин

## ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИ-3,4-ЭТИЛЕНДИОКСИТИОФЕНА С ВКЛЮЧЕНИЯМИ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ПАЛЛАДИЯ

Руководитель Н. П. Новосёлов

Санкт-Петербургский государственный университет технологии и дизайна  
Кафедра теоретической и прикладной химии

Создание сенсоров на основе наночастиц металлов является новым и быстро развивающимся направлением современного электроанализа. Модифицирование поверхности индикаторного электрода наночастицами металла приводит к улучшению электроаналитических показателей сенсорных устройств по сравнению с традиционно используемыми металлическими электродами, а также позволяет снизить их стоимость.

Модификация свойств проводящих полимеров за счет осаждения частиц металлов, особенно благородных металлов, например палладия, часто увеличивает каталитическую активность материала. Это открывает возможности для создания новых многофункциональных материалов для различных приложений.

Палладий относится к группе благородных металлов, проявляющих каталитические свойства в отношении реакций окисления с участием многих органических соединений и других электродных реакций. Поэтому исследование гибридных систем с внедрением в полимерную матрицу, в частности, в проводящий полимер поли-3,4-этилендиокситиофен (PEDOT) ультрадисперсных частиц палладия представляет большой интерес в связи с возможностью получения новых электродных материалов, обладающих каталитическими и сенсорными свойствами.

В данной работе исследован процесс электровосстановления пероксида водорода в растворах фосфатного буфера на пленках PEDOT/Pd. Интерес к процессам восстановления пероксида водорода связан с разработками новых материалов для сенсоров на пероксиде водорода.

Получены композитные пленки поли-3,4-этилендиокситиофена (PEDOT), содержащие металлические кластеры палладия. Изучены электрохимические свойства композитных пленок PEDOT/Pd в растворах, содержащих пероксид водорода. Показано, что в растворах фосфатного буфера в области потенциалов 0,0–0,7 (В) восстановление пероксида водорода протекает на частицах палладия.

ЭКСПРЕССНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ НИКЕЛЯ И КОБАЛЬТА В СПЛАВЕ  
КОВАР

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственный университет  
Кафедра органической и аналитической химии

Предназначено для определения никеля и кобальта в сплавах на основе железа, никеля и кобальта. Рекомендуется для применения в электровакуумной промышленности, приборостроении, машиностроении, металлургии.

Метод основан на поглощении линий сернокислых комплексов никеля и кобальта в 1 н. серной кислоты при волнах 720 и 510 нм. Влияние железа учитывают, используя метод сравнения со стандартным сплавом.

Последовательность операции:

растворение анализируемой пробы в разбавленной (1:1) азотной кислоте с добавлением концентрированной серной кислоты и упаривание раствора до паров серного ангидрида;

растворение выпавших солей в воде при нагревании и фильтрование полученного раствора;

замер оптической плотности комплексов на спектрофотометре СФ-16 при 720 и 510 нм относительно 1 н. серной кислоты.

Применяемые реактивы:

|  |      |
|--|------|
| азотная кислота (1:1), мл              | 20   |
| серная кислота (концентрированная), мл | 3,0  |
| серная кислота, 1 н., мл               | 25   |
| стандартный образец ВНИИСО 261-а, г    | 0,25 |

Время проведения анализа 1–1,5 ч. Коэффициент вариации при содержании никеля 29 и кобальта 18% равен 0,8%.

Преимущества данного метода перед потенциометрическим для кобальта и спектрофотометрическим с диметилглиоксимом для никеля состоят в том, что вместо двух методов применяется один и отпадает необходимость в специальных реагентах и установке для потенциометрического титрования. При этом время анализа сокращается в 10 раз.

*Работа выполнена при поддержке гранта ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы (Соглашение № 14.В37.21.0653).*

## СРАВНИТЕЛЬНЫЙ ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ГУМТА КАЛИЯ И ТРАДИЦИОННЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ УДОБРЕНИЙ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

В настоящее время сельскохозяйственному производству предлагаются новые виды органических и органо-минеральных удобрений. Перспективным видом таких удобрений, содержащим водорастворимые соли гуминовых веществ, являются гуматы. Гуматы – биологически активные растворимые органические вещества, входящие в состав гумуса – основного качественного показателя плодородия почвы. Одним из представителей данных удобрений является агрогумат калия, сочетающий в себе некоторые свойства традиционных органических удобрений и классических гуминовых препаратов. Он обладает значительной физиологической активностью, одновременно оказывает заметное рекультивирующее влияние на почву: улучшает структурное состояние и водно-физические свойства, способствуют росту нитрификационной способности и увеличению подвижности фосфорных соединений. Мы проанализировали химический состав традиционных видов органических удобрений, используемых в Нечерноземной зоне РФ и гумата калия (таблица).

Химический состав и реакция исследуемых удобрений в % на сухую массу

| Показатель        | рНкcl | влажность<br>ь<br>% | Содержание в сухом веществе, % |  |                           |                        | Содержание<br>в 1 т. физич.<br>массы, кг |
|-------------------|-------|---------------------|--------------------------------|--|---------------------------|------------------------|--|
|                   |       |                     | N<br>общий                     | P <sub>2</sub> O <sub>5</sub><br>общий | K <sub>2</sub> Oоб<br>щий | C орг.<br>веществ<br>о |  |
| «Агрогумат калия» | 9,11  | 12,3                | 2,86                           | 0,22                                   | 7,75                      | 42,2                   | 94,9                                     |
| Навоз КРС         | 4,5   | 78,0                | 2,45                           | 1,43                                   | 1,53                      | 38,3                   | 15,94                                    |
| ТНК               | 6,2   | 70                  | 1,65                           | 1,20                                   | 0,98                      | 40,6                   | 11,49                                    |
| Торф              | 5,4   | 60                  | 1,85                           | 0,22                                   | 0,05                      | 43,1                   | 30,68                                    |
| Свиной навоз      | 7,9   | 73,0                | 2,82                           | 2,11                                   | 0,90                      | 37,0                   | 15,64                                    |

По суммарному содержанию NPK на единицу массы гумат калия заметно превосходит все другие виды удобрений (94,9 кг). Правда, с учетом невысокой дозы внесения его в почву (0,2–0,5 т/га) общее поступление указанных элементов не большое (18,9–47,4 кг/га). С обычными удобрениями в почву вносятся (460–630 кг/га). Это говорит о том, что агрогумат калия проявляет свое удобрительное действие не через внесение в почву большего количества NPK, а оказывает мобилизационное влияние на использование питательных веществ из почвы.

Н.А. Соловьева, Ю.Г. Оленева

ИЗУЧЕНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ТЫСЯЧЕЛИСТНИКА  
ОБЫКНОВЕННОГО (*ACHILLEA MILLEFOLIUM*) МЕТОДАМИ  
ОПТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

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

Растения способны накапливать из окружающей среды вещества различной природы, поэтому важным этапом производства лекарственных препаратов является анализ растительного сырья. Среди оптических методов исследования наиболее доступными, а потому и самыми распространенными являются инфракрасная (ИК) и ультрафиолетовая (УФ) спектроскопии, с помощью которых можно решать задачи качественного и количественного анализа вещества. Использование современных физико-химических методов в изучении влияния разных факторов на химический состав лекарственного сырья имеет большое практическое значение.

В данной работе был исследован химический состав стебля, листьев и цветков тысячелистника обыкновенного (*Achillea millefolium*), который получил широкое распространение, как в традиционной, так и в народной медицине. Наличие биологически активных веществ определяли с помощью качественных реакций. Для анализа содержания дубильных веществ использовался водный экстракт из растительного сырья в соотношении 1:100. Наличие флавоноидов осуществляли в 70% спиртовом экстракте из сырья в соотношении 1:10. Установление присутствия дубильных веществ определялось реакциями с 1 % раствора желатина, с железо-аммонийными квасцами. Конденсированные дубильные вещества – реакцией с бромной водой. Наличие флавоноидов подтверждалось цианидиновой пробой, борно-лимонной реакцией, реакцией с 10% раствором аммиака.

Для УФ спектрального анализа готовили растворы исследуемых образцов в 70% этиловом спирте. Суммарное содержание фенольных соединений определяли методом Фолина – Чокальтеу по галловой кислоте при  $\lambda=750$  нм.

При записи ИК спектров образцов использовали стандартную методику приготовления таблеток с бромидом калия (KBr). Регистрация спектров осуществлялась на Фурье-ИК спектрометре «Equinox 55» фирмы «Bruker».

В результате проведенных исследований установлено, что химический состав наземных частей тысячелистника обыкновенного чувствителен к воздействию антропогенных факторов, что проявляется в положении и количестве полос поглощения в ИК и УФ спектрах экстрактов растений. Данный факт следует учитывать при сборе лекарственного сырья, и это позволяет глубже оценить степень загрязнения окружающей среды.

М.Ю. Сорокина, И.С. Ребецкая

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СОЛЕЙ НИКЕЛЯ(II) С АНИОНАМИ  
ОКСАЦИЛЛИНА И ЦЕФАЗОЛИНА

Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Выделены в твердом состоянии и исследованы соли Ni(II) с анионами двух часто применяемых в медицинской практике бета-лактамовых антибиотиков: оксациллина ( $\text{Oxa}^-$ ) и цефазолина ( $\text{Czl}^-$ ). Соли были получены путем взаимодействия 0.2 моль/л водных растворов  $\text{NiCl}_2$  и натриевых солей антибиотиков в мольном соотношении 1:4. Образовавшиеся осадки отделяли фильтрованием, промывали холодной водой (5 °C) и сушили при комнатной температуре до постоянного веса. Состав полученных соединений (таблица) был определен путем сопоставления результатов определения содержания C, H, N, S и кристаллизационной воды. Элементный анализ образцов был проведен на приборе «Perkin Elmer 2400 Series II», синхронный термический анализ (одновременная запись кривых термогравиметрии и ДСК в диапазоне 30–550 °C) – на приборе «Netzsch STA 449 F3 Jupiter» в атмосфере аргона.

| Образец   | Брутто-формула   | Содержание (найденно/вычислено), % |                |                  |                  |
|---|--|------------------------------------|----------------|------------------|------------------|
|   |  | C                                  | H              | N                | S                |
| $[\text{Ni}(\text{Oxa})_2] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ | $\text{C}_{38}\text{H}_{50}\text{N}_6\text{NiO}_{17}\text{S}_2$    | 47.11 / 47.17                      | 4.72 /<br>5.00 | 8.80 /<br>8.69   | 6.75 /<br>6.63   |
| $[\text{Ni}(\text{Czl})_2] \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ | $\text{C}_{28}\text{H}_{40}\text{N}_{16}\text{NiO}_{15}\text{S}_6$ | 30.86 / 30.80                      | 3.26 /<br>3.69 | 20.54 /<br>20.53 | 17.71 /<br>17.62 |

Исследование образцов в виде таблеток с КВг методом ИК спектроскопии на приборе «Bruker Equinox 55» в диапазоне 4000–400  $\text{cm}^{-1}$  показало смещение полос поглощения бета-лактамовых и амидных групп  $\text{Oxa}^-$  и  $\text{Czl}^-$  относительно их положения в спектрах натриевых солей антибиотиков. Это, скорее всего, является следствием их координации с Ni(II). Таким образом, можно предполагать, что полученные соли имеют структуру внутрикомплексных хелатных соединений.

Полученные малорастворимые соли антибиотиков перспективны для использования в качестве элетродноактивных веществ в химических сенсорах для количественного определения в растворах оксациллина и цефазолина.

А.В. Старовойтов

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ СЛЕДОВ ЗОЛОТА В ОСАДКАХ СТОЧНЫХ ВОД

Руководитель Ю.В. Чурсанов

Тверской государственной технической университет

Кафедра химии

Серьезной экологической проблемой развитых и развивающихся стран являются обезвреживание и утилизация иловых осадков сточных вод (ИОСВ) крупных промышленных городов. В России по различным оценкам ежегодно образуются до  $2 \times 10^9$  тонн коммунальных сточных вод или 100–120 млн. тонн по сухому веществу [1]. Одним из неприятных свойств ИОСВ (кроме запаха и бактериального заражения) является наличие соединений тяжелых металлов (кадмия, марганца, меди, железа, никеля, свинца и цинка) в концентрациях, часто превышающих ПДК. В то же время, в ИОСВ обнаруживают благородные металлы – серебро и золото. Источником поступления этих элементов в сточные воды являются главным образом промышленные предприятия.

Данная публикация посвящена разработке методики анализа содержания золота в ИОСВ методом атомно-абсорбционной спектроскопии с электротермической атомизацией. Для анализа использована комбинированная схема, включающая окисление органики, кислотное (царсководочное) разложение и отделение матричных элементов путем соосаждения золота с теллуrom.

Пробы ИОСВ были отобраны в летний период 2012 года из илоуплотнителя №2 очистных сооружений г. Твери. Влажность исходного материала составляла 77,4%, зольность (в пересчете на сухое вещество) – 34,2%. Содержание золота составило  $17,2 \pm 6,7$  г/т золы при  $P = 0,95$  и  $n = 4$  или 1,3 г/т в исходном ИОСВ. Минимальная концентрация золота в промышленных рудах составляет 2–3 г/т [2]. Целесообразность извлечения золота требует тщательного обоснования, однако в будущем при разработке методов утилизации ИОСВ возможно создание экономически выгодного процесса.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Передовая технология для преобразования 100% осадка сточных вод в 100% в биоудобрения для неограниченного сельскохозяйственного использования. URL: <http://www.bioindustry-ltd.com/nvr.htm>.
2. Бусев А.И. // Аналитическая химия золота. – М. Наука, 1973.

М.В. Стороженко

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОДНОАТОМНЫХ СПИРТОВ

Руководитель М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Целью настоящей работы является установление через аналитические выражения и/или графические зависимости количественных корреляций «структура-свойство» в рядах одноатомных спиртов. Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи: изучение литературы по теме исследования; оценка состояния численных данных по энергетическим характеристикам указанных соединений; вывод расчётных схем; проведение численных расчетов; выявление отдельных закономерностей.

Работа носит теоретический характер. В ней на основе концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов (атом-атомное представление) построены расчетные схемы и представлены рабочие формулы для расчета энтальпий образования, средних энергий связей и энергий разрыва связей; проведены численные расчеты, получены новые данные. Численные расчеты (там, где можно сделать сопоставления) согласуются с экспериментом.

В работе также были построены и проанализированы графические зависимости ряда свойств веществ от отдельных факторов химического строения. Найдено, что эти зависимости в общем случае нелинейны, хотя линии замещения на одну и ту же группу симбатны между собой.

На основе анализа экспериментальных и расчетных данных установлены определенные закономерности, связывающие энтальпии образования, средние энергии связей и энергии разрыва связей со строением молекул.

## УВЕЛИЧЕНИЕ ВСХОЖЕСТИ ПШЕНИЦЫ ПОД ДЕЙСТВИЕМ БОРАТ-ЭТИЛЕНДИАМИНДИСУКЦИНАТНОГО КОМПЛЕКСА

Руководитель Т.И. Смирнова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Необходимость бора для роста и развития растений установлена более ста лет назад, но до настоящего времени остаётся неясным, каким образом реализуются его функции, в какие конкретные реакции он включен и каков механизм его участия в конкретных процессах. Этот микроэлемент не реутилизируется в растениях, его недостаток негативно сказывается уже на первых стадиях развития растения. Применение борных микроудобрений (чаще всего это борная кислота или бура) при выращивании культурных растений приводит к существенным прибавкам урожая.

По этой причине весьма актуальными являются исследования, посвященные поиску новых, наиболее эффективных и экологически безопасных форм борных микроудобрений.

С этой целью был поставлен лабораторный опыт, при выполнении которого было исследовано влияние борат-этилендиаминдисукцинатного комплекса (В-ЭДДЯК) на всхожесть и параметры проростков одной из самых распространённых в мировой сельскохозяйственной практике зерновых культур – яровой пшеницы.

Семена яровой пшеницы сорта «Иволга» урожая 2011 года перед проращиванием замачивали в 0,002 м растворе В-ЭДДЯК и во взятых для сравнения растворах  $\text{H}_3\text{BO}_3$  и этилендиаминдиантарной кислоты (ЭДДЯК) с такой же концентрацией. Контролем служили семена, замоченные в дистиллированной воде. Семена проращивали на фильтровальной бумаге и по стандартной методике определяли всхожесть и одновременно – средние массу и высоту проростков.

Как показали результаты опыта, все три препарата обладают действием, стимулирующим всхожесть пшеницы, но наибольшую эффективность проявил комплексонат В-ЭДДЯК, увеличивающий всхожесть на 6 % , среднюю массу проростка на 12 % и высоту проростка на 26 % .

Следовательно, комплекс В-ЭДДЯК можно рассматривать как перспективный препарат, не только повышающий всхожесть пшеницы, но и существенно улучшающий качество проростков зерновой культуры.



А.М. Супрун

РАЗРАБОТКА МЕЗОСКОПИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ  
КРУПНОМАСШТАБНОЙ СТРУКТУРЫ ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОГО  
РАСТВОРА НА БАЗЕ МЕТОДА ДИССИПАТИВНОЙ ДИНАМИКИ ЧАСТИЦ

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

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Исследование процессов структурообразования гелей привлекает к себе внимание ученых в течение многих лет. Важной частью исследований в данной области является выявление причин гелеобразования в системах супрамолекулярных полимеров.

Гели представляют собой коллоидную систему из растворителя и диспергированного вещества. Дисперсионной фазой в гидрогелях (ГГ) является вода, а растворенные в ней компоненты формируют пространственную сетку, которая связывает и удерживает растворитель. Одной из таких систем является цистеин-серебряный раствор (ЦСР).

Главная цель данной работы – построение крупномасштабной модели формирования структуры геля сетки. Для выявления общих закономерностей гелеобразования в ЦСР был проведен литературный обзор работ по системам, состоящим из цистеина и других металлов (Cu, Bi, Au). Цистеин имеет в своем составе 3 функциональные группировки: —COOH, —NH<sub>2</sub> и —SH. За их счет он координирует неорганические катионы и формирует высокоаффинитивные металл-легантные кластеры. Кластеры затем формируют пространственную геле-сетку. Тем не менее вопрос о факторах, которые вызывают изменения в морфологии геля сетки (влияние солей металлов на формирование ее структуры и др.) остается открытым.

Для исследования процесса формирования крупномасштабной структуры ЦСР был выбран метод диссипативной динамики частиц. Рассматриваемая модель предполагает, что самосборка сферических кластеров меркаптида серебра (МС) осуществляется за счет наличия у них на поверхности комплементарных функциональных группировок.

В ходе выполненных расчетов удалось проследить постепенное формирование и укрупнение агрегатов из кластеров МС. Начиная с некоторого времени они замыкаются сами на себя через периодические граничные условия. Таким образом, в ходе первоначальных расчетов нам удалось пронаблюдать возникновение волокон геле-сетки из кластеров МС.

*Авторы выражают благодарность МСЦ РАН за предоставление вычислительных ресурсов кластера MBS-100k.*

## ВЛИЯНИЕ СВЧ МЕТАЛЛИЗАЦИИ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ ЦТС

Руководитель О.В. Малышкина

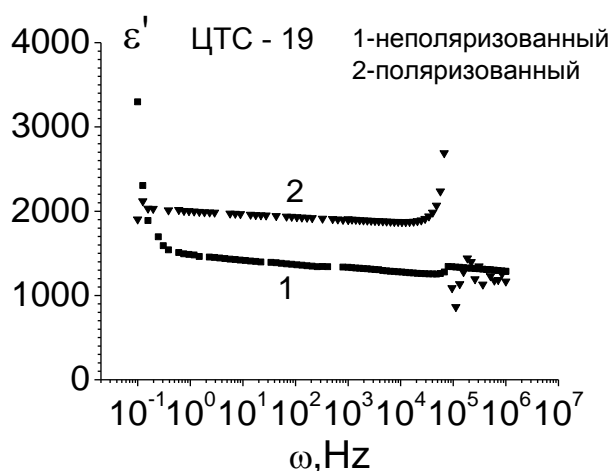
Тверской государственной университет

Кафедра технической физики и инновационных технологий

В работе проведены исследования диэлектрических свойств пьезоэлектрических керамик на основе цирконата-титаната свинца (ЦТС-19 и ЦТССТ-3) металлизированных по промышленной технологии и с использованием СВЧ-металлизации. Применение технологии СВЧ-металлизации приводит к существенному (в 8...10 раз) сокращению продолжительности времени металлизации.

Как было показано ранее, состояние поляризации в образцах ЦТС не зависит от способа нанесения электродов\*. В ходе анализа дисперсии диэлектрической проницаемости образцов ЦТС-19 и ЦТБССТ-3 различия между образцами с разным типом электродов также не установлено. Таким образом, можно утверждать, что СВЧ-металлизация не изменяет диэлектрические свойства пьезокерамических материалов по сравнению с промышленной металлизацией.

В то же время у поляризованных образцов обнаружено аномальное поведение дисперсии диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь при частотах, соответствующих частотам пьезоэлектрического резонанса данных образцов (рисунок). Из полученных результатов следует, что дисперсию диэлектрической проницаемости можно исследовать только на не поляризованных образцах.



\*. Malyshkina O.V., Movchikova A.A., Barabanova E.V., Belousov A., Embil I.A., Pugachev S.I. // Integrated Ferroelectrics. – 2011. – V.123. – P.47–52.

Т. В. Трофимова

## СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОГО МЕТОДА ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОБАЛЬТА

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

На многих промышленных предприятиях осуществляются технологические процессы, в результате которых в сточных водах оказывается целый набор различных металлов. В литературе описан способ определения кобальта (III) с этилендиаминтетрауксусной кислотой (ЭДТА).

К недостаткам этого способа следует отнести: использование комплексона ЭДТА, загрязняющего окружающую среду; интервал определения колеблется от 0,25 до 3,75 мг/мл; требуется предварительное удаление из анализируемой системы железа и хрома, т.к. они мешают определению.

Задачей исследования является спектрофотометрическое определение кобальта с помощью экологически безопасных комплексонов в более широком интервале концентраций, а именно 0,1–4 мг/мл, без предварительного удаления железа и хрома.

Новая методика заключается в следующем: к 100 мл анализируемой пробы добавляют 10 мл концентрированной азотной кислоты, кипятят и упаривают до объема 15–20 мл. После охлаждения добавляют к остатку 25 мл воды и 10 мл пиридина, перемешивают и фильтруют через плотный фильтр. Фильтрат помещают в мерную колбу емкостью 100 мл, добавляют 2 мл конц. азотной кислоты и разбавляют водой до метки. К 10 мл полученного раствора добавляют 5 мл 5 % раствора динатриевой соли ЭДДЯК, 3 мл пергидроля и 10 мл ацетатного буфера. Смесь нагревают до кипения, охлаждают и переносят в мерную колбу емкостью 50 мл, добавляют 5 мл 5%-ного раствора ЭДДЯК, доливают водой до метки и перемешивают.

Оптическую плотность полученного раствора измеряют в кюветах длиной 50 мм на спектрофотометре при 535 нм или на фотоэлектроколориметре с зеленым светофильтром.

*Работа выполнена при поддержке гранта ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы (Соглашение № 14.В37.21.0653).*

## КАТАЛИТИЧЕСКОЕ ГИДРИРОВАНИЕ НИТРОБЕНЗОЛА

Руководитель Е.И. Шиманская

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Промышленное гидрирование нитробензола осуществляется в газовой и в жидкой фазах. Процесс газофазного гидрирования нитробензола обычно осуществляется с использованием Ni или Cu содержащих катализаторов, парциальном давлении водорода 1–5 атм и температуре 250–300 °С [1]. В то время как жидкофазное гидрирование осуществляется с использованием Pt, Pd, Ni, содержащих катализаторы при температуре 50–100 °С, и при давлении 10–50 атм как в среде различных растворителей так и в их отсутствии [2]. При этом селективность по целевому продукту составляет 75–95%.

В данной работе были проведены эксперименты с различными растворителями, такими, как сверхкритический диоксид углерода, изопропиловый спирт, а также в случае проведения реакции без растворителя. В ходе процесса наблюдалось значительное увеличение в 3.5–5 раз скорости образования целевого продукта – анилина в среде сверхкритической углекислоты, при этом селективность составляла 92–95%.

Таким образом, применение сверхкритического диоксида углерода в процессе селективного гидрирования нитробензола вызывает значительный интерес, что обусловлено значительными преимуществами использования сверхкритического диоксида углерода в органическом синтезе.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Vishwanathan V., Jayasri V., Basha P., Mahata N., Sikhwivhilu L., Coville N. *Catalysis Communications*. – 2008. – V. 9. – P. 453.
2. Kantam M., Chakravati R., Pal U., Sreedhar B., Bhargava S. *Advanced Synthesis and Catalysis*. – 2008. – V. 350. – P. 822.

Т.А. Федорова, А. Ю. Терещенков

## ПРИМЕНЕНИЕ СВЕРХКРИТИЧЕСКОГО ДИОКСИДА УГЛЕРОДА В ПРОЦЕССЕ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ГИДРИРОВАНИЯ НИТРОБЕНЗОЛА

Руководитель Е.И. Шиманская

Тверской государственный технический университет

Кафедра биотехнологии и химии

Каталитическое гидрирование нитробензола является важным химико-технологическим процессом получения анилина, используемого в качестве полупродукта в синтезе полиуретанов, резины, фармацевтических препаратов, пестицидов и гербицидов, красителей, химических добавок к полимерам, фармацевтических препаратов.

В данной работе в качестве растворителя использовался сверхкритический диоксид углерода, который вызывает большой интерес, потому что обладает значительными преимуществами. Сверхкритический  $\text{CO}_2$  легко переводится в сверхкритическое состояние ( $T_{\text{кр}} = 30.5^\circ\text{C}$ ;  $P_{\text{кр}} = 75.8$  атм), доступен, дешев, нетоксичен, негорюч, экологически безопасен и хорошо растворяет большой спектр органических соединений. Углекислота является идеальным инертным растворителем для проведения каталитических реакций аэробного окисления и гидрирования; полностью смешивается с кислородом и водородом. Кроме того, диоксид углерода химически инертен по отношению ко многим веществам и удаляется просто при разгерметизации аппаратуры. Хотя  $\text{CO}_2$  является парниковым газом, его использование практически ничего не добавляет в атмосферу, так как его берут оттуда же.

Таким образом, применение сверхкритического диоксида углерода в процессе каталитического гидрирования нитробензола является перспективным, так как наблюдается увеличение скорости образования целевого продукта в 3,5–4 раза, при этом селективность процесса составляет 92–95%. В настоящее время проводятся исследования. Основные проблемы применения сверхкритических технологий заключаются в возможности разрешения некоторых технологических и технических вопросов, в высоких инвестиционных затратах.

---

\*. Fujita S., Yoshida H., Asai K., Meng X., Arai M. J. of Supercritical Fluids. –2011. – V. 60. – P. 106.

Ю.Е. Федорова

## ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛИОКСАДИАЗОЛЬНЫХ ВОЛОКНИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ

Руководитель Е.П. Ширшова

Санкт-Петербургский государственный университет технологии и дизайна  
Кафедра наноструктурных, волокнистых и композиционных материалов им.А.И. Меоса

Введение в полимерную волокнообразующую матрицу наночастиц или дисперсий красителей часто приводит к появлению новых уникальных свойств в композиционном материале, что способствует расширению областей их применения. Введение даже небольшого количества термостойких наноразмерных частиц (УНТ, ТУ) позволяет повысить термостойкость волокно-композитов\*.

Целью данной работы являлось исследование термических характеристик полиоксодиазольных волокон, модифицированных нано- и микродисперсными порошками пигментов, в количестве от 2,5 до 10%.

Анализ термогравиметрических кривых позволил выявить некоторые закономерности изменения термических свойств модифицированных волокон. В температурном диапазоне 120–125°C происходит потеря влаги у модифицированных и ненаполненных волокон, которая может достигать 5%. Термическая деструкция у всех исследуемых волокон начинается выше 440°C при этом сохраняется до 85% массы образца. Процессы термодеструкции, проходящие в волокнах характеризуются для ненаполненных волокон двумя экзотермическими эффектами, для наполненных – тремя.

Показано, что введение частиц в количестве до 2,5% не приводит к изменению хода термогравиметрической кривой по сравнению с ненаполненными волокнами. Введение наночастиц в количестве более 4% приводят к снижению конечной температуры деструкции на 30–70°C, и смещению экзотермических эффектов в сторону уменьшения температуры на 20–30°C

Термостойкость модифицированных волокон оценивали по потере 50% массы. Следует отметить, что термостойкость волокон зависит от природы модифицирующих частиц и незначительно от их количества.

---

\*. Андриевский Р.А. Основы наноструктурного материаловедения. Возможности и проблемы. – М. БИНОМ. Лаборатория знаний. 2012.

Ю. А. Филимонова

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЦИНКА В РАСТВОРАХ ГАЛЬВАНИЧЕСКИХ ВАНН

Руководитель В. М. Никольский

Тверской государственный университет

Кафедра неорганической и аналитической химии

Метод гальванического цинкования является самым распространённым способом защиты металлов от коррозии. Наибольшее распространение гальваническое цинкование получило при производстве крепёжных изделий, гвоздей и стальной сетки. Это обусловлено высокой производительностью гальванических агрегатов, низкой себестоимостью процесса и достаточной степенью защиты от коррозии. Изделия с защитным покрытием цинка обладают высоким блеском, разнообразной цветовой гаммой и высокой коррозионной стойкостью.

Все гальванические технологии требуют высокого качества подготовки поверхности обрабатываемых изделий. Перед процессом цинкования осуществляется очистка поверхности от окислов, остатков технологической смазки, продуктов коррозии (ржавчины). После нанесения цинкового покрытия для большей стабильности и стойкости покрытие подвергают осветлению (декапированию – травлению в слабом растворе азотной кислотой) и пассивации.

Нами изучены основные методы определения цинка в растворах гальванических ванн. В частности, особое внимание уделено комплексометрическому определению в цианистых электролитах цинкования, а также ионов цинка с предварительным экстракционным отделением ионов железа и кадмия диантипиралметаном и титрованием после соответствующей реэкстракции комплексоном III. Также, уделено внимание определению ионов  $Zn^{2+}$  в случаях малого содержания последних при помощи предварительного фотометрического разделения антипириновыми красителями. Рассмотрены методы амперометрического определения цинка в цинканных электролитных растворах с помощью феррицианида калия и в электролитах латунирования с помощью титрования роданидом калия в присутствии пиридина. Установлено, что комплексометрическое определение содержания цинка в электролите является универсальным и позволяет получить достоверные результаты анализа.

*Работа выполнена при поддержке гранта ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 годы (Соглашение № 14.В37.21.0653).*

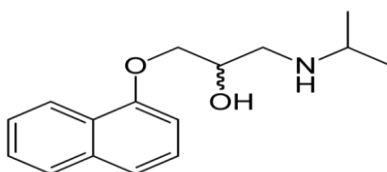
И.С. Цветкова

## ИОННО-МОЛЕКУЛЯРНЫЕ РАВНОВЕСИЯ В РАСТВОРАХ, СОДЕРЖАЩИХ АНАПРИЛИН

Руководитель М. А. Феофанова

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Среди множества антиаритмических препаратов широкое применение получил анаприлин. С химической точки зрения – это гетерофункциональное органическое соединение, содержащее ароматическую систему, связанную через простую эфирную связь с углеводородным радикалом, содержащем гидроксильную группу и вторичную аминогруппу в протонированной форме:



Анаприлин – неселективный бета-адреноблокатор. Он оказывает антигипертензивное, антиангинальное и антиаритмическое действие, снижает внутриклеточное поступление ионов кальция, а также оказывает отрицательные хроно-, дромо-, батмо- и инотропные действия.

Цель исследования заключается в изучении кислотно-основных свойств анаприлина, а также ионно-молекулярных равновесий с участием ионов биометаллов и анаприлина. Из биометаллов были выбраны кальций и магний, так как кальций совместно с магнием участвует во многих процессах, происходящих в организме, например, в регулировании тонуса кровеносных сосудов и сокращении мышц, включая сердечную мышцу. Кальций стимулирует мышцы и сокращает кровеносные сосуды, в то время как магний расслабляет мускулатуру и расширяет сосуды. Магний может повлиять на баланс кальция, воздействуя на гормоны, управляющие усвоением и метаболизмом кальция, а на клеточном уровне – на механизмы распространения кальция.

В работе исследован анаприлин, выделенный из лекарственной формы, чистота которого была подтверждена методами элементного анализа и термогравиметрического анализа. По данным рН-метрического титрования в среде физиологического раствора (ионная сила 0,15 NaCl и  $t^{\circ}=37\text{ C}^{\circ}$ ) с использованием методов математического моделирования (AVTORQVIL и HYPERQVAD) изучены кислотно-основные свойства анаприлина, получены логарифмы констант образования комплексов, определен их стехиометрический состав, построены диаграммы распределения значимых и комплексных форм.



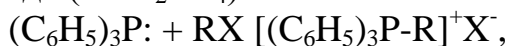
Е.А. Цветкова

## СИНТЕЗ И ИНГИБИРУЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ АЛКИЛТРИФЕНИЛФОСФОНИЙ ГАЛОГЕНИДОВ

Руководитель Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет  
Кафедра органической химии

Среди большого многообразия фосфорорганических соединений четвертичные соли фосфония с длинноцепочечными радикалами принадлежащие к классу катионных поверхностно-активных веществ (ПАВ), занимают довольно скромное место (10–15%). Это связано в основном с высокой стоимостью исходного сырья и низким выходом целевого продукта. Несмотря на малый объем производства солей фосфония, указанные соединения обладают высокой эффективностью как бактерицидные препараты, ингибиторы коррозии, присадки к топливам. В настоящей работе получены четвертичные соли фосфония общей формулы на основе трифенилфосфина,  $(C_6H_5)_3P$  и алкилирующих агентов, различающихся по структуре и длине алкильного радикала, изучены свойства их водных растворов и защитная способность в кислой среде ( $2n H_2SO_4$ ) относительно стали-3:



где  $R=CH_3$ ;  $CH_2C_6H_5$ ;  $CH_2-CH=CH_2$ ;  $C_6H_{11}$ ;  $CH_2COOC_7H_{15}$ ;  $CH_2COOC_{13}H_{27}$ ;  $CH_2COOC_{16}H_{33}$ ,  $X=Cl$ ;  $Br$ ;  $I$ .

Полученные соединения представляют собой белые кристаллические вещества, строение их подтверждено данными ИК спектроскопии: полоса поглощения связи P-C наблюдалась в области  $1400-1200\text{ см}^{-1}$ ;  $\nu_{C-Asp}$  1600, 1500  $\text{см}^{-1}$ ,  $\nu_{C-H}$  2960, 2930  $\text{см}^{-1}$ ;  $\nu_{C=O}$  1745-1735  $\text{см}^{-1}$  и  $\nu_{C-O-C}$  1300-1100  $\text{см}^{-1}$ .

Защитную способность солей фосфония изучали по общепринятой методике; концентрация ингибитора во всех случаях была  $1 \cdot 10^{-3}$  моль/л. Коррозионные испытания проводили в течение 24 часов при естественной аэрации.

Из полученных данных следует, что в зависимости от структуры катиона и природы аниона защитный эффект различный. Во всех случаях иодиды были более эффективны; а циклогексилфосфоний иодид проявил наибольшую ингибирующую способность среди всех исследуемых соединений, что, вероятно, связано с большей экранирующей способностью кольца при адсорбции на стали-3.

## АДСОРБЦИЯ КРАСИТЕЛЕЙ НА НАНОЧАСТИЦАХ ДИОКСИДА ТИТАНА

Руководитель Е.И. Туркин

Санкт-Петербургский университет технологии и дизайна

Кафедра наноструктурных, волокнистых и композиционных материалов им. А.И. Меоса

Диоксид титана ( $\text{TiO}_2$ ) представляет большой интерес для фотокатализа [1]. Известно что, на поверхности  $\text{TiO}_2$  находятся центры любовской кислотности и основности, которые во многом определяют его адсорбционные и каталитические свойства [2]. Обесцвечивание растворов красителей возможно как за счёт адсорбции, так и за счёт фотокаталитической деструкции. При использовании наночастиц  $\text{TiO}_2$  или других каталитически активных материалов для фотокаталитической деструкции органических красителей необходимо знать вклад адсорбции в процесс обесцвечивания водных растворов красителей.

Целью данного исследования являлось определение количества адсорбированных красителей на поверхности  $\text{TiO}_2$ . Результаты исследований адсорбции различных красителей приведены в таблице.

Адсорбция красителей на диоксиде титана\*

| Краситель                      | Равновесная концентрация, мг/л | Степень извлечения, % | Величина адсорбции, мг/г |
|--------------------------------|--------------------------------|-----------------------|--------------------------|
| Кислотный алый 2Ж              | 6,6                            | 34                    | 3,4                      |
| Кислый красный 4Ж              | 3,3                            | 67                    | 6,6                      |
| Кислый фиолетовый К            | 2,7                            | 73                    | 7,3                      |
| Кислотный антрахиноновый синий | 3,7                            | 63                    | 6,3                      |
| Метиленовый голубой            | 0,9                            | 91                    | 9,1                      |

\* Температура 20°C; модуль ванны 1000 мл/г; время адсорбционного равновесия 120мин; исходная концентрация 10 мг/л

Анализ результатов, представленных в таблице, показывает, что адсорбция красителей на наночастицах  $\text{TiO}_2$  значительна. В наибольшей степени сорбируется краситель метиленовый голубой (степень извлечения 91%), в наименьшей степени сорбируется краситель кислотный алый (степень извлечения 34%).

Полученные результаты свидетельствуют, что при рассмотрении фотокаталитической деструкции красителей необходимо учитывать вклад процессов адсорбции.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Цыбук И. О., Лысенко Л. А., Брошь С., Перушон Л. Р. // Вестник СПГУТД. — 2012. — №4. Серия 1. — С 13–15.
2. Parfitt G.D. // Progress in Surface Membrane Science. NP London. — 1976. — V. 11. — P. 181.

## ОБ ИЗМЕНЕНИИ ХАРАКТЕРИСТИК НЕТКАННЫХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ИХ КАРБОНИЗАЦИИ

Руководитель: Перминов Я.О.

Санкт-Петербургский государственный университет технологии и дизайна  
Кафедра наноструктурных, волокнистых, композиционных материалов им.А.М. Меоса

Нетканые материалы из ПАН и ГЦ с поверхностной плотностью 100–300 г/м<sup>2</sup> могут являться перспективными прекурсорами для получения углерод-углеродных композитов, в частности электродов для различных электрохимических процессов\*.

Задачей настоящей работы являлось изучение свойств углеродных материалов из гидратцеллюлозы после карбонизации. В качестве исходных материалов были взяты гидратцеллюлозные нетканые материалы с поверхностной плотностью 100–400 г/м<sup>2</sup>, толщиной 0,15–0,5 мм. Определяли выход карбонизованного остатка, толщину, усадку, поверхностную плотность. Результаты экспериментов приведены в таблице.

Характеристики образцов до и после карбонизации.

| Характеристики                            | Количество слоев нетканого материала |      |     |      |
|---|--------------------------------------|------|-----|------|
|   | 1                                    | 2    | 3   | 4    |
| Поверхностная плотность, г/м <sup>2</sup> |                                      |      |     |      |
| До карбонизации                           | 120                                  | 180  | 250 | 370  |
| После карбонизации                        | 17                                   | 60   | 70  | 110  |
| Толщина, мм                               |                                      |      |     |      |
| До карбонизации                           | 1,2                                  | 2,0  | 3,3 | 5,2  |
| После карбонизации                        | 0,2                                  | 0,6  | 0,7 | 1,4  |
| Масса, г                                  |                                      |      |     |      |
| До карбонизации                           | 1,24                                 | 2,6  | 3,5 | 5,3  |
| После карбонизации                        | 0,09                                 | 0,35 | 0,5 | 0,76 |
| Выход углеродного остатка, %              | 8                                    | 13   | 14  | 14   |
| Усадка по длине и ширине, %               | 72                                   | 65   | 68  | 68   |

Показано, что при карбонизации гидратцеллюлозных нетканых материалов можно получать нетканые углеродные материалы с поверхностной плотностью 17–110 г/м<sup>2</sup> и толщиной от 0,2 до 1,4 мм, которые в дальнейшем могут быть использованы для получения углерод-углеродных композитов для альтернативной энергетики.

\* Сальникова П.Ю., Лысенко В.А. и др. Углеродные текстильные материалы для газодиффузионных электродов водородных топливных элементов / Текстильная химия. – 2008. – С. 62.

О.И. Шаляпина

## СРАВНИТЕЛЬНЫЕ ИСПЫТАНИЯ АНТИКОРРОЗИОННЫХ ГРУНТОВОК

Руководитель Ю.Н. Смирнов

Тверской государственной технической университет

Кафедра технологии полимерных материалов

Объектом исследования являются вододисперсионные грунтовочные материалы, модифицированные ингибиторами коррозии металлов.

Цель работы – разработка рецептуры и технологии получения вододисперсионной грунтовки по черным металлам, модифицированной сульфометилированными продуктами конденсации многоатомных фенолов.

При разработке рецептуры и технологии изготовления вододисперсионной грунтовки проводились исследования совместимости водной дисперсии бутадиенстирольного сополимера с сульфометилированными продуктами конденсации полиоксибензолов.

Оптимизация рецептуры осуществлялась методом математического планирования. Проведены сравнительные испытания защитных свойств грунтовочных покрытий.

Разработаны рецептура и технология изготовления вододисперсионной грунтовки, модифицированной сульфометилированными продуктами конденсации полиоксибензолов.

Вододисперсионная грунтовка предназначена для окраски металлоконструкций, сельскохозяйственной техники и других металлических изделий, эксплуатирующихся в атмосферных условиях.

Таким образом, покрытие, разработанное грунтовкой атмосферостойкое, стойкое к воздействию морской и пресной воды, моющих растворов, минеральных масел, устойчиво к изменению температуры от минус 45 до плюс 60°C.

Применяемое в производстве грунтовки высококачественное отечественное сырье обеспечивает превосходные показатели по качеству, при этом сохраняется самый важный аспект современного рынка – низкая цена.

Грунтовка предназначена для грунтования металлических, деревянных и других поверхностей под покрытия различными эмалями.

## СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЖЕСТКОСТИ ВОДЫ

Руководитель Л.Н. Толкачева

Тверской государственной университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Жесткость воды является важнейшим показателем качества воды. Жесткие воды могут образовывать накипь и отложения на бытовой технике, котлах, трубопроводах горячей воды. При использовании жесткой воды для стирки белья ее необходимо предварительно умягчать. Установлена статистически достоверная связь между жесткостью воды и развитием сердечно-сосудистых заболеваний (частотой инфаркта миокарда). Есть предположение о роли жесткости воды в развитии мочекаменной болезни. Жесткость воды для питьевых целей ограничена концентрацией 7 мг-экв/л.

Для определения жесткости в настоящее время используется комплексометрический метод с этилендиаминтетрауксусной кислотой (ЭДТА). Этот комплексон накапливается в окружающей среде, что может привести к серьезным негативным последствиям. Многие фирмы предлагают отказаться от его использования.

Мы предложили новый способ определения как общей жесткости, так и индивидуальных концентраций кальция и магния, основанный на использовании экологически безопасного комплексона иминодиянтарной кислоты (ИДЯК). ИДЯК образует устойчивые комплексы с катионами кальция ( $\lg K = 5,5$ ) и магния ( $\lg K = 4,6$ ), что позволяет провести их определение из растворов без предварительной подготовки образцов.

Объектами исследования нами выбраны пробы водопроводной воды различных районов г. Твери, а также г. Удомля. Все образцы были проанализированы как по стандартной методике, так и по модифицированной с применением ИДЯК.

Результаты, полученные двумя методами, имеют хорошую сходимость. Можно сделать вывод, что предложенный метод определения концентраций ионов кальция, магния и жесткости может быть рекомендован для внедрения в аналитических лабораториях.

*Работа выполнена при поддержке гранта ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы (Соглашение № 14.В37.21.0653) и программы «У.М.Н.И.К.» (государственный контракт № 10509р/16886 от 08.06.2012 г).*

М.С. Шашков

ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРА ПРЫЖКОВОЙ ПРОВОДИМОСТИ  
ВИСМУТСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ  $\text{Bi}_2\text{Ti}_{2.5}\text{Cr}_{0.2}\text{O}_{8.3}$ ,  $\text{Bi}_2\text{Ti}_{2.5}\text{Cu}_1\text{O}_9$ ,  
 $\text{Bi}_4\text{Ti}_2\text{Fe}_1\text{O}_{11.5}$

Руководители: О.В.Малышкина, Е.В. Барабанова

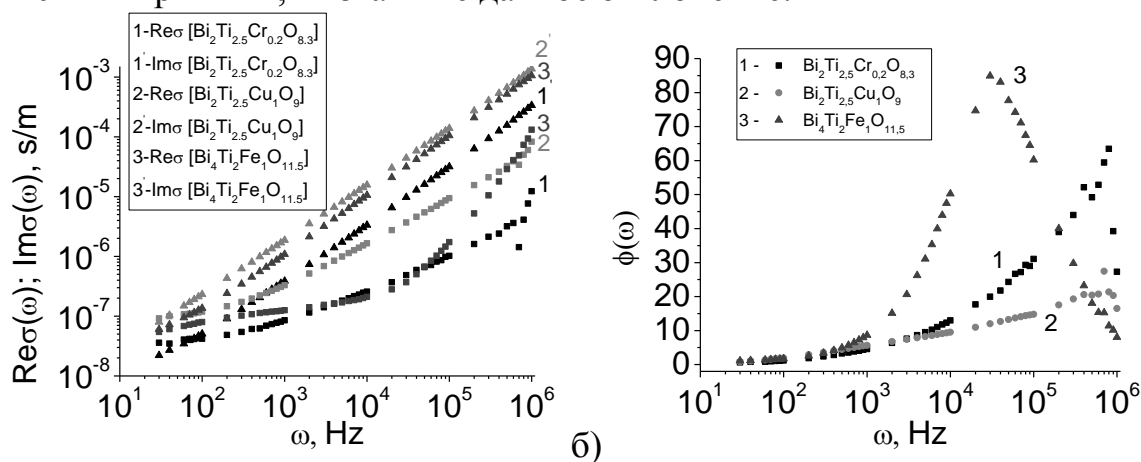
Тверской государственный университет

Кафедра технической физики и инновационных технологий

Частотная зависимость проводимости на эксперименте в широком классе неупорядоченных систем аппроксимируется степенным выражением  $\sigma \sim \omega^s$  [1] с показателем  $s < 1$ . Большинство авторов интерпретируют эту зависимость в рамках модели прыжковой проводимости в двухузельном приближении.

Методом диэлектрической спектроскопии в диапазоне частот  $30 \div 106$  Гц при температуре 296К исследованы соединения  $\text{Bi}_2\text{Ti}_{2.5}\text{Cr}_{0.2}\text{O}_{8.3}$ ,  $\text{Bi}_2\text{Ti}_{2.5}\text{Cu}_1\text{O}_9$ , и  $\text{Bi}_4\text{Ti}_2\text{Fe}_1\text{O}_{11.5}$ . Как показано на рисунке (а), в заданном интервале частот в поведении действительной и мнимой частей комплексной проводимости не наблюдается аномальных изменений.

Однако для всех образцов обнаружено аномальное поведение котангенса угла диэлектрических потерь (рисунок, б), по виду которого определяется характер перескоков носителей заряда [2; 3]. В работе были сделаны попытки объяснить причины, вызвавшие данное отклонение.



а) Дисперсия действительной и мнимой части комплексной проводимости (а) и котангенса угла диэлектрических потерь (б) для образцов  $\text{Bi}_2\text{Ti}_{2.5}\text{Cr}_{0.2}\text{O}_{8.3}$ ,  $\text{Bi}_2\text{Ti}_{2.5}\text{Cu}_1\text{O}_9$ ,  $\text{Bi}_4\text{Ti}_2\text{Fe}_1\text{O}_{11.5}$

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Jonscher A.K. Universal relaxation law. – London. – 1996.
2. Брыксин В. В. – ФТТ. – 1980. – Т. 22.
3. Брыксин В. В. – ФТТ. – 1981. – Т. 23.

И.П. Шевчук

ФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ  
ОКСИЭТИЛИДЕНДИФОСФОНОВОЙ КИСЛОТЫ МЕТОДОМ  
КОНКУРИРУЮЩЕГО КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ

Руководитель В.М.Никольский

Тверской государственной университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Оксиэтилидендифосфоновая кислота (ОЭДФ,  $H_4L$ ) и её комплексы являются эффективными ингибиторами солеотложений и коррозии в водооборотных системах. Ингибирующее действие проявляется при концентрациях комплексона  $10^{-5}$ – $10^{-4}$  моль/л. Предлагаемые в литературе методики определения малых концентраций ОЭДФ основаны на каталитическом разложении комплексона с последующим определением ортофосфата фотометрическим или кинетическим методами. Подобные методики требуют больших затрат времени и не позволяют оперативно контролировать процессы ингибирования.

Способность ОЭДФ образовывать устойчивые комплексы с Fe(III) в умеренно кислой среде позволяет использовать методики анализа, основанные на конкурирующем комплексообразовании. В качестве конкурирующего лиганда удобно использовать роданид-ион, образующий с Fe(III) интенсивно окрашенные комплексы. В присутствии ОЭДФ они обесцвечиваются.

Полнота протекания реакции зависит от кислотности среды, поскольку ОЭДФ является слабой кислотой. Для определения оптимальной области pH при фотометрическом анализе было изучено влияние кислотности на чувствительность разрабатываемого метода. Кислотность среды регулировалась введением азотной кислоты.

Предлагаемый метод позволяет в 5–6 раз сократить время анализа в сравнении с методиками, связанными с длительным разложением ОЭДФ до фосфатов, и дает возможность эффективно контролировать концентрацию комплексона в циркуляционной воде при ингибировании коррозии и солеотложений.

*Работа выполнена при поддержке гранта ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы (Соглашение № 14.В37.21.0653).*

И. К. Шевчук, П.Н. Крылов

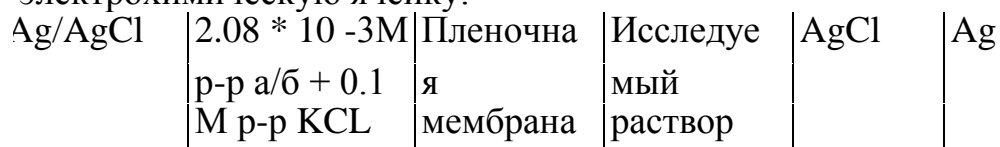
## СОЗДАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ИОНСЕЛЕКТИВНОГО ЭЛЕКТРОДА С ОТКЛИКОМ НА ТРАМАДОЛ

Руководитель Г. И. Мантров

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

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

В работе использовали трамадол фармакопейной чистоты, фосфорномолибденовую (ФМК) и фосфорновольфрамную (ФВК) кислоты ч.д.а., диоктилфталат (ДОФ) ч.д.а., поливинилхлорид (ПВХ) марки С-70 х.ч. Электродноактивные вещества (ЭАВ) получали осаждением трамадола из водных растворов вышеуказанными гетерополикислотами. Пластифицированные мембраны имели следующий состав (в масс. %): ПВХ-35, ДОФ-60, ЭАВ-5. ИСЭ перед применением вымачивали в 0,05 М растворе трамадола. Для определения электродных характеристик использовали электрохимическую ячейку:



Изготовленные электроды обладали хорошими метрологическими характеристиками. Интервал линейности электродной функции находится в промежутке 2–5 pC, крутизна электродной функции близка к теоретическому значению, время отклика составляло 6–9 с. Показано, что потенциал ИСЭ не изменяется в интервале pH 4–6, что делает этот интервал наиболее подходящим для определения трамадола. Определение трамадола в готовых лекарственных формах показало работоспособность созданного ИСЭ.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rakhmanko E. M., Yegorov V. V., Gilevich A. L. Ion-Sel. Electrode Rev. 1992. – P. 5–11.
2. Корыта И., Штулик К. Ионоселективные электроды. – М.: Мир, 1989.



## ВЛИЯНИЕ КОМПЛЕКСОНАТОВ НА МИКРОБИОЛОГИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ ПОЧВЫ И УРОЖАЙНОСТЬ СТОЛОВОЙ СВЕКЛЫ

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

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Большая часть микроэлементов наиболее эффективно усваивается растениями в форме комплексонатов, в том числе и необходимый в сравнительно больших количествах биоактивный неметалл – бор. При взаимодействии с некоторыми лигандами борат-анионы могут образовывать хелатные комплексы. Подобные соединения обладают высокой химической активностью и могут оказывать положительное влияние как на растения, так и на некоторые почвенные показатели.

Для подтверждения указанных предположений были проведены исследования на мелкоделяночном опыте. Он располагался на экспериментальном участке кафедры агрохимии, почвоведения и агроэкологии Тверской ГСХА. Общая площадь участка – 60 м<sup>2</sup>, площадь 1 делянки – 1 м<sup>2</sup>. Повторность опыта трехкратная, расположение делянок – рендомизированное. В качестве опытной культуры была выбрана столовая свекла, как наиболее отзывчивая на соединения бора. Семена свеклы сорта «Красный шар» предварительно замачивали на сутки в растворах Н<sub>3</sub>ВО<sub>3</sub>, этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТУК), этилендиаминдиянтарной кислоты (ЭДДЯК), иминодиянтарной кислоты (ИДЯК) с концентрацией 1,5 · 10<sup>-3</sup> моль/л, а также в растворах, содержащих совместно комплексоны в концентрации 1,5 · 10<sup>-3</sup> моль/л и эквимольные количества Н<sub>3</sub>ВО<sub>3</sub>. В качестве контроля использовались семена, замоченные при тех же условиях в Н<sub>2</sub>О dest. После появления третьего настоящего листа и далее с интервалом в один месяц растения дважды опрыскивали соответствующими растворами, а контрольные делянки – дистиллированной водой из расчета 100 мл /м<sup>2</sup>.

При проведении анализов на содержание в дерново-подзолистой легкосуглинистой почве углерода микробной биомассы была выявлена следующая закономерность: при использовании комплекса бора с исследуемыми органическими кислотами увеличивалось значение указанного показателя в среднем на 4,1–5,0 мкг/г почвы по отношению к контролю. При этом максимальным содержанием С микробной массы отличались варианты с В-ЭДТУК (84,0 мкг/г почвы), а наименьшим – с ЭДТУК (44,6 мкг/г почвы). Наибольший выход корнеплодов столовой свеклы по отношению к контролю отмечен на вариантах с применением В-ЭДДЯК (на 30%) , тогда как при обработке растений Н<sub>3</sub>ВО<sub>3</sub> – на 10%.

Н.Ю. Шумилова

ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ  
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ АМПИЦИЛЛИНА С Co(II) В ВОДНОМ  
РАСТВОРЕ

Руководитель Т.Б. Хоченкова

Ивановский государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Было обнаружено, что ампициллин образует как моно-, так и билигандные комплексы с катионом Co(II).

Обработку данных потенциометрических измерений проводили по программе РНМЕТР, предназначенной для расчета констант равновесия по измеренным равновесным концентрациям какой-либо одной частицы в растворе. В качестве базисных частиц были выбраны  $Co^{2+}$ ,  $Amp^-$ ,  $H^+$ . В результате исследования было изучено комплексообразование ампициллина с кобальтом (II) потенциометрическим методом.

| Равновесие                     | $Lg\beta$<br>потенциометрическим<br>методом | $Lg\beta$<br>(справочник) |
|--------------------------------|---|---------------------------|
| $Co^{2+} + Amp^- = CoAmp^+$    | $4,52 \pm 0,16$                             | $4,6 \pm 0,3$             |
| $Co^{2+} + 2Amp^- = CoAmp_2^+$ | $3.93 \pm 0,18$                             |                           |
| $CoAmp + OH^- = CoAmpOH$       | $9.76 \pm 0,8$                              |                           |

## СПОСОБ СИНТЕЗА НОВОГО КОМПЛЕКСОНА 1,6-ГЕКСАМЕТИЛЕНДИАМИН -N,N'-ДИАНТАРНОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Разработан способ синтеза нового полидентатного комплексона 1,6-гексаметилендиамин -N,N'-диянтарной кислоты (ГМДДЯК, H<sub>4</sub>L).

Пониженное относительное содержание азота в ГМДДЯК (8,02 %) является экологически важной особенностью получаемого комплексона. Биоразлагаемость и пониженное относительное содержание азота в составе вещества – два критерия эффективности для современного использования комплексонов\*.

Сущность предложенного способа заключается в следующем:

1,6-гексаметилендиамин -N,N'-диянтарную кислоту получают путем кипячения раствора, содержащего дилитиевую соль малеиновой кислоты и 1,6-гександиамин в соотношении 2:1 в течение 48 часов, с последующей очисткой с помощью горячего ацетона. Выход вещества ~65%.

| C <sub>14</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>8</sub> | C     | H    | N    |
|---|-------|------|------|
| Вычислено, %  | 48,17 | 7,16 | 8,02 |
| Найдено, %  | 48,09 | 7,18 | 7,99 |

Целью исследования являлось получение вещества 1,6-гексаметилендиамин -N,N'-диянтарной кислоты, не загрязненного примесями неорганических веществ – бромид лития – результата химических реакций, протекающих в растворе в процессе синтеза 1,6-гексаметилендиамин -N,N'-диянтарной кислоты.

Технический результат достигается благодаря тому, что в процессе очистки вещества используется горячий ацетон, что позволяет произвести очистку готового продукта от неорганических примесей в одну стадию (растворимость бромида лития в ацетоне 18,2<sup>20</sup>, 39,7<sup>60</sup>, тогда как 1,6-гексаметилендиамин -N,N'-диянтарная кислота в ацетоне нерастворима.

В процессе очистки готового продукта не используется вода или смеси, содержащие воду, что предотвращает потерю части готового продукта.

\*Hyvonen H., Orama M., Saarinen H., Aksela R. Studies on Biodegradable Chelating ligands: Complexation of Iminodisuccinic Acid (ISA) with Cu (II), Zn (II), Mn (II) and Fe (III) Ions in Aqueous Solutions // Green Chemistry. – 2003. – V. 5. – P. 410-414.



## ***АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ***

|   |    |
|---|----|
| Абраменко А.В.                              | 3  |
| Алексеева Е.П.                              | 4  |
| Андрианова Е.В.                             | 5  |
| Андрианова Я.В.                             | 6  |
| Ахметзянова У.Р.                            | 7  |
| Ащепкова А.А., Семенова М.В.                | 8  |
| Бабенко М.В.                                | 9  |
| Балбихина О.В., Карпенков А.Ю.              | 10 |
| Баранова О.А.                               | 11 |
| Батулина Н.В.                               | 12 |
| Беляева А.А., Мельникова Ю.А.               | 13 |
| Беляков В.А.                                | 14 |
| Богачев А.А.                                | 15 |
| Бойкова Н.В.                                | 16 |
| Боровиков Д.В., Бровина Е.А., Баранова О.А. | 17 |
| Бровина Е. А., Баранова О. А.               | 18 |
| Булюкин Е.С., Подковина О.А.                | 19 |
| Буторин А.О.                                | 20 |
| Васильев С.А.                               | 21 |
| Васильева Д. В.                             | 22 |
| Викторов Б.Н.                               | 23 |
| Виноградов А.В.                             | 24 |
| Виноградов О.В.                             | 25 |
| Володько К.Ю.                               | 26 |
| Воронцов М.С.                               | 27 |
| Глекова В.А.                                | 28 |
| Горбачева Н.А.                              | 29 |
| Громов А.Н.                                 | 30 |
| Гусаров А.А.                                | 31 |
| Гусев Д.А.                                  | 32 |
| Густова А.В.                                | 33 |
| Дицина О.Ю.                                 | 34 |
| Жигалова Ю.Э.                               | 35 |
| Журавлев Е.В., Демичев Г.А.                 | 36 |
| Зайцев М.Н.                                 | 37 |
| Захаров П.А.                                | 38 |
| Золотарев Н.В.                              | 39 |
| Иванов П.Н.                                 | 40 |
| Иванов Р.П.                                 | 41 |
| Ильяшенко Н.В.                              | 42 |
| Кличева О.Б.                                | 43 |

|   |    |
|---|----|
| Кныш Е.В., Демидова М.С.  | 44 |
| Кобилинский И.В.  | 45 |
| Копич Н.И.  | 46 |
| Коробейников П.А.   | 47 |
| Корогод К.  | 48 |
| Крисковец М.В.  | 49 |
| Кротова Н.И.  | 50 |
| Кротова Д.М.  | 51 |
| Крылов А.А.   | 52 |
| Кузин С.В.  | 53 |
| Куликов Г.С., Крылов П.Н., Султанов М.Б.                              | 54 |
| Кутюмина Е.А.   | 55 |
| Лебедев П.В.  | 56 |
| Лихуша П.С.   | 57 |
| Логинова Е.С.   | 58 |
| Ляшко О.Ю., Яковлева Р.А., Якубовская А.А.                            | 59 |
| Макарова А.С.   | 60 |
| Мальшев Н.  | 61 |
| Миронов А.А., Дибуга Кат Констант О.                                  | 62 |
| Морозихина Т.А.   | 63 |
| Муравьев А.А.   | 64 |
| Нилова К.А.   | 65 |
| Новикова В.В.   | 66 |
| Оленева Ю.Г.  | 67 |
| Орликова Ю.А.   | 68 |
| Павлов А. В.  | 69 |
| Пайкова М.Г.  | 70 |
| Пичугина А.И.   | 71 |
| Плисова А.А.  | 72 |
| Погудкина А.А.  | 73 |
| Посадова Е.   | 74 |
| Пугачева Н.А.   | 75 |
| Рисунков С.В.   | 76 |
| Рыбаков И.И.  | 77 |
| Саакян А.А., Теплов И.В.  | 78 |
| Селина Т.Ю.   | 79 |
| Сергеева А.В., Смирнова Е.А.  | 80 |
| Синитенков И.   | 81 |
| Ситникова В.Е.  | 82 |
| Ситников В.Н.   | 83 |
| Скобин М.И., Крюков Т.В., Тормозов И.А., Кустарёв Б.А., Соколова Е.М. | 84 |
| Скобин М.И., Крюков Т.В., Тормозов И.А., Кустарёв Б.А., Соколова Е.М. | 85 |

|                                 |     |
|---------------------------------|-----|
| Смирнова К.В.                   | 86  |
| Смолин А.М.                     | 87  |
| Соколова О.А.                   | 88  |
| Соколов М.А.                    | 89  |
| Соловьева Н.А., Оленева Ю.Г.    | 90  |
| Сорокина М.Ю., Ребецкая И.С.    | 91  |
| Старовойтов А.В.                | 92  |
| Стороженко М.В.                 | 93  |
| Сулейманова Ш.Ф.Г.              | 94  |
| Супрун А.М.                     | 95  |
| Топчиев А.А.                    | 96  |
| Трофимова Т. В.                 | 97  |
| Федорова Т.А., Терещенков А. Ю. | 98  |
| Федорова Т.А., Терещенков А. Ю. | 99  |
| Федорова Ю.Е.                   | 100 |
| Филимонова Ю. А.                | 101 |
| Цветкова И.С.                   | 102 |
| Цветкова Е.А.                   | 103 |
| Цыбук И.О.                      | 104 |
| Чебаков О.С.                    | 105 |
| Шаляпина О.И.                   | 106 |
| Шарова М.Г.                     | 107 |
| Шашков М.С.                     | 108 |
| Шевчук И.П.                     | 109 |
| Шевчук И. К., Крылов П.Н.       | 110 |
| Шмакотин И. А., Узденов А.К.    | 111 |
| Шумилова Н.Ю.                   | 112 |
| Яковлев А.А.                    | 113 |
| Яковлев И.С.                    | 114 |
| Авторский указатель             | 115 |