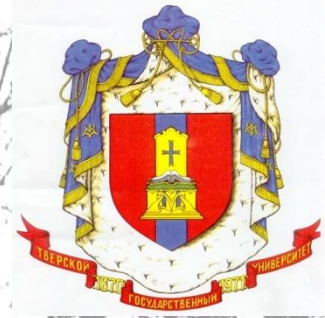




ФОНД СОДЕЙСТВИЯ РАЗВИТИЮ

малых форм предприятий в научно-технической сфере



XXI КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ

с международным участием

**Всероссийская научно-техническая
конференция молодых учёных**

«Физика, химия и новые технологии»

ТВЕРЬ 2014

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

XXI КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ

с международным участием

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

27 марта 2014 года

г. Тверь

Тезисы докладов

ТВЕРЬ 2014

УДК 54(082)
ББК Г.я431
Р32

Ответственные за выпуск:

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

Р32 XXI Каргинские чтения: тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2014. – 113 с.

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

Настоящий сборник издан на средства РФФИ (грант № 13-03-06201г_1_2014).

© Тверской государственный
университет, 2014
© Авторы статей, 2014

А.В. Абраменко

СЕЛЕКТИВНАЯ КАТАЛИТИЧЕСКАЯ КОНВЕРСИЯ ГЛИЦЕРИНА В 1,2-ПРОПАНДИОЛ

Руководитель Л.Ж. Никошвили

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

Быстро развивающееся в мировом масштабе производство биодизельного топлива на базе жиров и масел привело к существенному увеличению производства в качестве побочного продукта глицерина. Одним из способов конверсии глицерина в полезные продукты является гидрогенизация в пропиленгликоль (1,2-пропандиол), 1,3-пропандиол, или этиленгликоль [1].

Гидрогенизация глицерина проводится в присутствии различных металлических катализаторов и водорода. Были описаны процессы с использованием катализатора $\text{Cu}/\text{Al}_2\text{O}_3$, при которых достигается 100% конверсия глицерина и 90% выход пропиленгликоля. Однако после 6 часов реакции наблюдалось снижение конверсии [2]. В присутствии $\text{Pd}/\text{Fe}_2\text{O}_3$ катализаторов эксперименты проводились в автоклаве при 5 бар в инертной атмосфере. После 24 ч, 12 ч и 8 ч времени реакции при 180°C и при 150°C была получена высокая конверсия глицерина 96%-100% и выход пропиленгликоля составил 87%-94% [3].

В данной работе исследовались катализаторы $\text{Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{Pd}/\text{MN-100}$ и катализатор содержащий CuO , ZnO , Al_2O_3 . Было показано, что наилучшие результаты в присутствии катализатора, содержащего CuO , ZnO , Al_2O_3 . За 15 часов эксперимента достигалась 34,18% селективность при 65,82% конверсии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Corma A. Chemical Routes for the Transformation of Biomass into Chemicals // Chem. Rev. – 2007. - Vol. 107. – P. 2411-2502.
- Auttanat T. Dehydroxylation of Glycerol to Propylene Glycol over Cu-ZnO/Al₂O₃ Catalyst: Effect of Feed Purity // International Journal of Chemical and Biological Engineering. – 2012. - Vol. 64. – P. 448-451.
- Musolino M. G. Selective transfer hydrogenolysis of glycerol promoted by palladium catalysts in absence of hydrogen // Green Chem. 2009. V. 11. P. 1511-1513.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ ФОСФОНИЯ В КАЧЕСТВЕ ИНГИБИТОРОВ КОРРОЗИИ СТАЛИ-3 В СЕРНОЙ КИСЛОТЕ.

Руководитель: д.х.н., проф. Л.И. Ворончихина
Тверской государственной университет
Кафедра органической химии

Наибольший ущерб металлическим изделиям наносит кислотная коррозия. В качестве средств защиты от коррозии используют органические соединения самых различных классов – это соли аммония, пиридина, сульфония и др. Четвертичные соли фосфония как ингибиторы кислотной коррозии изучены в меньшей степени, хотя неорганические фосфаты и особенно полифосфаты широко применяются в качестве ингибиторов коррозии в особенности в водоснабжении, охладительных системах и энергетических установках. В последние годы широко используются полифосфаты для обработки естественных вод, для защиты охладительных циркуляционных систем как от коррозии так и от отложения солей кальция. Для исследования защитных свойств фосфониевых солей в настоящей работе синтезированы четвертичные соли трифенилфосфония (1) различающиеся по длине и структуре гидрофобного радикала, изучены свойства их водных растворов и защитная способность в $2\text{H}_2\text{SO}_4 [\text{Ph}_3\text{-R}] \text{X}$ (1)

где $\text{R} = \text{CH}_3; \text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_5; \text{CH}_2\text{-CH=CH}_2; \text{CH}_2\text{COOC}_7\text{H}_{15}; \text{CH}_2\text{COOC}_{13}\text{H}_{27}$. $\text{X}=\text{Cl}; \text{Y}$.

Коррозионные испытания проводили на образцах стали Ст-3 (0,14%С, 0,55% Мп, 0,05% Сг); концентрация ингибитора составляла $5 \cdot 10^{-3}$ моль/л., фосфониевой соли. Коррозионные испытания проводили по общепринятой методике; время испытаний 120 час. Из полученных данных следует, что все исследованные четвертичные соли фосфония являются эффективными ингибиторами кислотной коррозии. Необходимо отметить, что эффективность солей в значительной степени зависит от наличия в коррозионной среде растворенного кислорода. Растворенный в кислоте кислород увеличивает скорость растворения стали вероятно в связи с окислением в объеме раствора молекул ингибитора, вследствие чего его эффективная концентрация снижается и скорость коррозии стали возрастает. Сопоставление защитных свойств ингибиторов в аэрированных растворах показывает, что чем менее чувствительна соль к окислению кислородом, тем менее эффективна она в качестве ингибитора. Вероятно, это является результатом того, что защита металла обусловлена не только катионным ионом, но и продуктом окислительного распада соли, возможно с образованием трифенилфосфина, либо окиси трифенилфосфина.

КАТАЛИТИЧЕСКОЕ ГИДРИРОВАНИЕ ФУРФУРОЛА

Руководитель В.Ю. Долуда

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Современные проблемы топливо-энергетического сектора экономики связанные с уменьшением запасов ископаемых топлив фокусируют научные исследования на возможности применения возобновляемых ресурсов в качестве альтернативных источников энергии. Одним из возможных решений данной проблемы является использование пиролизной жидкости, получаемой при температурной переработки биомассы в качестве биотоплива [1]. Наиболее часто встречающимся компонентом пиролизной жидкости являются фурфурол и его производные. Обычно фурфурол и его производные подвергаются каталитическому восстановлению до соответствующих спиртов или алициклических соединений. Также продукты процесса гидрирования фурфурола используются в качестве эффективных пластификаторов, полупродуктов синтеза фармацевтических препаратов, пестицидов и гербицидов [2], что является перспективой использования его производных в различных областях химической промышленности.

При гидрировании фурфурола на Pd, нанесенном на различные формы углерода, были выявлены основные продукты – фурфуриловый спирт и тетрагидрофурфуриловый спирт. Скрининг образцов катализаторов показал, что наибольшей активностью обладает 5мас.%Pd катализатор на носителе активированный уголь (5мас.% Pd/актив.С). Была проведена серия экспериментов при варьировании температуры реакции для образцов 5мас.% Pd/актив.С при давлении H₂ 6 МПа, в диапазоне температур 343 – 473 К.

При увеличении температуры с 343 до 473 К происходит увеличение конверсии фурфурола с 0.68 до 30.5%. Однако, увеличение температуры выше 473 К приводит к быстрой полимеризации фурфурола и дезактивации катализатора. Максимальный выход фурфурола был получен при давлении 6 МПа, при температуре 463 К, с использованием 0.1 г 5мас.% Pd/актив.С. Полученный максимальный выход соответствует литературным данным для этого типа катализатора. Однако необходимо отметить, что небольшие значения выхода фурфурилового и тетрагидрофурфурилового спиртов, полученные на существующих катализаторах показывают необходимость разработки новых каталитических систем.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- M. Stocker, *Angew. Chem., Int. Ed.*, 2008, 47, 9200–9211.
- David Martin Alonso, Jesse Q. Bond and James A. Dumesic // *Green Chem.*, 2010, 12, P. 1493–1513

Л.Г. Алексеева

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РЕАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ НА ДОСТОВЕРНОСТЬ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ, ПОЛУЧЕННЫХ В РАЗОМКНУТОЙ МАГНИТНОЙ ЦЕПИ

Руководитель А.Г. Пастушенков

Тверской государственный университет

Кафедра магнетизма

Получение достоверной информации о магнитных свойствах материала напрямую зависит от выбранного метода магнитных измерений, и от способа построения магнитной цепи. В случае когда, существует немагнитное пространство вблизи образца, то есть в разомкнутой магнитной цепи, наличие собственное поле размагничивания характеризует объект исследования. При этом даже строгое выполнение требований применяемого метода измерений, не позволяет получить однозначные зависимости магнитного параметра от величины магнитного поля для образцов изготовленных из одного и того же ферромагнитного материала.

В настоящей работе была поставлена задача исследования поведения измеряемого сигнала в процессе насыщения полюсов электромагнита при изменении величины удельной намагниченности исследуемого образца при сохранении размеров, а также при изменении размеров образца при сохранении величины его удельной намагниченности.

В качестве измерительного устройства использован вибрационный магнитометр, где исследуемый объект размещался в центре межполюсного пространства электромагнита.

В первой части были получены зависимости сигнала измерительной информации в области насыщения полюсных наконечников при изменении удельной намагниченности от $\sigma_s(\text{Ni})$ до $\sigma_s(\text{Fe})$ и сохранении размеров образцов. Во второй части - идентичные зависимости при изменении размеров образцов и сохранении значения удельной намагниченности. Показано, что в пределах точности измерения все зависимости, построенные в приведенных единицах, совпадают с точностью измерительного устройства (1,5% по отношению к эталонному образцу).

Все рассуждения, изложенные выше, верны только при сохранении симметрии построения рабочего объема намагничивающего устройства.

Полученные результаты могут быть полезны при получении информации о ферромагнетиках в разомкнутой магнитной цепи.

Е.В. Андрианова

ИНГИБИРУЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ N-АЛКИЛПИРИДИНИЯ

Руководитель: д.х.н., проф. Л.И. Ворончихина
Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Метод защиты металлов с помощью ингибиторов коррозии известен давно, однако до настоящего времени проводятся испытания по поиску новых более эффективных ингибиторов. Обусловлено это как возрастанием потерь от коррозии, так и резко возросшими требованиями технического прогресса. Наибольший ущерб металлическим изделиям наносит кислотная коррозия. Исследовано большое число органических соединений в качестве ингибиторов кислотной коррозии. У наиболее эффективных ингибиторов наблюдается одна общая черта: в их состав входят азот, фосфор, сера. Наиболее применимые ингибиторы кислотной коррозии – это алифатические амины, пиридины, четвертичные соли аммония, сульфония, фосфония, причем высокие защитные свойства, как правило, проявляют соли с объемными противоионами. В настоящей работе синтезированы четвертичные соли N-алкилпиридиния с различными объемными анионами, и изучена их ингибирующая способность в разбавленных и концентрированных растворах серной кислоты при защите стали-3 (0,14% С; 0,55% Mn; 0,05% Cr). Концентрация ингибитора во всех случаях составляла 0,025% масс., метод исследования – гравиметрический, температура 25°C, время испытаний 240 час. Исследованные соединения – соли N-алкилпиридиния получали кватернизацией пиридина нонил- и цетилиодидами при кипячении в ацетоне в течение 2 – 3 часов. Продукты реакции выпадали в виде кристаллических осадков; состав и строение подтверждены данными элементного анализа и ИК-спектроскопии. Тетрафторбораты, гексафторфосфаты и тетрабораты N-алкилпиридиния получены метатезисом в среде ацетона. Результаты коррозионных испытаний позволяют сделать вывод, что исследованные ингибиторы более эффективны в концентрированных растворах серной кислоты, чем в разбавленных, причем тетрафторфосфаты превосходят по эффективности даже иодиды N-алкилпиридиния.

Я.В. Андрианова

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА САМООРГАНИЗАЦИИ В ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОМ РАСТВОРЕ И ГИДРОГЕЛЯХ НА ЕГО ОСНОВЕ

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

В настоящее время проявляется повышенный интерес к исследованию процессов самосборки супрамолекулярных структур в растворах. Особое место среди указанных объектов занимают низкоконцентрированные гели. Одной из таких систем, является изучаемый нами гидрогель, который обладает супрамолекулярным строением. Данный гидрогель образуется в результате взаимодействия простейшей аминокислоты L-цистеина, нитрата серебра и электролита – инициатора гелеобразования. Получаемые гидрогели обладают тиксотропными свойствами. Целью работы являлось изучение процессов созревания цистеин-серебряного раствора (ЦСР) и гелеобразования под воздействием солей металлов (хлориды, вольфрамат и молибдат).

ЦСР получали при смешивании водных растворов исходных компонентов с концентрацией 0,03 М при молярном соотношении от 1,0:1,0 до 1,0:1,4. В качестве электролитов использовали хлориды (ионы) следующих металлов: Na^+ , Co^{+2} , Ni^{+2} , Mg^{+2} , Mn^{+2} , Zn^{2+} , Cu^{2+} , а также NaWO_4 и NaMo_4 . Прочность получаемых гидрогелей определяли по балльной шкале прочности в диапазоне от 0 до 5 баллов. Более точные данные для вязкости гелей получали на вибрационном лепестковом вискозиметре SV-10. Структурные исследования ЦСР и гидрогелей осуществляли методом динамического светорассеяния (ДСР) на приборе «Zetasizer NanoZS» фирмы Malvern.

В результате установлено, что при увеличении концентрации нитрата серебра в ЦСР по отношению к L-цистеину наблюдается снижение вязкости системы. На характер и прочность геля-сетки существенное влияние оказывает тип вводимого электролита (выше прочность для хлоридов и сульфатов, ниже – для вольфрамата и молибдата). Уменьшение относительной вязкости системы при увеличении концентрации Ag^+ , хорошо коррелируют с данными, полученными методом ДСР, из которых следует, что размер частиц при этом уменьшается. Введение солей MeCl и MeSO_4 в ЦСР способствует формированию более прочной пространственной геля-сетки.

Таким образом, на данном этапе исследований установлено оптимальное соотношение концентраций цистеина и нитрата серебра в ЦСР, необходимое для образования наиболее прочных гелей. Методом вибрационной вискозиметрии проведено сравнение влияния электролитов на значение вязкости получаемых гидрогелей.

D-ГЛЮКОНОВАЯ КИСЛОТА – ОСНОВНОЙ ПРОДУКТ ГЕТЕРОГЕННО-КАТАЛИТИЧЕСКОГО ОКИСЛЕНИЯ D-ГЛЮКОЗЫ

Руководитель Э.М. Сульман

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

D-глюконовая кислота и ее соли являются важными промежуточными продуктами пищевой и фармацевтической промышленности. Помимо ферментативного окисления D-глюкозы, D-глюконовую кислоту получают также каталитическим и электрохимическим окислением.

Однако существующие технологии получения D-глюконовой кислоты зачастую имеют серьезные недостатки. При гетерогенном каталитическом окислении применение палладийсодержащих катализаторов нанесенных на оксидный носитель Al_2O_3 обеспечивает низкую степень конверсии и невысокую скорость процесса; применение ряда катализаторов содержащих висмут может привести к загрязнению окружающей среды. При использовании золотого катализатора на углеродной подложке вместе с понижением рН возможно постепенное выщелачивание металла.

Таким образом, интенсификация процесса синтеза D-глюконовой кислоты путем снижения энергозатрат, уменьшения количества вредных выбросов и увеличения выхода целевого продукта посредством использования эффективного и стабильного катализатора является главной задачей, при этом немаловажную роль играет выбор носителя.

Наиболее перспективными подложками могут служить полимерные матрицы, такие как сверхсшитый полистирол. Его сетка обеспечивает монодисперсное распределение металлочастиц в объеме носителя, что способствует увеличению активности и стабильности катализатора, а также возрастанию скорости.

Селективное окисление D-глюкозы проводилось в водном растворе при атмосферном давлении и барботировании реакционной массы чистым кислородом в присутствии подщелачивающего агента и золото-содержащего катализатора (в качестве носителя был использован сверхсшитый полистрирол). Полученный продукт отличается высокой степенью чистоты, степень конверсии D-глюкозы составила 98%, а селективность процесса синтеза D-глюконовой кислоты – 98% (время реакции 30 минут).

Г.Е. Бабенко

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА КАТАЛИТИЧЕСКОЙ ГАЗИФИКАЦИИ ОТХОДОВ БИОМАССЫ

Руководитель: Ю.В. Луговой

Тверской государственный технический университет

Кафедра биотехнологии и химии

Процесс каталитической газификации биомассы является эффективным способом получения тепловой и электрической энергии из возобновляемого сырья. Широкое внедрение технологий газификации позволит решить проблему очистки значительных территорий от лесосечных отходов и отходов деревообработки с одновременным увеличением энергоэффективности процессов переработки [1].

Известно [1], что щелочные катализаторы (карбонаты натрия, калия и др.) повышают выход синтез-газа при газификации биомассы водяным паром в интервале температур 550-750°C. Соли переходных металлов, хотя и проявляют высокую активность на начальной стадии реакции, дезактивируются в ходе процесса. Поэтому актуальной задачей является поиск недорогих, стабильных и активных катализаторов процесса газификации биомассы.

Целью данной работы является исследование процесса каталитической газификации отходов биомассы с получением горючих газов.

Результаты и обсуждение

Изучение процесса каталитической газификации проводилось в реакторе полупериодического действия с неподвижным слоем с использованием воздушного дутья в присутствии оксидов кобальта, марганца и хрома. В результате проведенных экспериментов были подобраны оптимальные условия данного процесса: температура – 650°C, скорость воздушного дутья – 0,7 л/мин и катализатор – Cr₂O₃, содержание катализатора на носителе – 4% (масс.). В результате ТГА были получены семейства кривых зависимости массы образца от температуры при разных скоростях нагрева. Расчет показал, что при использовании катализатора Cr₂O₃ в процессе газификации древесных отходов происходит снижение энергии активации на 60 кДж/моль.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кузнецов Б.Н. Каталитическая химия растительной биомассы // Соросовский общеобразовательный журнал. 1996. №12. С. 47–55.

П.О. Бабуркин

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЯ В ЦИСТЕИН СЕРЕБРЯНОМ РАСТВОРЕ

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доц. Комаров П.В.
Тверской государственный университет
Кафедра теоретической физики

Гели широко используются в медицине, бытовой химии, пищевой промышленности и косметике. Изучения механизмов гелеобразования является актуальной задачей с точки зрения разработки новых и совершенствования известных гелеобразующих веществ. Наибольший интерес представляют низкомолекулярные вещества, которые способны вызывать структурообразование при низких концентрациях. Такие системы являются удобными объектами для понимания процессов управляемой самосборки молекулярных систем. Данная работа является продолжением наших исследований процессов гелеобразования в цистеин серебряном растворе (ЦСР) методами компьютерной химии.

Для изучения формирования пространственной геле-сетки используется крупнозернистая модель ЦСР разработанная на основе метода диссипативной динамики частиц (ДДЧ). ДДЧ позволяет использовать достаточно большие значения шага по времени при интегрировании уравнений движения. Благодаря этому можно изучать большие системы из нескольких сотен тысяч частиц, что обычно недоступно для классических методов молекулярной динамики из-за огромного количества вычислений.

В докладе обсуждается фазовая диаграмма поведения модели ЦСР при изменении двух главных параметров выполненных расчетов – концентрации меркаптида серебра (МС) и параметров взаимодействия силовых центров цвиттерионов МС с растворителем.

Автор выражает благодарность МСЦ РАН за предоставление вычислительных ресурсов кластера MBS-100k.

И.А. Барабонова

ТЕХНОЛОГИЯ УПРОЧНЕНИЯ БЫСТРОРЕЖУЩЕЙ СТАЛИ

Руководитель доцент Л.Е. Афанасьева

Тверской государственной технической университет

Кафедра технологии металлов и материаловедения

При газолазерной резке быстрорежущей стали образуется зона термического влияния, где происходит высокоскоростная закалка поверхностных слоев. В зоне оплавления и зоне закалки из твердой фазы твердые растворы мартенсит и аустенит насыщены углеродом и легирующими компонентами за счет растворения карбидных фаз. В этих зонах может содержаться повышенное количество остаточного аустенита. В переходной зоне, где нагрев ниже точки A_{c1} в предварительно закаленной или отпущенной стали возможно снижение микротвердости и разупрочнение мартенсита, связанное с образованием структур отпуска. Актуальными являются исследования по поиску возможностей снижения количества остаточного аустенита в поверхностных слоях зоны термического влияния и при этом не подвергать дальнейшему разупрочнению переходную зону.

Цель работы – исследовать фазовые превращения в быстрорежущей стали после газолазерной резки, обработки холодом и лазерного отпуска и разработать технологию упрочнения инструмента, позволяющую повысить его эксплуатационную стойкость.

В работе изучено строение и фазовый состав зоны термического влияния при газолазерной резке. Показано, что зона термического влияния имеет слоистое строение, содержание остаточного аустенита в зоне закалки 60 %. По данным рентгеноструктурного фазового анализа обработка холодом в жидком азоте снижает количество остаточного аустенита до 7–9 %. Рассчитаны режимы и экспериментально реализовано проведение после газолазерной резки и обработки холодом лазерного отпуска быстрорежущей стали. Показано, что после отпуска микротвердость в зоне закалки возросла на 200–250 МПа, что свидетельствует о прохождении процессов дисперсионного твердения. Предложена новая технология упрочнения быстрорежущей стали лазерной и криогенной обработкой. Производственные испытания опытных образцов пуансонов и матриц для координатно-револьверных прессов, упрочненных по новой технологии, показали повышение эксплуатационной стойкости в 1,5 раза.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Барабонова И.А., Афанасьева Л.Е., Ботянов Е.В., Раткевич Г.В. // Упрочняющие технологии и покрытия. 2013. № 9. С. 13–16.

Н.Е. Брякина, В.С. Явсенков

ОТРАБОТКА РЕЦЕПТУР ВОДОДИСПЕРСИОННЫХ ЛАКОКРАСОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ВОДОРАЗБАВЛЯЕМЫМИ ОЛИГОМЕРАМИ

Руководитель: Ю.Н. Смирнов

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии полимерных материалов

Объектом исследования являются вододисперсионные лакокрасочные материалы (ВР ЛКМ), модифицированные водоразбавляемыми олигомерами (ВРО).

Цель работы – разработка рецептур и технологии получения ВР ЛКМ, для нанесения по различным подложкам, модифицированных ВРО с пониженной температурой отверждения.

При разработке рецептур и технологии изготовления ВР ЛКМ проводились исследования водной дисперсии бутадиенстирольного сополимера, совмещенной с сульфометилированными продуктами конденсации полиоксибензолов, в присутствии ряда функциональных добавок.

Оптимизация моделей рецептур осуществлялась методом математического планирования. Проведены сравнительные испытания защитно-декоративных свойств покрытий на основе модельных композиций. При исследовании применялись методы химического и физико-химического анализа и стандартные испытания свойств ЛКМ и покрытий на их основе.

Разработаны модельные рецептуры и технология изготовления ВР ЛКМ, на основе латекса БС-65 ГП, модифицированного сульфометилированными продуктами конденсации полиоксибензолов, подобран широкий спектр функциональных добавок.

Предложена ВД грунтовка для комплексных покрытий с использованием традиционных эмалей, предназначенная для окраски металлоконструкций, сельскохозяйственной техники и других металлических изделий, эксплуатирующихся в атмосферных условиях.

Выданы рекомендации по применению ВРО – модификаторов (стабилизаторов) латекса, оценке коррозионной активности компонентов ВР ЛКМ.

О.А. Булюкина

ВЛИЯНИЕ АГРОТЕХНОЛОГИЙ НА ПРОДУКТИВНОСТЬ СОРТОВ ГОЛОЗЕРНОГО ОВСА

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра общего земледелия и растениеводства

Быстрые темпы развития современной науки и промышленности требуют от сельхозпроизводителей внедрение новых, более перспективных агротехнологий с применением новых высокотехнологичных препаратов с целью получения высоких урожаев более высокого качества.

В этой связи нами в 2012–2013гг. были проведены полевые трехфакторные опыты по следующей схеме: А-сорта: А₁– Вятский, А₂– Першерон; В– агротехнологии: В₁– экологически чистая, без удобрения, В₂– экологически безопасная, удобрения в расчете на урожай 3т/га, В₃– интенсивная, удобрения в расчете на урожай 4т/га; С– препараты для некорневых подкормок: С₁– без подкормки, С₂– Агрогумат Экстра, 1%-ный раствор (АЭ), С₃– Макс-Супергумат, 1%-ный раствор (МСГ), С₄– Аквадон-Микро, 1% раствор (АМ), С₅– 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 на обоих сортах увеличивают сохранность (в 1,1–1,3 раза) и общую выживаемость (в 1,1–1,2раза); 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 повышают АгБион-2 и Аквадон-Микро, по экологически безопасной – АгБион-2 и МАКС Супер Гумат, по интенсивной – преимущество имеет АгБион-2; 3 – использование всех препаратов для некорневых подкормок повышает густоту продуктивного стеблестоя. По экологически чистой технологии наибольшее количество продуктивных побегов сформировалось в варианте с АгБион-2, по экологически безопасной - т МАКС Супер Гумат, по интенсивной – АгБион-2 (Вятский) и МАКС Супер Гумат (Першерон); 4- более высокую урожайность в среднем за 2 года, сформировал сорт Першерон (3,39т/га) при возделывании его по всем изучаемым агротехнологиям. Прибавки к сорту Вятский составили: по экологически чистой технологии 0,15т/га (10,0%), по экологически безопасной – 0,33т/га (14,6%), по интенсивной – 0,35т/га (12,5%); 5 – все изучаемые препараты оказали положительный эффект на экономические показатели. Так, наибольший условно чистый доход, в среднем по агротехнологиям, получен от применения по сорту Вятский МСГ – 21,21 тыс.руб./га, по сорту Першерон АгБион-2 – 19,03 тыс.руб./га с уровнем рентабельности соответственно по сортам – 83,07 и 71,03 %.

О.В. Валькова

ИЗУЧЕНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА РАСТЕНИЙ-ГИДРОФИТОВ
МЕТОДАМИ ОПТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Руководитель: Пахомов В.М.

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Развитие промышленных предприятий и увеличение автотранспортных средств привели к серьезным нарушениям природных ландшафтов. Загрязнители попадают в окружающую среду и поглощаются растениями, многие из которых используются человеком в приготовлении лекарственных препаратов, кормов для животных в сельском хозяйстве.

Целью работы является изучение химического состава растений-гидрофитов методами оптической спектроскопии. Исследуемые виды могут произрастать как в чистых, так и загрязненных местах обитания, они интенсивно поглощают биогенные элементы, минеральные и органические вещества, выступают в роли минерализатора и детоксиканта, а также биофильтра пестицидов и нефтепродуктов. Поскольку под действием антропогенного загрязнения окружающей среды в растениях-гидрофитах могут происходить изменения на химическом и анатомическом уровнях, то эффективными методами изучения этих изменений являются Фурье-ИК спектроскопия и РЭМ.

Объектами исследования являются образцы Ряски малой (*Létna* L.), Элодеи канадской (*Elodéa canadensis* L.) и Роголистника темно-зеленого (*Ceratophyllum demersum* L.), принадлежавших группе растений-гидрофитов. Сбор вышеупомянутых образцов производился в местах с различной антропогенной нагрузкой Тверского региона. Запись ИК спектров осуществляли на Фурье-ИК спектрометре «Equinox-55» фирмы Брукер. Образцы готовили в виде таблеток с KBr

Основные изменения в ИК спектре Ряски малой наблюдаются на частотах 1649, 1542, 875, 837 и 713 см^{-1} , что соответствует колебаниям групп Амид I ($\nu_{\text{C=O}}$), Амид II ($\nu_{\text{O-C-N}}$), сульфатной группы $(\text{RO})_2\text{SO}_2$ и колебаниям $\nu_{\text{C-S-C}}$. Изменения в ИК спектре Роголистника темно-зеленого наблюдаются на частотах 1644, 1438, 1370, 1320, 876 и 777 см^{-1} , что соответствует колебаниям групп Амид I ($\nu_{\text{C=O}}$), CH_2 и N-H ($\text{CH}_2, \delta_{\text{N-H}}$), $\delta(\text{OH})$, (COO) , (ν_{ASO_2}) , $(\text{RO})_2\text{SO}_2$, R-SO₂-R (ν_{SO_2}), сульфоны. Основные изменения в ИК спектре Элодеи канадской наблюдаются на частотах 1654, 1416, 1384, 1152, 533 см^{-1} , что соответствует колебаниям групп Амид I ($\nu_{\text{C=O}}$), CH_2 и OH, (CH_2, OH), группы алкилнитратов ($\nu_{\text{s-O-NO}_2}$), C-O-C, ($\nu_{\text{C-O-C}}$), R-SO₂-R (ν_{SO_2}), сульфоны. Данные изменения свидетельствуют о включении серосодержащих и азотосодержащих соединений в ткани растений и их большом количестве в тканях растений собранных в «загрязненной» зоне.

А.С. Васильев, Н.В. Бирюкова

ЭФФЕКТИВНОСТЬ РЕГУЛЯТОРОВ РОСТА ПРИ ВОЗДЕЛЫВАНИИ ОДНОЛЕТНИХ БОБОВО-МЯТЛИКОВЫХ СМЕСЕЙ НА ЗЕРНОСЕНАЖ

Руководитель: В.А. Тюлин

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра ботаники и луговых экосистем

Главным фактором успешного животноводства является стабильная кормовая база, основанная на высокой обеспеченности кормами местного производства, перспективным источником при получении которых являются смешанные посевы однолетних полевых культур. Однако продуктивность таких агроценозов в условиях низкого эффективного плодородия дерново-подзолистых почв остается невысокой. Применение удобрений не окупается прибавкой урожая и способствует росту себестоимости продукции. Альтернативным и более экономичным приемом в таких условиях являются некорневые подкормки высокотехнологичными препаратами.

В связи с этим нами была поставлена цель – изучить влияние некорневых подкормок современными рострегулирующими веществами на продуктивность разных видов вико-ячменно-овсяных агроценозов. Для этого нами в 2012 - 2013 гг. были проведены комплексные исследования в 2-х факторном полевом опыте на дерново-среднеподзолистой остаточной карбонатной глееватой почве на морене, супесчаной по гранулометрическому составу. Факторы опыта: А – степень насыщения смеси компонентами: 1) овес – чистый посев, 2) вика + ячмень + овес (1,25+1+0,75); 3) вика + ячмень + овес (0,75+1,25+1); 4) вика + ячмень + овес (1+0,75+1,25); 5) вика + ячмень + овес (1+1+1); В – вид некорневой подкормки: 1) без подкормки, 2) гуминовое удобрение Гумат калия, 3) микробиологический препарат Байкал ЭМ1, 4) наноматериал AgБион-2.

В результате исследований выявлено, что наибольшей продуктивностью характеризуются трехкомпонентные вико-ячменно-овсяные смеси, при конструировании которых заложен принцип соотношения 0,75:1,0:1,25 в разных вариациях составляющих. Такие агроценозы обеспечивают урожайность зерносенажной массы до 18,52 т/га при уровне рентабельности производства до 165,1%.

Из рострегулирующих веществ более целесообразны некорневые подкормки смешанных посевов Гуматом калия и Байкалом ЭМ1, позволяющие получать урожайность моносортов от 17,31 до 19,24 т/га, условно чистый доход от 15,84 до 18,23 тыс.руб./га при уровне рентабельности производства от 152,9 до 174,1%.

ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКИЙ ОКИСЛИТЕЛЬНО-
ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫЙ СЕНСОР С «ЭФФЕКТОМ ПАМЯТИ»

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Степень окисленности полианилина (ПАНи) определяется соотношением эмеральдина и лейкоэмеральдина. Если пленка ПАНи находится на электропроводной подложке, то измерив потенциал этого электрода относительно электрода сравнения в среде соляной кислоты можно определить степень окисленности. Это позволит изготовить потенциометрический окислительно-восстановительный сенсор. Электропроводные полимеры практически на растворимы в обычных органических растворителях, поэтому для осаждения пленок на электропроводную подложку (платина) мы использовали метод ЦВА.

Изготовленные таким образом электроды были использованы как ОВ сенсоры. Для изменения степени окисленности ОВ сенсора они погружались в растворы окислителей и восстановителей с известным значением окислительно-восстановительного потенциала. Все электроды обратимо изменяли степень окисленности, что сказывалось на их потенциале.

Поскольку электропроводные полимеры теряют свои электропроводящие свойства при $pH > 4$, все исследования мы проводили при $pH = 2$. После выдержки электродов в среде с заданным значением потенциала в специальных буферных растворах (время экспозиции около 5 минут), мы их помещали в 0,01 М раствор соляной кислоты и измеряли их потенциал. В области $E 0,2 - 0,8$ В наблюдается линейная зависимость потенциала отклика полученного электрода, это можно объяснить тем, что именно в этой области существует две формы электропроводных полимеров: эмеральдин и лейкоэмеральдин, соотношение которых и определяет потенциал экспериментальных электродов.

Интересно отметить, что значение потенциала экспериментальных электродов, которые они приобрели, находясь в буферном растворе, они «запоминали» и сохраняли в течение длительного времени. Таким образом, становится возможным использование данного типа электродов после процесса контакта ОВ сенсора с анализируемым объектом. На наш взгляд это актуально для определенных исследований в полевых условиях, в этом случае имея набор сенсоров и помещая их в измерительную среду мы тем самым «запишем» значение ОВ потенциала, которое можно будет измерить («считать») в химической лаборатории.

С.А. Васильев

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ АТОМИСТИЧЕСКОГО КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНОСИСТЕМ

Руководитель В.М. Самсонов

Тверской государственный 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 наноэлектронике. Экспериментальные исследования наночастиц и наносистем являются, как правило, затруднительными и дорогостоящими, а их результаты в ряде случаев вызывают вполне резонное сомнение. В связи с этим особую значимость приобретает применение альтернативного подхода – компьютерного моделирования, который позволяет существенно сэкономить финансовые и интеллектуальные ресурсы. К настоящему времени возможно осуществление не только компьютерного моделирования наночастиц и наносистем, но и ряда существующих и перспективных технологических процессов.

Это делает актуальным создание собственной компьютерной программы для атомистического моделирования наносистем с ее последующей коммерциализацией. Планируется также создание и распространение ряда вспомогательных, но важных компьютерных программ для обработки результатов компьютерных экспериментов.

Результаты, полученные с использованием уже имеющейся зарегистрированной программы-прототипа (Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013610101 от 9 января 2013 года), достаточно хорошо апробированы и представлены в ряде статей и презентаций на ряде российских и международных конференций, в том числе с участием докладчика [1]. Кандидатская диссертация А.Г. Бембеля [2], подготовленная под руководством научного руководителя Самсонова В.М., была успешно защищена в 2012 г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Самсонов В.М., Сдобняков Н.Ю., Бембель А.Г., Соколов Д.Н., Комаров П.В., Васильев С.А., Шакуло О.В. // Вестник МИФИ, 2013. Т. 2, № 4, С. 448–451.
- Бембель А.Г. Дис...канд. физ.-мат. наук, Тверь, Тверской государственный университет, 2012.

О.В. Виноградов

ТВЕРДОТЕЛЬНЫЙ ИОНОСЕЛЕКТИВНЫЙ ЭЛЕКТРОД НА ИОН ХРОМА (III)

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Известно, что ионометрический контроль катионов Cr^{3+} затруднён из-за отсутствия надёжного ионоселективного электрода (ИСЭ). В литературе встречаются отдельные работы, связанные с изготовлением мембранного ИСЭ с жидкостным внутренним электродом сравнения. Известно, 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 твердоконтактного ИСЭ на хром (III) с полианилиновым трансдюсером.

Для ИСЭ мы использовали ионообменную мембрану, приготовленную по классической схеме. Мембрана содержала диоктилфталат 55%, поливинилхлорид 40% и электродактивное вещество 5% – 8-хинолиндитиокарбоксилат хрома (III). Для стабилизации потенциала на границе ионоселективная мембрана-токоотвод (с электронной проводимостью) мы использовали трансдюсер на основе полианилина (ПАНИ). Плёнка трансдюсера была получена электрохимическим методом циклической вольтамперометрии (ЦВА). Изготовленный электрод имел широкий диапазон линейности электродной функции в интервале: 1-6 pC. Крутизна электродной функции составила 18,3 мВ/pC. Время отклика не превышало 30 секунд, при этом значения потенциала были стабильными. Электрод сохранял работоспособность в интервале температур 15–65⁰C. Изменение температуры в указанном интервале влияло на крутизну электродной функции в соответствии с теоретическими значениями. Рабочий диапазон pH: 3,5–5,5. Ионометрическому анализу практически не мешают ионы цинка, кальция, магния и калия. Изготовленный электрод был использован при анализе модельных смесей, содержащих Cr^{3+} , при этом взятые и найденные значения находились в хорошем соответствии. Относительная погрешность не превышала 10%.

К.Ю. Володько

СОДЕРЖАНИЕ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ В КОМПОСТАХ С УЧАСТИЕМ
ОСВ г. ТВЕРИ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Урбанизация городов и поселков городского типа приводит к большому накоплению в них осадков сточных вод (ОСВ), получаемых в процессе очистки сточных канализационных вод. Химический состав таких продуктов свидетельствует, что в их составе содержится значительное количество питательных веществ, используемых растениями в процессе их вегетации. Поэтому ОСВ целесообразно использовать в качестве удобрений. Вместе с тем в их составе могут находиться тяжелые металлы, количество которых иногда превышает допустимые пределы. Для снижения их концентрации на единицу массы удобрения, ОСВ подвергают компостированию с органическими наполнителями, типа торфа, опилок, сапропеля, измельченной соломы и д.

Мы исследовали содержание тяжелых металлов в компосте, состоящем из ОСВ и древесных опилок с добавлением биологически активных материалов ЭМ и птичьего помета., как 1:3. Полученные данные представлены в таблице.

Содержание ТМ в компостах на основе ОСВ и древесных опилок с биодобавками, через 2 месяца после закладки

Показатели	Единицы измерения	Состав компостов			
		ОСВ	ОСВ+опилки	ОСВ:опилки +ЭМ	ОСВ:опилки + помет
Свинец	мг/кг а.с.в.	56,39	8,7	8,9	9,0
Кадмий	-//-	2,22	0,42	0,45	0,52
Цинк	-//-	477,0	105,8	112,7	118,5
Медь	-//-	212,9	36,4	36,5	38,8
Никель	-//-	24,0	4,7	5,0	5,7
Хром	-//-	39,6	7,0	7,4	8,1
Марганец	-//-	246,7	101,1	101,0	106,4
Мышьяк	-//-	2,22	0,2	0,21	0,22
Ртуть	-//-	0,90	0,18	0,18	0,19

ВОЗДЕЙСТВИЕ УЛЬТРАЗВУКА НА ДЕСТРУКЦИЮ БИОПОЛИМЕРОВ

Руководитель О.В. Манаенков

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Деструкция полимеров – это процессы, протекающие с разрывом химических связей в макромолекулах и приводящие к уменьшению степени полимеризации или молекулярной массы полимера без изменения его химического состава [1].

Объектами исследования в настоящей работе являлись биополимеры животного (хитозан) и растительного происхождения (альгинат натрия, целлюлоза).

Ультразвуковые исследования открывают новые возможности в создании новых веществ, материалов с новыми свойствами. В ультразвуковом диапазоне частот сравнительно легко получить направленное излучение; ультразвуковые колебания хорошо поддаются фокусировке, в результате чего повышается интенсивность ультразвуковых колебаний в определенных зонах воздействия [2].

Целью данной работы является исследование возможности использования низкочастотного ультразвука для деструкции макромолекул биополимеров.

Результаты и обсуждения: были рассмотрены существующие методы деструкции биополимеров, приводящие к разрыву химических связей в макромолекулах и приводящие к уменьшению степени полимеризации или молекулярной массы полимера. Знание механизма и закономерностей деструкции дает возможность усилить или ослабить ее в зависимости от поставленной задачи.

Экспериментально отработаны методики определения средневязкостной молекулярной массы хитозана и альгината натрия по стандартной методике с использованием уравнения Марка-Куна-Хаувинка и степени полимеризации целлюлозы, основанной на определении содержания скрытых концевых альдегидных групп по йодному числу.

Определены оптимальные параметры интенсивности ультразвукового воздействия, время обработки и концентрации растворов, при которых происходит деструкция биополимеров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1 Грасси Н. химия процессов деструкции полимеров / Н. Грасси. - М.: Издатинлит, 1959.

2 Балдаев. Р. Применения ультразвука / Р. Балдаев, В. Раджендран – М.: Издательство Техносфера, Паланичами, 2006. – 576 с.

ЭНЕРГИИ РАЗРЫВА СВЯЗИ В ТИОСПИРТАХ И ТИОЭФИРАХ

Руководитель М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Энергия разрыва связи – одна из характеристик обуславливающая стабильность молекул и вещества в целом, необходимая для решения ряда задач теоретической и прикладной химии. Экспериментальные же сведения по энергиям связей скудны и порой разноречивы.

Поэтому развитие расчетных методов определения, предсказания физико-химических свойств молекул и получение с помощью этих методов новой информации является в настоящее время актуальной задачей.

Целью настоящей работы является – проведение анализа энергии разрыва связи в тиоспиртах и тиоэфирах.

Для достижения поставленной цели в работе были решены следующие задачи:

- проведена оценка состояния численных данных по энергиям разрыва связи в рассматриваемых соединениях,
- выявлены определённые закономерности связывающие энергии разрыва связей со строением тиоэфиров и тиоспиртов,
- проведены численные расчёты, согласующиеся с экспериментом,
- построены и проанализированы графические зависимости “энергия разрыва связи – число заместителей”.

Найдено, что данные зависимости в общем случае нелинейны, однако линии замещения на одну и ту же группу симбатны между собой.

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

Также в работе показано, что численные расчеты (там, где можно сделать сопоставления) согласуются с экспериментом.

А.Н. Голосова, Р.Е. Григорьев, А.В. Коренева

ДЕЙСТВИЕ АГРОГУМАТА КАЛИЯ И КОМПЛЕКСОНАТОВ НА АГРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДЕРНОВО-ПОДЗОЛИСТОЙ ЛЕГКОСУГЛИНИСТОЙ ПОЧВЫ

Руководитель О.В.Смирнова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Дерново-подзолистые почвы отличаются невысоким уровнем плодородия, низкой поглотительной способностью, поэтому для обеспечения оптимального содержания подвижных форм элементов питания применяются различные виды и дозы органических удобрений.

В условиях мелкоделяночного опыта было изучено удобрительное действие агрогумата калия и комплексонатов на агрохимические свойства дерново-подзолистой легкосуглинистой почвы и урожайность столовой свеклы сорта «Красный шар».

Исследования проводились на экспериментальном участке кафедры агрохимии, почвоведения и агроэкологии Тверской ГСХА. Общая площадь участка – 150 м², площадь одной делянки – 2 м². Повторность опыта трехкратная, расположение делянок - рендомизированное.

Схема опыта включала варианты с применением агрогумата калия (300 кг/га) и обработкой семян растворами Н₃ВО₃, комплексонами (ЭДТУК, ЭДДЯК, ИДЯК) или комплексонатами (В-ЭДТУК, В-ЭДДЯК, В-ИДЯК), а также варианты с одновременным внесением агрогумата калия и минеральных удобрений.

Наибольшим содержанием нитратов отличались варианты с агрогуматом и аммиачной селитрой (N₆₀), наименьшим – вариант без использования агрогумата калия. Максимальные значения Р₂О₅ получены на фоне агрогуматов с Р₆₀ и агрогуматов с обработкой семян и растений В-ЭДДЯК, а обменного калия - в почве с агрогуматами и хлористым калием (К₆₀), а также на варианте с агрогуматами и комплексонатами.

Таким образом, на протяжении всего периода проведения исследований максимальное содержание подвижных форм азота, фосфора и калия установлено в почве с агрогуматами и минеральными удобрениями. Следует отметить, что внесение в почву агрогуматов и применение комплексонатов, способствовало увеличению подвижных форм элементов питания по отношению к варианту с агрогуматом (без обработки комплексонатами семян и растений).

Наибольшая урожайность корнеплодов столовой свеклы получена на вариантах с агрогуматами и минеральными удобрениями (в среднем от 5,6 кг/м² до 6,5 кг/м²), а также при обработке семян и растений комплексонатом В-ЭДДЯК(6,7 кг/м²).

А. Н. Грачев, Д. С. Кутузов

ИЗМЕРИТЕЛЬНО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО УЧЕТА РАСХОДА ПРИРОДНОГО ГАЗА

Руководитель: В. М. Горохов

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

Измерительно-вычислительный комплекс (ИВК) – это система автоматизации, осуществляющая измерение сигналов от первичных датчиков, определение физических величин с последующим расчетом по ним необходимых параметров технологического процесса, формирование, хранение и предоставление отчетов по этим параметрам.

В нефтегазовой промышленности ИВК применяются для измерения и учета количества и показателей качества жидкостей (нефтепродуктов) и газов. Следствием технологической сложности процессов добычи, подготовки и транспортировки углеводородного сырья является то, что ИВК для учета нефти и газа представляют собой сложные и многофункциональные, а потому дорогостоящие приборы, выполненные на базе промышленных компьютеров, способные в режиме реального времени собирать и обрабатывать информацию сразу с множества измерительных линий, на каждой из которых размещается по несколько датчиков.

В настоящей работе была поставлена задача: разработать измерительно-вычислительный комплекс для автоматизированного учета расхода природного газа на отдельной измерительной линии.

Актуальность задачи связана с развитием класса узкоспециализированных ИВК, отличающихся простотой конструкции и низкой стоимостью, которые можно использовать в тех случаях, где функциональность стандартных ИВК оказывается избыточной, а потому их приобретение становится экономически нецелесообразным.

Эта задача была решена нами на кафедре общей физики ТвГУ с использованием оборудования и консультаций специалистов Тверского филиала ООО «Корпорация ИМС» – «ИМС-Тверь».

Итогом нашей работы стало создание, калибровка и тестирование действующего прототипа ИВК для автоматизированного учета расхода природного газа на отдельной измерительной линии, способного с помощью токовых датчиков стандарта 4 – 20 мА измерять первичные параметры газа: температуру, давление и объемный расход при рабочих условиях; в соответствии с ГОСТ рассчитывать по ним объемный расход при стандартных условиях и массовый расход газа; формировать, хранить и отображать оперативные, сменные и суточные отчеты по расходам газа.

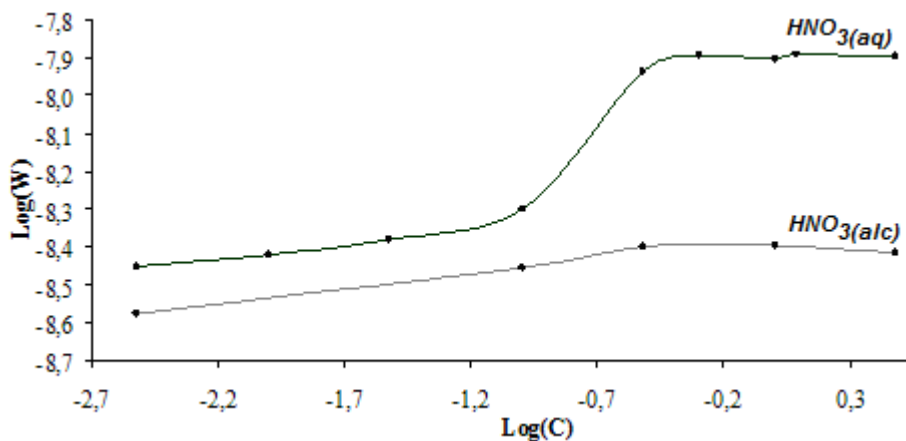
ВЛИЯНИЕ ГИДРАТАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ СУЛЬФИДА НИКЕЛЯ (II) НА СКОРОСТЬ ЕГО КИСЛОТНОГО РАСТВОРЕНИЯ

Руководитель В.И. Луцик

Тверской государственный технический университет
Кафедра химии

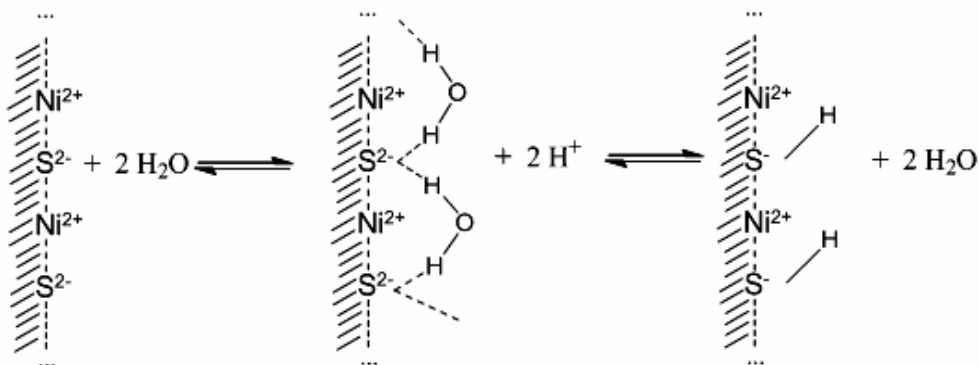
С целью определения деталей механизма процесса растворения сульфида никеля (миллерита) в азотной кислоте изучена зависимость удельной скорости перехода никеля в раствор W , моль/дм²·с от концентрации кислоты в водном и этанольном растворе (рис.1).

В области относительно высоких значений концентраций кислоты при $C = 1$ моль/дм³ скорость растворения в этанольном растворе равна $W = 4,01 \cdot 10^{-9}$ моль·дм⁻²·с⁻¹, что в 3 раза ниже, чем в водном растворе, для которого $W = 1,25 \cdot 10^{-8}$ моль·дм⁻²·с⁻¹.



Зависимость удельной скорости растворения сульфида никеля от концентрации азотной кислоты

Проведенный эксперимент показывает, что необходимой стадией процесса кислотного растворения сульфида никеля (II) является гидратация его поверхности. Последующая стадия гидролитического растворения миллерита в азотной кислоте – протонизация гидратированной поверхности сульфида по схеме:



А.А. Гурин

ПРОДУКТИВНОСТЬ ОЗИМОЙ ТРИТИКАЛЕ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ В ТЕХНОЛОГИИ ВОЗДЕЛЫВАНИЯ ВЫСОКОТЕХНОЛОГИЧНЫХ ПРЕПАРАТОВ

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра общего земледелия и растениеводства

В полевом многофакторном опыте исследовано (2012 / 2013 г.) влияние высокотехнологичных препаратов (наносеребра AgБион - 2), гуминовых и микроэлементных удобрений (Макс – Супер Гумат, Аквадон Микро, Агрогумат Экстра, Гумат «Плодородие») при использовании их для опрыскивания вегетирующих растений в разные сроки (осенью до ухода в зиму, весной после отрастания и в фазу выхода в трубку) на 2-х фонах минерального питания (1 - без удобрения, 2 – расчетная доза НРК на урожай в 35 ц/га.). Опыт закладывали на хорошо окультуренной дерновосреднеподзолистой остаточной карбонатной глееватой почве, на морене, супесчаной по гранулометрическому составу с содержанием гумуса 1,89 % (по Тюрину) $N_{л.г.}$ – 60 мг / кг (по Корнфилду), P_2O_5 – 358 и K_2O – 86 мг / кг (по Кирсанову), $pH_{сол.}$ – 6,84. Объект исследований – сорт Валентин (селекции РГАУ-МСХА имени К.А. Тимирязева).

Агрометеорологические условия 2012/2013 г. были неблагоприятны для перезимовки озимой тритикале вследствие многоснежной зимы и поздней весны. Вместе с тем на удобренном фоне, в среднем по вариантам, урожайность составила 26,0 ц/га, на удобрение – 30,8 ц/га. Сроки некорневой подкормки не оказали существенного влияния на урожайность. Более высокие прибавки урожая зерна от применения различных препаратов получены на удобренном фоне. Они колебались при первом сроке подкормки от 5,8 до 14,6 %, при втором – от 6,9 до 19,5 %, при третьем - от 8,0 до 19,0 %. На удобренном фоне самые высокие прибавки урожая обеспечили препараты: при первом сроке подкормки Макс-Супер Гумат (4,3 ц/га или 15,7 %), при втором сроке – Аквадон Микро (5,1 ц/га или 19,5 %), при третьем сроке так же Аквадон Микро (5,2 ц/га или 19,0 %). Стабильные прибавки урожая на обоих фонах и при всех сроках подкормки получены от применения Макс-Супер Гумата, они колебались от 11,1 до 17,9 %.

ВЫБОР ТИПА ТОРФА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ГУМИНОВЫХ УДОБРЕНИЙ

Руководитель И.Н.Барановский

Тверская Государственная Сельскохозяйственная Академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Последние два десятилетия в земледелии Нечерноземной зоны РФ пропагандируются гуминовые удобрения. Они представляют собой щелочные вытяжки из торфа, в которые переходят гумусовые кислоты (гуминовые и фульвокислоты). При необходимости в такие вытяжки могут добавляться различные соли, тем самым расширяя круг питательных веществ, входящих в удобрение. Считается, что находящиеся в растворе, прежде всего гуминовые кислоты, способны оказывать положительное влияние на свойства почвы. Они стимулируют гумусообразовательный процесс в почве, увеличивают мобилизацию питательных веществ из почвенных запасов и поглощательную способность почвы, улучшают её структуру, повышают микробиологическую активность.

Выполненные на кафедре агрохимии, почвоведения и агроэкологии Тверской ГСХА исследования показали, что действительно на хорошо окультуренных почвах, в которых содержатся большие запасы питательных веществ, внесенные гуминовые удобрения оказывают положительное влияние на рост урожайности сельскохозяйственных культур. В то же время, их удобрительное действие на низкоплодородных почвах оказалось незначительным, либо оно отсутствует вовсе.

Данные научных исследований показывают, что не все гуминовые удобрения, получаемые из торфа, проявляют одинаковую эффективность. Это зависит от типа торфа и растений торфообразователей. Мы приводим сравнительную характеристику органического вещества ряда торфов (таблица) имеющих широкое распространение, как в Тверской области, так и в целом по Нечерноземной зоне.

Общий выход гумусовых веществ в профиле разных типов целинных торфяных залежей, Св % к беззольному торфу /Сгк-углерод гуминовых кислот/

Глубина, см	Тип торфа							
	Верховой		Переходный маломощный		Переходный мощный из осоки		Низинный	
	С	Сгк в % к общему С	С	Сгк в % к общему С	С	Сгк в % к общему С	С	Сгк в % к общему С
0-10	5,0	39,1	15,7	49,6	14,1	50,7	25,6	60,7
10-20	4,7	33,2	18,8	66,5	20,7	57,2	33,2	74,1
20-40	5,4	47,1	21,3	71,0	24,9	73,2	32,8	82,2
40-50	5,5	47,4	27,5	79,5	23,5	75,1	26,9	80,5
60-80	5,4	46,5	14,7	74,0	22,6	78,0	24,0	78,9
80-100	6,5	56,2	13,8	75,0	21,3	79,2	20,9	76,0

А.В. Густова

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ МЕТАЛЛОВ VIII ГРУППЫ В ПРОЦЕССЕ ГИДРОДЕОКСИГЕНИРОВАНИЯ АНИЗОЛА ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА ЦИКЛОГЕКСАНА

Руководитель Э.М. Сульман

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Основными способами получения циклогексана, основы для производства капролактама и адипиновой кислоты, растворителя для эфирных масел, восков, лаков, красок; а так же экстрагента в фармацевтической промышленности, являются гидрирование бензола, рефракция нефтепродуктов и гидрирование фенола. Перспективным методом получения циклогексана является гидродеоксигенирование бионефти.

Бионефть, как продукт быстрого пиролиза отходов производств, например, технического лигнина, широко используется во многих отраслях промышленности, однако, сложный состав, высокое содержание кислородсодержащих соединений и воды вызывает затруднения в применении бионефти в чистом виде. Гидродеоксигенирование – наиболее часто используемый метод повышения качества бионефти.

Для изучения процесса гидродеоксигенирования бионефти в качестве модельного соединения был выбран анизол.

Высокая селективность (свыше 72%) по циклогексану при 98% конверсии наблюдается при гидродеоксигенировании смеси анизола и додекана ($C_{\text{анизола}}=0.49$ моль/л) на катализаторах 5%-Pd/Al₂O₃ и 5%-Pt/Al₂O₃ при 300°C и 15 атм в течение 5 ч.

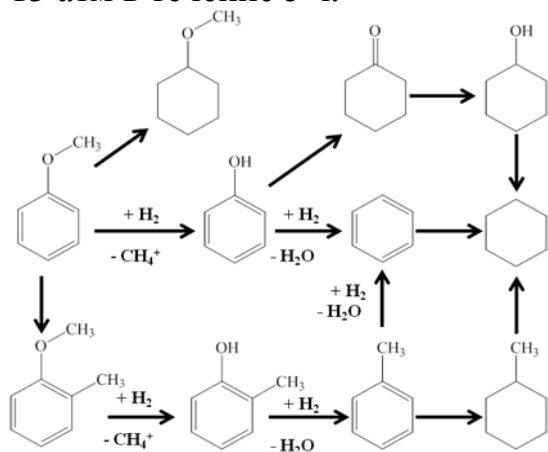


Схема конверсии анизола

Пути конверсии анизола представлены на схеме, в основном определяются наличием метоксигруппы и бензольного кольца. Основными путями реакции гидродеоксигенирования анизола являются трансалкилирование, деалкилирование, изомеризация, разрыв связи С-О и различные внутримолекулярные перегруппировки,

М.С. Демидова

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ В ИЗУЧЕНИИ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ АМИНОВ

Руководитель М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Целью настоящей работы является теоретико-графовое изучение корреляций “структура – энтальпия образования” аминов.

В работе был проведен отбор топологических индексов (ТИ) с учётом их дискриминирующей способности, построены графические зависимости вида “ $\Delta_f H^0_{298} - \text{ТИ}$ ”, “ $\Delta_f H^0_{298} - \text{номер изомера}$ ” и “ТИ – номер изомера”. Найдено, что в одних случаях наблюдается симбатное изменение энтальпии образования и топологического индекса, например, энтальпии образования и индекса Харари H для изомеров C_3H_9N и числа Винера W для $C_4H_{12}N$, это свидетельствует о хорошей корреляции между $\Delta_f H^0_{298(r)}$ и ТИ. В других случаях (как $\Delta_f H^0_{298(r)}$ и W, W') такой корреляции нет. С увеличением числа изомеров корреляции между $\Delta_f H^0_{298(r)}$ и ТИ усложняются. Эти соображения нужно принимать во внимание при аналитическом представлении зависимостей “ $\Delta_f H^0_{298(r)}$ - ТИ графа молекулы”. Данный графический метод позволяет просто и наглядно оценить корреляционную способность ТИ со свойствами.

Также в работе обсуждены возможности теоретико-графового подхода в построении и интерпретации аддитивных схем расчёта и прогнозирования аминов (отмечено, что многие известные ТИ участвуют как числа параметров в конструировании таких схем).

Так для аминов получена следующая формула

$$P = p_1 b_{cc} + p_2^* b_{cN} + p_2 \Gamma_{cc} + p_2^* \Gamma_{cN} + R \Delta_{ccc} + R^* \Delta_{ccN} + p_3 \tau_{cc} + p_3^* \tau_{cN} + p_4 \omega_{cc} + p_4^* \omega_{cN}$$

Здесь p_1, p_2, p_3, p_4 – соответственно число путей (рёбер) длины один, два, три и четыре; R – число троек смежных рёбер; $\Gamma^*_{cc}, \tau^*_{cc}, \omega^*_{cc}$, –эффективные взаимодействия пар атомов С соответственно через один атом, два, три и четыре атома и т.д.

Также была установлена аналитическая зависимость $\Delta_f H^0_{298} = f(\text{ТИ})$ отвечающая наиболее тесной корреляционной связи между энтальпией образования и ТИ.

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

А.М. Дожделев

ИЗГОТОВЛЕНИЕ ОСЕВОГО ИНСТРУМЕНТА С ПОВЫШЕННЫМИ ЭКСПЛУАТАЦИОННЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ ДЛЯ ОБРАБОТКИ ИЗДЕЛИЙ ИЗ ТРУДНООБРАБАТЫВАЕМЫХ МАТЕРИАЛОВ

Руководитель А.Ю. Лаврентьев

Тверской государственный технический университет
Кафедра технологии металлов и материаловедения

Зенкер (нем. Senken) - многолезвийный осевой режущий инструмент для обработки цилиндрических и конических отверстий в деталях с целью увеличения их диаметра, повышения качества поверхности и точности.

Для обеспечения требуемой стойкости инструментальный материал должен обладать высокой твердостью и теплостойкостью. Этим требованиям вполне соответствует твердый сплав. Однако инструмент из твердого сплава в ряде случаев выходит из строя из-за скола припаянных твердосплавных пластин. Для обеспечения оптимального уровня эксплуатационных характеристик инструмента предлагается изготавливать зенкер биметаллическим с применением наплавки быстрорежущей стали. Это позволит обеспечить максимальную жесткость рабочей части зенкера при высокой прочности и износостойкости инструментального материала, а также существенно сэкономить на дорогостоящей быстрорежущей стали.

Для изготовления опытной партии зенкеров изготовили заготовки из стали 45 ГОСТ 1050-88. Была разработана конструкция заготовки, учитывающая требования по обеспечению оптимального сечения наплавленного слоя. Зенкера изготавливали с применением электродуговой полуавтоматической наплавки порошковой проволокой [1].

Стойкость наплавленного инструмента превысила стойкость цельных зенкеров из быстрорежущей стали изготовленных традиционным способом. В дальнейшем планируется улучшить эксплуатационные характеристики инструмента за счет применения термомеханической обработки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. А.Ю. Лаврентьев, И.А. Соколов, А.М. Дожделев, А.А. Хохлов. // Сборник статей «Вестник ТвГТУ». Тверь, 2014 г.

Е.В. Дьякова

РАЗРАБОТКА ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ОСНОВ ПОЗИТРОННОГО РЕАКТИВНОГО ДВИГАТЕЛЯ

Руководитель В.М. Самсонов

Тверской государственный университет
Кафедра теоретической физики

В настоящее время в авиации и космонавтике применяются лишь химические реактивные двигатели, в которых реактивная струя создаётся за счёт окислительно-восстановительных реакции. Соответственно, для работы химического реактивного двигателя необходимы две жидкости: окислитель и восстановитель (топливо). Наиболее эффективным топливом, с точки зрения величины максимальной (теоретической) скорости истечения газов (u) является сжиженный водород. Однако и в этом случае u не превышает 5,6 км/с, что недостаточно для межпланетных полётов.

Темой нашего исследования является принципиальная возможность создания реактивных двигателей другого типа, которые можно условно назвать реактивными тепловыми двигателями (РТД). Имеются в виду двигатели, использующие лишь одну жидкость (монотопливо).

В таком двигателе реактивная струя будет создаваться путём испарения «топлива» и последующего нагрева газа с помощью тепла, получаемого от того или иного источника тепла.

Но встаёт вопрос: как нагреть водород до необходимой температуры.

Одно из возможных решений предложила компания Positronics Research, финансируемая NASA. Предложенный ими двигатель назван позитронным, так как теплота, необходимая для испарения водорода и его нагрева в газообразном состоянии, получается в процессе аннигиляции электрон-позитронной пары:

В соответствии с формулой Эйнштейна, при аннигиляции электрон-позитронной пары будет выделяться энергия, которая нагреет монотопливо.

Нами проведены оценки удельного импульса u для различных рабочих веществ: водорода ($u = 10,6$) и воды ($u = 4,7$), а так же количества позитронов, минимально необходимых для реализации позитронного реактивного двигателя. Показано, что это количество сравнимо по порядку величины с годовым производством позитронов.

Сделан вывод о том, что создание и применение РТД вполне возможно, но связано с рядом принципиальных проблем, среди них основной является поглощение γ -квантов, которая также рассматривается в данной работе.

НАНОТЕХНОЛОГИИ В МЕДИЦИНЕ

Руководители: Лопина Н.П., Бордина Г.Е.
ГБОУ ВПО Тверская ГМА Минздрава России, г.Тверь
Кафедра химии

В настоящее время известно много достижений науки в области наномедицины. Например, ученые разработали метод по выращиванию клеток спинного мозга при помощи опорных наноструктур большого количества маленьких параллельных трубочек, состоящих из биоразлагающегося полимера. Структура трубочек-биологически активное вещество 3-(3,4-дигидроксифенил)-глицериновой кислоты. Поскольку полимер слишком мягок на этой стадии разработки, к полимеру была добавлена биокерамика. В медицинской практике наиболее часто используют керамику на основе: ортофосфата кальция – $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$, гидроксиапатита кальция $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}$; оксида алюминия – Al_2O_3 ; оксида циркония – ZrO_2 . В Японии ученые разработали «наномозг» – молекулярную структуру, состоящая из нескольких сотен атомов, которая позволяет управлять нанороботами. Наномозг - система, собранная из 17 молекул DRQ, объединенные между собой водородными связями. Структура – (2,3,5,6-тетраметил-1-4-бензоквинон). Американская компания проводит предклинические испытания средств на основе фуллереновых наносфер C60. Спектр их применений включает борьбу с вирусными заболеваниями такими, как грипп и ВИЧ, онкологическими и нейродегенеративными заболеваниями, остеопорозом, заболеваниями сосудов. Учёные также использовали аддукт фуллерена с поливинил-пир-ролидоном (ПВП)-синтетический полимер-гамма-виниллактам N-амино-масляной кислоты. ПВП эффективен против вируса А- и В- типа, сходен по своим свойствам с синовиальной жидкостью и может использоваться в качестве искусственного заменителя при отсутствии ее в суставе.

Ученые с помощью компьютерных средств смогли создать искусственную работоспособную сосудистую систему, состоящую из крошечных сосудов. Сначала капиллярная сеть была выгравирована на кремниевой пластине, затем в образовавшуюся структуру был введен биоразрушающийся полимер. После этого была создана зеркальная копия структуры, затем обе их сложили, разместив между ними микропористый мембранный слой. В результате получилась искусственная кровеносная система. Затем в сеть капилляров с одной стороны мембраны ввели клетки эндотелия, а с другой - клетки ткани печени. Клетки эндотелия покрыли внутреннюю поверхность сосудов. Биоразрушающийся материал разрушился, и получились обычные кровеносные сосуды со стенками из клеток эндотелия, сохранившие изначальную структуру.

КРАХМАЛ ИЗ РАЗЛИЧНЫХ ИСТОЧНИКОВ КАК ПЕРСПЕКТИВНОЕ СЫРЬЕ ДЛЯ БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Руководитель: Е.В. Ожимкова

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Крахмал – основной резервный источник энергии в растительных клетках, накапливается в клубнях, корнях, семенах [1]. Наряду с другими полисахаридами, которые используются в биотехнологии, крахмал имеет несколько неоспоримых преимуществ:

- ежегодная возобновляемость сырьевых ресурсов для его получения;
- простота модификации молекул крахмала и придание новых практически ценных свойств путем химического, физического, микробиологического или комбинированного воздействия;
- возможность использования крахмалов для создания новых биodeградируемых материалов;
- нетоксичность и удобство работы с крахмалом как с полимером.

В биотехнологии крахмал нашел применение при производстве этанола, ацетона и бутанола, подсластителей и сиропов, глюкозы, фруктозы, молочной кислоты и т.д.[2].

В биотехнологических процессах используются в основном картофельный и кукурузный крахмалы, которые, к сожалению, обладают рядом существенных недостатков. Вследствие этого во многие процессы внедряют крахмалы, полученные из других видов растительного сырья, например, из ячменя, фасоли и т.д.

Целью работы являлась разработка современного эффективного метода получения крахмалов из новых перспективных растительных источников. В ходе работы обоснован выбор растительных источников крахмала. Экспериментально установлены оптимальные параметры традиционной и ультразвуковой экстракции крахмалов из таких источников как горох, рисовая и гречневая крупы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Технология крахмала и крахмалопродуктов/Н. Н. Трегубов, Е. Я. Жарова, А. И. Жушман, Е. К. Сидорова/; под ред. Н. Н. Трегубова. – 5-е изд., перераб. и доп. – М.: Легкая и пищевая промышленность, 1981 - 471 с.
2. Poonam Nigam. Enzyme and microbial systems involved in starch processing / Poonam Nigam, Dalel Singh// Butterworth Heinemann. – 1995. - №17. – с. 770-778.

А.М. Жерихова

ЭНЕРГИИ РАЗРЫВА СВЯЗИ В ДИЕНАХ. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЁТЫ И ОСНОВНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ

Руководитель М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Энергетические характеристики являются важными факторами, обуславливающие стабильность молекул и вещества в целом. Экспериментальные сведения по энергиям разрыва связей в различных классах органических (и иных) соединений скудны и порой разноречивы. Поэтому важное значение имеет развитие расчетных методов их определения.

Цель настоящей работы – проведение анализа энергии разрыва связи в диенах.

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи:

1. Оценка составления численных данных по энергиям разрыва связи в диенах.
2. Анализ экспериментальных данных.
3. Проведение численных расчетов,
4. Построение и анализ графических зависимостей “энергия разрыва связи – число заместителей”.

В результате проделанной работы были проанализированы графические зависимости свойства вещества - степень замещения l . Найдено, что эти они в общем случае нелинейны, однако линии замещения на одну и ту же группу симбатны между собой.

Данные зависимости служат ценным дополнением к расчетно-аналитическому исследованию. Они наглядно позволяют оценить влияние вида и числа разных заместителей, а также графическим путем получить недостающие значения свойств.

Анализ числовых данных по энергиям разрыва связей в диенах, их сопоставление и упорядочение по рядам сходных молекул позволил выявить определенные закономерности.

В работе также проведены численные расчеты по энергиям разрыва связей диенов. Там, где можно сделать сопоставления эти расчёты согласуются с экспериментом.

ВЛИЯНИЕ ПРИНЦИПА МЕХАНОХИМИИ НА СВОЙСТВА УГЛЕРОДСОДЕРЖАЩИХ СУБСТРАТОВ И ПРОДУКТИВНОСТЬ КАРТОФЕЛЯ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Для комплексного улучшения плодородия почвы, активно зарекомендовали себя механохимические методы производства биоорганоминеральных удобрений. Они основаны на твердофазном превращении биологически активных веществ растительного происхождения в растворимые формы, путем механической обработки сырья и специально подобранных реагентов (известки, фосфатитов, мочевины и др. минеральных компонентов, корректирующих состав получаемых удобрений).

Механохимическому принципу активации малодоступных веществ подвергают солому, стружку, подсолнечную лузгу, торф, сапрпель, уголь и т. п. и на их основе получают ценное удобрение.

Мы проанализировали элементный состав низинного торфа и продукта, полученного при его механохимической обработке «Агрозумат калия» (таблица 1).

Таблица 1. Агрохимические свойства низинного торфа и активированного продукта его переработки

Показатель	рН	Влажность, %	Содержание в сухом веществе, %					ГК
			Нобщ.	P ₂ O ₅	K ₂ O	Зольность	Органическое вещество	
«Агрозумат калия»	9,7	14,28	2,94	0,20	6,96	26,4	73,6	29,85
Низинный торф	5,4	60,00	1,85	0,22	0,20	16,0	84,0	39,10

Воздействие механохимических процессов существенно активизировало химические вещества в составе торфа, что позволило получить более высокий урожай картофеля в полевом опыте (таблица 2). На всех удобренных вариантах урожайность оказалась на 23-180% выше контроля.

Таблица 2. Влияние «Агрозумата Экстра» на продуктивность картофеля в полевом опыте на дерново-подзолистой почве

Вариант	Доза внесения препарата, кг/га	Урожайность, ц/га	прибавка	
			ц/га	%
Контроль (без удобрений)	-	94	-	-
1 вариант	100	116	22	23
2 вариант	200	212	118	125
3 вариант	300	264	170	180

Ю.Э. Жигалова, Р.А. Яковлева, А.А. Якубовская

ДЕЙСТВИЕ БОРАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСОНОВ, ПРОИЗВОДНЫХ ЯНТАРНОЙ КИСЛОТЫ, НА ПРОРОСТКИ ЛЬНА-ДОЛГУНЦА

Руководители: И.Н. Барановский, Т.И. Смирнова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Бор относится к числу микроэлементов, поглощаемых растениями в больших по сравнению с другими микроэлементами количествах. Он участвует в метаболизме углеводов, нуклеиновых кислот, ростовых веществ, фенолов; входит в состав клеточных стенок растений в виде комплексов с пектинами, влияет на транспорт сахаров, процессы дыхания, функционирования плазмалеммы, растяжения и деления растительных клеток. Растения поглощают бор в форме борат-анионов, которые могут образовывать хелатные комплексы с некоторыми эхелатантами, в т.ч. – с комплексонами, производными янтарной кислоты (КПЯК): этилендиаминдиантарной кислотой (ЭДДЯК) и транс-1,2-диаминоциклогександиантарной кислотой (ДЦГДЯК). Как свойства, так и биологическая активность борат-этилендиаминдисукцинатного комплекса (В-ЭДДЯК), мало исследованы, но представляются интересными не только теоретически, но и с практических позиций. До настоящего времени оставалась неисследованной биологическая активность самого эффективного из производных янтарной кислоты хелатанта – ДЦГДЯК и образуемых ею комплексов.

С целью изучения действия боратных комплексов КПЯК на качество проростков льна-долгунца, как растения, наиболее требовательного к содержанию бора в среде культивирования, был проведён лабораторный опыт.

Семена льна проращивали в чашках Петри на фильтровальной бумаге, увлажнённой растворами В-ЭДДЯК и В-ДЦГДЯК с концентрацией 2 мМ, и взятыми для сравнения растворами H_3BO_3 , ЭДДЯК и ДЦГДЯК в объёмах по 20 мл. В контрольных вариантах использовали дистиллированную воду. В семидневных проростках льна фотометрическим методом (фотометр КФК-3-2МП) определяли содержание фотосинтетических пигментов и биомассу проростков. Перед проведением анализов рассчитывали всхожесть семян.

Препаратом, стимулирующим всхожесть и увеличение биомассы проростков, в представленном опыте оказался В-ЭДДЯК. Этот комплекс оказал также благоприятное воздействие и на пигментный состав развивающихся растений, вызвав наибольшее увеличение содержания зелёных и жёлтых пигментов, практически совпадающее с воздействием борной кислоты, но при оптимальном соотношении хлорофиллоа/в(2,4), в отличие от варианта с H_3BO_3 . Комплекс В-ДЦГДЯК и свободный лиганд оказали на проростки влияние, увеличивающее в них содержание каротиноидов, но некоторое снижение биомассы и содержания хлорофилла.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ В СИСТЕМЕ ГЕПАРИН-ОКСАЦИЛЛИН-КАЛЬЦИЙ

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Актуальным направлением является исследование возможного совместного использования в клинической медицине и терапии лекарственных веществ различной биологической направленности. Очевидно, изучая физико-химические взаимодействия в многокомпонентных системах, включающих эти вещества, можно прогнозировать возможную биологическую активность композиций на их основе. В ходе работы были проведены исследования ионных равновесий с участием ионов Ca^{2+} , гепарина (Na_4Hep) и оксациллина (NaOx).

Измерения при потенциометрическом титровании проводили с помощью цифрового иономера марки «Аквилон» рН 410 с точностью измерения величин рН 0.01, а также комбинированного электрода марки «Аквилон» ЭСЛК-01.7. Калибровку иономера проводили по стандартным буферным растворам со значениями рН, равными 1.65 и 9.18, делая поправку на температуру 37 °С. Расчеты моделей равновесий проводились по алгоритмам, реализованным в универсальной компьютерной программе New DALSFЕК (КСМ Soft, 2000 г.).

Исследованию системы $\text{Na}_4\text{Hep}-\text{NaOx}-\text{Ca}^{2+}-\text{H}_2\text{O}-\text{NaCl}$ предшествовало изучение химических равновесий во всех составляющих подсистемах по независимым данным рН-метрии. По результатам эксперимента рассчитаны комплексные формы, построены диаграммы распределения и определены логарифмы констант образования.

Логарифмы констант образования комплексных форм

Форма	$\lg\beta$
HepOx^{5-}	6.11 ± 0.227
HHepOx^{4-}	9.72 ± 0.259
HHepOxCa^{2-}	11.77 ± 0.379

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Diane R. Romac, Timothy E. Albertson // Clinics in Chest Medicine. 1999. V. 20, № 5. P. 385–399.
2. Matthew E. Falagasa, Konstantinos Z. Vardakasa, Stavros Athanasioud // European Journal of Pharmacology. 2007. V. 557, № 2–3, P. 93–98.

А.Д. Зигерт

МУЛЬТИПЛАТФОРМЕННОЕ ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ ОПТИЧЕСКОГО РЕФЛЕКТОМЕТРА

Руководитель: А.Ю. Ивлев

Тверской государственный университет

Кафедра общей физики

Оптический рефлектометр (Optical Time Domain Reflectometer – OTDR) – прибор для измерения параметров волоконно-оптических линий (ВОЛС).

Рефлектометры существенно упрощают локализацию неисправностей на линии — на рефлектограмме видны все неоднородности оптического волокна (сростки, точки коммутации и т.п.). В ряде случаев эти работы без рефлектометра вообще невозможно выполнить (например, в случае бронированных, уложенных в каналы или грунт оптических кабелей). С помощью рефлектометра можно измерить такие параметры, как погонное затухание, возвратные потери, величину отраженного сигнала. А сравнение текущей рефлектограммы с полученной ранее и сохраненной эталонной позволяет мгновенно выявить возникшие с течением времени отклонения в параметрах волоконно-оптической линии.

В настоящей работе была поставлена задача: создание мультиплатформенного программного обеспечения для просмотра и анализа оптических рефлектограмм, а также для удаленного управления оптическим рефлектометром.

Актуальность задачи связана с развитием технологии ВОЛС и неизбежно возникающей необходимости в недорогом полнофункциональном приборе для эксплуатационного анализа оптических кабельных сетей.

Эта задача была решена на кафедре общей физики ТвГУ с использованием оборудования и консультаций специалистов конструкторского бюро ООО «Связьприбор».

Итогом работы стало создание программного обеспечения, которое при совместном использовании с оптическим рефлектометром серии VISA позволяет: определять распределение потерь вдоль ВОЛС, выявлять дефектные участки; определять точное расположение обрывов или дефектных участков ВОЛС; обнаруживать постепенное или внезапное ухудшение качества волокна путем сравнения его характеристики с результатами более ранних измерений; сохранять проведенные измерения в .sof файлы.

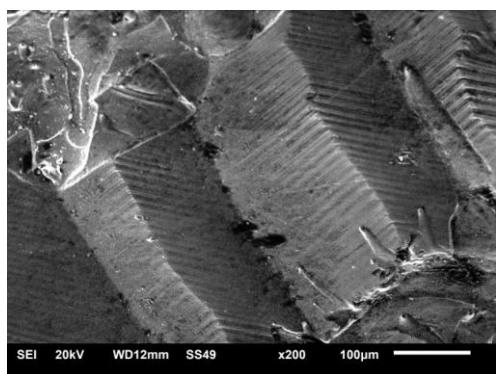
А.Д. Златарова

ПИРАМИДЫ РОСТА ЛЕГИРОВАННЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ
ГЕРМАНИЯ

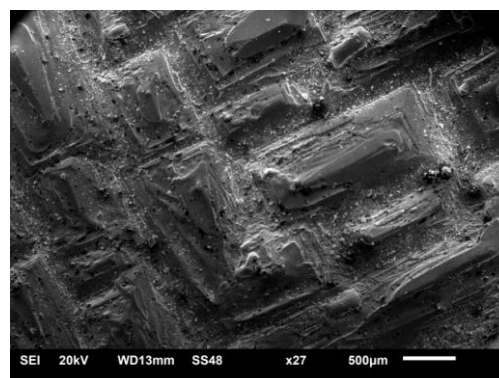
Руководитель Ю.М.Смирнов

Тверской государственной университет
Кафедра прикладной физики

В работе изучались пирамиды роста монокристаллов германия, легированных примесями сурьмы и мышьяка. В зависимости от того в каком направлении выращивается кристалл, какова легирующая примесь и ее концентрация, сростки пирамид роста граней {111} могут быть по-разному ориентированы. Если концентрации легирующих примесей, близки к пределам растворимости, пирамидальное строение монокристаллов обычно проявляется особенно отчетливо. Монокристаллы германия, были выращены методом Чохральского в условиях обычно реализуемых переохлаждений и при высоких переохлаждениях расплава в области фронта кристаллизации с различными направлениями роста. Физические свойства монокристаллов были исследованы стандартными методиками, пирамиды роста исследовались электронно-микроскопическим методом на растровом электронном микроскопе (JEOL JSM-6610LV). На рисунке представлены результаты этих исследований. Все картины подтверждают, что при методе выращивания по Чохральскому и при легировании до уровней 10^{19}см^{-3} реализуется классический послойный (тангенциальный) механизм роста.



а



б

Пирамиды роста монокристаллов германия, легированных мышьяком (а) и сурьмой (б)

СООТНОШЕНИЯ СОВМЕСТИМОСТИ ГРУПП ВОЛНОВЫХ ВЕКТОРОВ (НА ПРИМЕРЕ СИММЕТРИИ ГЕРМАНИЯ O_h)

Руководитель Ю.М. Смирнов

Тверской государственный университет
Кафедра прикладной физики

Представляемая работа решает один из частных вопросов общей теории фазового перехода второго рода. Каждая группа симметрии может быть разложена на неприводимые представления. Они характеризуют основные волновые вектора решетки и позволяют в принципе определить возможности фазовых переходов второго рода в данном веществе. Основные векторы обратной решетки определяются на основе знания основных векторов трансляций кристалла. Рассмотрим группы Δ (ось 4) и Γ ($m\bar{3}m$). Волновой вектор Δ соответствует поворотной оси $L_4 <100>$, волновой вектор Λ – поворотной оси $L_3 <111>$, волновой вектор Σ – поворотной оси $L_2 <110>$. Коэффициенты разложения обозначим α_i и воспользуемся выражением ортогональности характеров $\alpha_j(\Gamma_i) = \frac{1}{s} \sum_{\Delta} \chi_{\alpha}(\Delta) \chi_{\beta}(\Gamma_i)$. Проведём редукцию группы по неприводимым представлениям группы волнового вектора Δ : $\alpha_1(\Gamma_1)=1$; $\alpha_1(\Gamma_2)=0$; $\alpha_1(\Gamma_{12})=1$; $\alpha_1(\Gamma_{15'})=0$; $\alpha_1(\Gamma_{25'})=0$; $\alpha_1(\Gamma_1')=0$; $\alpha_1(\Gamma_2')=0$; $\alpha_1(\Gamma_{12}')=0$; $\alpha_1(\Gamma_{15})=1$; $\alpha_1(\Gamma_{25})=0$. $\alpha_2(\Gamma_1)=0$; $\alpha_2(\Gamma_2)=1$; $\alpha_2(\Gamma_{12})=1$; $\alpha_2(\Gamma_{15'})=0$; $\alpha_2(\Gamma_{25'})=0$; $\alpha_2(\Gamma_1')=0$; $\alpha_2(\Gamma_2')=0$; $\alpha_2(\Gamma_{12}')=0$; $\alpha_2(\Gamma_{15})=0$; $\alpha_2(\Gamma_{25})=1$. Далее вычисляем значения, равные 1 $\alpha_4(\Gamma_{15'})=1$; $\alpha_4(\Gamma_{12}')=1$; $\alpha_5(\Gamma_{15'})=1$; $\alpha_5(\Gamma_{25'})=1$; $\alpha_5(\Gamma_{12}')=1$; $\alpha_5(\Gamma_{25})=1$.

В итоге получены соотношения совместности для группы волнового вектора Δ : $\Gamma_1-\Delta_1$; $\Gamma_2-\Delta_2$; $\Gamma_{12}-\Delta_1, \Delta_2$; $\Gamma_{15}-\Delta_1, \Delta_5$; $\Gamma_{25}'-\Delta_3(\Delta_2'), \Delta_5$; $\Gamma_{12}'-\Delta_3(\Delta_2')$; $\Delta_4(\Delta_1')$; $\Gamma_{15}'-\Delta_4(\Delta_1')$; $\Delta_5 \cdot \Gamma_1'-\Delta_4(\Delta_1')$. Остальные малые группы Λ и Σ определены таким же методом: группа Λ : $\Gamma_1-\Lambda_1$; $\Gamma_2-\Lambda_2$; $\Gamma_{12}-\Lambda_3$; $\Gamma_{15}'-\Lambda_2, \Lambda_3$; $\Gamma_{25}'-\Lambda_1, \Lambda_3$; $\Gamma_1'-\Lambda_2$; $\Gamma_2'-\Lambda_3$; $\Gamma_{15}-\Lambda_1, \Lambda_3$; $\Gamma_{25}-\Lambda_2, \Lambda_3$; группа Σ : $\Gamma_1-\Sigma_1$; $\Gamma_2-\Sigma_2$; $\Gamma_{12}-\Sigma_1, \Sigma_4$; $\Gamma_{15}'-\Sigma_2, \Sigma_3, \Sigma_4$; $\Gamma_{25}'-\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3$; $\Gamma_1'-\Sigma_2$; $\Gamma_2'-\Sigma_3$; $\Gamma_{12}'-\Sigma_2, \Sigma_3$; $\Gamma_{15}-\Sigma_1, \Sigma_3, \Sigma_4$; $\Gamma_{25}-\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_4$. Трёхмерно вырожденное состояние Γ_{25} на уровне волнового вектора вдоль оси Σ распадается на три одномерных (простых) уровня $\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_4$, вдоль направления Δ – на простой уровень Δ_2 и двукратно вырожденный уровень Δ_5 . А вдоль направления Λ – на простой уровень Λ_1 и двукратно вырожденный уровень Λ_3 . Состояние Γ_{12} распадается соответственно на уровни Δ_1 и Δ_2 вдоль направления Δ и на простые уровни Σ_2 и Σ_5 вдоль направления Σ . По этому же признаку определяются изменения волновых характеристик у состояний Γ_{25}' , Γ_{15}' и Γ_{15} .

ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ В ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОМ РАСТВОРЕ
ПРИ НАЛИЧИИ БИОАКТИВНЫХ МЕТАЛЛОВ

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

Изучение процессов гелеобразования является актуальной проблемой для современной прикладной науки. Низкоконцентрированные гидрогели на основе L-цистеина и AgNO_3 обладают супрамолекулярным строением. Исходные компоненты являются биологически активными и играют особую роль в организме человека. Введение кобальта в систему 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

Целью данной работы являлось изучить процесс самоорганизации в цистеин-серебряном растворе (ЦСР) под воздействием сульфатов биоактивных металлов (Fe^{2+} , Zn^{2+} , Cu^{2+} , Mn^{2+} , Mg^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+}), методами динамического светорассеяния (ДСР) и вибрационной вискозиметрии.

По данным ДСР наибольшие размеры кластеров возникают при взаимодействии ЦСР с сульфатом меди, кобальта, цинка и железа. Так, при введении данных металлов, происходит сдвиг пиков, по отношению к исходному ЦСР, в сторону больших размеров уже на 10 мин. измерения и дальнейшее образование устойчивых прочных гелей.

В результате реологических исследований методом вибрационной вискозиметрии установлено, что максимальный рост вязкости ($14 \text{ mPa}\cdot\text{s}$) наблюдается для гидрогеля на основе ионов железа, а затем вязкость падает до значения вязкости воды, то есть пространственная гель-сетка полностью разрушается. В то же время, гидрогель на основе ионов натрия имеет максимальное значение вязкости ниже (около $3,75 \text{ mPa}\cdot\text{s}$), однако является самым долговечным из анализируемых гелей (разрушается в течение часа). Для гидрогелей с ионами меди и магния вязкость находится в пределах между вязкостью ЦСР и H_2O (от $3,0$ до $1,0 \text{ mPa}\cdot\text{s}$). Эксперимент продолжается.

ПОЛУЧЕНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ ПРОДУКЦИИ КАРТОФЕЛЯ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ ПО ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра общего земледелия и растениеводства

В работе исследуются особенности формирования урожайности 8 сортов картофеля при возделывании их по интенсивной и экологически безопасной технологиям с междурядьями 90 см и размещением картофеля по двум предшественникам – повторно по картофелю и по горчице белой на сидерат. Один сорт (Удача) российской и 7 сортов зарубежной селекции (Германия). Исследования проводили в трехфакторном полевом опыте в 2012-13 гг. на полях ООО «Тверь Агропром» Лихославльского района.

Выявлены существенные преимущество размещения картофеля по горчице белой на сидерат, которое обеспечивает повышение урожайности сортов, в среднем, по экологически безопасной технологии в 1,9 раз (с 14,6 до 28,0 т/га), по интенсивной – в 1,8 раза (с 23,9 до 42,4 т/га). Наиболее урожайными при возделывании по экологически безопасной технологии по обоим предшественникам является сорт Удача. Так, урожайность в среднем за 2 года по предшественнику картофель составила 17,7 т/га, а по горчице на сидерат – 35,2 т/га.

Расчеты экономической эффективности выявили большое преимущество размещения картофеля по сидерату – горчице белой. Так, условно чистый доход, в среднем по сортам возрастает при возделывании по экологически безопасной технологии с 35,84 до 130,73 тыс. руб./га (в 3,6 раза), по интенсивной технологии с 96,92 до 195,02 тыс. руб./га (в 2,0 раза), а уровень рентабельности соответственно с 45,7 до 119,6 % (в 2,6 раза) и с 98,5 до 146,3 % (в 1,5 раза).

Наиболее экономически выгодно возделывать сорта по экологически безопасной технологии по картофелю – Удача, Инара, и Ред Анна, по сидерату – Удача. Размещение картофеля по горчице белой на сидерат при возделывании по экологически безопасной технологии, несмотря на снижение урожайности, обеспечивает высокий уровень рентабельности (в среднем 119,6 %), который лишь на 26,7 % ниже, чем по интенсивной технологии. По сорту Удача уровень рентабельности при возделывании по экологически безопасной технологии (167,5 %) не ниже, чем по интенсивной (161,5 %). В этом случае получаем экологически чистую продукцию, свободную от пестицидов с содержанием нитратов в несколько раз ниже временно допустимого уровня и в 1,5-2 раза ниже, чем по интенсивной технологии.

К.П. Комар

ВЛИЯНИЕ РЕЖИМОВ ТЕРМИЧЕСКОГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ АЦЕТАТА ПАЛЛАДИЯ НА ФОРМИРОВАНИЕ СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ В СВЕРХСШИТОМ ПОЛИСТИРОЛЕ НАНОЧАСТИЦ ПАЛЛАДИЯ

Руководитель: Быков А.В.

Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии и химии

Работа посвящена изучению термической деструкции ацетата палладия в среде промышленного сверхсшитого полистирола MN270 методами ТГ и РФЭС.

Гетерогенный катализ играет огромную роль в современной химии и химической промышленности. Так, более 90% химических производств, включают каталитические стадии. В связи с этим, эффективный, контролируемый и дешевый дизайн катализаторов является одной из приоритетных задач современной химии. Наиболее развивающейся областью катализа является катализ наночастицами металлов и их оксидов, нанесенных на оксид алюминия, оксид кремния или активированный уголь. В последние десятилетия значительное внимание уделяется катализаторам, стабилизированным в полимерных средах, в частности в полимерных сетках, одним из ярких представителей которых является сверхсшитый полистирол.

Восстановление ацетата палладия с образованием металлического палладия проводилось путем термического разрушения прекурсора. Для установления термической стабильности полимерной матрицы и катализаторов на основе ацетата палладия было проведено термогравиметрическое исследование подготовленной и измельченной менее 60 мкм полимерной матрицы, ацетата палладия и исходного катализатора Pd/MN270 в среде аргона при температурах 200, 250, 300 и 325 °С и восстановленного водородом при 200 °С. Установлено, что процесс пиролиза соли многоступенчатый.

В ходе исследования было показано, что ацетат палладия, распределенный в сверхсшитом полистироле в виде наноструктурированной фазы, подвергается термической декомпозиции при более низкой температуре, чем в случае чистой порошкообразной соли. При этом формируется значительное количество кластеров палладия состава Pd₇ – Pd₁₀, часть из которых агрегирует в наночастицы. Преобладание на поверхности термически восстановленных и восстановленных водородом в газовой фазе катализаторов кластеров палладия, включающих 7–10 атомов над наночастицами палладия, возможно, обусловлено стабилизирующим действием полимерной матрицы, что препятствует их миграции в среде полимера.

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ОТКЛИК СТРУКТУРЫ SiC/ALN/SiC/Si/AG НА ВОЗДЕЙСТВИЕ ПЕРИОДИЧЕСКИ МОДУЛИРОВАННОГО ИК-ИЗЛУЧЕНИЯ

Руководитель А.А. Богомолов

Тверской государственный университет
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

В качестве объекта исследований использовались пленки (0001)AlN, выращенные на подложке (111)SiC/(111)Si методом хлоридной газовой эпитаксии в ФТИ им. А.Ф. Иоффе [1]. Толщина слоя SiC составляла порядка 100 нм, а слоя AlN – 1000 нм. Интерес к подобным гетероструктурам определяется высоким совершенством поверхности монокристаллических слоев карбида кремния, выращенных на монокристаллической подложке кремния по оригинальной технологии [2], и малым рассогласованием кристаллических решеток нитрида алюминия и карбида кремния (~ 1%), принципиально позволяющим получать высококачественные слои AlN в диапазоне субмикронных и микронных толщин.

Известно, нитрид алюминия имеет большую ширину запрещенной зоны (6 эВ) и является линейным пирозлектриком. В работе проведены результаты исследований электрического отклика от пленок нитрида алюминия (AlN), сформированных на подложках SiC/Si, на воздействие прямоугольно модулированного теплового потока. Исследуемый объект представлял собой матрицу конденсаторных структур с верхними электродами из хрома. В качестве нижнего электрода использовано серебро. В качестве источника теплового излучения использовалось ИК-излучение с длиной волны 980 нм, мощностью излучения 220 мВт. Модуляция теплового потока осуществлялась с помощью генератора в интервале частот от 1 до 500 Гц. Возникающий электрический импульс усиливался операционным усилителем и записывался с помощью платы сбора данных. Одновременно наблюдался опорный сигнал, фиксирующий нагрев/охлаждение структуры. В результате исследований показано, что электрический отклик носит пиковый характер с последующей релаксацией во времени и совпадает по фазе с опорным сигналом, а его величина колеблется в зависимости от частоты модуляции от 0,4 до 0,7 нА. При этом на форме импульса можно наблюдать «полку», что может свидетельствовать в пользу интерпретации этого отклика в качестве пирозлектрического.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В.Н. Бессолов, Ю.В. Жилиев, Е.В. Коненкова и др. // Письма в ЖТФ, 2010. Т.36, вып. 11. С.17-23.
2. С.А.Кукушкин, А.В. Осипов // ФТТ, 2008. Т.50, №6. С.1188–1195.

ПРОЦЕССЫ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ МЕТАЛЛОВ 3А-
ПОДГРУППЫ С ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫМИ КОМПЛЕКСОНАМИ

Руководитель В.М. Никольский
Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Создание и изучение свойств хелатных соединений, которые не загрязняют окружающую среду, вызывает научный интерес. Для изучения были выбраны комплексоны, производные янтарной кислоты, такие как иминодиантарная кислота (ИДЯК, H_4X), этилендиаминдиантарная кислота (ЭДДЯК, H_4Y) и гексаметилендиаминдиантарная кислота (ГМДДЯК, H_4Z). По безотходной технологии получения комплексонов нового класса предусматривается простое присоединения двух молекул малеиновой кислоты: к аммиаку (синтез иминодиантарной кислоты); к этилендиамину (синтез этилендиаминдиантарной кислоты) или к гексаметилендиамину (синтез гексаметилендиаминдиантарной кислоты).

Методом потенциометрического титрования определены кислотно-основные свойства новых комплексонов. Константы диссоциации, $I = 0,1(KNO_3)$, $T = 298 K$:

1. Для ИДЯК $pK_1 = 2,66$; $pK_2 = 3,29$; $pK_3 = 4,71$; $pK_4 = 10,87$;
2. Для ЭДДЯК $pK_1 = 2,68$; $pK_2 = 3,68$; $pK_3 = 6,70$; $pK_4 = 10,02$;
3. Для ГМДДЯК $pK_1 = 2,73 \pm 0,05$; $pK_2 = 3,52 \pm 0,07$; $pK_3 = 6,62 \pm 0,08$; $pK_4 = 9,38 \pm 0,04$.

В результате проведенных исследований установлено, что основность донорных атомов азота самая низкая у ГМДДЯК, а самая высокая у ИДЯК.

Исследование процессов комплексообразования ионов Al^{3+} , Ga^{3+} , In^{3+} с КПЯК проводили рН-потенциометрическим методом при различных значениях ионной силы. Термодинамические константы были вычислены путем экстраполяции данных, полученных при фиксированных значениях ионной силы (0,8; 0,6; 0,4; 0,1) на нулевую ионную силу по уравнению с одним индивидуальным параметром [1]. Рассчитана устойчивость средних комплексов ИДЯК с Al^{3+} ($16,48 \pm 0,07$), с Ga^{3+} ($19,03 \pm 0,15$), с In^{3+} ($18,77 \pm 0,04$). Для комплексона ЭДДЯК получена термодинамическая константа устойчивости средних комплексов для Al^{3+} ($16,27 \pm 0,07$).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Васильев В.П. Термодинамические свойства растворов электролитов.- М., 1982. С. 267.

П.А. Коробейников

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ
КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ В
РАМКАХ QTAIM

Руководитель Ю.Д. Орлов

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

Гетероциклические соединения играют важную роль во многих биологических процессах, а их физико-химические свойства имеют большое практическое значение. Полное свойство индивидуального вещества есть следствие распределения его электронной плотности – $\rho(r)$, а парциальное свойство атомной группировки – следствие распределения электронной плотности взятого фрагмента. Однозначное разбиение $\rho(r)$ на «топологические» атомы и более крупные фрагменты, в том числе функциональные группы (R) возможно в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» Р.Бейдер. 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.

В настоящей работе проведено исследование распределения электронной плотности в молекулах малых гетероциклических соединений. Оптимизация геометрии радикалов 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- и -CH₂-.

Электронные характеристики групп в гетероциклических молекулах сопоставлялись с зарядом, энергией и объемами CH₂ групп простых углеводородных циклов и «стандартной» CH₂, выделенной в n-алканах [4]. Выявлена дальность распространения влияния кислорода в циклах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. М., 2001. 528 с.
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).
4. В.В. Туровцев, Ю.Д. Орлов, Ю.А.Лебедев // Журн. физ. химии. 2009. Т. 83, № 2. 313.

К.А. Косарева

ПРИМЕНЕНИЕ ПЛАЗМОЗАМЕЩАЮЩИХ РАСТВОРОВ В КОНСЕРВИРОВАНИИ ОРГАНОВ

Научные руководители: к.х.н., доц. Лопина Надежда Петровна,
к.б.н., доц. Бордина Галина Евгеньевна
ГБОУ ВПО Тверская ГМА Минздрава России, г. Тверь
Кафедра химии

Консервирование органов и тканей – это методы воздействия на изолированную от целостного организма часть физическими, химическими и биологическими факторами, позволяющими сохранить ее жизнеспособность и полноценную функцию в течение значительного времени существования вне организма; используется с заместительной целью при восстановительных операциях (трансплантации органов и тканей). Прекращение доставки кислорода и питательных веществ, наступающее после остановки кровообращения, по-разному действует на различные органы: одни быстро погибают, другие — продолжают оставаться жизнеспособными. Причинами нарушений в изолированных органах являются такие процессы, как аноксия, ацидоз, аутолиз. Работа с трансплантатами идет в несколько этапов, среди которых можно выделить основные: заготовка, консервирование, стерилизация и контроль годности.

Заготовка трансплантатов осуществляется в судебно-медицинских моргах или других медицинских учреждениях от погибших людей, а также от животных на скотобойнях или мясокомбинатах. Для уменьшения повреждений в изолированных тканях и органах применяют множество методов воздействия, которые можно условно разделить на три: заместительное консервирование (искусственное поддержание обмена веществ путем доставки кислорода и питательных веществ), консервирование, подавляющее обмен веществ (искусственное снижение уровня обменных процессов, а следовательно, и потребности в кислороде, питательных веществах), а также комбинированное консервирование.

Плазмозамещающие растворы применяют в методе, подавляющем обмен веществ,- бесперфузионном охлаждении в жидких средах, а также в комбинированных методах - при бесперфузионном охлаждении в жидких средах в присутствии питательных веществ. Основой плазмозамещающих растворов для этих методов являются сложные изотонические растворы - растворы Рингера-Локка, Рингера-Тироде, среда Хенкса.

А.Ю. Косивцова

ВЫДЕЛЕНИЕ ЛИГНИНА ИЗ НОРВЕЖСКОЙ ЕЛИ С ВОДНЫМ РАСТВОРОМ ЩЕЛОЧИ И ПЕРЕКИСЬЮ ВОДОРОДА

Руководитель Ю.Ю. Косивцов

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Лигнин – аморфный натуральный полимерный материал, основанный на фенилпропановых производных и один из наиболее изобильных возобновляемых ресурсов на планете. Лигнин является одним из важных химических компонентов лигниноцеллюлозных материалов в древесине и одним из натуральных биополимеров в природе. Несмотря на обширные исследования, состав и непостоянная структура лигнина не полностью изучены. Физические свойства и химические характеристики различны не только из-за разнообразия различных пород деревьев, но и в соответствии с методом получения лигнина. Более того, молекулярная структура и функциональные группы также различаются в соответствии типа лигнина.

Лигнин может быть выделен из различного сырья, например дерева или черного щелока. Существуют различные методы для определения содержания лигнина в древесине, которые разделяют на прямые и непрямые методы. Экстракция лигнина из лигниноцеллюлозных материалов проводится при условиях, в которых лигнин разрушается до фрагментов с низким молекулярным весом, в результате чего происходят изменения его физико-химических свойств. Таким образом, выбор метода экстракции имеет значительное влияние на структуру и свойства лигнина.

Работа основана на выделении лигнина из древесины норвежской ели экстракцией 2% раствором щелочи и перекисью водорода. Пероксид много лет широко используется при отбеливании сульфит- и крафт-целлюлозы, но совместное щелочное применение при растворении и делигнификации лигнинцеллюлозного материала до сих пор изучается. Высокая эффективность при отбеливании и делигнификации наблюдается при проведении реакции в щелочной среде. В данных условиях анион гидропероксида (HO_2^-) в роли активной частицы отвечает за устранение хромофорных групп из лигнина. Данный анион является сильным нуклеофилом, который в процессе отбеливания атакует этиленовые и углеродные группы, присутствующие в лигнине. Как следствие, такие хромофоры как хинон, коричный альдегид и кетоны, сопряженные с ароматическим кольцом переходят в нехромофорные соединения.

В результате применения новых способов экстракции лигнина из древесных пород с помощью разбавленной щелочи может привести к получению нового, более реакционноспособного лигнина. Мягкие условия проведения реакции способствуют получению менее конденсированного и тем самым более реакционноспособного лигнина.

ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННОЙ ГАЛАКТОГЛЮКОМАННОЗЫ ДЛЯ УДАЛЕНИЯ ТЯЖЁЛЫХ МЕТАЛЛОВ

Руководители : Е. А.Прутенская, Д.Даниель
Тверской государственный университет
Кафедра биотехнологии и химии

О-ацетилгалактоклоккоманнан (GGM) характеризуется высокой степенью ацетилирования, что приводит к хорошей растворимости его как в воде, так и в органических растворителях и препятствует развитию кристаллического порядка. Гидрогели, полученные на основе GGM, возможно применять как биоразлагаемые матрицы.

Они могут применяться и в таких стратегических областях, как высвобождение лекарственного средства и тканевой инженерии (удаление металлов). Тем не менее, их механические свойства имеют низкие показатели, поэтому необходимо проводить сополимеризацию с синтетическим сомономерами, например, с 2-гидроксиэтил метакрилатом (HEMA) или макромономером, метакрилоилированным поли-(этиленгликолем) (PEGDMA). В результате можно получить новые смешанные природно-синтетические гидрогели, которые будут обладать оптимальным гидрофильно-гидрофобным балансом, и подходящими механическими и деградационными свойствами.

В данной работе рассматриваются пути сополимеризации GGM с гликозилметакрилатом (GMA). Реакция осуществляется в две стадии.

Первая стадия – модификация О-ацетилгалактоклоккоманнана взаимодействием его с GMA, катализируемая диметиламинопиридином. В ходе экспериментов оптимизируются такие условия проведения реакции как время, количество катализатора, тип растворителя для GGM.

Следующая стадия – радикальная полимеризация полученного модифицированного GMA (GMA-MA), с использованием 2 – хлорид (метакрилоилокси) этил-аммония как мономера. Для этой реакции используются различные типы инициаторов, в том числе окислительно-восстановительный и ультрафиолетовый. Также получают гидрогели с участием наноцеллюлозы, которые, предположительно, обладают лучшими абсорбционными свойствами. В дальнейшем анализируются свойства полученных гидрогелей: скорость набухания, вязкость и вязкоупругое состояние. Гидрогели тестируются также на способность поглощать тяжелые металлы из воды.

А.В. Котомкин

КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ФТОРАЛКАНОВ И ИХ РАДИКАЛОВ

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

В настоящее время наблюдается повышенное внимание к фторорганическим соединениям, что требует более детального исследования их структуры и свойств.

Целью настоящего исследования является изучение индуктивного влияния F-заместителей в гомологических рядах фторалканов и их радикалах.

В работе с использованием программы GAUSSIAN 03 методом B3LYP/6-311++G(3df,3pd) определены равновесные геометрии и распределения электронной плотности молекул $C_nH_{2n+1}F$, где $0 \leq n \leq 9$, и радикалов $C^\bullet H_2(CH_2)_nF$, где $0 \leq n \leq 9$, $C_nH_{2n+1}C^\bullet HF$, где $0 \leq n \leq 8$. Электронные параметры групп R , где $R = CH_2, CH_3, C^\bullet H_2, C^\bullet HF, F$, вычислены в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» (QTAIM) с помощью программы AIMALL.

Для достижения заявленной цели были поставлены и решены следующие задачи:

1. Установлено равновесные геометрии молекул гомологического $C_nH_{2n+1}F$, где $0 \leq n \leq 9$, и радикалов $C^\bullet H_2(CH_2)_nF$, где $0 \leq n \leq 9$, $C_nH_{2n+1}C^\bullet HF$, где $0 \leq n \leq 8$.

2. Определены электронные параметры (заряд $q(R)$, энергия $E(R)$ и объем $V(R)$) функциональных групп R , где $R = CH_2, CH_3, C^\bullet H_2, C^\bullet HF, F$, исследуемых соединений.

3. Показано, что индуктивное влияние F распространяется по углеводородной цепи на четыре CH_2 группы, от $C^\bullet HF$ – на три.

4. Предложена качественная шкала электроотрицательностей групп $\chi(R)$ для изученных структур:



А. В. Котомкин

ИЗУЧЕНИЕ ИЗОМЕРИИ ТИОКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ $\text{CH}_3-(\text{CH})_n-\text{CSOH}$

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

Тиокарбонные кислоты используются в качестве исходных блоков для построения большого числа биоорганических соединений. В природе существуют в виде смеси двух таутомеров $\text{R}-\text{C}(\text{S})\text{OH}$ и $\text{R}-\text{C}(\text{O})\text{SH}$ (рис. 1).

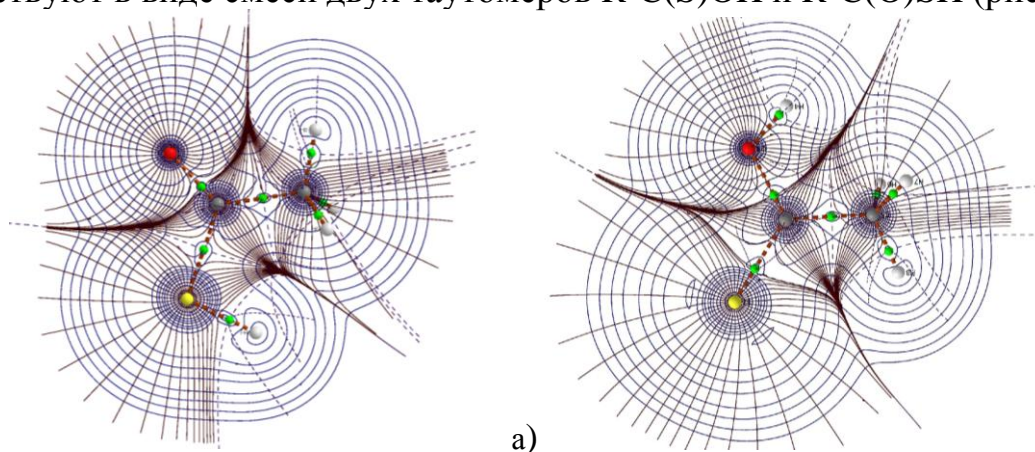
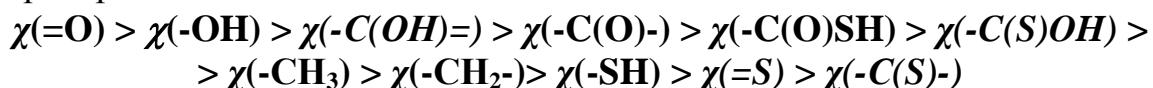


Рис.1: Анализ распределения электронного строения [1,2,5] CH_3-CSOH (а)-тиольной и б)-тионовой форм тиоуксусной кислоты).

Целью данной работы является создание качественной шкалы χ .

Используя метод DFT B3LYP в базисе 6-311++G(3df,3pd) [1] рассчитали равновесное строение таутомерных форм соединений $\text{CH}_3-(\text{CH})_n-\text{CSOH}$, где $n \leq 8$. С помощью программы AIMALL [3] проведён анализ распределения электронного строения $\text{CH}_3-(\text{CH})_n-\text{C}(\text{S})\text{OH}$ и $\text{CH}_3-(\text{CH})_n-\text{C}(\text{O})\text{SH}$ изомеров. Заряды атомов (q) вычислялись в рамках «квантовой теории атомов в молекуле» (QTAIM) [2]. Проведено качественное сравнение электроотрицательностей (χ) групп из сопоставления зарядов и построена шкала электроотрицательностей.



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H. B., et. al. // *Gaussian 03 (Revision E0.1)*, Gaussian Inc., Pittsburgh PA, 2007
2. Бейдер Р. *Атомы в молекулах: Квантовая теория*. М., 2001. 532с
3. Todd A. Keith, *AIMAll (Version 10.05.04)*, 2010 (aim.tkgristmill.com)

Н.И. Кротова

ПОВЫШЕНИЕ ЗАЩИТНЫХ СВОЙСТВ ПОКРЫТИЙ В ПРИСУТСТВИИ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Руководитель: Л.И.Ворончихина

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Одним из наиболее эффективных средств защиты от коррозии аппаратуры, оборудования, металлоконструкции, находящихся в различных условиях эксплуатации, являются лакокрасочные покрытия, которые ограничивают доступ агрессивной среды к защищаемой поверхности. Но лакокрасочные покрытия пока остаются дефицитными, кроме того, в процессе эксплуатации они подвергаются различным атмосферным воздействиям, что приводит к изменению их механических и оптических свойств. Лакокрасочные покрытия, модифицированные введением веществ непердельного характера, при длительном хранении теряют свои свойства и становятся непригодными для практического применения.

В связи с этим разработка эффективных модифицирующих добавок для введения в лакокрасочные покрытия – ингибиторов коррозии или пассиваторов, является весьма актуальной.

С целью получения покрытий с улучшенными эксплуатационными свойствами и обладающими повышенными защитными свойствами изучена возможность модификации лакокрасочных покрытий введением поверхностно-активных веществ (ПАВ), различающихся как природой гидрофильного центра, так и строением гидрофобного радикала. Адсорбируясь на межфазных поверхностях раздела, ПАВ образуют на них мономолекулярные (а иногда и полимолекулярные) слои ориентированных молекул (ионов), резко изменяя молекулярную природу поверхности. Среди известных классов ПАВ наиболее перспективны в качестве ингибиторов коррозии катионные ПАВ, обладающие защитным действием в нейтральных и кислых средах.

В настоящей работе исследованы защитные свойства катионных ПАВ - четвертичных солей аммония общей формулы $R(CH_3)_2NCH_2CH_2OH$, где $R = C_{11}H_{23}; C_{15}H_{31}; C_{17}H_{35}$. Кроме того, в качестве ингибиторов коррозии в составе лакокрасочных покрытий исследованы маслорастворимые ПАВ – сложные эфиры диметилэтаноламина и высших жирных кислот $R(CH_3)_2NCH_2COOR_5$ представляющих собой полупродукты при получении четвертичных солей аммония. Они представляют интерес как перспективные дешевые ингибиторы, имеющие доступную сырьевую базу и достаточно простую технологию получения.

ЗАВИСИМОСТЬ АКТУАТОРНЫХ СВОЙСТВ ПОЛИАНИЛИНОВОЙ ПЛЕНКИ ОТ pH

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственной университет

Кафедра Неорганической и аналитической химии

Ранее, нами было показано, что полианилиновая (ПАНи) пленка может быть использована в качестве рабочего тела электрохимического актуатора (ЭХА). Предложенный механизм изменения геометрических размеров ЭХА основан на изменении конформации окисленной и восстановленной формы. Известно что в реакциях окисления и восстановления ПАНи принимает участие H^+ . Поэтому целью настоящей работы было изучение влияния pH среды на его работоспособность.

ЭХА был изготовлен по принципу биметаллической пластинки, где роль подложки выполняла платиновая фольга, а рабочего тела – пленка полианилина. Полианилиновая пленка была нанесена на поверхность подложки методом циклической вольтамперометрии (ЦВА) в несколько этапов. Для предотвращения осаждения ПАНи с другой стороны платиновой подложки, мы ее изолировали от раствора при помощи изоляционного лака. Для фиксации изменений геометрических размеров использовался микроскоп совмещенный с web-камерой.

Эксперимент заключался в измерении деформации ЭХА под действием электрического тока в среде с различными значениями pH. Величина pH контролировалась при помощи иономера, и создавалась при помощи HCl и NaOH необходимой концентрации. Измерение отклонения ЭХА проводили с использованием ЦВА. Было выяснено, что рабочим диапазоном pH является от 0 до 3 pH. Несмотря на то, что актуатор перестает работать при pH более 3-х, но даже длительное пребывание при pH 11 не приводит к необратимой потере его работоспособности. Это хорошо согласуется с зависимостью электросопротивления полианилина от величины pH. Наибольшая амплитуда отклонения ЭХА была зарегистрирована при pH в интервале 0-1 pH. При увеличении pH амплитуда деформации ЭХА снижается. Была обнаружена линейная зависимость степени искривления ЭХА от его потенциала в одном и том же буферном растворе. Время отклика было менее 1 секунды. Также был обнаружен своеобразный гистерезис отклонения ЭХА в зависимости от направления изменения потенциала. Кроме того, на величину этого гистерезиса оказывает pH среды. Это явление имеет максимальную величину при pH 3, закономерно уменьшаясь до pH 0. Если необходимо установить точное геометрическое положение ЭХА, то необходимо задавать его потенциал все время от меньшего к большему значению (либо наоборот). При соответствующей доработки данный актуатор, на наш взгляд, может быть использован для механического манипулирования микрообъектами.

ЭНЕРГИИ РАЗРЫВА СВЯЗИ В АЛКАНАХ И ИХ АНАЛОГАХ

Руководитель Ю.Г. Папулов

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Энергия разрыва связи – важный фактор, характеризующий стабильность молекул и вещества. Скудность экспериментальных данных по энергиям разрыва связей в органических соединениях делает актуальным развитие расчетных методов их определения .

Цель настоящей работы – проведение анализа энергии разрыва связи в алканах и их аналогах.

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи:

5. Оценка составления и анализ экспериментальных данных по энергиям разрыва связи в исследуемых соединениях.

6. Построение расчётных схем и проведение численных расчетов,

7. Построение и анализ графических зависимостей «энергия разрыва связи – число заместителей».

В работе применялись – феноменологические методы, основывающиеся на концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов в молекуле.

В результате проделанной работы были проанализированы графические зависимости “Энергия разрыва связи - степень замещения l ”. Найдено, что эти они в общем случае нелинейны, однако линии замещения на одну и ту же группу симбатны между собой. Данные зависимости также позволяют графическим путем получить недостающие значения свойств.

Анализ числовых данных по энергиям разрыва связей в алканах и их аналогах, сопоставление и упорядочение их по рядам сходных молекул позволил выявить определенные закономерности.

В работе также проведены численные расчеты по энергиям разрыва связей алканах и кремнийорганических соединениях. Там, где можно сделать сопоставления эти расчёты согласуются с экспериментом.

И.В. Кузьмина

СИНТЕЗ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ СОЛЕЙ ПИРИДИНИЯ, ЛАНТАНА И НЕОДИМА

Руководитель: доцент, к.х.н. Егорова И.Ю.

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

Развитие высоких технологий все более вовлекает использование лантаноидов. На основе лантаноидов получают многие уникальные материалы, которые находят широкое применение в различных областях науки и техники. В этом отношении не будет преувеличением отнести лантаноиды и их сплавы к материалам XXI века. металлоорганические соединения лантаноидов применяются в органическом синтезе и катализе, используются для создания материалов с заданными электрическими, оптическими и магнитными свойствам (полимерные вещества) [1].

Представленная работа посвящена синтезу комплексных соединений на основе хлоридов алкилпиридиния, лантана и неодима. Четвертичные соли алкилпиридиния, различающиеся длиной алкильного радикала, были получены кватернизацией пиридина алкилхлоридами. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопии.

Взаимодействием сульфата лантана (III) с гидроксидом натрия получен гидроксид лантана. Хлорид лантана LaCl_3 получили путем обработки гидроксида лантана соляной кислотой. Взаимодействием дециловой кислоты с оксидом неодима получен децилат неодима. Далее взаимодействием децилата неодима с хлоридом олова (IV) получен хлорид неодима.

Реакцией взаимодействия соли децил- и додецилпиридиния с хлоридами лантана и неодима в ацетоне получены тетрахлорлантанат и тетрахлорнеодимат децил- и додецилпиридиния [2]. Строение полученных соединений подтверждено данными ИК-спектроскопии. Далее планируется получить комплексные соединения с различным строением углеводородного радикала и изучить их свойства.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бочкарев М.Н. // Успехи Химии. 2000. Т. 69. С. 856 - 868.
2. Журавлев О.Е., Ворончихина Л.И. // Вестник ТвГУ. Серия: Химия. 2008. № 8 С. 92–98.

В.В. Кукарекин

ВЛИЯНИЕ СПОСОБОВ ПОСЕВА И ГУСТОТЫ СТОЯНИЯ НА ФОРМИРОВАНИЕ УРОЖАЙНОСТИ СОРТОВ СОИ В УСЛОВИЯХ ВЕРХНЕВОЛЖЬЯ

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра общего земледелия и растениеводства

Соя – самая распространенная зернобобовая и масличная культура. В условиях Верхневолжья (Тверь) она не возделывается. Вместе с тем в последнее время вырос интерес к этой ценной культуре со стороны производства.

Цель наших исследований – изучить особенности формирования урожайности двух сортов сои при разных способах посева и густоте стояния; выявить оптимальную густоту стояния и способ посева, обеспечивающие получение наибольшей урожайности в условиях Верхневолжья.

С этой целью в 2012 – 2013гг. проведены полевые опыты, в которых изучались факторы: А – сорт: Аннушка и Мерлин; В – способы посева: 1- гребневой, междурядья 70 см., 2 - рядовой, междурядья 15 см., на гладкой поверхности, 3 - широкорядный, междурядья 45 см., на гладкой поверхности; С – норма высева: 200, 300, 400, 500, 600, 700, 800 тыс.шт./га.

В результате исследований выявлено: 1 – в условиях 2012г. при повышенном увлажнении и недостатке тепла не наступила полная спелость семян изучаемых сортов. Лучшим оказался широкорядный (45см) способ посева. Наибольший урожай сухих семян – 10,6 ц/га сорт Аннушка сформировал при норме высева 200 тыс./га и фактической густоте к уборке 129 тыс./га, сорт Мерлин – 11,3 ц/га при норме высева 300 тыс./га и фактической густоте 144 тыс./га. Увеличение нормы высева и густоты стояния не сопровождалось ростом урожайности семян; 2 - в 2013 г. лучшие условия сложились для сорта Мерлин при широкорядном (70 см) гребневом способе посева. Более высокий урожай семян сформирован при самой высокой норме высева 800 тыс./га и густоте стояния к уборке 148 тыс./га. Он составил 5,8 ц/га и был выше, чем при норме высева 200 тыс./га на 41,5 %. Наибольший урожай сухой фитомассы – 75,9 ц/га получен при норме высева 700 тыс./га с густотой стояния к уборке 124 тыс./га. Прибавка урожая к норме высева 200 тыс./га составила 28,0 ц/га (58,4%).

ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ АМИНОВ

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 аминах.

Для достижения поставленной задачи в работе применялись – феноменологические методы, но не все, а только те, которые непосредственно основываются *на концепции* попарных и более сложных взаимодействий атомов в молекуле - *атом-атомное представление*. В ряде задач использовались методы статистического анализа, линейной алгебры, в частности, матричного исчисления.

В работе проведена оценка состояния численных данных по энтальпии образования аминов, выявлены отдельные закономерности [1]:

- энтальпия образования зависит от длины цепи молекулы, причем для гомологов аналогичного строения (*n*-амины и т.п.) эта зависимость носит линейный характер, что свидетельствует о постоянном энергетическом вкладе CH_2 -группы;

- разности энергий между структурными изомерами аминов достигают 50 кДж/моль, причем наименьшие значения $-\Delta_f H_{298}^0$ имеют амины с третичным атомом азота.

Также в работе получены расчётные схемы. Так в третьем приближении имеем :

$$\begin{aligned} R_{c_n} H_{2n+2-m} X_m = & h_{cc} p_{c-c} + h_{cx} p_{c-x} + x_{cc1} \Gamma_{cc} + x_{cx1} \Gamma_{cx} + x_{xx1} \Gamma_{xx} + x_{ccc1} \Delta_{ccc} + \\ & + x_{ccx1} \Delta_{ccx} + x_{cxx1} \Delta_{cxx} + x_{xxx1} \Delta_{xxx} + x_{cc2} \tau_{cc} + x_{cx2} \tau_{cx} + x_{xx2} \tau_{xx} + \\ & + x_{cc3} \omega_{cc} + x_{cx3} \omega_{cx} + x_{xx3} \omega_{xx} \end{aligned}$$

где $X = \text{NH}_2$, $h_{cc} = (n-1)$, $h_{cn} = (2n+2-m)$, $h_{cx} = m$.

По приведенной формуле проведён численный расчёт энтальпии образования ряда аминов с $C_1 - C_6$. Рассчитанные величины, в общем, вполне согласуются с экспериментальными. Параметры Γ_{xx} , Δ_{xxx} , ω_{cx} выпадают из-за нехватки экспериментальных данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г., Куликов Г.С. // Вестник Тверского государственного университета. Серия «Химия», 2013. Выпуск 16. №30. С. 132–136.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫХ КОМПЛЕКСОНОВ, ПРОИЗВОДНЫХ ЯНТАРНОЙ КИСЛОТЫ

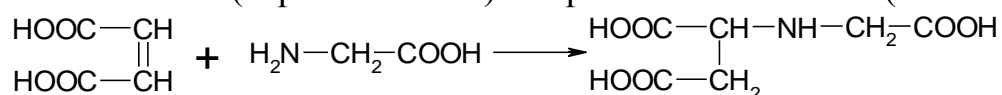
Руководитель: В.М. Никольский

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

В Тверском государственном университете создан ряд биологически активных экологически безопасных комплексонов, производных янтарной кислоты.

Специфика структур рассматриваемых комплексонов в сочетании с оптимизацией условий синтеза и выделения целевого продукта предусматривают нетрадиционный подход к методам их получения. Например, присоединение аминокислот, а то и просто аммиака, по двойным связям малеиновой кислоты. При осуществлении способов получения комплексонов резко снижается возможность протекания побочных реакций, а единственным продуктом реакции является получаемый комплексон.

Простейшей иллюстрацией универсального метода синтеза комплексонов может служить синтез N-(карбоксиметил)аспарагиновой кислоты (КМАК):



малеиновая к-та глицин

КМАК

По этому методу синтезирован новый комплексон группы производных янтарной кислоты 1,6-гексаметилендиамин-N,N'-диянтарная кислота [1]. Переосаждение синтезированного комплексона осуществляли с применением органических растворителей с последующим разделением фракций в специальной делительной воронке [2].

Работа выполнена при поддержке гранта фонда Бортника по программе «УМНИК».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Патентная заявка на изобретение №2013106188 от 14.02.2013 г., Способ синтеза 1,6-гексаметилендиамин-N,N'-диянтарной кислоты/ Яковлев А.А., Никольский В.М., Толкачева Л.Н., Симонова М.В.
2. Патент РФ №137767, опубл. 27.02.2014 Бюл. №6, Делительная воронка для разделения несмешивающихся жидкостей / Логинова Е.С., Никольский В.М.

Н.А. Любимова

ПРИМЕНЕНИЕ ПАЛЛАДИЕВЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ, СОДЕЖАЩИХ МАГНИТНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ, ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ПОЛУПРОДУКТОВ СИНТЕЗА ДУШИСТЫХ ВЕЩЕСТВ И ВИТАМИНОВ

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

Реакции селективного каталитического гидрирования алкинов являются одними из важнейших и интереснейших в практическом и теоретическом отношении. Эти процессы используются в производстве душистых веществ, биологически активных добавок, лекарственных препаратов и витаминов. Примером душистого вещества, синтезируемого посредством «ацетиленового» процесса, одна из стадий которого включает селективное гидрирование тройной $-C\equiv C-$ связи 2-метил-3-бутин-2-ола (C_5), является линалоол [1]. Кроме того, линалоол – один из промежуточных продуктов синтеза изофитола, который в свою очередь используется с целью получения витаминов Е и К [2].

Первым катализатором, используемым для селективного гидрирования кратных связей ацетиленовых спиртов, стал предложенный Линдларом $Pd/CaCO_3$, модифицированный ацетатом свинца и хинолином, который обеспечивает селективность 95% при 100% конверсии [3]. Однако, использование этих модификаторов приводит к загрязнению целевого продукта и экологически небезопасно, что требует усовершенствования традиционных Pd -содержащих каталитических систем и разработки новых.

Данная работа посвящена изучению каталитических свойств наночастиц Pd , стабилизированных в магнитно-разделяемых нанокompозитах на основе пиридилфениленовых дендронов и дендримеров, в реакции селективного гидрирования тройной связи ацетиленового спирта C_5 . Было показано, что использование синтезированных каталитических систем позволяет проводить процесс гидрирования тройной связи с селективностью до 97% (при 100% конверсии).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. G. Karlaganis, SIDS Initial Assessment Report for SIAM 14, 26-28 March 2002, Paris, France, 157 p.
2. W. Bonrath, M. Eggersdorfer, T. Netscher, Catal. Today, 121 (2007) 45.
3. H. Lindlar, Helv. Chim. Acta., 35 (1952) 446.

С.А. Максименко; Д.А. Бордин

ПРИМЕНЕНИЕ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ В АНАЛИЗЕ
АНТИКОАГУЛИРУЮЩЕГО ЛЕКАРСТВЕННОГО СРЕДСТВА
«ВАРФАРИН»

Научные руководители: к.б.н., доцент, Бордина Г. Е.
ГБОУ ВПО Тверская ГМА Минздрава России, г. Тверь
Кафедра химии

Отправной точкой нашего исследования послужил тот факт, что варфарин зарубежного производства – «варфарин никомед» у отдельных лиц вызывал тяжелые аллергические реакции, которые исчезали после отмены препарата и перевода пациента на отечественный препарат.

По составу препарат «варфарин никомед» отличается от отечественного аналога присутствием во вспомогательных веществах красителя индигокармина [2].

ИК-спектры поглощения регистрировали на ИК-спектрометре Nicolet iS10 фирмы Thermo SCIENTIFIC с автоматической записью спектра в области $400-4000\text{см}^{-1}$ при скорости $64\text{см}^{-1}/\text{мин}$. Обработка спектров проводилась по специальной компьютерной программе OMNIC.

На ИК-спектре видно наличие широкой полосы $2800-3500\text{см}^{-1}$, характеризующей наличие водородных связей (внутри и межмолекулярных). Следует отметить увеличение интенсивности этой полосы у варфарина никомед. Слабые пики $3550, 3450\text{см}^{-1}$ связаны с присутствием оксо группы кетонов. В области $3550-3200\text{см}^{-1}$ все кетоны имеют обертоны $\nu_{\text{C=O}}$, который ошибочно может быть отнесён к колебаниям ОН групп. В области $1660-1580\text{см}^{-1}$ отмечается полоса поглощения характерная для $\text{C}=\text{C}$, сопряженная с $\text{C}=\text{O}$ группой. [1–3].

Анализ ИК-спектров показал, что оба спектра близки как по форме, так и по положению пиков поглощения. Наличие пиков, соответствующих функциональным группам не выявлено. По-видимому, это связано с тем, что его содержание ($6,4\text{мкг}$) весьма незначительно по сравнению с активным компонентом ($2,5\text{мг}$).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Беллами Л. Новые данные по ИК-спектрам сложных молекул. М., 1971.
2. Российские клинические рекомендации по диагностике, лечению и профилактике венозных тромбозомболических осложнений // Флебология. 2010. № 1. Вып. 2.
3. Тарасевич, Б.Н. ИК спектры основных классов органических соединений: справочные материалы; МГУ имени М.В. Ломоносова – Москва 2012.

УДК: 546.33+547.466.2

К.А. Мартынова

ГЛУТАМАТ НАТРИЯ – ПОЛЬЗА ИЛИ ВРЕД, МИФ ИЛИ РЕАЛЬНОСТЬ

Руководители: Лопина Н.П., Бордина Г.Е.
ГБОУ ВПО Тверская ГМА Минздрава России, г. Тверь
Кафедра химии

Пищевая добавка Е621 известна как глутамат натрия и представляет собой, встречающуюся в природе натриевую соль глутаминовой аминокислоты.

Впервые глутамат натрия был получен в 1907 Кикунэ Икэдой. Сейчас глутамат натрия добывается в основном методом бактериального брожения.

В ЦНС человека присутствует около 106 глутаматергических нейронов, тела которых лежат в коре головного мозга, и других нервных структурах. В здоровом организме глутаматы синтезируются и используются для обеспечения функции практических любых быстро делящихся клеток. Глутаминовая кислота используется при лечении травм или ожогов.

Глутаминовая кислота её соли используются как усилитель вкуса во многих пищевых концентратах и консервах. При добавлении глутамата в пищу, у свиней, отмечается лучшая перевариваемость органических веществ и белка.

По сути своей это природное вещество, имеющееся в составе многих натуральных продуктов. Однако, как и в случае с любым продуктом стоит соблюдать меру — ведь даже витамины в слишком больших количествах могут стать угрозой здоровью человека.

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ЦИНКА (II) С ЦЕФТРИАКСОНОМ

Руководитель Алексеев В.Г.

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Цефтриаксон – цефалоспориновый антибиотик III поколения широкого спектра действия. В медицине используется в виде динатриевой соли Na_2Ctx . Молекула цефтриаксона содержит одну карбоксильную группу, однако этот цефалоспорин ведет себя как двухосновная кислота, так как не только карбоксильная группа проявляет кислотные свойства, но и гидроксильная группа гидрокситриазинового цикла боковой цепи молекулы. При этом аминотиазольная группа другой боковой цепи проявляет слабые основные свойства и способна к протонированию в кислой среде. Следовательно, анион цефтриаксона может выступать в качестве лиганда и образовывать с металлами устойчивые комплексные соединения.

Впервые проведено исследование комплексообразования Zn^{2+} с анионами Ctx^{2-} в растворе методом рН-метрического титрования при 25 °С и ионной силе 0.1 (KNO_3). Для проведения эксперимента использовали динатриевую соль цефтриаксона (Na_2Ctx) производства компании «Деко» (Москва) и цинк азотнокислый 6-водный по ГОСТ 5106-77 ($\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$). Полученные усредненные рН-метрические данные обрабатывались с помощью специализированной программы расчета химических равновесий New DALSFЕК (КСМ Soft, 2000 г.). Вначале были исследованы кислотно-основные равновесия в системе $\text{H}^+ - \text{Ctx}^{2-}$. Получены значения ступенчатых констант протонирования аниона Ctx^{2-} : $\lg K_1 = 4.39 \pm 0.05$, $\lg K_2 = 3.20 \pm 0.09$, $\lg K_3 = 2.34 \pm 0.13$. При этом можно предполагать, что K_1 соответствует протонированию тиазольного цикла, K_2 – окситриазиноновой группы, K_3 – карбоксилатной группы.

С учетом найденных констант протонирования исследовано комплексообразование ионов Zn^{2+} с анионами Ctx^{2-} . Проведено исследование систем, содержащих как избыток цефтриаксона, так и избыток цинка для учета возможного образования полилигандных и полиядерных комплексов. Математический анализ кривых показал, что происходит образование только средних монолигандных комплексов ZnCtx . Найдено значение $\lg \beta(\text{ZnCtx}) = 4.45 \pm 0.17$. Построены диаграммы распределения равновесных концентраций частиц в системе $\text{Zn}^{2+} - \text{Ctx}^{2-}$.

Н.В. Мельников

ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ПРЕДЕЛЬНЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ В ВОЗДУХЕ

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Пьезокварцевомикровзвешивание – чувствительный метод для определения содержания различных веществ в газовой среде. Путём подбора соответствующего адсорбента на поверхности кварцевой пластинки можно добиться селективности определенного класса веществ в воздушной среде. Целью настоящей работы было создание пьезоэлектрического сенсора с откликом на содержание предельных углеводородов в воздушной среде. Для решения поставленной задачи мы использовали в качестве кварцевого резонатора НС-49/US с частотой 8 МГц. Для придания чувствительности к предельным углеводородам на поверхность кварцевого резонатора был нанесён Squalanерастворённый в гексане с последующим удалением растворителя. Эксперименты показали, что избыточное количество адсорбента срывает генерацию на резонансной частоте кварцевого резонатора. Было установлено оптимальное количество адсорбента ($0,1 \cdot 10^{-7}$ грамм), которое было равномерно распределено по всей поверхности резонатора. Кварцевый резонатор был подключен к электрической схеме генератора. Частота этого генератора контролировалась при помощи частотомера электронно-счетного 43-54. Все эксперименты проводили в термостатированной герметичной камере, снабжённой вентилятором для перемешивания воздуха. Пробы воздуха с известным содержанием углеводородов вносились в герметичную камеру при помощи шприца. Было выяснено, что изготовленный сенсор имеет удовлетворительный отклик на величину содержащихся углеводородов в воздухе. Время отклика не превышало 20 секунд, время релаксации 5 минут. Изготовленный сенсор обладает хорошей воспроизводимостью результатов и чувствительностью. Вероятно, данное устройство может найти практическое использование для мониторинга объектов окружающей среды.

СЕЛЕКТИВНЫЕ К АНТИБИОТИКАМ ХИМИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ НОВОГО ТИПА

Консультант д.х.н., профессор Алексеев В.Г.

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Бета-лактамы антибиотики, прежде всего пенициллины и цефалоспорины, являются одними из наиболее распространенных лекарственных средств. На рынке нередко встречаются различного контрафактные лекарственных формы пенициллинов и цефалоспоринов, в том числе с заниженным содержанием действующего вещества и с подменой действующего вещества более дешевым и менее эффективным аналогом. Вследствие того, что все пенициллины и цефалоспорины в зависимости от рН раствора существуют в ионной форме, возможно создание ионоселективных электродов с откликом на эти антибиотики и применение для анализа лекарственных форм и других, содержащих антибиотики объектов, простого, быстрого, и при этом достаточно чувствительного и селективного метода ионометрического анализа.

Химические сенсоры нового типа основаны на синтезированных и исследованных нами малорастворимых комплексах железа (III) с анионами бета-лактамы антибиотиков. Методика получения комплексов защищена НОУ ХАУ Тверского государственного университета «Методика синтеза твердых комплексов железа (III) с бета-лактамы антибиотиками» № 01-047-2013 от 14 июня 2013. Применение неводных растворов комплексных соединений антибиотиков в качестве электродноактивного вещества предотвращает гидролиз антибиотиков, увеличивает срок службы и селективность данных сенсоров. Подобная конструкция сенсора с откликом на анионы антибиотиков является принципиально новой и ранее в литературе не описана.

Полученные сенсоры позволяют осуществлять контроль за содержанием лекарственных форм и других, содержащих антибиотики объектов, выявлять контрафактные лекарственные формы пенициллинов и цефалоспоринов, в том числе с заниженным содержанием действующего вещества и с подменой действующего вещества более дешевым и менее эффективным аналогом. В дальнейшем возможна разработка мультисенсорных электродных систем для анализа лекарственных форм комбинированных антимикробных препаратов, например, содержащих амоксициллин и клавулановую кислоту.

Е.С. Молчанова, М.В. Мыльникова

БИОКАТАЛИТИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ НЕЗАМЕНИМЫХ АМИНОКИСЛОТ ПРИ БИОКОНВЕРСИИ ОРГАНИЧЕСКИХ ОТХОДОВ

Руководитель Е.В. Ожимкова

Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии и химии

Перспективными методами получения биологически активных веществ могут служить процессы биоконверсии, в которых доступные органические материалы играют роль исходного субстрата. Сырьем для твердофазной биоконверсии может служить разнообразное углеродсодержащее сырье [1]. Именно наличие в исходном органическом сырье сообществ микроорганизмов и необходимых для них элементов питания способно определять ход процесса ферментации и формирование конечного продукта.

Метаболический аминокислотный фонд клетки служит источником их накопления при микробиологическом синтезе аминокислот. Когда синтез белка в культуре практически прекращен, а синтез аминокислот продолжается, продукты синтеза поступают во внешнюю среду. Способность аккумулировать в среде для культивирования аминокислоты обнаружена у многих микроорганизмов. При этом строгой корреляции между видовой принадлежностью микроорганизма и его способностью накапливать аминокислоты нет. Наиболее распространенными продуцентами являются бактериальные культуры, относящиеся к родам *Arthrobacter*, *Brevibacterium*, *Micrococcus*, *Microbacterium*, *Corynebacterium*. Активное накопление аминокислот в среде происходит с середины экспоненциальной фазы роста культуры, достигая максимума к ее концу [2].

В представленной работе проведена твердофазная ферментация смесей, содержащих отходы растениеводства, с получением биологически активных веществ. Экспериментально подобран ряд факторов (продолжительность, температура, рН, аэрирование и т.д.) для определения оптимальных условий процесса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Биотехнологическое использование отходов растениеводства / А.И.Осадочная, В.С.Подгорский, В.Ф.Семенов Киев, 1990. 183 с.
2. Микробиологический синтез аминокислот (Сборник АН ЛатвССР, ин-т микробиологии им. А.Кирхенштейна). // Под ред. П.А Кукайн, Ю.О.Якобсон, А.Э.Дук. - Рига: Зинатне, 1972. 130 с.

Т.С. Молькова, С.С. Рыжкова, М.А.Базанова

ТЕРМОХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ СМЕШАННОЛИГАНДНОГО КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ КОМПЛЕКСОНАТОВ МЕТАЛЛОВ(II) С АМИНОКИСЛОТАМИ В РАСТВОРЕ

Руководители Д.Ф. Пырзу, Е.В.Козловский

Ивановский государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Активное использование комплексонов (Ida, Nta и др) для удаления токсического избытка катиона металла в организме человека посредством хелатотерапии, а также при разделении белков в процессе аффинной хроматографии делает актуальным изучение взаимодействия комплексонов металлов с аминокислотами и олигопептидами. В связи с этим представляет интерес изучение систем M^{2+} - Ida^{2-} , Nta^{3-} - аминокислота, дипептид в водном растворе с целью определения дентатности и типов координации лигандов в смешанных комплексах.

В ходе работы была проведена серия рН-потенциометрических титрований растворов ($NaMNta + HL \cdot HCl$) ($M = Cu, Ni, Co, Zn$; $L = His, Lys, Orn, Arg, Ser$) раствором $NaOH$ при $25^{\circ}C$ и ионной силе 0,5 (KNO_3) при соотношении $MNta : L = 1:1$. ЭДС цепи с переносом, включающей стеклянный и хлорсеребряный электроды, измеряли компенсационным методом. Обработку экспериментальных данных рН-метрических измерений проводили по программе РНМЕТР [1]. Согласие между рассчитанной кривой и экспериментом достигалось только при учете образования наряду с $MNtaL$ (заряды опущены) смешанного комплекса состава $MNtaHL$ ($L = His, Lys, Orn, Arg$). В случае серина установлено существование в растворе смешанных комплексов состава $MNtaSer$ и $MNtaSerH_1$. Измерения тепловых эффектов проводили на ампульном калориметре смешения с изотермической оболочкой и термистерным датчиком температуры. Обработку калориметрических данных проводили по программе HEAT [1].

Для систем $MNta-L$ ($M = Cu, Co, Ni$; $L = His, Ser, Arg$) были сняты электронные спектры поглощения. Измерение оптической плотности проводили на спектрофотометре КФК-3. Обработку спектрофотометрических данных проводили по программе FTMT [1]. Для систем $ZnNta-L$ ($L = His, Orn$) были сняты спектры ЯМР на ядрах 1H и ^{13}C . Спектры ЯМР регистрировали на приборе Bruker AVANCE III – 500. В качестве внешнего стандарта использовали циклогексан.

Данные спектральных методов были сопоставлены с данными термодинамики, что позволило предложить наиболее вероятный тип координации аминокислотного остатка в смешанных комплексах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1.В.А. Бородин, В.П. Васильев, Е.В. Козловский. Математические задачи химической термодинамики. Новосибирск, 1985.

Е.А. Мочалова, И.А. Соколова

СИНТЕЗ ПОЛИ-*n*-ФЕНИЛЕНТЕРЕФЛАМИДА

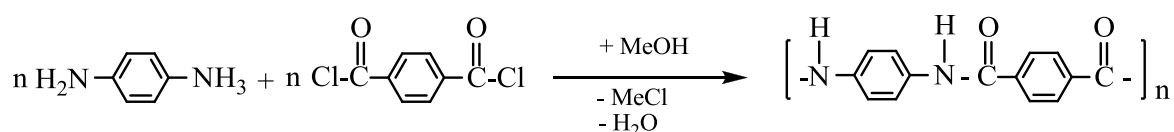
Руководитель: Лагуцева Е.И.

Тверской государственной технической университет

Кафедра технологии полимерных материалов

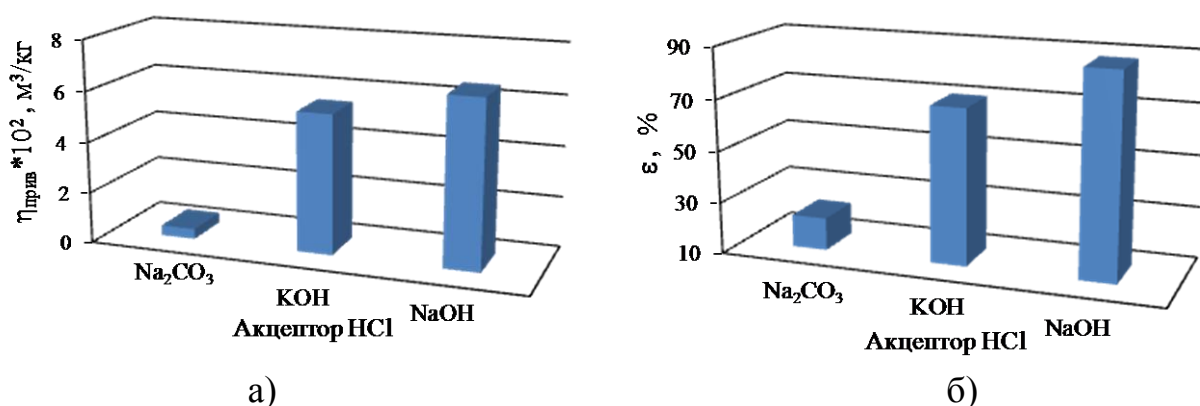
Ароматические полиамиды (полиарамиды) позволили решить проблему получения легких, высокопрочных, высокомодульных, теплостойких, огнестойких материалов многофункционального назначения практически всего традиционного ассортимента полимерных материалов¹.

Цель данной работы – синтез ароматического полиамида поли-*пара*-фенилентерефталамида (терлон, арамид,) эмульсионной поликонденсацией



с использованием в качестве акцептора хлористого водорода HCl щелочи (Na₂CO₃, KOH, NaOH) и изучение свойств полученного полимера.

Водная фаза – 0,1 Н раствор *n*-фенилендиамина и 0,14 Н раствор щелочи. Органическая фаза – 0,1 Н раствор терефталойлхлорида в толуоле.



Зависимость молекулярной массы (η_{прив}) (а) и выхода (ε) (б) от вида акцептора хлористого водорода

Анализ полученных зависимостей показал влияние вида акцептора хлористого водорода на выход (ε) и молекулярную массу (η_{прив}) полимера: максимальные показатели продукта выявлены при использовании акцептора HCl гидроксида натрия, что согласуется с литературными данными.

¹ Михайлин Ю.А. Термоустойчивые полимеры и полимерные материалы - СПб.: Профессия, 2006. 624 с.

Е. Н. Некрасова

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СРОКА ДАВНОСТИ НАПИСАНИЯ ДОКУМЕНТА СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Руководитель М. А. Феофанова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Экспертизу давности написания документа используют для определения настоящей даты создания документа. Это один из популярных способов исследования, так как в суды предоставляют огромное количество бумаг, на которых истинная дата создания и дата указанная могут быть не одинаковы, – контрактов, справок, договоров, доверенностей. Экспертиза давности написания документа способна выявить подлог, основываясь на несовпадении даты, указанной на бумаге, и времени, когда на самом деле был создан документ.

Цель исследования заключается в разработке метода определения давности написания документа, исключающего проблему надобности достаточного количества образцов для проведения сравнительного анализа. На данный момент, если для анализа предоставлен единственный документ, а в архиве образцов отсутствуют подходящие экземпляры, то экспертизу не проводят. Данный метод позволяет при помощи спектрофотометрических характеристик чернил, использованных при написании документа, определить давность написания документа в интервале от 0 мес. до 30 мес., используя всего один документ для экспертизы.

Также этот метод исключает проблему ненадлежащего состояния документа. На данный момент, если в результате неправильного хранения или умышленной порчи документ значительно видоизменен или утеряны первоначальные характеристики документа, то экспертизу не проводят. Данный метод позволяет использовать всего 6 отрезка штрихов образца размерами 1 см или 2 см. Тем самым позволяет использовать документы, дату создания которых другими способами экспертизы не определить.

Сущность метода заключается в том, что образец экстрагируют в течение 10 мин в органическом растворителе. Затем снимается спектр в диапазоне от 200 до 800 нм. Второй образец нагревают в течение 90 мин при 105 – 110 °С, а затем проводят экстрагирование при тех же условиях и снимают спектр в том же диапазоне. В области длины волны максимума, соответствующего пикам поглощения красителя исследуемых объектов, сравнивают величины изменения оптических плотностей образцов после и до «искусственного старения», тем самым, определяя давность написания документа.

КОМПЛЕКСЫ СЕРЕБРА(I) С ЦЕФАЗОЛИНОМ И ЦЕФОТАКСИМОМ

Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Цефазолин (НСzl) и цефотаксим (НСxm) – эффективные антибиотики из группы цефалоспоринов. В водных растворах проявляют свойства карбоновых кислот и образуют соли с катионами металлов. Путем взаимодействия водных растворов натриевых солей цефазолина и цефотаксима с водным раствором AgNO_3 впервые получены и исследованы в виде осадков AgCzl и AgCxm . После промывания холодной водой на фильтре, осадки высушены на воздухе сначала при комнатной температуре, затем в течение 3 часов при $80\text{ }^\circ\text{C}$. Методом синхронного термического анализа на приборе Netzsch STA 449 F3 Jupiter установлено, что полученные образцы не содержали кристаллизационной воды. Состав образцов (см. табл.1) определен методом элементного анализа на CHNS-анализаторе Perkin Elmer 2400 Series II. Исследование методом ИК спектроскопии на приборе Bruker Equinox 55 показало смещение полос валентных колебаний $\nu(\text{C}=\text{O})$ амидной и бета-лактамной групп в сторону более высоких частот по сравнению со спектром натриевой соли антибиотика (табл. 2), что можно расценивать как координацию этих групп с ионом серебра. Таким образом, полученные соединения AgCzl и AgCxm можно рассматривать как внутрикмоплексные.

Таблица 1. Результаты элементного анализа полученных образцов

Образец	Брутто-формула	Содержание (найдено / вычислено), %			
		C	H	N	S
AgCzl	$\text{C}_{14}\text{H}_{13}\text{N}_8\text{O}_4\text{S}_3\text{Ag}$	28.98 / 29.95	2.37 / 2.33	19.51 / 19.96	17.51 / 17.14
AgCxm	$\text{C}_{16}\text{H}_{16}\text{N}_5\text{O}_7\text{S}_2\text{Ag}$	32.62 / 34.17	3.24 / 2.87	12.30 / 12.45	10.61 / 11.40

Таблица 2. Спектральные характеристики образцов в ИК-области

Образец	Отнесение колебаний		
	$\nu(\text{C}=\text{O})$ β -лактам	$\nu(\text{C}=\text{O})$ Амид	$\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)$ (asym)
NaCzl	1761	1680	1604
AgCzl	1772	1697	1608
NaCxm	1758	1647	1612
AgCxm	1772	1674	1610

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ МАГНИЯ И КАЛЬЦИЯ С АНТИАРИТМИЧЕСКИМИ ПРЕПАРАТАМИ

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Сердечно – сосудистые заболевания — это группа болезней, уносящих огромное количество человеческих жизней по всему миру. Среди антиаритмических препаратов широкое применение получили соталол и анаприлин.

Анаприлин – это гетерофункциональное органическое соединение, содержащее ароматическую систему, связанную через простую эфирную связь с углеводородным радикалом, содержащим гидроксильную группу и вторичную аминогруппу в протонированной форме.

Соталол – гетерофункциональное соединение, содержащее бензольное кольцо с двумя заместителями в пара положении замещенной аминогруппой и углеводородным радикалом, содержащем гидроксогруппу в протонированной форме.

Цель исследования заключается в изучении кислотно-основных свойств анаприлина и соталола, а также ионно-молекулярных равновесий с участием ионов биометаллов. 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.

В работе исследованы соталол и анаприлин, выделенные из лекарственной формы, чистота которых была подтверждена методами элементного анализа и термогравиметрическим анализом. По данным рН-метрического титрования в среде физиологического раствора (ионная сила 0,15 NaCl и $t^{\circ}=37\text{ C}^{\circ}$) и с использованием методов математического моделирования (DALSFЕК) изучены кислотно - основные свойства анаприлина и соталола. Получены логарифмы констант образования комплексов и выявлены значимые комплексные формы в системах, средние и гидроксо – комплексы.

Если сравнивать комплексообразующие свойства соталола с ионами магния и кальция, то комплекс соталола с ионами магния ниже, чем устойчивость комплексных форм соталола и кальция.

Ю.Г. Оленева

ВЛИЯНИЕ АНТРОПОГЕННОГО ФАКТОРА НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ЛЕКАРСТВЕННЫХ РАСТЕНИЙ

Руководитель: П.М.Пахомов

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 доступной, а потому и самой распространенной является инфракрасная (ИК) и ультрафиолетовая (УФ) спектроскопия, с помощью которых можно решать задачи качественного и количественного анализа вещества. Использование современных физико-химических методов в изучении влияния различных антропогенных факторов на химический состав лекарственного сырья имеет большое практическое значение.

В работе был исследован химический состав стебля, листьев и цветков тысячелистника обыкновенного (*Achillea millefolium*), собранный в местах с антропогенной нагрузкой, который получил широкое распространение как в традиционной, так и в народной медицине.

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. Наличие изменения химического состава образцов под действием поллютантов подтверждали с помощью Фурье ИК спектроскопии.

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

Таким образом, с помощью спектрофотометрических методов установлено, что химический состав наземных частей тысячелистника обыкновенного чувствительны 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 позволяет глубже оценить степень загрязнения окружающей среды.

Ю.А. Орликова

АНТИМИКРОБНЫЕ СВОЙСТВА ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ АММОНИЯ, ПИРИДИНИЯ И МОРФОЛИНИЯ

Руководитель Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Известно, что на биологическую активность четвертичных солей аммония оказывает влияние как природа катиона, так и аниона, поэтому замена традиционных галогенид-анионов в структуре четвертичной соли на объемные анионы типа PF_6^- , BF_4^- , FeCl_4^- и др. должно сказываться и на их биологической активности. Подобные соединения – четвертичные соли алифатических или гетероциклических аминов находящиеся в жидком состоянии в широком интервале температур называются ионными жидкостями. Эти соединения в последнее время привлекают внимание в виду уникальности их свойств. Негорючесть, малое давление паров и гидрофобность ионных жидкостей исключает их попадание в окружающую среду и отвечает современным экологическим требованиям.

Целью работы был синтез тетрахлорферратов четвертичного аммония, пиридиния и морфолиния исследование их антимикробной активности в сравнение с исходными, базовыми галоидными солями.

Антимикробную активность изучали методом диффузии в агар среде Muller-Hinton по отношению к тест-культурам микроорганизмов грамм-положительным и грамм-отрицательным бактериям и оценили по: диаметру зон задержки роста тест штаммов в мм.

Исследования показали, что тетрахлорферраты четвертичных солей аминов по сравнению с исходными хлоридами обладают более широким спектром антибактериального действия. Наибольшим антимикробным действием обладал тетрахлорферрат децилпиридиния. соединение проявило выраженное антибактериальное действие как в отношении грамм-положительных и грамм-отрицательных бактерий, так и в отношении гриба *Candida albicans*.

А. В. Павлов

РЕАЛЬНАЯ СТРУКТУРА СЕГНЕТОКЕРАМИКИ СИСТЕМЫ ЦТС

Руководитель Н. Н. Большакова

Тверской государственный университет
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Цель работы – методом растровой электронной микроскопии (РЭМ) исследовать реальную структуру сегнетокерамики системы ЦТС, обладающей различным отношением Zr/Ti .

Образцы представляли собой диски диаметром 10 мм. Содержание циркония в образцах менялось от 0,41 до 0,61 моль. %. Сюда вошли составы, лежащие в морфотропной области диаграммы состояний, т.е. составы с преимущественно тетрагональным или ромбоэдрическим искажением элементарной ячейки.

Рис. 1 иллюстрирует типичную картину реальной структуры исследуемой керамики. Было выяснено, что микроструктура содержит поры, средний размер которых составляет 0,05–0,14 мкм.

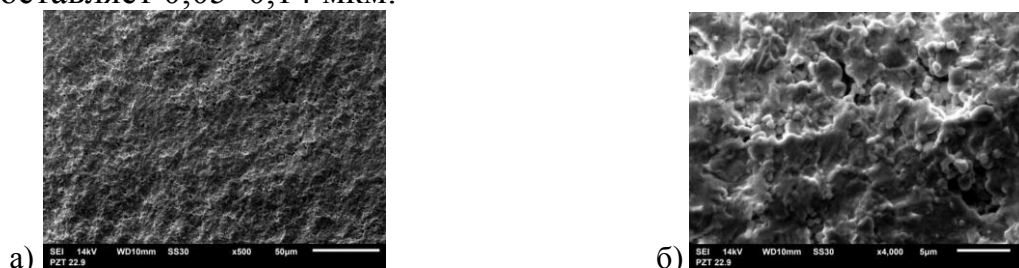


Рис 1. Изображения структуры сколов пьезоэлементов, изготовленных из сегнетокерамики системы ЦТС () при различных увеличениях: а) 500 раз б) 4000 раз

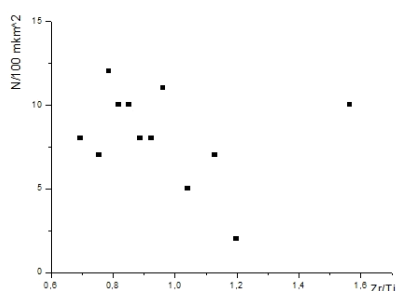


Рис. 2. Концентрационная зависимость числа пор сегнетокерамики

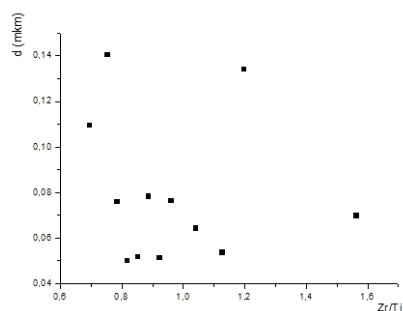


Рис. 3. Концентрационная зависимость средних размеров пор сегнетокерамики

На рис. 2 и 3 приведены концентрационные зависимости числа и средних размеров пор сегнетокерамики.

Видно, что наиболее крупные поры принадлежат составу, лежащему в морфотропной области диаграммы состояния. По-видимому, увеличение диэлектрической проницаемости этих образцов является следствием уменьшения числа пор.

ОБЩАЯ ОЦЕНКА ПИТАТЕЛЬНОЙ ЦЕННОСТИ КЛУБНЕЙ ТОПИНАМБУРА СОРТОВ «СКОРОСПЕЛКА» И «ИНТЕРЕС»

Руководитель д.с.-х.н., профессор З.И.Усанова
Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра общего земледелия и растениеводства

Топинамбур (земляная груша) – ценная культура многостороннего использования [1,2]. В настоящее время выведено большое количество его сортов и гибридов. Для средней полосы России наиболее приемлемым является раннеспелый сорт клубневого направления "Скороспелка" (авторы Устименко - Бакумовский Г.В., Усанова З.И.), а для южных регионов – позднеспелый сорт "Интерес" (автор Пасько Н.М.). Последний так же относится к клубневым сортам, но в более северных условиях может выращиваться для силосного использования [1]. В исследованиях по фотопериодизму показано, что путем искусственного сокращения длины дня можно добиться ускорения клубнеобразования и цветения, особенно - у позднеспелых сортов [2]. Особый интерес представляет использование топинамбура в пищевых целях. Клубни земляной груши содержат большое количество микро и макроэлементов (доля золы среднем около 3 - 6%); клетчатки (около 4–4,2 %); а так же ряд других полезных веществ (протеина – 8–12 %, сахаров (включая инулин) – 74 % и др.) Точное количество каждого из веществ зависит от сорта [1; 2]. Клетчатка способствует очищению и улучшению работы кишечника, а зола содержит полезные организму минеральные элементы [1].

Цель исследования: определить питательную ценность клубней топинамбура сортов «Скороспелка» и «Интерес». Результаты исследования показали, что у сорта «Интерес» они более богаты золой (4,97 %) и клетчаткой (5,53%). У сорта «Скороспелка» отмечено несколько меньшее содержание данных веществ (3,21 % и 4,16 % соответственно). Однако, следует отметить, что урожайность клубней у сорта «Скороспелка» в средней полосе на порядок выше ввиду раннеспелости сорта.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кочнев, Н.К., Топинамбур биоэнергетическая культура XXI века / Н.К. Кочнев, М.В. Калиничева - М., 2002. 76 с.
2. Усанова, З.И., Особенности биологии и технологии возделывания топинамбура // Топинамбур и другие инулиносодержащие растения - проблемы возделывания и использования [Текст]. Мат. 6-й Межд.,науч.-практ. конф., 12-14 сент. 2006 г. Тверь: ТГСХА, 2006. 260 с

Т. В. Перезовова, П. Н. Крылов

ИССЛЕДОВАНИЕ АГРЕГАЦИИ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ
НА ОСНОВЕ ЦИСТЕАМИНА, МЕРКАПТОПРОПИОНОВОЙ КИСЛОТЫ И
НИТРАТА СЕРЕБРА

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

Известно^{*2}, что водные системы на основе низкоконцентрированных растворов аминокислоты L-цистеин и нитрата серебра при определенных условиях являются гелеобразующими. Изучение агрегации в растворах других тиолсодержащих соединений, производных цистеина, позволит понять роль каждой функциональной группы в процессе гелеобразования. В данной работе были рассмотрены системы цистеина (ЦА) – AgNO₃, меркаптопропионовой кислоты (МПК) – AgNO₃ и их смеси (1:1). Оба исследуемых вещества содержат тиольную (меркапто-) группу, но ЦА (SH-CH₂-CH₂-NH₂) имеет аминогруппу, а МПК (SH-CH₂-CH₂-COOH) – карбоксильную, тогда как цистеин (SH-CH₂-CH-(NH₂)-COOH) – три функциональных группы.

Основными методами исследования в данной работе были динамическое светорассеяние (ДСР) (прибор “Zetasizer nano-ZS”, фирмы “Malvern”) и УФ спектроскопия (спектрометр “Evolution Array” фирмы “Thermo Scientific”). Было установлено, что в рассмотренных системах происходит агрегация с образованием кластеров, размер которых и устойчивость во времени разная. В системе на основе ЦА агрегаты крупнее и более стабильны по сравнению с системой МПК, а в смеси ЦА–МПК и нитрат серебра наблюдается присутствие зародышевых агрегатов размером ~ 2 нм и крупных частиц с размером гидродинамического радиуса 100–110 нм. Агрегация в системах возможна при условии образования низкомолекулярных соединений Ag-S-R, (где R – остальной фрагмент молекулы с меркаптогруппой), которые ассоциируют в олигомерные цепочки типа -Ag-S(R)-Ag-S(R)-. Таким образом, экспериментально доказано, что в системах на основе тиолсодержащих соединений и нитрата серебра происходит агрегация, причем размер кластеров зависит от структуры соединения.

² Пахомов П.М., Хижняк С.Д., Овчинников М.М., Комаров П.В. Супрамолекулярные гели. Тверь, 2011.

В.Е. Петрова

ПОЛУЧЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНО ЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ
ИМИДАЗОЛИНА

Руководитель Н.В. Веролайн

Тверской государственный университет

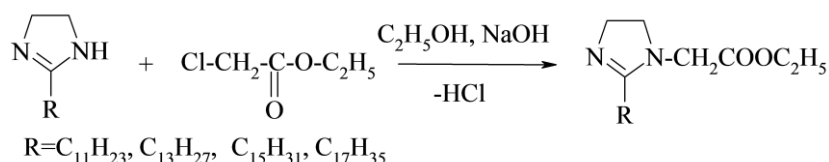
Кафедра органической химии

В публикациях последних лет присутствует большое количество работ посвященных получению новых производных имидазолина. Полученные исследователями 2-алкилимидазолины имеют следующие свойства: высокая термостабильность, низкая токсичность, биоразлагаемость, бактерицидная активность, хорошо экстрагирующие свойства. Кроме того, они обладают высокими антикоррозионными свойствами. С этой целью были получены функционально замещенные производные имидазолина.

Для синтеза 2-алкилимидазолинов был использован каталитический низкотемпературный метод. Конденсацию осуществляют нагреванием реакционной смеси в растворителях (бензол, толуол, ксилол и др.) при 80–120 °С в течение 6–8 часов.

Синтезированные 2-алкилимидазолины были использованы в качестве нуклеофилов для создания функционально замещенных производных имидазолина.

По модифицированной методике реакцию вели в полярном растворителе (изопропиловом спирте) при эквимолярных соотношениях исходных веществ, при эффективном механическом перемешивании и температуре 60–75 °С в течение 3 часов.



Амфолитизацию метилового эфира акриловой кислоты и 2-алкилимидазолина осуществляли при стехиомерическом соотношении реагирующих компонентов в воде при pH= 7,5 и температуре 45 °С. Продолжительность реакции 4 часа.

Определены коллоидно-химические свойства водных растворов полученных соединений. Данные соединений оказались эффективными ингибиторами коррозии в отношении стали-3.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Амбрамзон А.А., Зайченко Л.П., Файнгольд С.И. Поверхностно-активные вещества. Синтез, анализ, свойства, применение. Л., 1988. 200 с.
2. Розенфельд И.Л. Ингибиторы коррозии. М., 1977. 352 с.

ГИДРОХИМИЧЕСКОЕ ОКИСЛЕНИЕ СУЛЬФИДА НИКЕЛЯ (II) АЗОТНОЙ КИСЛОТОЙ

Руководитель В.И. Луцик

Тверской государственный технический университет
Кафедра химии

В работе представлены результаты исследования кинетики растворения синтетического сульфида никеля (миллерита), полученные методом вращающегося диска [1]. Математические зависимости удельной скорости растворения (W , моль/дм²с) в азотной кислоте при $C = 0,003\text{--}0,03$ моль/дм³, $T = 323\text{--}293$ К и ω от 1,6 до 10 с⁻¹ имеют вид:

$$W = 2,7 \cdot 10^{-6} \cdot c^{0,1} \cdot e^{-275/T} \cdot \omega^0 \cdot \tau^0 \quad (1)$$

для области высоких концентраций при $C = 0,5\text{--}3$ моль/дм³:

$$W = 3,3 \cdot 10^{-5} \cdot c^{0,82-218/T} \cdot e^{-583/T} \omega^0 \cdot \tau^0 \quad (2)$$

Влияние концентрации кислоты и температуры в изученных диапазонах их значений на величину удельной скорости растворения W сульфида никеля отражает рисунок 1.

Разработаны технологические рекомендации по осуществлению выщелачивания никеля из сульфидного сырья азотной кислотой.

а)

б)

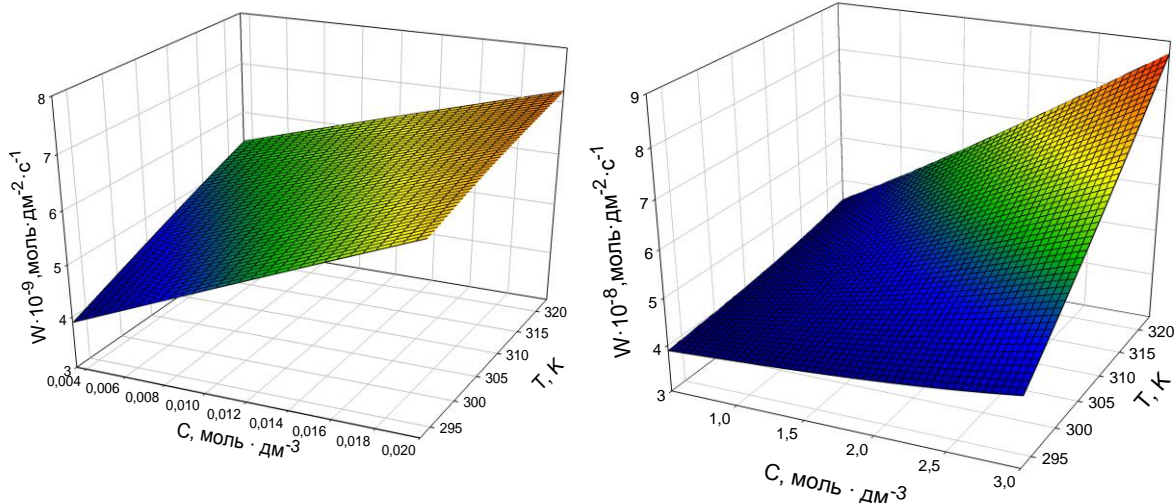


Рис.1. Зависимость окисления сульфида никеля NiS от концентрации азотной кислоты и температуры: а) при $C = 0,003\text{--}0,03$ моль/дм³; б) при $C = 0,05\text{--}3$ моль/дм³

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Луцик В.И. Кинетика гидролитического и окислительного растворения сульфидов металлов / В.И. Луцик, А.Е. Соболев. Тверь.: ТГТУ, 2009. 140 с.

А.А. Погудкина, Г.И. Куликов, В.Е. Ситникова

ХАРАКТЕРИСТИКИ МОРФОЛОГИИ ТРЕКОВЫХ МЕМБРАН МЕТОДАМИ ИК И УФ СПЕКТРОСКОПИИ

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

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Производство и разработка новых типов трековых мембран (ТМ) – область высоких технологий. Трековые (ядерные) мембраны изготавливаются из полимерных пленок посредством бомбардировки их высокоэнергетичными ионами криптона, пробивающими пленку насквозь. В местах прохождения отдельных ионов образуются каналы деструктированного материала (треки). Избирательное растворение деструктированного материала превращает исходную пленку в микрофльтрационную мембрану со сквозными порами цилиндрической формы. ТМ уже широко используются: при фильтрации различных жидкостей (питьевой воды) и газов (тонкая очистка воздуха); фильтрации крови при плазмофорезе; в электронной промышленности при изготовлении нанопроволоки и др. Важными характеристиками ТМ являются их селективность и диаметр пор. С целью изучения морфологии ТМ в работе предлагается использовать, развиваемый нами, неразрушающий спектроскопический метод.

Объектами исследования служили ТМ на основе ПП, ПЭТФ и ПК, изготовленные в ОИЯИ г. Дубна с диаметрами пор от 0,35 нм до 5 мкм при толщине пленок 10 – 23 мкм. ИК спектры образцов записывали на Фурье-ИК спектрометре «Equinox-55» фирмы Bruker УФ спектрометре «Evolution Array» фирмы Thermo Scientific. Морфологию ТМ также контролировали методами оптической (Hyperion-1000) и электронной сканирующей микроскопии (Jeol JSM 6610 LV)

В результате исследований было установлено, что оптические спектры несут важную информацию о морфологии ТМ, хорошо коррелирующую с данными визуальных методов.

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ СОРБЦИИ ФЕНОЛА АКТИВИРОВАННЫМИ УГЛЯМИ, ПОЛУЧЕННЫМИ ИЗ ПРОДУКТОВ ПИРОЛИЗА АВТОМОБИЛЬНЫХ ШИН

Руководитель Ю.В. Чурсанов

Тверской государственной технической университет

Кафедра химии

Улавливание фенола методами адсорбции позволяет решить проблему глубокой очистки сточных вод. В качестве адсорбентов чаще всего используют активированные угли, полученные активацией карбонизатов биомассы (древесины, бурых или каменных углей). Перспективными сорбентами могут являться твердые продукты пиролиза отходов резины – автомобильных шин.

Для изучения процессов адсорбции фенола из водных растворов были использованы образцы пиролизата резиновой крошки, полученного в процессе быстрого низкотемпературного пиролиза, и модельные водные растворы фенола с концентрацией $1,07 \text{ мг/см}^3$. Определены основные характеристики пиролизного карбонизата: влажность $0,33 \pm 0,02\%$; зольность $16,22 \pm 0,02\%$; содержание железа $0,19 \pm 0,02\%$; цинка $3,3 \pm 0,2\%$; адсорбционная емкость по иоду $14,7 \pm 0,3 \text{ мг/г}$.

Проведено исследование и сравнение различных методов определения фенола: фотоколориметрического с 4-аминоантипирином, флуоресцентного, кулонометрического титрования с электрогенерированным бромом. Рассчитаны метрологические характеристики методик: пределы обнаружения, повторяемости, точности. Наиболее приемлемой является флуоресцентная методика определения фенола: предел обнаружения – $0,8 \text{ мкг/мл}$; предел повторяемости – $0,012 \text{ мкг/мл}$; суммарная погрешность – $0,015 \text{ мкг/мл}$.

Кинетику адсорбции фенола изучали при механической агитации навесок карбонизата с раствором фенола. При достижении заданного времени пробу раствора фильтровали, часть раствора помещали в кварцевую кювету длиной 1 см и измеряли интенсивность флуоресценции на приборе «Флюорат 02-3М». Адсорбционное равновесие в системе устанавливается в течение 40 – 60 мин, величина предельной сорбции (сорбционная емкость) составляет 62 – 65 мг/г. Кинетические кривые описываются уравнениями 1-го порядка, что может свидетельствовать о лимитировании процесса внешней диффузией.

Полученные данные подтверждают возможность использования карбонизата, полученного быстрым пиролизом резиновой крошки для глубокой очистки сточных вод от фенола.

СИНТЕЗ ГЕКСАФТОРФОСФАТОВ И ТЕТРАФТОРБОРАТОВ ТЕТРААЛКИЛАММОНИЯ И ИХ ТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

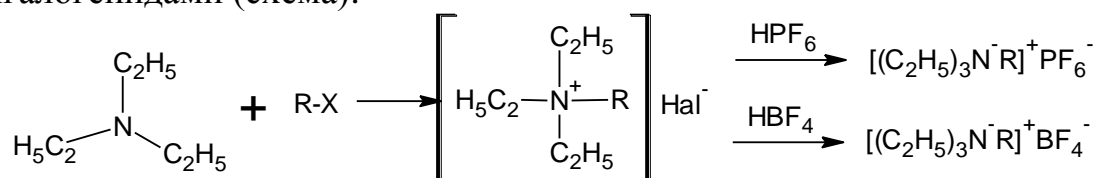
Руководитель О.Е. Журавлев

Тверской государственный 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 способствовала развитию исследований в области синтеза, катализа и др. областях органической химии. Гидрофобность гексафторфосфатов и тетрафторборатов является значительным преимуществом при их применении в качестве ионных жидкостей. Учитывая, что в некоторых процессах органической химии, приходится использовать ИЖ при повышенных температурах важным становится вопрос относительно их стабильности.

Поэтому целью данной работы было исследования термической стабильности гексафторфосфатов и тетрафторборатов тетраалкиламмония.

Гексафторфосфаты и тетрафторбораты тетраалкиламмония были получены из галогенидов тетраалкиламмония, путем метатезиса галогенид-аниона на PF_6^- и BF_4^- соответственно. Исходные галогениды были получены в результате реакций кватернизации триэтиламина различными алкилгалогенидами (схема):



где, $\text{R}=\text{CH}_3, \text{C}_4\text{H}_9, \text{C}_6\text{H}_{13}, \text{C}_8\text{H}_{17}, \text{C}_{10}\text{H}_{21}, \text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ $\text{Hal}=\text{Br}^-, \text{I}^-$

Термическую стабильность гексафторфосфатов и тетрафторборатов изучали методом термогравиметрии. Для сравнения была изучена термическая стабильность исходных галогенидов тетраалкиламмония. Нами показано, что замена галоид-иона на анионы PF_6^- и BF_4^- приводит к повышению температуры плавления солей (что не позволяет отнести исследованные соединения к низкотемпературным ионным жидкостям) и температуры разложения. В общем случае гексафторфосфаты и тетрафторбораты устойчивы до $320\text{--}360^\circ\text{C}$ и постепенно разлагаются в интервале $350\text{--}450^\circ\text{C}$. Галогениды тетраалкиламмония устойчивы лишь до $160\text{--}200^\circ\text{C}$ и быстро разлагаются в интервале $190\text{--}250^\circ\text{C}$.

И.А. Пресняков

СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ СУЛЬФИДА ЦИНКА В ПРИСУТСТВИИ МОДИФИКАТОРОВ

Руководитель: О.Е. Журавлев

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Процессы химического модифицирования поверхности различных материалов успешно используют на протяжении нескольких десятилетий для защиты поверхности от внешних воздействий, изменения ее характеристик, создания сорбентов, катализаторов, сенсоров, элементов электронных устройств, биосовместимых материалов и т.п.

Несмотря на большое число работ в этой области, появившихся в последнее десятилетие, создание новых методов получения наночастиц и, особенно, препаративного синтеза по-прежнему остается актуальной задачей. Введение модификатора поверхности на стадии синтеза служит эффективным способом регулирования размера образующихся наночастиц. Кроме того, модифицирование поверхности позволяет решить одну из главных проблем при работе с наночастицами - их высокую склонность к агрегации.

Интерес к наночастицам сульфида цинка связан, в первую очередь, с их практическим применением в качестве люминесцентных меток или так называемых «квантовых точек». С этой точки зрения актуально выявление зависимости оптических свойств от размера и структуры наночастицы, от условий ее формирования и свойств поверхности, а также разработка методов целенаправленного изменения свойств наночастиц за счет химического модифицирования их поверхности.

Целью работы было исследование влияния химического модифицирования поверхности на процесс формирования, характеристики и свойства наночастиц сульфида цинка.

В литературе уделяется недостаточное внимание синтезу и модифицированию поверхности наночастиц ZnS в водном растворе, поэтому синтез осуществляли в водных растворах. В качестве модификаторов поверхности были выбраны водорастворимые поверхностно-активные вещества (N-гексадецилпиридиний бромид, полиоксиэтилен(20)сорбитан моноолеат (твин-80), додецилсульфат натрия), образующие за счет адсорбции на поверхности частиц защитные оболочки, которые препятствуют агрегированию наночастиц сульфида цинка и значительно повышают устойчивость золей. Синтез наночастиц проводили двойным капельным методом в растворе модификаторов различной концентрации. Размеры частиц в полученных нами золях исследовали методами УФ-спектроскопии и динамического светорассеяния.

ВЫДЕЛЕНИЕ ЛИПИДОВ ИЗ КУЛЬТУРЫ РОДА *Candida*

Руководитель Е.А.Прутенская
Тверской государственной технической университет
кафедра Биотехнологии и химии

В настоящее время возрос интерес к применению энзиматических процессов с целью получения биотоплива, что обусловлено интенсивным развитием технологий, в том числе и в области биоэнергетики.

Биодизель является одним из видов биотоплива. Для его получения используют растительные и животные жиры. Широко применяются и липиды микробного происхождения, в особенности дрожжевые липиды. Дрожжи имеют ряд преимуществ (скорость роста, неприхотливость к составу питательных сред, высокий выход липидов), что позволяет их рассматривать в качестве перспективного источника получения липидов.

Помимо биодизеля, дрожжевые липиды и продукты их переработки могут быть использованы в самых различных отраслях промышленности. Например, в текстильной, керамической, кожевенной и др., а также при производстве каучука, резины, фармацевтических препаратов, косметики, мыла. Широкое применение дрожжевые липиды находят в сельском хозяйстве для кормления животных и птиц. Так как для этого используется богатая жирными кислотами биомасса микроорганизмов, из процесса получения липидов исключается стадия экстракции липидов из клеток.

Объект исследования – микроорганизмы вида *Candida* spp., предоставленный профессором Н.Б Градовой из рабочей коллекции РХТУ им. Менделеева.

Культивирование микроорганизмов проводили на среде Сабуро в течение 24-168 ч. Инкубирование осуществляли в термостате при температуре 30°C.

Прирост биомассы определяли путем взвешивания. Для определения количества липидов биомассу дрожжей экстрагировали различными экстрагентами: хлороформом, хлороформэтанольной смесью и хлороформэтанольной смесью с добавлением воды.

В процессе работы выявлено, что наибольшее количество липидов экстрагируется хлороформэтанольной смесью.

Также было изучено влияние соотношения концентрации компонентов в хлороформэтанольной смеси. Наибольшей экстрактивной способностью обладала хлороформэтанольная смесь в соотношении компонентов 1:2.

М.А.Рубин, В.В. Смелкова, А.В. Быков
ЖИДКОФАЗНЫЙ СИНТЕЗ МЕТАНОЛА

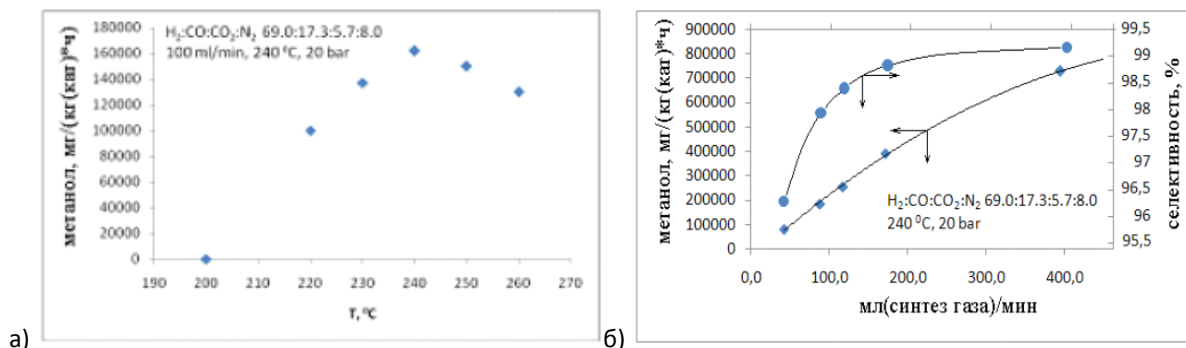
Руководитель А.В. Быков

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Метанол является сырьем для многих производств органического синтеза. Одним из перспективных направлений использования метанола является конверсия в углеводороды с целью получения топлива [1; 2].

В ходе исследования был проведен ряд опытов с применением промышленного медьсодержащего катализатора для синтеза метанола MEGAMAX 700 (Sud-Chemi), не применявшегося ранее в жидкофазном синтезе метанола. Эксперименты проводились в среде додекана, с использованием 0,5г катализатора и 12,5 мл растворителя. Исследовалось влияние температуры, давления, состава и скорости газового потока, на скорость образования метанола. Были определены оптимальные условия синтеза метанола: температура 240°C, давление 20 атмосфер, соотношение $(\text{H}_2\text{-CO}_2)/(\text{CO}+\text{CO}_2)=4$, скорость газового потока 400 мл_н/мин. Скорость образования метанола при этих условиях составила более 700 г метанола/(кг(кат-ра)*ч). При этом селективность процесса по метанолу достаточно высока и составляет более 98%.



Зависимость скорости образования метанола от температуры(а) и скорости газового потока(б)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В. Hu, K. Fujimoto, Applied Catalysis A: General. 2008. №346. С.174–178.
2. М. Farsi, А. Jahanmiri, Journal of Industrial and Engineering Chemistry. 2012. №18. С.1088–1095.

Д.П. Руднев

ВЛИЯНИЕ ВЫСОКЕОТЕХНОЛОГИЧНЫХ ПРЕПАРАТОВ НА ФОРМИРОВАНИЕ УРОЖАЙНОСТИ ОЗИМОЙ РЖИ

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра общего земледелия и растениеводства

Исследовано влияние различных высокотехнологичных препаратов (наносеребра AgБион-2, гуминовых удобрений – Макс – Супер Гумат, Агрогумат Экстра, Гумат «Плодородие», Биоплант Флора; комплексного микроэлементного удобрения Аквадон Микро; биопрепарата Прорастин), при использовании их для некорневой подкормки в фазу выхода в трубку, на формирование урожайности озимой ржи на 3-х фонах минерального питания (1 – без удобрения, 2 и 3 – расчетная доза NPK на урожай зерна в 30 и 40 ц/га). Опыт проводили на дерново-среднеподзолистой супесчаной почве с содержанием гумуса 2,36 % (по Тюрину), $N_{л.г.}$ – 60 мг / кг (по Корнфилду), P_2O_5 – 294 и K_2O – 83 мг / кг (по Кирсанову), $pH_{сол.}$ – 6,7. Объект исследований – сорт озимой ржи Татьяна.

В результате выявлено, что наиболее значительное влияние на формирование урожайности озимой ржи оказал фон минерального питания. При внесении удобрений на 2 и 3 фонах повышалась общая выживаемость растений (на 6,6 и 13,2 %), густота стояния озимой ржи (на 33 и 66 шт./м²), улучшалась фотосинтетическая продуктивность посевов. Так, урожай сухой фитомассы увеличился в сравнении с неудобренным фоном на 2 фоне на 29,6 %, на 3 фоне на 54,5 %.

Улучшение обеспеченности растений минеральной пищей способствовало росту урожайности на 2 и 3 фонах на 33,5 и 68,3 %. В среднем по вариантам, урожай зерна составил: на неудобренном фоне 19,6 ц/га, на 2 фоне 23,6 ц/га, на 3 фоне 29,2 ц/га.

Некорневые подкормки наибольшее положительное влияние на урожайность озимой ржи оказали на неудобренном фоне. Наибольшие прибавки урожая обеспечили: Прорастин 6,6 ц/га (39,5 %), Макс-Супер Гумат 4,3 ц/га (25,7 %), Гумат «Плодородие» 3,7 ц/га (22,2 %). На удобренных фонах достоверные прибавки урожая получены от опрыскивания посевов Прорастином – 4,7 и 5,8 ц/га или 21,1 и 20,6 %.

ФЛОКУЛИРУЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ ПОВЕРХОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Руководитель Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

Одним из путей интенсификации процессов очистки сточных вод от хрома, содержащегося в водах гальванических производств и кожевенных заводов, является разработка новых высокоэффективных флокулянтов, объединяющих функции осадителей компонентов растворов, коагулянтов и гидрофобизаторов частиц дисперсной фазы. Перспективными соединениями в этом отношении могут быть смешанные катионно-активные поверхностно-активные вещества (ПАВ), способные при диссоциации образовывать хром как в виде катиона, так и в виде аниона в широком диапазоне рН(5-11).

В работе изучена флокулирующая способность модельных соединений анионных ПАВ – стеарата, лаурата и каприлата калия и их аналогов с органическими противоионами; катионных ПАВ – четвертичных солей аммония и пиридиния, а также полученных на их основе смешанных ПАВ. Для флокуляции хрома использовали модельные хромовые растворы на основе хлорида хрома, а также реальные сточные воды кожзавода. Исследованы закономерности флокулирующей способности ПАВ от строения их молекул, концентрации в растворе, условий введения в сточные воды и рН.

Установлено, что, как модельные (анионные и катионные), так и смешанные ПАВ, представляют собой перспективный класс соединений для очистки сточных вод от хрома. Оптимальная доза флокулянта составляет 0,5–5,0 мг/л для 90–95 % флотационного извлечения. Существенным преимуществом исследованных соединений является их высокая осадительная и коагулирующая способность в широком диапазоне рН (5–11).

ГАЗОВЫЙ СЕНСОР С ОТКЛИКОМ НА ХЛОРОВОДОРОД

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Определение концентрации хлороводорода в воздушной среде имеет важное значение в технологических и экологических аспектах. Целью настоящей работы являлось создание газового сенсора с откликом на хлороводород на основе полианилина. Известно, что полианилин в зависимости от степени допирования может изменять электрическое сопротивление, одним из допирующих агентов является анион хлора.

Полианилин легко допируется анионом хлора, поэтому в качестве аналитического сигнала мы решили использовать электросопротивление полианилиновой пленки под воздействием паров HCl, к сожалению, полианилиновую пленку практически невозможно изготовить традиционными способами, то есть из раствора или реактива полианилина, поэтому датчик был изготовлен методом нанесения полианилина на диэлектрическую подложку с инкорпорированными платиновыми электродами в процессе электрохимического синтеза.

Для нанесения на платиновую подложку пленки полианилина мы использовали метод электрохимического синтеза в режиме циклической вольтамперометрии (ЦВА). Для этого циклирование потенциала осуществляли в интервале -200 - +1200 мВ относительно хлорсеребряного электрода. Скорость сканирования – 50 мВ/с. Синтез прерывали через 6 циклов при условии надёжного замыкания пленкой полианилина платиновых электродов. Измерение электрического сопротивления изготовленного таким образом электродов проводили в герметичной термостатичной камере, снабжённой вентилятором для перемешивания газовой среды и устройством для ввода пробы.

Электросопротивление изготовленного сенсора измеряется при помощи цифрового омметра с выводом результатов на компьютер. В результате исследований было установлено, что увеличение концентрации хлороводорода в газовой среде способствует существенному уменьшению электросопротивления сенсора.

Диапазон линейности калибровочного графика находился для хлороводорода в интервале $1 \cdot 10^{-3}$ – $2 \cdot 10^{-2}$ М. Конструкция предложенного сенсора может быть микроминиатюризирована и может быть использована для практических измерений.

А.А. Саакян

КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ АНТИБИОТИКОВ ПРИ СОВМЕСТНОМ ПРИСУТСТВИИ МЕТОДОМ ТОНКОСЛОЙНОЙ ХРОМОТОГРАФИИ

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Количественное определение антибиотиков требует длительного времени определения 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. Целью нашего исследования является количественное определение методом тонкослойной хроматографии при совместном присутствии таких антибиотиков пенициллинового ряда как оксациллина и бензилпеницилина, присутствующих одновременно в некоторых лекарственных формах.

В ходе работы нами были подобраны оптимальные условия хроматометрирования и в частности состав элюента – смесь бутанол-уксусная кислота-вода. Для визуализации полученных хроматографических зон были использованы два способа, описанные в литературе: окрашивание в порах йода и под действие нингидрида. Оба способа дали удовлетворительный результат. В этих условиях были получены следующие величины R_f : для оксациллина – 0,47, для бензилпеницилина – 0,21. Большие различия в этих величинах позволяют количественно определить отдельный компонент в смеси антибиотиков.

Следующий этап работы предполагал получение калибровочного графика на основании анализа серии растворов антибиотиков различной концентрации, для построения, которого, после проведения хроматографирования и визуализации хроматографических зон, нами был использован метод оптического денситометрирования, что позволило определить содержание антибиотиков в готовых лекарственных формах. Таким образом предложенная методика позволяет быстро и эффективно проводить количественный анализ отдельно взятого компонента в смеси антибиотиков пенициллинового ряда.

ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ АЛКАНОВ И ИХ АНАЛОГОВ. ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Руководитель Ю.Г. Папулов

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций “структура-свойство” в алканах и их аналогах.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

- анализ экспериментальных данных по исследуемым соединениям,
- подбор топологических индексов (ТИ),
- построение расчётных схем и функциональных зависимостей вида $P=f(\text{ТИ})$,
- проведение численных расчётов,
- построение и анализ графических зависимостей.

В работе была проведена оценка состояния численных данных по энтальпии образования алканов и их аналогов, выявлены отдельные закономерности.

Были получены аналитические зависимости наиболее точно коррелирующие с энтальпией образования рассматриваемых соединений.

Также в работе рассматриваются расчётные схемы для алканов и их аналогов.

Так в третьем приближении для алканов имеем :

$$P_{C_n H_{2n+2}} = a + bn + p_2 \Gamma_{CC} + R \Delta_{CCC} + p_3 \tau_{CC} + p_4 \omega_{CC} ,$$

где

$$a = -rc - c + 2rc - n , \quad b = rc - c + 2rc - n .$$

Здесь p_2, p_3, p_4 – соответственно число путей (рёбер) длины два, три и четыре; R – число троек смежных рёбер; $\Gamma_{CC}, \tau_{CC}, \omega_{CC}$ – эффективные взаимодействия пар атомов С соответственно через один атом, два, три и четыре атома и т.д.

Аналогичная схема получена для аналогов алканов по подгруппе.

По полученным формулам проведён численный расчёт энтальпии образования ряда алканов и их аналогов.. Рассчитанные величины, в общем, согласуются с экспериментальными.

В работе также были построены и проанализированы графические зависимости энтальпии образования от различных факторов.

СОВРЕМЕННАЯ КОМПЛЕКСНАЯ ПЕРЕРАБОТКА СЕМЯН ЛЬНА

Руководитель Е.В. Ожимкова

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Лен – одна из самых динамично развивающихся и перспективных культур в России. Спрос на лен и продукты его переработки в России объясняется повышенным интересом к его использованию в медицине, кулинарии и косметологии. Основными нутриентами, определяющими биологическую активность льняного семени являются белковые вещества, витамины, ферменты, углеводы, органические кислоты и жирное масло, в состав которого входят глицериды линоленовой (35-45%), линолевой (25-35%), олеиновой (15-20%), стеариновой (8-9%) кислот.

Комплексная переработка семян льна позволяет выделить из них такие биологически активные соединения как белки с полноценным аминокислотным составом, комплекс полиненасыщенных жирных кислот с преобладающим содержанием α -линоленовой (ω -3) кислоты, гетерополисахариды, лектины. Кроме того, после извлечения из семян льна масла остаются жмых или (при экстрагировании) шрот – ценные источники таких пищевых ингредиентов, как белок и пищевые волокна. В практике кормления сельскохозяйственных животных льняной жмых считается хорошим кормом [1,2].

Представленная работа посвящена разработке комплексной технологии переработки семян льна. Предложено первым этапом получать льняное масло, из остающегося жмыха экстрагировать гетерополисахариды и белки, а после извлечения указанных компонентов целесообразно использовать остатки растительного сырья в качестве биологически активной пищевой добавки к кормам сельскохозяйственных животных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Цыганова Т.Б. Пищевая ценность семян льна и перспективные направления их переработки / Т.Б. Цыганова, И.Э. Миневиц, В.А. Зубцов и др. // М., 2010.124 с.
2. Левчук А.Н. Физиологическая роль лектинов в семенах льна маслинного / А.Н. Левчук // «Актуальные вопросы биологии, селекции, технологии возделывания и переработки масличных культур». Материалы междунар. конф. 2013.С.119-123.

ЗНАЧЕНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ОПИЛОК, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ПРИ ЗАГОТОВКЕ КОМПОСТОВ НА ОСНОВЕ ОСАДКА СТОЧНЫХ ВОД

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

В настоящее время в России, в связи с уменьшением объемов использования традиционных органических удобрений, значительно возрастает роль альтернативных видов удобрений (компосты, сидераты, осадки сточных вод, биогумус и т.д.). Значительным резервом получения питательных веществ являются осадки сточных вод и компосты на их основе.

С развитием промышленности и ростом городов объем сточных вод и, как следствие, осадка, получаемого при их очистке, с каждым годом возрастает. Скопление больших количеств осадков затрудняет работу очистных сооружений и создает угрозу загрязнения окружающей среды.

Наиболее перспективным направлением переработки ОСВ является компостирование с различными наполняющими компонентами (опилки, торф, навоз и т.д.). Наиболее часто используемыми при компостировании ОСВ наполнителями являются опилки. Они являются отходами, получаемыми при распилке леса и дров. В целом по Тверской области ежегодно получается около 130-135 тыс.м³ опилок, которые с успехом можно использовать для производства компостов с участием ОСВ.

Мы исследовали состав наполнителей древесного происхождения используемых для получения компостов на основе ОСВ (таблица 1,2). Наиболее высокое содержание общих форм азота, фосфора и калия находятся в коре, которая часто вообще не используется. Из тяжелых металлов ближе всего к допустимому уровню нахождения в органическом субстрате находился кадмий, хотя и по нему это в разы меньше требований ГОСТа. Из представленных данных видно, что получаемые в Тверской области опилки из распила леса содержат питательные вещества, а количество тяжелых металлов в них не превышает нормативных документов.

Таблица 1. Химический состав древесных опилок, коры и лигнина

Компоненты	Влажность, %	рН (сол.)	Общие формы, %, а.с.м.		
			N	P	K
опилки	62-68	2,8-4,2	0,06-0,10	0,09-0,11	0,05-0,09
кора	60-66	4,4-4,6	0,3-0,5	0,15-0,21	0,14-0,26
лигнин	65-67	2,3-2,6	0,06-0,12	0,01-0,02	0,02-0,03

Таблица 2. Содержание тяжелых металлов в опилках от хвойных пород леса

Компоненты	мг/кг сухого вещества					
	Cr	Cu	Mo	Pb	Cd	Zn
опилки	13,5-15,2	18,6-19,1	0,5-1,2	12,1-13,8	3,1-3,8	20,2-23,1
По ГОСТу	130	132	-	130	15	220

В.Е. Ситникова

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЙ ПОДХОД ДЛЯ ХАРАКТЕРИСТИКИ МОРФОЛОГИИ ПОРИСТЫХ И НАПОЛНЕННЫХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Руководители: проф., д.х.н., П.М. Пахомов,
к.х.н. С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Для исследования структуры пористых и наполненных материалов в лаборатории спектроскопии ТвГУ был разработан спектроскопический метод определения размеров рассеивающих частиц. Суть спектроскопического метода заключается в выделении и анализе компоненты, связанной с ослаблением падающего на образец излучения за счет рассеяния в ИК диапазоне на порах или частицах наполнителя. Для хорошего проявления эффекта рассеяния в спектре образца необходимо, чтобы показатель преломления и плотность полимера и наполнителя отличались как можно больше.

В настоящей работе указанный метод применен для изучения строения композиционных полимерных материалов на основе ПЭ, ПП, ПС, ПЭТФ и ПВХ с различными наполнителями. Образцы исследовались во всем оптическом диапазоне с помощью методов УФ и Фурье-ИК спектроскопии. Для контроля данных, полученных с помощью спектроскопического метода, использовали методы оптической и электронной сканирующей микроскопии.

В ходе работы установлено, что оптические спектры наполненных полимерных материалов несут в себе важную информацию о структуре объекта. Исследования показали, что в ИК спектрах изучаемых образцов проявляется эффект дифракционного рассеяния и тем больше, чем выше концентрация пор или частиц наполнителя в матрице. Анализируя характер рассеяния электромагнитного излучения образцом, можно оценивать такие его характеристики, как концентрация частиц наполнителя (пор), их средний размер, распределение по размерам, а также форму и ориентацию частиц внутри полимерной матрицы.

В.Н. Ситников

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ
ГОМОЛОГИЧЕСКОГО РЯДА АЛКИНОВ $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{C}\equiv\text{C}(\text{CH}_2)_m\text{CH}_3$

Руководитель Ю.Д. Орлов

Тверской государственный университет

Кафедра общей физики

Квантово-механическая «теория атомов в молекуле» (QTAIM), созданная Р. Бейдером, является наиболее удобным инструментом исследования электронной плотности соединений [1]. В рамках данной теории электронная плотность молекулы представляется в виде «топологических» атомов (Ω), границы которых определяются поверхностями нулевого потока вектора градиента электронной плотности. Исследование взаимного влияния групп атомов в соединениях дает четкое теоретическое обоснование аддитивно-группового подхода, открывает возможность проведения важных уточнений, основанных на понимании изменения характеристик группы и позволяет четко устанавливать границы применимости группового подхода.

В настоящей работе исследовалось распределение электронной плотности в молекулах ряда алкинов: $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{C}\equiv\text{C}(\text{CH}_2)_m\text{CH}_3$, где $n, m = 0 \div 5$. 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 CH_3 , CH_2 , C были найдены суммированием электронных характеристик, составляющих их атомов.

Было изучено электронное строение атомного фрагмента $\text{C}\equiv\text{C}$, его влияние на группы CH_2 и CH_3 , а так же определено затухание индуктивного эффекта, вызванного этим фрагментом, вдоль углеводородной цепи. Проведено сравнение результатов полученных для рассмотренного ряда с углеводородами нормального строения. Определены стандартные группы. Выявлены переносимые группы (а также парциальные свойства групп) между молекулами гомологических рядов $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{C}\equiv\text{C}(\text{CH}_2)_m\text{CH}_3$ и $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. М., 2001. 528 с.
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)

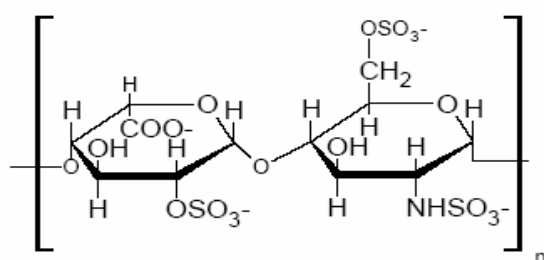
М.И. Скобин, Т.В. Крюков, Е.В. Потеха

МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСЫ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ГЕПАРИНА С
МИКРОИОНАМИ d-ЭЛЕМЕНТОВ (Zn^{2+} , Fe^{3+} , Mn^{2+}) И
АМИНОКИСЛОТАМИ (ГЛИЦИН, АРГИНИН)

Руководитель М.А.Феофанова

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

В данной работе была изучена способность высокомолекулярного гепарина образовывать тройные, сложные комплексы с микроионами d-элементов (Zn^{2+} , Fe^{3+} , Mn^{2+}) и аминокислотами. Структурная формула мономерного дисахаридного звена гепарина приведена на рисунке ниже.



Смешаннолигандное комплексообразование Zn^{2+} , Fe^{3+} , Mn^{2+} с высокомолекулярным гепарином и аминокислотами (глицин, аргинин), мы исследовали с помощью рН-метрического титрования, далее, используя метод математического моделирования, рассчитали константы устойчивости оттитрованных тройных комплексов-систем. При расчётах мы учитывали, что высокомолекулярный гепарин образует с ионами Zn^{2+} , Fe^{3+} и Mn^{2+} преимущественно монолигандные комплексы, но беря во внимание тот факт, что мономерное звено гепарина, в следствии ряда факторов (конформация полимерной цепи, стерические факторы), может взаимодействовать и с микроионами d-элементов, и с аминокислотами, образуя смешаннолигандные металлокомплексы.

Здесь особый интерес представляют синтез и структурные исследования идентифицированных металлокомплексов. Также в литературе было высказано предположение, что гепарин как эндогенный лиганд плазмы обладает невысокой селективностью, поэтому длительное его применение, особенно в высоких дозировках, способно повлиять на баланс микроэлементов в плазме крови, вследствие чего полученные результаты в будущем найдут своё применение в практической медицине.

И.А. Смирнов

РАЗРАБОТКА ТЕПЛООБМЕННИКОВ НА ОСНОВЕ
БЫСТРОЗАКАЛЕННЫХ ЛЕНТ СОЕДИНЕНИЯ Y_2Fe_{17}

Руководитель К.П. Скоков

Тверской государственный университет
Кафедра магнетизма

Чтобы найти применение в технологии магнитного охлаждения, магнитокалорические материалы должны быть адаптированы к производству на их основе теплообменников – пористых тел с каналами для теплопередающей жидкости. Самой современной геометрией рабочего тела магнитного холодильника считается структура из тонких параллельных пластин или стержней толщиной 0,1–0,3 мм с зазорами 0,1 мм между ними [1]. Использование такой конфигурации теплообменников позволит уменьшить влияние полей собственного размагничивания на величину МКЭ в хладагенте, а также приведет к увеличению энергоэффективности магнитного холодильника за счет уменьшения необходимого давления теплопередающей жидкости в системе. Однако формирование теплообменников из интерметаллических соединений, которые считаются лучшими на сегодня магнитокалорическими материалами, является сложной задачей из-за их эксплуатационных характеристик. Метод быстрой закалки из расплава является идеальным способом для формирования тонких пластин (лент) 0,1 мм толщиной и стержней диаметром 1 мм для производства теплообменников.

В работе предложены два способа сборки теплообменников с заданной геометрией на основе быстрозакаленных лент Y_2Fe_{17} . Первый метод основан на сборке лент толщиной 0,1–0,03 мм в структуры с каналами толщиной 0,1–0,3 мм путем склеивания теплопроводящей эпоксидной смолой (5 мас. % от общей массы теплообменника). Второй способ заключается в спекании сложенных быстрозакаленных лент при температуре 1473 К для достижения прочной многослойной структуры. Предлагаемые методы являются универсальными и могут использоваться для производства теплообменников на основе быстрозакаленных лент любых интерметаллических соединений, кристаллизующихся конгруэнтно из расплава.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kuz'min, M. D. Factors limiting the operation frequency of magnetic refrigerators / M. D. Kuz'min // Applied Physics Letters. –2007. – V. 90. – P. 251916.

ДЕЙСТВИЕ АГРОГУМАТА КАЛИЯ НА ПИТАТЕЛЬНЫЙ РЕЖИМ ДЕРНОВО-ПОДЗОЛИСТОЙ ПОЧВЫ

Руководитель Барановский И.Н.

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

За последние годы в аграрном секторе России резко сократилось применение минеральных удобрений. Это вынуждает сельхозтоваропроизводителей искать новые приемы и формы обеспечения растений элементами питания, для увеличения производства продукции растениеводства. Одним из перспективных элементов технологий в земледелии является широкое использование гуминовых удобрений. Последние представляют собой водорастворимые соли гуминовых веществ, которые называются гуматами.

Технология производства гуминовых удобрений заключается в обработке выбранного материала (торфа, бурого угля, сапропеля) слабыми растворами щелочей. Это позволяет в полной мере перевести гуминовые кислоты и другие, биологически активные вещества в доступное для растений состояние. При получении агрогумата калия использовался принцип механохимии. Обработанный щелочью торф подвергался механическому воздействию, в результате увеличивается его удельная поверхность и повышается химико-биологическая активность.

Мы исследовали последствие агрогумата калия на питательный режим дерново-подзолистой почвы (таблица). На фоне всех доз и сочетаний агрогумата с другими видами удобрений отмечено возрастание исследуемых элементов питания по отношению к контролю.

Влияние агрогумата калия на питательный режим почвы 2013 г.

Вариант опыта	Средние значения из 3-х определений за сезон			
	2013 ячмень			
	NH_4^+	NO_3^-	P_2O_5	K_2O
1.Контроль	10,0	6,9	231	121
2.Агрогумат 300 кг/га	10,6	7,4	239	125
3.Агрогумат 500 кг/га	11,9	8,1	248	134
4.Агрогумат 300 кг/га + NPK	11,9	8,6	251	132
5.Агрогумат 500 кг/га + NPK	14,0	10,0	259	140
6.Агрогумат 300 кг/га + NPK + солома	11,6	8,8	243	141
7.Агрогумат 500 кг/га + NPK + солома	13,4	9,0	252	150
8.Агрогумат 300 кг/га + нав. свин.	15,1	8,7	255	146
9.Агрогумат 500 кг/га + нав. свин.	16,7	10,4	263	150
10.Агрогумат 300 кг/га + помет	18,3	10,6	263	154
11.Агрогумат 500 кг/га + помет	19,6	12,3	272	159

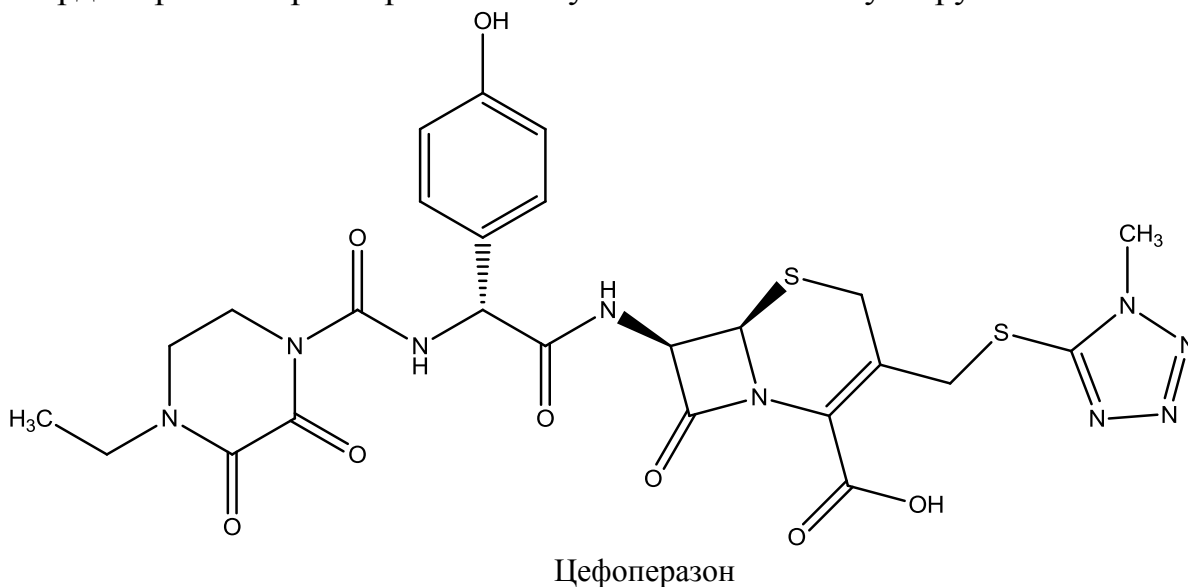
Особое значение гуминовые удобрения имеют в настоящее время при распашке залежных земель. Накопившаяся в них органическая масса от произраставших растений, при распашке подвергается разложению с последующей гумификацией. Внесенные в них гуминовые удобрения являются как бы «центрами гумификации», вокруг которых формируются гумусовые вещества, и они более прочно закрепляются минеральной частью почвы.

МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСЫ ЦЕФОПЕРАЗОНА

Руководитель: В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Путем взаимодействия водных растворов натриевой соли цефоперазона и хлоридов металлов впервые получены в виде малорастворимых осадков соли цефоперазона с Al(III), Ca(II), Cd(II), Cr(III), Cu(II), Er(III), Fe(III) и Ni(II). Полученные соединения исследованы методами ИК спектроскопии на приборе Bruker Equinox 55 и синхронного термического анализа на приборе Netzsch STA 449 F3 Jupiter. Согласно данным ИК спектроскопии кальциевое производное цефоперазона является солью с типично ионной связью, т.к. ИК спектры натриевой и кальциевой солей цефоперазона практически идентичны. В остальных случаях наблюдается смещение полосы поглощения валентных колебаний $\nu(\text{C}=\text{O})$ бета-лактамной группы и изменение относительной интенсивности полос валентных колебаний $\nu(\text{C}=\text{O})$ бета-лактамной и $\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)_{\text{as}}$ карбоксилатной групп по сравнению с полосами валентных колебаний $\nu(\text{C}=\text{O})$ амидных и пиперазиндионовых групп. Таким образом, соли цефоперазона с Al(III), Cd(II), Cr(III), Cu(II), Er(III), Fe(III) и Ni(II) имеют характер внутрикомплексных соединений, в которых ион металла координирован через карбоксилатную и бета-лактамную группы.



ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРОМЫШЛЕННЫХ ЗАГРЯЗНЕНИЙ НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ТЫСЯЧЕЛИСТНИКА ОБЫКНОВЕННОГО (*ACHILLEA MILLEFOLIUM*) ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

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

Растение способно к накоплению из окружающей среды веществ различной природы, как биологически активных, так и загрязняющих. Кроме того, при неблагоприятных условиях в растениях повышается концентрация фенольных соединений, которые играют роль защитного барьера на пути механических, химических, термических факторов среды, а также болезнетворных воздействий. В связи с этим актуальным является исследование изменений химического состава растений (лекарственных или биоиндикаторных), происходящих под влиянием экологических факторов, для оценки качества лекарственного сырья или уровня экологической обстановки.

Цель работы – оценить влияние различных промышленных загрязнений на химический состав и морфологию тысячелистника обыкновенного с помощью методов Фурье-ИК и УФ спектроскопии, атомно-адсорбционной спектроскопии (ААС), рентгеновского микроанализа и растровой электронной микроскопии (РЭМ). Объектами исследования являлись образцы тысячелистника обыкновенного (*Achillea millefolium*), собранные в г. Твери в местах с различной антропогенной нагрузкой. В качестве контроля использовали образец готовой аптечной формы ЗАО «Здоровье».

Результаты исследований показывают, что химический состав тысячелистника обыкновенного чувствителен к воздействию антропогенных факторов. В ИК спектрах образцов из различных мест сбора имеются изменения (по интенсивности и положению максимума) для следующего ряда характеристических полос: $\sim 1734 \text{ см}^{-1}$ ($\nu_{\text{C=O}}$), $\sim 1650\text{--}1620 \text{ см}^{-1}$ ($\nu_{\text{C=C}}$), $\sim 1541 \text{ см}^{-1}$ (Амид II), $\sim 1047 \text{ см}^{-1}$ ($\nu_{\text{C-O-C}}$). Спектры поглощения спиртовых экстрактов в УФ области (200–400 нм) также имеют существенные различия, которые свидетельствует об изменении в составе и концентрации фенольных соединений в изучаемых образцах. Методом ААС установлено наличие тяжелых металлов в растениях, причем в ряде случаев в количествах, значительно превышающих ПДК этих металлов в почве. С помощью метода РЭМ получены микроснимки листьев и цветков образцов тысячелистника, в которых наблюдаются некоторые изменения анатомических признаков. Таким образом, спектральные методы анализа могут быть использованы для оценки степени загрязнения окружающей среды.

С.И. Соловьева

ТВЕРДОТЕЛЬНЫЙ ЭЛЕКТРОД С ТРАНСДЮССЕРОМ С ОТКЛИКОМ НА ИОН ТЕТРАЦИКЛИНА

Руководитель С.С.Рясенский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

В последнее время твердотельные ионоселективные электроды (ИСЭ) все большее применение находят в ионометрологическом анализе. В тоже время становится все более очевидной проблема экспресс-анализа различных объектов. В частности, в медицине в диагностических целях важно уметь определять содержание антибиотиков в различных объектах.

Целью настоящей работы было создание и использование твердоконтактного ионоселективного электрода с полианилиновым трансдюссером с откликом на ион тетрациклина.

Отказ от внутреннего раствора сравнения и замена его на ионоэлектронный трансдюссер позволяет существенно улучшить метрологические характеристики электрода.

В качестве ионоэлектронного трансдюссера был выбран электропроводный полимер – полианилин (ПАН). В качестве ионоселективной мембраны с электроактивным веществом использовали ионный ассоциат лекарственного препарата (тетрациклин) смешанный с водным раствором вольфрамо-фосфорной кислотой (ВФК), где связующее звено - поливинилхлорид 38%, а пластификатор - дибутилфталат 57%.

Поперечный разрез электрода представляет собой своеобразную трехслойную структуру: внешний слой – ионоселективная мембрана, промежуточный слой – ионоэлектронный трансдюссер содержащий ПАН 15%, внутренний слой – графитовый токоотвод. Графит выбран в связи с его дешевизной по отношению к драгоценным металлам, таким как платина и серебро, используемым в подобных электродах.

Электродная функция изготовленного электрода представляет собой прямую в интервале рС 1- 4. При этом крутизна функции составила 50 мВ/рС. Рабочий диапазон рН составил 3-7 единиц. Время отклика не превышает 20 секунд. Селективность электрода удовлетворительна. Надежность изготовленного электрода была подтверждена при помощи ионометрического определения содержания тетрациклина в готовых лекарственных формах.

Подводя итог, можно сказать, что применение ионоэлектронного трансдюссера позволяет изготавливать электроды с большим сроком службы и широким практическим применением.

И.И. Спиридонов

ИНТЕНСИФИКАЦИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ПРОИЗВОДСТВА ИЗДЕЛИЙ ИЗ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СТЕКЛОПЛАСТИКОВ

Руководитель: Лагусева Е.И.

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии полимерных материалов

В промышленном производстве для изготовления крупногабаритных изделий из стеклопластиковых композитов применяют методы: напыление рубленого стекловолокна со связующим, ручная выкладка и пропитка, процесс литья в закрытые формы и процесс инфузии.

Напыление и ручная выкладка являются наименее экологичными в связи с тем, что процессы проводят на открытой технологической оснастке. При применении напыления рубленого волокна невозможно контролировать ориентацию волокон, и как следствие – получать изделия с анизотропными механическими свойствами. В дополнении ко всему данные методы требуют больших трудозатрат.

Использование в процессе пропитки специализированных установок позволяет снизить отходы связующего и нелинейно изменять давление подачи за счет обратной связи по давлению внутри оснастки.

Оптимальным при производстве крупногабаритных изделий является процесс вакуумной инфузии с использованием полимерных пленочных материалов в качестве пуансона. Применение процесса инфузии открывает широкие возможности по интенсификации и повышению экологичности производства.

Использование в процессе инфузии в качестве пуансона светопрозрачных полимерных пленочных материалов позволяет оперативно контролировать процесс пропитки армирующего материала связующим. Отсутствие пуансона постоянной формы позволяет изменять конструктивные особенности изделия в процессе производства без существенных трудозатрат.

Таким образом, производство изделий из композитных материалов на основе стеклопластиков может быть интенсифицировано путем применения технологий пропитки в закрытых формах, в том числе с использованием пленок в качестве пуансона. Интенсификация позволяет изделиям из стеклопластика конкурировать с традиционными конструкционными материалами.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ Al(III) С ЦЕФАЛОСПОРИНАМИ МЕТОДАМИ ИК СПЕКТРОСКОПИИ И ТЕРМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

Руководитель: В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Путем взаимодействия водных растворов натриевых солей антибиотиков и хлорида алюминия впервые получены в виде белых осадков и исследованы внутрикомплексные соли цефалоспориновых антибиотиков цефазолина (HCzl), цефотаксима (HCxm) и цефтриаксона (H₂Ctx) с Al(III). После промывания холодной водой на фильтре, осадки высушены на воздухе сначала при комнатной температуре, затем в течение 3 часов при 80 °С. Методом синхронного термического анализа на приборе Netzsch STA 449 F3 Jupiter установлено содержание кристаллизационной воды в исследованных образцах. Состав образцов определен методом элементного анализа на CHNS-анализаторе Perkin Elmer 2400 Series II. Исследование методом ИК спектроскопии на приборе Bruker Equinox 55 показало смещение полос валентных колебаний $\nu(\text{C}=\text{O})$ амидной и бета-лактамой групп и $\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)$ карбоксилатной группы в сторону более высоких частот по сравнению со спектром соответствующей натриевой соли антибиотика, что можно расценивать как координацию этих групп с Al(III).

Образец	$\nu(\text{C}=\text{O})$ β -лактамы	$\nu(\text{C}=\text{O})$ амид	$\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)_{\text{ас}}$
NaOxa·H ₂ O	1759	1649	1604
Al(Oxa) ₂ Cl·H ₂ O	1784	1668	1626
NaCzl·H ₂ O	1761	1680	1604
Al(Czl) ₂ Cl·H ₂ O	1774	1700	1624
NaCxm·H ₂ O	1758	1647	1612,
Al(Cxm) ₂ Cl·H ₂ O	1774	1672	1624
Na ₂ Ctx·4H ₂ O	1741	1650	1604
AlCtxCl·H ₂ O	1769	1668	1623

ИЗУЧЕНИЕ НА ПРОРОСТКАХ ТРИТИКАЛЕ БИОРЕГУЛИРУЮЩЕГО
ДЕЙСТВИЯ СОЕДИНЕНИЙ СЕЛЕНА

Руководитель Т.И. Смирнова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Дефицит селена в продуктах питания является одной из причин более 30 заболеваний человека и сельскохозяйственных животных: сердечно-сосудистых, онкологических, поражений печени, иммунодефицита и др. Микроэлемент селен поддерживает нормальное функционирование не только антиоксидантной, но и детоксицирующей, и иммунной систем организма. Среди продуктов питания основным источником селена служит продукция из зерна злаковых культур, содержащая этот микроэлемент в количестве, на порядок большем по сравнению с другими видами продуктов. В Тверской области, относящейся к числу селенодефицитных регионов, весьма актуальной является задача обогащения сельскохозяйственной продукции селеном. Кроме того, селен необходим и для нормального роста и развития самим растениям.

С целью выяснения действия соединений селена и возможных комплексов селена с комплексонами: этилендиаминтетрауксусной кислотой (ЭДТУК) и этилендиаминдигидратной кислотой (ЭДДЯК), на проростки злаковых растений был поставлен лабораторный эксперимент. Семена тритикале проращивали в чашках Петри на фильтровальной бумаге, увлажнённой растворами Se-ЭДТУК и Se-ЭДДЯК с концентрацией в пересчёте на селен 25, 10, 5 мг/л, и взятыми для сравнения растворами, содержащими эквимольные количества Na_2SeO_3 , ЭДТУК и ЭДДЯК в объёмах по 25 мл. В контрольных вариантах использовали дистиллированную воду. По прошествии семи дней в проростках фотометрическим методом (фотометр КФК-3-2МП) определяли содержание фотосинтетических пигментов и биомассу проростков. Перед выполнением анализов рассчитывали всхожесть семян.

Результаты опыта показали, что оптимальным биостимулирующим действием обладают среды прорастания, содержащие 5 мг/л селена в составе Na_2SeO_3 и Se-ЭДДЯК. Эти соединения оказали благоприятное воздействие на всхожесть семян и на пигментный состав развивающихся растений, вызвав практически одинаковое увеличение содержания хлорофилла и каротиноидов, но при одновременном возрастании биомассы в варианте с Se-ЭДДЯК, в отличие от варианта с селенитом натрия. ЭДТУК. Возможный комплекс Se-ЭДТУК и ЭДТУК оказали на проростки угнетающее влияние, существенно большее в варианте со свободным лигандом, что может служить косвенным свидетельством существования селенсодержащих комплексов.

А.И. Ткачева

БИОРЕМЕДАЦИЯ ПОЧВ

Руководитель Прутенская Е.А.

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Одной из основных экологических проблем на предприятиях топливно-энергетического комплекса являются аварии на нефтепроводах, в связи с их износом, старением, а также при перевозках нефти и нефтепродуктов различными видами транспорта.

К методам ликвидации нефтяных загрязнений почвы относят: механические (обвалка загрязнения, откачка нефти в ёмкости, замена почвы), физико-химические (сжигание, предотвращение возгорания, промывка почвы, дренирование почвы, экстракция растворителями, сорбция, термическая десорбция) и биологические (биоремедиация и фиторемедиация).

Механические и физико-химические методы очистки имеют ряд недостатков: дороговизна, узкая область применения, трудоемкость процесса, большие энергозатратами и т.д.

Биоремедиация загрязнённых почв и грунтов представляет собой набор техник, основанных на применении биологических агентов для очистки почв и грунтов от поллютантов. Чаще всего для биоремедиации почв используются микроорганизмы, обычно бактерии и грибы, реже – растения.

Использование микроорганизмов для деструкции нефтяных углеводородов является не только простым, наиболее благоприятным для окружающей среды, но и экономически выгодным. По сравнению с химической очисткой от нефтяных загрязнений, при которой используются дорогостоящие химические реагенты, которые не всегда благоприятно влияют на экологию.

Поэтому, в настоящее время, целесообразно развивать биоремедиацию, основанную на селекционных штаммах микроорганизмов, способных утилизировать различные углеводороды. А также подбирать новые питательные среды для культивирования микроорганизмов с усиленной деструктирующей способностью, разрабатывать ассоциации микроорганизмов.

В данной исследовательской работе была разработана ассоциация микроорганизмов, в состав которой входили микроорганизмы рода *Candida* и *Vacillus*. Степень деструкции углеводородов нефти в модельных образцах составила 85%. Начальная концентрация нефти 5% по массе.

ИОННЫЙ СОСТАВ ВОД РЕК РЕГИОНА ВЕРХНЕЙ ВОЛГИ

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

Экологическая ситуация в России уже многие годы остается не совсем благополучной. Источниками загрязнения являются не только промышленность, транспорт и энергетика, но и аграрный сектор. Начиная с 1980 года, ООН считает угрозой живой природе, исходящую от сельского хозяйства, в числе четырех самых опасных источников загрязнения. Особое значение имеют два источника определяющих сельскохозяйственное загрязнение – минеральные удобрения и пестициды. Так, первоначально накопление и распространение пестицидов сразу после их внесения происходит в радиусе 10–30 км. Это связано с направлением ветров, водным стоком. Но со временем (через 10–20 лет) пораженной оказывается значительно большая территория, целые бассейны рек. Считается, что не больше 3% вносимых в почву химикатов достигает цели, ради которой их используют. Следовательно, остальные 97% мигрируют за пределы тех полей, на которые вносятся и тем самым загрязняют окружающую среду.

Мы исследовали ионный состав вод рек впадающих в реку Волга, а также состав воды самой Волги в двух створах, в районе Ивановского водохранилища и г. Ржева (таблица). Полученные данные свидетельствуют, что по двум элементам- железу и цинку выявлено некоторое превышение, по отношению к ПДК. По всем другим элементам этого не установлено.

Химический состав воды в реках водосборной площади региона Верхней волги

Наименование компонента	ПДК	р. Волга (Иваньковское вдхр.), г. Тверь	р. Тверца г. Тверь	р. Тьмака г. Тверь	р. Волга г. Ржев	р. Кашин г. Кашинка	р. Цна г. В. Волочок
Азот нитратов	9.1	0.7	0.6	0.5	0.8	0.6	0.4
Хлорид ион	300	4	4	4	3.3	18	5
Сульфат ион	100	7	2	2	11	37	2
Фосфат ион	0.6	0.17	0.15	0.19	0.24	0.31	0.13
Железо общее	0.1	0.77	0.28	0.55	0.69	0.36	0.44
Калий	50	2.5	1.4	1.3	1.6	4.4	1.2
Свинец	0.006	0.003	0.003	0.003	0.003	0.003	0.003

Л. А. Федоренко

СТВОЛОВЫЕ КЛЕТКИ. ОСОБЕННОСТИ. ХИМИЗМ ДИФФЕРЕНЦИРОВКИ

Научные руководители: к.х.н., доцент, Лопина Н. П.,
к.б.н., доцент, Бордина Г. Е.

ГБОУ ВПО Тверская ГМА Минздрава России, г. Тверь
Кафедра химии

Стволовые клетки (СК) после выделения их из организма становятся бессмертными и не меняются со временем. Но стоит добавить в питательную среду специальное вещество, как начинается каскад химических реакций и превращений СК в более 220 видов клеток. Это свойство дает ученым возможность использовать стволовые клетки для выращивания органов и тканей человека. В ходе работы рассмотрены возможные методы выращивания человеческих стволовых клеток в культуральной среде, для их последующей дифференцировки и трансплантации. Было выяснено, что направление дифференцировки СК в большей части зависит от того, какие вещества будут добавлены к культуре.

Было обобщено влияние химических веществ представляющих собой факторы роста (BMP4, фактор эпидермального роста, ретинол, FGF-2, TGF- β , активин А, цитокин SF, фактором роста нервов), внутриклеточные белки (белок Tcf15) и мембранные гликопротеины (е-кадгерин) на дифференцировку.

В ходе работы были подробно рассмотрены методы кроветворной дифференцировки эмбриональных стволовых клеток человека, при культивировании СК на метилцеллюлозе [C₆H₇O₂(OH)₃-x(OCH₃)_x].

На основе исследований ученых, были проанализированы молекулярные коммуникационные сети в стволовых клетках человека под действием киназ и выявлены наиболее важные из них, а также рассмотрены механизмы их действия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сухих Г.Т., Малайцев В.В., Богданова И.М., Дубровина И.В. //Мезенхимальные стволовые клетки. 2002, 124-133.
2. Писаржевский С.А.//Стволовые клетки и молекулярная биология.
3. По материалам NewScientist.com «news service» 21.04.2006 .
4. Журнал «Cell Reports», статья: Результаты исследования Центра Регенеративной Медицины Медицинского Исследовательского Совета при Университете Эдинбурга.

А.Е. Филатова

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ПРОТЕКАНИЯ ПРОЦЕССА ГИДРОЛИТИЧЕСКОГО ГИДРИРОВАНИЯ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ НА ВЫХОД ГЕКСИТОЛОВ

Руководитель О.В. Манаенков

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

В настоящее время всё отчетливее проявляется перспектива энергетического кризиса, связанного с истощением запасов невозобновляемых полезных ископаемых, которые на данный момент являются основным сырьем для химической и топливной промышленности. В связи с этим, большое внимание научного сообщества уделяется разработке эффективных и экологичных технологий получения химикатов и топлив из природного сырья, не представляющего пищевой ценности для человека.

Работа направлена на исследование влияния условий протекания процесса гидролитического гидрирования целлюлозы в среде субкритической воды на выход, с целью повышения эффективности процесса конверсии целлюлозной биомассы в сырьё для химического синтеза и биотоплива.

Процесс гидролитического гидрирования целлюлозы осуществляли в стальном реакторе высокого давления при высокой температуре в субкритической воде, под давлением водорода, в присутствии гетерогенных катализаторов гидрирования. В ходе работы было проведено изучение влияния различных технологических параметров на протекание процесса. В ходе исследования процесса гидролитического гидрирования целлюлозы было изучено: влияние температуры; влияние парциального давления водорода; влияние времени. Эффективность процесса определялась по значениям конверсии целлюлозы, селективности и выходу основных продуктов.

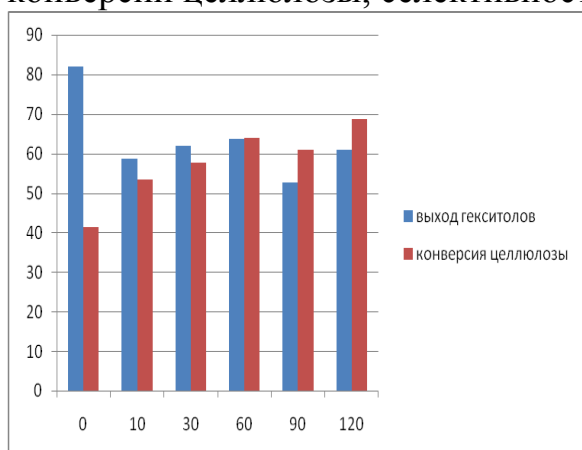


Рис. 1. Влияние времени процесса на выход гекситолов

При изучении влияния температуры процесса на конверсию целлюлозы и селективность по сорбитолу и маннитолу было показано, что с увеличением температуры от 175 до 235 °С конверсия целлюлозы возросла с 19,0 до 86,3 %. В ходе исследования влияния парциального давления водорода было установлено, что оптимальное значение составило 60 атм., что обеспечило конверсию целлюлозы, равную 64,0 %, и селективность по гекситолам – 70,7%.

Полученные предварительные результаты позволяют подобрать оптимальные условия для процесса, позволяющие получить наибольшие значения по селективности и конверсии.

Е.С. Чехонин

ПОЗИТРОННО-ЭМИССИОННАЯ ТОМОГРАФИЯ

Руководители: Лопина Н.П., Бордина Г.Е.
ГБОУ ВПО Тверская ГМА Минздрава России, г. Тверь
Кафедра химии

Позитронно-эмиссионная томография — новейший уникальный диагностический неинвазивный томографический метод исследования внутренних органов и тканей человека, основанный на использовании ультракороткоживущих радиоизотопов.

В основе метода лежит возможность при помощи ПЭТ-сканера отслеживать распределение в организме биологически активных соединений, меченых позитрон-излучающими радиоизотопами. Потенциал ПЭТ в значительной степени и определяется арсеналом доступных меченых соединений — радиофармпрепаратов, которые являются соединениями, содержащими в своей молекуле определенный радиоактивный нуклид. Именно выбор подходящего РФП позволяет изучать с помощью ПЭТ такие разные процессы, как метаболизм, транспорт веществ, экспрессия генов и т. д. Использование РФП, относящихся к различным классам биологически активных соединений, делает ПЭТ достаточно универсальным инструментом современной медицины.

ПЭТ позволяет диагностировать заболевание на нулевой стадии, когда заболевание еще не распространилось.

Рентген и МРТ позволяют получить изображение анатомических особенностей тканей и внутренних органов, а ПЭТ применяется для диагностики их функциональной активности.

ПЭТ является высокоинформативным и высокочувствительным методом лучевой диагностики. ПЭТ проводит анализ метаболизма, позволяя в большинстве случаев безошибочно выявить патологию, уточнить стадию заболевания или поставить диагноз. Чаще всего после проведения исследования на ПЭТ предварительный диагноз был изменен. Очаги поражения выявляются даже у больных без клинических проявлений патологических процессов.

Д. С. Шеховцова, Д. М. Торопова

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ЗАГРЯЗНЕНИЯ СРЕДЫ ОБИТАНИЯ НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ТЫСЯЧЕЛИСТНИКА ОБЫКНОВЕННОГО

Руководитель П.М.Пахомов

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

В настоящее время существенно увеличился спрос на препараты растительного происхождения, которые содержат биологически активные вещества, такие как флавоноиды, эфирные масла и др. Через корневую систему в растение поступают различные вещества из окружающей среды, которые они способны накапливать в своих тканях. Однако в результате загрязнения окружающей среды разными поллютантами, потребность в контроле растительного сырья возрастает. Целью этой работы было изучение химического состава образцов тысячелистника обыкновенного (*Achillea millefolium*), произраставшего в местах с различной антропогенной нагрузкой: ТЭЦ-3, г. Тверь, Вышний Волочек (ВВ) - экологически чистый район, в качестве контроля использовали аптечную форму «Тысячелистник, трава» ЗАО «Здоровье». Анализ растительного сырья был проведён с помощью методов ИК спектроскопии, атомно-адсорбционной спектроскопии (ААС), растровой электронной микроскопии (РЭМ) и рентгенофлуоресцентного анализа. Для записи ИК спектров использовали стандартную методику приготовления таблеток с KBr. Регистрация спектров проводилась на спектрометре «Equinox 55» фирмы «Bruker». При сравнении ИК спектров образцов (смесь цветов и листьев) (ВВ, ТЭЦ-3, аптечный) были обнаружены различия в следующих структурно-чувствительных областях спектра: $\sim 671, 1092, 1156, 1321, 1737, 2854 \text{ см}^{-1}$. Дополнительно был проведен сравнительный анализ ИК спектров отдельных частей растения из ВВ – листьев и цветков, которые также имеют небольшие различия. С помощью ААС в образцах было обнаружено высокое содержание тяжелых металлов, таких как Fe, Zn, Cu, Cd, Cr, Mn, Pb. На снимках образцов ТЭЦ-3, полученных с помощью РЭМ, отмечено большое количество близкорасположенных видоизмененных устьиц и восковых отложений, что указывает на высокий уровень загрязнения среды обитания растений. Таким образом, с помощью методов ИКС, ААС и РЭМ, данные которых дополняют друг друга, установлено, что в результате загрязнения окружающей среды в растениях происходит существенное изменение химического состава растений, которое сопровождается изменением и их анатомо-морфологических признаков.

К.В. Шильниковская, К.Е. Сальникова

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ ПЕРЕЭТЕРИФИКАЦИИ, КАТАЛИЗИРУЕМОЙ ИММОБИЛИЗОВАННОЙ ЛИПАЗОЙ В СВЕРХКРИТИЧЕСКОМ ДИОКСИДЕ УГЛЕРОДА

Руководитель Лакина Н.В.

Тверской государственный технический университет

Кафедра биотехнологии и химии

Одним из эффективных и экологически чистых способов получения компонентов биотоплив и ценных продуктов переэтерификации масел является применение липазокатализируемой реакции переэтерификации в сверхкритическом диоксиде углерода (CO₂). Она позволяет производить продукт высокой чистоты и легко отделять его от побочного продукта, глицерина. В настоящее время широко используется фермент липазы в качестве биокатализатора для стадии реакции переэтерификации в производстве биодизеля. На Рис. 1 показана общая схема реакции переэтерификации между двумя основными реагентами глицеридом жирных кислот и метанолом.

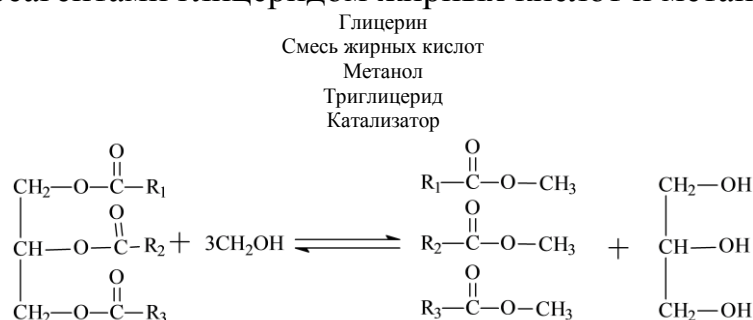


Рис. 1 Реакция переэтерификации триглицеридов жирных кислот и метанола

В данном исследовании для проведения реакции переэтерификации в сверхкритической среде в качестве катализатора использовали гидролитический фермент липазу (E.C.3.1.1.3), иммобилизованную на магнитные наночастицы. Максимальная конверсия растительного масла - 99,2% при T= 40 °C, P=15 МПа, стабильность полученной биокаталитической системы составила 15 рабочих циклов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Christian Blattner, Maria Zoupanioti, Jurgen Kroner, Georg Schmeer, Aristotelis Xenakis, Werner Kunz // Original Research Article The Journal of Supercritical Fluids, Vol. 36. 2006. P. 182-193.
2. Prakash S. Bisen, Bhagwan S. Sanodiya, Gulab S. Thakur, Rakesh K. Baghel. // Biotechnol Lett . 2010. 32. P. 1019–1030.
3. Matveeva O.V., Lakina N.V., Doluda V.Yu., Sulman E.M. // Abstracts of International Conference BIOCATALYSIS-2013: FUNDAMENTALS & APPLICATION, Moscow, July 2-5, 2013, P. 82.

СОЗДАНИЕ ВЫСОКОПОРИСТОЙ ЯЧЕИСТОЙ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ С РАЗВИТОЙ ВНЕШНЕЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА РЕПЛИКАЦИИ ПЕНОПОЛИУРЕТАНОВОЙ СТРУКТУРООБРАЗУЮЩЕЙ МАТРИЦЫ

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

Высокопористые ячеистые катализаторы – специфический класс пористых материалов состоящих из больших ячеек, с линейными размерами от 10 мкм до 5 мм и обладающих геометрией примерно соответствующей четырнадцатиграннику.

Высокопористые керамические структуры могут быть сделаны в виде различных форм из широкого круга материалов и проявляют качества такие как высокая пористость с хорошей взаимоспроникаемостью. В виду своей специфичной геометрии и других свойств такие материалы могут быть использованы в решении широкого круга инженерных задач. Ячеистые катализаторы хорошо зарекомендовали себя в ряде газофазных технологических процессов.

Наиболее распространенным методом производства высокопористых ячеистых материалов является метод репликации пенополиуретановой структурообразующей матрицы. Технология подразумевает термическое разложение пенополиуретановой структуры, после пропитки керамическим шликером. Состав шликера, наполнитель, размер частиц наполнителя и его количество, размер и форма ячеек структурообразующей матрицы из пенополиуритана варьируемы и определяют свойства катализатора.

Работа основана на термообработке высокопористой пенополиуретановой матрицы, обработанной шликером, содержащим в качестве наполнителя корунд с добавлением компонентов, придающих прочность на сжатие, кислото- и щелочестойкость, пеногасителей и других присадок (до 2%), с последующим нанесением оксида алюминия с кристаллической решеткой в гамма-состоянии полученного из нитрата алюминия. Далее на подготовленную поверхность высокопористого ячеистого носителя наносятся активные подложки и каталитически активные компоненты.

В результате варьирования компонентного состава шликера можно получить новую каталитическую систему с более развитой площадью поверхности. Разработка оптимального температурного режима обжига позволяет избежать разрушения структуры катализатора.

Преимуществом высокопористых ячеистых катализаторов является высокая площадь поверхности и высокая проницаемость для газового и жидкостного потока, что приводит к высоким скоростям массо- и теплопереноса, что позволяет создавать малообъемные каталитические системы.

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Абраменко А.В	3
Алекберова И.А.	4
Алексеева Е.А., Стригина В.А.	5
Алексеева Л.Г.	6
Андрианова Е.В.	7
Андрианова Я.В.	8
Ахметзянова У.Р.	9
Бабенко Г.Е.	10
Бабуркин П.О.	11
Барабонова И.А.	12
Брякина Н.Е., Явсенков В.С.	13
Булюкина О.А.	14
Валькова О.В.	15
Васильев А.С., Бирюкова Н.В.	16
Васильева Д.В.	17
Васильев С.А.	18
Виноградов О.В.	19
Володько К.Ю.	20
Гаврилова А.С.	21
Глушонок Д.А.	22
Голосова А.Н. Григорьев Р.Е. Корнева А.В.	23
Грачев А.Н., Кутузов Д.С.	24
Грицук М.А., Пичугина А.И.	25
Гурин А.А.	26
Гусева В.А.	27
Густова А.В.	28
Демидова М.С.	29
Дожделев А.М.	30
Дьякова Е.В.	31
Евтюхина А.И.	32
Жвирбле К.В.	33
Жерихова А.М.	34
Жигалова Ю.Э.	35
Жигалова Ю.Э. Яковлева Р.А. Якубовская А.А.	36
Журавлев Е.В., Потеха Е.В.	37
Зигерт А.Д.	38
Златарова А.Д., Самохвалов Н.Е.	39
Златарова А.Д.	40
Золотухина С.Ю.	41
Козлов В.В.	42
Комар К.П.	43
Комаров Н.А.	44

Копич Н.И.	45
Коробейников П.А.	46
Косарева К.А.	47
Косивцова А.Ю.	48
Котельникова А.А.	49
Котомкин А.В.	50
Котомкин А.В.	51
Кротова Н.И.	52
Крылов А.А.	53
Крылов П.Н.	54
Кузьмина И.В.	55
Кукарекин В.В.	56
Куликов Г.С.	57
Логина Е.С.	58
Любимова Н.А.	59
Максименко С.А., Бордин Д.А.	60
Мартынова К.А.	61
Маякова М.Н.	62
Мельников Н.В.	63
Минина М.В.	64
Молчанова Е.С., Мыльникова М.В.	65
Молькова Т.С., Рыжкова С.С., Базанова М.А.	66
Мочалова Е.А., Соколова И.А.	67
Некрасова Е.Н.	68
Нилова К.А.	69
Новикова В.В., Цветкова И.С.	70
Оленева Ю.Г.	71
Орликова Ю.А.	72
Павлов А.В.	73
Павлов М.Н.	74
Перевозова Т.В., Крылов П.Н.	75
Петрова В.Е.	76
Пичугина А.И.	77
Погудкина А.А., Куликов Г.И., Ситникова В.Е.	78
Порандайкина О.А.	79
Постнова О.И.	80
Пресняков И.А.	81
Рагузина Е.М.	82
Рубин М.А., Смелкова В.В., Быков А.В.	83
Руднев Д.П.	84
Рыбаков Е.В.	85
Рыбаков И.И., Кустарев Б.А.	86
Саакян А.А.	87
Сазонова А.М.	88
Светогорова Д.А.	89

Семенова Л.Н.	90
Ситникова В.Е.	91
Ситников В.Н.	92
Скобин М.И. Крюков Т.В., Потеха Е.В.	93
Смирнов И.А.	94
Соколова Е.М.	95
Соколов М.А.	96
Соловьева Н.А., Торопова Д.М.	97
Соловьева С.И.	98
Спирidonов И.И.	99
Суворова З.В., Котенкова Е.Н.	100
Сулейманова Ш.Ф.Г.	101
Ткачева А.И.	102
Узденов А.К.	103
Федоренко Л.А.	104
Филатова А.Е.	105
Чехонин Е.С.	106
Шеховцова Д.С., Торопова Д.М.	107
Шильниковская К.В., Сальникова К.Е.	108
Шумилов В.В.	109
Авторский указатель	110