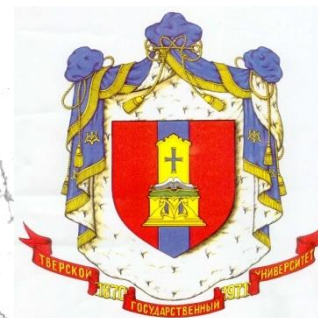


ФОНД СОДЕЙСТВИЯ РАЗВИТИЮ
малых форм предприятий в научно-технической сфере



XXIII КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ

с международным участием

**Всероссийская научно-техническая
конференция молодых учёных**

«Физика, химия и новые технологии»

ТВЕРЬ 2016

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

XXIII КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ

с международным участием

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

24 марта 2016 года

г. Тверь

Тезисы докладов

ТВЕРЬ 2016

УДК 54(082)

ББК Г.я431

Р32

Ответственные за выпуск:

доктор химических наук П.М. Пахомов
кандидат химических наук С.Д. Хижняк
аспирант Я.В. Андрианова

Р32 XXIII Каргинские чтения: тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2016. – 142 с.

Областная, а затем всероссийская научно-техническая конференция молодых учёных в рамках Каргинских чтений и на базе Тверского государственного университета 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 №16-03-20035г).

© Тверской государственной
университет, 2016

© Авторы статей, 2016

Яхья Абсалан

ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТОДИКИ СИНТЕЗА ДИОКСИДА ТИТАНА ПУТЕМ ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ТЕТРАБУТОКСИТИТАНА

Руководитель О.В. Ковальчукова

Российский университет дружбы народов
Кафедра общей химии

Диоксид титана (TiO_2) привлекает к себе большое внимание ученых в связи с многообразием областей его использования (в гетерогенном катализе, фотокатализе, в качестве компонента солнечных батарей и газовых сенсоров, а также пигмента белого цвета, противокоррозионного покрытия) [1]. Показано, что наноразмерные частицы TiO_2 проявляют наибольшие каталитические свойства в фотокатализе, которые значительно уменьшаются при увеличении размера частиц. Это свойство позволяет активно использовать их для разложения и полной минерализации различных токсичных органических загрязнителей сточных вод, таких, например, как фенол и др. [2].

В природе диоксид титана существует в виде трех аллотропных модификаций (анатаза, рутила и брукита), которые легко различаются методом рентгенофазового анализа. Известно, что наилучшими каталитическими свойствами обладает смесь, содержащая 80% анатаза и 20% рутила.

Основным методом синтеза диоксида титана является термическое разложение его тетраалкоголятов [3]. В настоящей работе была проведена оптимизация методики его получения для выделения диоксида титана в оптимальном соотношении аллотропных модификаций. В качестве прекурсора использовали тетрабутоксититан, варьировали температуру и время его обработки, о соотношении аллотропных модификаций судили по анализу порошковых рентгенограмм в научной лаборатории ЦКП ФХИ РУДН.

Установлено, что оптимальными условиями получения смеси 80% анатаза и 20% рутила является разложение тетрабутоксититана при температуре 550°C в течение 480 мин. Увеличение температуры приводит к преимущественному образованию аллотропной модификации рутил, а уменьшение времени обработки – к преобладанию аллотропной модификации анатаза (более 90%).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Diebold U. // Surface Science Reports, 2002. P. 53.
2. Ahmed M.A. // J. Photochem. Photobiol. A. Chemistry. 2012. V. 238. P. 63.
3. Ромашкин С.В. Дисс. ... к.х.н. М., РУДН, 2013. 121 с.

Д.В. Аверкин

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ САМООРГАНИЗАЦИИ В НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ВОДНЫХ РАСТВОРАХ, СОДЕРЖАЩИХ L-ЦИСТЕИН И АЦЕТАТ СЕРЕБРА

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

Гелеобразование в низкоконцентрированных водных растворах низкомолекулярных соединений, таких как аминокислоты, является редким явлением, поэтому оно интересно как с практической, так и с научной точек зрения. Автором изучено гелеобразование в системах на основе водных растворов аминокислоты L-цистеин и ацетата серебра (3,0 мМ) с помощью различных физико-химических методов.

Было установлено, что в результате смешивания водных растворов исходных компонентов (концентрация - 1,0 мМ) в молярном соотношении 1:1,25 (Cys / Ag⁺) образуется слегка опалесцирующий раствор. Спустя время (~12-24 ч) он приобретает желтый оттенок, это, так называемый, цистеин-серебряный раствор (ЦСР). Гели образуются путем прибавления к ЦСР инициатора, как правило, в его роли выступают соли различных металлов. Скорость гелеобразования зависит от концентрации добавленного электролита и температурных условий.

Результаты визкозиметрических исследований показывают, что вязкость ЦСР при комнатной температуре (~25⁰С) в 2 раза выше вязкости воды при той же температуре (~2,2 мПа•с/г/см³). Все образцы гелей тиксотропны, т.е. разрушаются в результате механического воздействия и вновь восстанавливаются при стоянии. По данным динамического светорассеяния, полученными на устройстве "NanoSizer NS" фирмы "Malvern", распределение частиц по размерам в ЦСР мономодально, средний размер частиц составляет ~330 нм. Измерение дзета-потенциала ЦСР показало, что его значение является достаточно стабильным и равно около +60 мВ. Добавление электролита (хлорида или сульфата различных солей) вызывает изменение заряда системы. Электронно-микроскопические изображения цистеин-серебряного раствора и гелей, полученные на микроскопе «Leo 912 AB OMEGA» («Carl Zeiss», Germany), подтверждают формирование пространственной гель-сетки в образцах. Таким образом, гидрогели на основе биологически активных веществ (аминокислоты L-цистеин и ацетата серебра) являются не только интересным объектом изучения процессов самоорганизации, но они могут найти применение в фармакологии и в различных областях медицины благодаря антибактериальным свойствам.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности (проект №4.1325.2014/К), государственного задания "Обеспечение проведения научных исследований" на базе ЦКП Тверского государственного университета

А.Н. Адамян

ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЕ В НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ВОДНЫХ РАСТВОРАХ, СОДЕРЖАЩИХ L-ЦИСТЕИН И АЦЕТАТ СЕРЕБРА

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

Известно, что L-цистеин образует гидрогели с некоторыми солями серебра (AgNO_3 , AgNO_2). За счет содержания в данных системах L-цистеина и катионов серебра, (как известно они широко используются в медицине), проблемы синтеза, изучения и применения супрамолекулярных гелеобразующих систем вызывают повышенный интерес. В работе обнаружено гелеобразование в низкоконцентрированных водных растворах (3,0 мМ) в системе L-цистеин – ацетат серебра и с помощью различных физико-химических методов – Фурье-ИК, УФ спектроскопии, динамического светорассеяния, рН-метрии – изучены условия образования гелей и их строение. В ходе исследований установлено, что в результате смешивания растворов исходных компонентов при условии избытка ионов серебра, молярное соотношение Cys/Ag^+ варьируется в интервале 1:1,24 – 1:1,28, образуется слегка опалесцирующий раствор, который при стоянии приобретает желтый оттенок. Скорость формирования такого раствора зависит от концентрации компонентов, их соотношения, температуры. Для образования гидрогеля необходимы инициаторы – электролиты такие, как хлориды и сульфаты металлов (Na^+ , Mg^{2+} , Zn^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Mn^{2+} , Cu^{2+} и NH_4^+). Согласно данным УФ спектроскопии в спектрах водных систем на основе L-цистеина и ацетата серебра появляются две полосы поглощения с максимумами ~ 314 и 394 нм, что связано с образованием супрамолекулярных цепочек $[-\text{Ag}-\text{S}(\text{Cys})-]_n$. При добавлении в смесь определенного количества хлорида любого металла в спектре исчезают полосы поглощения 314 и 391 нм, но появляется полоса поглощения 364 нм, в то время как сульфаты металлов в спектре изменений практически не вызывают. Данные ИК спектроскопии подтверждают различный механизм формирования гелей в присутствии сульфатов и хлоридов металлов. Таким образом, как показали экспериментальные исследования, гелеобразование является сложным, многостадийным процессом, включающим образование в системе молекул меркаптида серебра, формирование из них супрамолекулярных цепочек и пространственной гель-сетки при добавлении электролита.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности (проект №4.1325.2014/К), государственного задания "Обеспечение проведения научных исследований" на базе ЦКП Тверского государственного университета

К.Е. Акимова

ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНОЙ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ
СОЕДИНЕНИЙ $(\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x})\text{V}$

Руководитель О.В. Жданова

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Сплавы на основе железа и кобальта, в настоящее время, интересны с точки зрения поиска новых функциональных материалов, пригодных для использования в современной технике.

Соединения $(\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x})\text{V}$ обладают орторомбической кристаллической решеткой, пространственной группы $R\bar{3}m$. Магнитная доменная структура данного типа магнетиков, на данный момент, изучена недостаточно полно. В связи с этим было проведено исследование доменной структуры сплавов FeV и $\text{Fe}_{0,6}\text{Co}_{0,4}\text{V}$.

Доменная структура исследовалась на поликристаллических образцах с использованием метода полярного эффекта Керра, метода порошковых осадков, пленок феррита-граната и магнито-силовой микроскопии (МСМ).

Исследование доменной структуры сплава FeV показало, что в части зерен образца наблюдаются полосовые или каплевидные домены. На поверхности других зерен выявляются домены в виде «звездочек». Кроме того, в рядах «звездочек» прослеживается выделенное направление, вдоль которого они ориентированы. Замыкающие домены имеют правильную форму ромбов.

Аналогичная конфигурация доменной структуры выявляется в зернах матричной фазы сплава $\text{Fe}_{0,6}\text{Co}_{0,4}\text{V}$.

Полученные картины доменной структуры сплавов FeV и $\text{Fe}_{0,6}\text{Co}_{0,4}\text{V}$ подтверждают ранее полученные результаты и хорошо согласуются с моделью магнитной доменной структуры орторомбических магнетиков, предложенной в работах [1–2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Жданова О.В., Ляхова М.Б., Пастушенков Ю.Г.//Физика металлов и металловедение. 2011. Т.112. №3. С.239-246.
2. Жданова О. В., Ляхова М.Б., Пастушенков Ю.Г.//Металловедение и термическая обработка металлов. 2013. №2. С.12-16.

А.А. Аксенов, Н.А. Соловьева

ВЛИЯНИЕ ПРОМЫШЛЕННЫХ ЗАГРЯЗНЕНИЙ НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ КРАПИВЫ ДВУДОМНОЙ (*URTICA DIOICA*)

Руководители: П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк
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. Растения, в том числе лекарственные, способны накапливать из окружающей среды вещества различной природы, поэтому важным этапом производства лекарственных препаратов является анализ растительного сырья. Различные промышленные загрязнители, попадая в воздух, поглощаются растениями, как непосредственно через ассимиляционный аппарат (листья), так и путём косвенного воздействия через почву. В связи с этим анализ изменений химического состава растений (лекарственных или биоиндикаторных), происходящих под воздействием антропогенного фактора, является актуальной задачей для оценки качества лекарственного сырья или уровня экологической обстановки. Цель работы – изучение влияния промышленных загрязнений на химический состав крапивы двудомной (*Urtica dioica*) методами Фурье-ИК и УФ спектроскопии. В качестве объектов исследования были выбраны образцы крапивы двудомной (листья), собранные в г. Санаин республики Армения, пос. Шаховская Московской области, а также в г. Твери в местах с различной антропогенной нагрузкой.

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

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

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности (проект №4.1325.2014/К), государственного задания "Обеспечение проведения научных исследований" на базе ЦКП Тверского государственного университета

А.В. Аксенова

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗОЛЬНОСТИ УГЛЕЙ РАЗЛИЧНЫХ МАРОК КУЗБАССКОГО УГОЛЬНОГО БАССЕЙНА

Руководитель Т.В. Буланова

Кузбасский государственный технический университет
Кафедра химии и технологии неорганических веществ и наноматериалов

Количество и состав минеральных примесей являются одним из главных показателей промышленно-потребительских свойств ископаемых углей, представляющих собой петрографическую ассоциацию органического и минерального материала. Последний представлен главным образом соединениями Si, Al, Fe, Ca, Mg, S и других элементов, входящих в состав глинистого материала, полевого шпата, кремния, сульфидов, карбонатов (кальцита, сидерита, доломита) сульфатов (гипса и др.) [1].

Для оценки качества угля определена зольность углей различных марок Кузбасского угольного бассейна: Д(длиннопламенный), СС (слабоспекающийся), ГЖО (газовый жирный отощенный). Крупность пробы 0-1,6 мм. Сущность метода заключалась в постепенном продвижении лодочек с навесками в нагретую до $(815 \pm 10)^\circ\text{C}$ муфельную печь. Лодочки помещали на пластину из жаропрочного материала, устанавливали её на открытую крышку муфеля так, чтобы первый край лодочек находился у края печи, и выдерживали в таком положении 3 мин при озолении углей. Затем пластинку продвигали внутрь муфеля со скоростью 2 см/мин, закрывали дверцу печи и прокачивали зольные остатки углей 20-25 мин. По истечении времени, лодочки с навесками охлаждали на воздухе и взвешивали с точностью до 0,0001 г.

Содержание золы в исследуемых марках угля: Д - 16-17%, СС - 10-11%, ГЖО - 9-10%.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Такранов Р.А./ Оперативное определение показателей качества и свойств угля в маркшейдерско-геологической практике: Учеб. пособие // Р.А.Такранов, А.Н.Шеремет, Н.В.Лагай. СПб., 2005. 75 с.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СВОЙСТВ МОЛОКОСВЕРТЫВАЮЩИХ
ФЕРМЕНТОВ ЖИВОТНОГО И РАСТИТЕЛЬНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

Руководитель И.В. Ущাপовский

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Сыр – продукт натурального происхождения, полученный в результате ферментативного свертывания молока, выделения сырной мысы, ее последующей обработки и созревания. В основе технологии производства сыров лежит способность молока коагулировать под воздействием определенных протеолитических ферментов, получивших название молокосвертывающих [1,2]. Вытяжка из сычуга традиционно чаще всего используется в сыроделии, однако, его высокая стоимость и растущий дефицит приводят к росту спроса на коагулянты для молока растительного и микробиологического происхождения. Существенным преимуществом использования микроорганизмов и растений для получения молокосвертывающих ферментных препаратов является большая рентабельность производства за счет доступных источников сырья. Однако, технологические испытания коагулянтов микробиологического происхождения выявили их негативное влияние на органолептические свойства целевого продукта, а некоторые виды используемых препаратов вызывали заплесневение и вспучивания сыра [3]. Следовательно, перспективным источником молокосвертывающих ферментов являются растения. Многие экстракты растительного происхождения способны свертывать молоко, но некоторые из них (например, сок фигового дерева или бромелин из ананаса) не могут быть получены в промышленных масштабах из собственного сырья в РФ. Кроме того, экстракты растений, которые традиционно считались ферментными коагулянтами молока (майоран, мята, розмарин, подорожник, щавель), таковыми не являются, поскольку имеют другой механизм действия. Целью данной работы является исследование свойств молокосвертывающих ферментов растительного происхождения, а также сравнение с их аналогами животного происхождения, выделенных из желудка телят. В качестве растительного сырья для получения молокосвертывающих ферментов использованы *Circaea* и *Carlina spp.* и *Urtica dioica*, произрастающих в больших количествах на территории РФ. Для получения экстрактов с максимальной коагулирующей активностью были исследованы различные экстрагенты (с учетом их применимости в пищевой промышленности), а также время и способ получения экстрактов. Затем была исследована молокосвертывающая активность полученных экстрактов при варьировании процентного соотношения их внесения в молоко. Все пробы молока, используемого для экспериментов, предварительно анализировались на кислотность и на наличие возможных примесей (крахмал, сода, антибиотики), так как эти факторы также влияют на ход коагуляции белков молока. Аналогичные эксперименты проведены и для сычужного фермента.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Колесникова С. С. Ферменты для коагуляции молока в сыроделии // Молочное дело. 2006. № 8. С. 50-52; № 9. С. 50-51.
2. Крахмалева Т.М., Манеева Э.Ш. Пищевая химия: учеб. пособие. Оренбург, 2012. 155 с.
3. Колесникова С. С. Ферменты для коагуляции молока в сыроделии // Молочное дело. 2006. № 8. С. 50-52; № 9. С. 50-51.

Я.В. Андрианова

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ХЛОРИДОВ МЕТАЛЛОВ

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

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

ЦСР получали при смешивании водных растворов L-цистеина и AgNO_3 ($C=0,03$ М) при молярном соотношении (1.00:1.27). В качестве электролитов использовали хлориды металлов: Na^+ , Co^{+2} , Ni^{+2} , Mg^{+2} , Mn^{+2} , Zn^{2+} , Cu^{2+} . Вязкость растворов и гелей измеряли на вибрационном лепестковом SV-10 вискозиметре, а электропроводность - кондуктометром «Seven Go PRO SG7» фирмы «Mettler Toledo». Процесс самоорганизации в ЦСР на молекулярном уровне исследовали методом ДСР. С помощью пятибалльной шкалы [1] удалось оценить прочностные свойства гидрогелей с разными инициаторами и определить диапазоны концентраций компонентов. Методом вибрационной вискозиметрии проведены количественные измерения вязкости гидрогелей, установлено соответствие между прочностными и реологическими свойствами системы. Также установлено соответствие между процессами самоорганизации и падением значений электропроводности в системе. Полученные данные свидетельствуют о росте размеров фрактальных кластеров из супрамолекулярных цепей меркаптида серебра в ходе созревания ЦСР и образовании пространственной гель-сетки при введении хлоридов металлов. Результаты метода ДСР свидетельствуют о росте размеров кластеров из олигомерных цепей в момент «созревания» ЦСР и в процессе гелеобразования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк, М.М. Овчинников, П.В. Комаров. Супрамолекулярные гели. Тверь: ТвГУ. 2011. С. 272.

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

Д.В. Арефьев, М.Н. Барина

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ СПОСОБ КОЛИЧЕСТВЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИОНА ЛИНКОМИЦИНА

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Линкомицин из группы линкозамидов является популярным средством для лечения инфекционно-воспалительных заболеваний. В настоящее время для анализа биологически-активных веществ предложены надежные ионоселективные электроды (ИСЭ), которые упрощают аналитическую процедуру и имеют низкую погрешность измерений. Цель нашей работы - создание ионоселективного электрода с откликом на линкомицин. Для изготовления ИСЭ использовали ионоселективную мембрану состава (процент по массе): поливинилхлорид: дибутилфталат: электрод активное вещество (ЭАВ)-(55:40:5). В качестве ЭАВ использовали ионный ассоциат катиона линкомицина и молибдо-кремниевой кислоты. Известно, что использование трансдьюсера вместо внутреннего электрода сравнения позволяет существенно улучшить метрологические характеристики ионоселективного электрода. Поэтому нами были изготовлены ионоселективные электроды в двух вариантах 1) классический (с внутренним электродом сравнения и ионоселективной мембраной) и 2) с трансдьюсером, представляющим собой пластифицированную мембрану состава: поливинилхлорид: дибутилфталат: полианилин в соотношении (40:35:25). Трансдьюсер находился между ионоселективной мембраной и токоотводом. Исследование электродных функций полученных электродов показало, что оба они имеют крутизну электродной функции в пределах 35 мВ/рС, что соответствует теоретическим значениям, при этом минимально определяемая концентрация 1-5 (рС), диапазон которой является достаточным для большинства практических измерений. Эффективность предложенных методик была подтверждена при помощи анализа готовой лекарственной формой линкомицина гидрохлорида. Анализ проводили методом прямой потенциометрии с использованием изготовленных электродов и методом потенциометрического титрования раствора нитрата серебра (AgNO_3) с серебряным индикаторным электродом. Результаты анализа имеют хорошее соответствие.

ИЗУЧЕНИЕ УСЛОВИЙ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ГЕЛЕОБРАЗНОГО СОСТОЯНИЯ В РАСТВОРЕ МЕРКАПТИДА СЕРЕБРА: МЕЗОСКОПИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Руководитель П.В. Комаров

Тверской государственной университет
Кафедра теоретической физики

Большой интерес к изучению гелей и гелеобразного состояния объясняется их широким распространением в повседневной практике и использовании в технологических процессах. Понимание таких систем важно и с фундаментальной точки зрения, поскольку гелеобразное состояние является достаточно «простым» примером метастабильных систем, способных менять и восстанавливать свою структуру при наличии внешнего воздействия. В данной работе выполнено изучение условий образования пространственной гель-сетки в растворе меркаптида серебра (МС) под воздействием соли инициатора.

Для выявления механизма формирования гелеобразного состояния мы используем крупнозернистую модель раствора МС, разработанную на основе метода диссипативной динамики частиц. Она включает в себя два типа цвиттерионов МС: А (с блокированными функциональными группами $\text{C}(\text{O})\text{O}^-$ и NH_3^+ ионами металла) и В (с активными функциональными группами). Таким образом, отношение долей типов цвиттерионов, задаваемое параметром $f = A/(A+B)$, мы сопоставляем относительной концентрации соли в растворе. В результате выполненных расчетов была построена фазовая диаграмма поведения модели раствора МС при изменении двух главных параметров: концентрации меркаптида серебра (C) и соли (f). Классификация состояния системы производилась посредством визуального контроля ячеек моделирования и расчета структурных факторов $S(q)$. Полученная фазовая диаграмма качественно воспроизводит экспериментально наблюдаемое поведение системы.

C %	f							
	0.1÷0.4	0.5	0.55	0.6	0.65	0.7	0.75	0.8
3	Стабилизированный раствор			гелеобразное состояние		макрофазное разделение		
2.5								
2								
1.5	слабо разбавленный раствор							

Рис. Фазовая диаграмма состояния раствора.

Автор выражает благодарность МСЦ РАН за предоставление вычислительных ресурсов кластера МВС-100к. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства Науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности (№ 4.1325.2014/К).

Д.Д. Бадоскин

ВЛИЯНИЕ ЛИНЕЙНОЙ СКОРОСТИ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ НА СТЕПЕНЬ КРИСТАЛЛИЧНОСТИ И МОРФОЛОГИЮ ПОЛИАМИДОВ, ПОЛУЧАЕМЫХ ГАЗОЖИДКОСТНОЙ ПОЛИКОНДЕНСАЦИЕЙ

Руководитель В.А. Никифоров

Тверской Государственный технический университет
Кафедра технологии полимерных материалов

Степень кристалличности определяет морфологическую структуру, удлинение при разрыве или изгибе, модуль упругости при растяжении, твердость, проницаемость и плотность.

Изучено влияние линейной скорости газовой фазы на степень кристалличности полиамидов 6Т и 6И, полученных в реакторе-фибридаторе с конфузorno-диффузornoй двухступенчатой реакционной камерой, при соотношении мономеров $n_{ДА}/n_{ХА} = 1,5:1$, концентрации мономеров: $C_{ДА} = 0,1$ кмоль/м³ и $C_{ХА} = 1$ моль/м³. Образцы получены при различной линейной скорости газовой фазы.

Экспериментально установлено, что при повышении линейной скорости газовой фазы степень кристалличности понижается при синтезе как полиамида 6Т, так и полиамида 6И, а конечная степень кристалличности их отличается на десятки процентов. Это связано с уменьшением времени пребывания мономеров и растущих цепей в реакционной зоне. Обнаружено различие в степенях кристалличности полиамида 6Т и полиамида 6И, что объясняется ассиметричным строением молекулы полиамида 6И, вследствие чего кристаллизация макромолекулы затруднена и выражается невысокой степенью кристалличности (не более 40%).

Обработкой массива экспериментальных данных получены количественные зависимости степени кристалличности от линейной скорости газовой фазы для полиамида 6Т и полиамида 6И:

$$X_{6И} = -0,295W_r + 38,985;$$

$$X_{6Т} = -0,88W_r + 98,2;$$

где, $X_{6И}$ и $X_{6Т}$ – степень кристалличности полиамидов 6И и 6Т, %;
 W_r – линейная скорость газовой фазы, м/с.

Данные зависимости позволяют прогнозировать морфологическую структуру (возможность образовывать фибриды или газоструктурные элементы), получать полиамиды с необходимой степенью кристалличности, возможность её регулирования позволит создать полимер с требуемой твердостью, проницаемостью, плотностью, необходимым значением удлинения при разрыве или изгибе и модулем упругости при растяжении.

ТЕХНОЛОГИИ ТЕРМИЧЕСКОЙ ПЕРЕРАБОТКИ ПОЛИМЕРНЫХ ОТХОДОВ

Руководитель К.В. Чалов

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии полимерных материалов

Одной из глобальных проблем человечества является экономически выгодная и экологически безопасная утилизация отходов производства и потребления. Количество отходов, образующихся во всем мире, составляет более 400 млн. тонн в год. Твердые бытовые отходы – механическая смесь разнообразных материалов, среди которых наиболее трудно перерабатываемыми являются отходы полимерных изделий. За последние 20 лет морфологический состав ТБО сильно изменился – преобладают пластик и полиэтилен, которые, попадая в окружающую среду, ее загрязняют. Технологии вторичной переработки полимерных отходов постоянно совершенствуются. Выделяют следующие технологии утилизации: захоронение на полигонах ТБО, термические способы (прямое сжигание, пиролиз и др.), химические и механическая переработка. Наиболее рациональные и ресурсосберегающие способы переработки ТБО – термические. Пиролиз – наиболее эффективный с точки зрения получения ценных газообразных и жидких продуктов. Он дает возможность перерабатывать пластики различного химического состава без предварительной подготовки, что позволяет экологически чисто и просто с технической стороны утилизировать полимерные отходы.

Совершенствование процесса пиролиза возможно при применении катализаторов: на основе природных алюмосиликатов позволит снизить энергозатраты процесса и повысить выход газообразных и жидких горючих углеводородов. Исследованы металлы (никель, железо, медь, алюминий и др.) и их оксиды, но они неэффективны, т.к. дают большой выход метана и кокса. Лучшие результаты показали метаванадат калия, оксид индия, оксиды кальция и магния, некоторые цеолиты; также железохромовые катализаторы с добавлением оксида калия. Исследуют высококремнеземные цеолиты благодаря уникальным каталитическим свойствам, позволяющим использовать их при получении олефинов и аренов из низкокачественного углеводородного сырья.

В работе рассмотрены различные методы утилизации полимерных отходов, среди которых пиролиз можно выделить как наиболее эффективный и экологически безопасный способ. Использование дешевых и доступных катализаторов при пиролизе – актуальное направление исследований.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абдель-Бари, Е.М.// Полимерные пленки. СПб., 2006. 352 с.
2. Твердые бытовые отходы // Research Techart. 2011. Т.55, № 1. С. 48-49.

М.С. Барсукова, А.В. Сергеева, Р.Н. Тарасова

ИЗУЧЕНИЕ НАКОПЛЕНИЯ БЕЛКА В НАДЗЕМНЫХ И ПОДЗЕМНЫХ ЧАСТЯХ *LINUM ISITATISSIMUM* НА РАННИХ ЭТАПАХ РАЗВИТИЯ В КОНТРОЛИРУЕМЫХ УСЛОВИЯХ АЗОТНОГО ПИТАНИЯ

Руководитель Е.В. Ожимкова
Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии и химии

Азот является один из основных элементов, необходимых для нормального роста и жизнедеятельности растений, так он входит в состав белков, нуклеиновых кислот, витаминов и других соединений. Недостаток азота особенно резко сказывается на росте вегетативных органов. Основным источником азота для растений – соли азотной кислоты и аммония, которые образуются в почве благодаря разложению органических веществ почвы под действием различных факторов. В современном сельском хозяйстве основным источником азота для растений - промышленное внесение аммонийных и нитратных удобрений. Современные азотные удобрения позволяют существенно повысить уровень продуктивности земледелия, однако при нарушении технологии их применения они могут оказать существенное негативное воздействие на биосферу - почву, воду, атмосферу, растения, а через них - на животных и человека. Следовательно, совершенствование техник и дозировок рационального внесения азотных удобрений позволит не только добиться положительного влияния на урожайность сельскохозяйственных растений, но и снизить загрязнение природной среды минеральными удобрениями.

В представленной работе на примере нескольких сортов льна масличного и льна-долгунца исследовано накопление белка в побегах и корнях в контролируемых условиях азотного питания. В качестве контрольного эксперимента проведены серии опытов без дополнительного внесения минеральных компонентов. Вегетационные опыты по выращиванию льна проводили на песчаных культурах при контролируемой температуре и влажности. Перед посевом семенами проверяли на всхожесть, которая составила 98-100% в зависимости от сорта. Контролируемые условия азотного питания обеспечивались путем использования раствора Кнопа и его модификаций, а также бактериального удобрения, содержащего азотфиксирующие микроорганизмы. Для полученных растений определяли массу надземной и подземной части, а также содержание белковых компонентов. Концентрацию белка в экстрактах определяли бицинхонатным и биуретовым методами. Количество белка различно у изученных сортов и зависит от используемого источника азотного питания.

ЭНЕРГИИ РАЗРЫВА СВЯЗИ В ТИОСПИРТАХ И ЗАМЕЩЁННЫХ БЕНЗОЛА

Руководитель М.Г. Виноградова

Тверской государственной университет

Кафедра физической химии

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

В работе рассмотрены аддитивные методы и схемы расчёта; методы статистического анализа и линейной алгебры.

Для достижения поставленной цели в работе были решены следующие задачи:

1) Проведена оценка состояния численных данных по энергиям разрыва связи в рассматриваемых соединениях.

2) Выявлены определённые закономерности связывающие энергии разрыва связей со строением исследуемых соединений;

- энергии разрыва связей D_{298} в выбранных соединениях изменяются в широких пределах;

- в гомологических рядах с увеличением длины цепи энергия разрыва связей уменьшается, стремясь к некоторому пределу;

- энергия разрыва связей D_{298} в рассматриваемых соединениях уменьшается при разветвлении радикала;

- величины D_{298} уменьшается с ростом степени замещения;

- энергии разрыва связей увеличиваются при появлении атомов галогенов в цепи молекулы;

- величины D_{298} снижаются при появлении в α -положении (к отрываемой группе) двойной связи, фенильной группы, моноцикла и др.

3) Проведены численные расчёты энергий разрыва связи в тиоспиртах и замещённых бензола, согласующиеся с экспериментом (там, где можно сделать сопоставления).

4) Построены и проанализированы графические зависимости “энергия разрыва связи – число заместителей”.

Найдено, что данные сложные, в общем случае нелинейны. Линии замещения на одну и ту же группу не везде симбатны между собой.

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

И.С. Белова

ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕДИ(II) С ЦЕФАЛОСПОРИНАМИ

Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

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

Образец	$\nu(\text{C}=\text{O})$ β -лактам	$\nu(\text{C}=\text{O})$ амид	$\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)_{\text{as}}$
$\text{NaCzI} \cdot \text{H}_2\text{O}$	1761	1680	1605
$\text{Cu(CzI)}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	1765	1684	1606
$\text{NaCxm} \cdot \text{H}_2\text{O}$	1759	1647	1612
$\text{Cu(Cxm)}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	1769	1674	1616
$\text{Na}_2\text{Ctx} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	1740	1649	1610
$\text{CuCtx} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	1767	1668	1620

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

РАСТВОРА ИНГИБИТОРА И ЕГО УТИЛИЗАЦИЯ

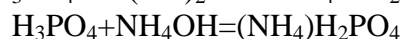
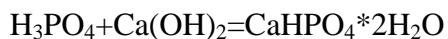
Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственной университет

Кафедра неорганической и аналитической химии

Для борьбы с коррозией чаще всего используются ингибиторы коррозии на основе фосфорной кислоты с комплексообразующими добавками в виде соли этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТА).

Научная новизна нашей работы состоит в замене загрязняющего природу комплексообразователя на экологически безопасный комплексообразователь и в утилизации отработанного раствора ингибитора коррозии. Предлагаемая рецептура ингибитора коррозии является экологически безопасной и обеспечивает утилизацию отработанного раствора на удобрения. Экологически безопасный комплексон (этилендиаминдиантарная кислота, ЭДДЯК), входящий в состав предлагаемой нами рецептуры в условиях естественных сбросов быстро разлагается на составляющие усвояемые аминокислоты [1]. Кроме того, нами предусмотрена переработка отработанного антикора на удобрения, что обеспечивает сохранение экологического равновесия в природе и экономическую эффективность. В нашей работе антикоррозионная обработка черного металла осуществляется в ванне заполненной ингибитором ржавчины [2] в комплекте с конвейером, имеющим подвески для труб и средства для их подъема и опускания. Благодаря высокой текучести, ингибитор ржавчины заполняет все неровности поверхности. Предложенная технология предполагает ряд преимуществ: введение в состав антикора экологически чистых комплексообразователей (ЭДДЯК), обеспечивает высокую антикоррозионную эффективность ОФК; исключается поступление в окружающую среду отработанного раствора фосфатирования, т.к. этот раствор используется для получения удобрений (преципитат, аммофос) по реакциям:



Предлагаемый антикоррозионный состав имеет мировую новизну [3].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. L.N. Tolkacheva, V.M. Nikol'skii// Rus. Journal of Phys. Chem., 2013, Vol. 87, No. 9, P.1498-1501.
2. Патент РФ №2565170, опубл. 20.10.2015.
3. Положительное решение ФИПС от 19.01.2016 о выдаче патента по заявке №2014153067 от 26.12.2014.

Е.А. Бугрова

ВЛИЯНИЕ ФОНА МИНЕРАЛЬНОГО ПИТАНИЯ И НЕКОРНЕВЫХ ПОДКОРМОК НА ПРОДУКТИВНОСТЬ ЯРОВОЙ ТРИТИКАЛЕ СОРТА НОРМАН

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра технологии производства, переработки и хранения продукции
растениеводства

Тритикале – новая зерновая культура, созданная человеком в 30-х годах прошлого столетия путем скрещивания пшеницы и ржи, в результате чего она воплотила в себе все ценные биологические и хозяйственные свойства этих ценных растений. Цель исследований – изучить особенности формирования урожайности яровой тритикале на трех фонах минерального питания при применении некорневых подкормок различными препаратами; выявить лучший вариант технологии возделывания.

Исследования проводили в 2015 году в полевом многофакторном опыте на опытном поле Тверской ГСХА на хорошо окультуренной дерново – подзолистой остаточной карбонатной глееватой почве на морене. Схема опыта включала факторы: А – фон минерального питания: А₁ – без удобрения (по эффективному плодородию), А₂ – расчетная доза NPK на урожай 2,5 т/га, А₃ – NPK на урожай – 3,5 т/га, Фактор В – некорневая подкормка одним из препаратов: В₁ – контроль без подкормки, В₂ – Байкал ЭМ – 1 (1:200), В₃ – Прорастин (1:100), В₄ – Циркон (30 мг/г), В₄ – AgБион – 2 (1:100). Учетная площадь делянки 2-го порядка 29,4 м², 1-го – 205,2 м², повторность в опыте – 3х кратная. Размещение вариантов - рендомизированное. Объект исследований – яровая тритикале, сорт Норман и бактериальные, биологические препараты, наносеребро AgБион-2. В результате исследований выявлено, что некорневые подкормки оказывают положительное влияние на урожайность. Так, на неудобренном фоне прибавки урожая колебались от 0,32 до 0,95 т/га (21,5 – 63,8 %) при урожае в контроле 1,49 т/га, на втором фоне – от 0,44 до 0,99 т/га (21,0 – 47,1 %) при урожае в контроле 2,1 т/га, на третьем фоне – от 0,11 до 0,56 т/га (4,3 – 21,9 %) при урожае в контроле 2,56 т/га. Наибольший урожай зерна сформирован при подкормке: на 1 фоне Прорастином – 2,44 т/га, на 2-ом – Цирконом – 3,09 т/га, на 3-ем – Цирконом – 3,12 т/га. От применения удобрений прибавки урожая составили на 2 фоне – 0,63 т/га (30,9 %), на 3 фоне – 0,75 т/га (36,8 %). Из-за дефицита влаги в отдельные периоды вегетации на 3 фоне не получен запрограммированный урожай в 3,5 т/га. Наиболее экономически выгодно проводить некорневые подкормки на неудобренном фоне Прорастином, на удобренном – Цирконом.

П.С. Василенко

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЙ ТЕРМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ

Руководитель Н.В. Баранова
Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Дифференциальный термический анализ дает возможность определять наличие разложения или загрязнения лекарственных веществ при хранении, прогнозировать сроки годности, определять однородность партии продукции, изучать явления полиморфизма, контролировать чистоту лекарственных веществ[1]. Поведение исследуемых соединений в процессе нагревания было изучено на приборе для синхронного термического анализа STA 449 F3. Все испытания проводились в стандартных условиях; скорость нагрева 10°C/мин в статической атмосфере воздуха, тигли алюминиевые.

Методом ДСК были зарегистрированы термограммы ацетилсалициловой кислоты.

Из анализа термограмм исследуемых лекарственных веществ следует, что все они плавятся без разложения. Из полученных данных следует, что температура плавления имеют более высокие значения по сравнению со стандартной температурой плавления [1], что говорит о наличии примесей, имеющих более высокие значения температуры плавления. Количество примесей колеблется от 0,8 до 3,8%.

В связи с этим встал вопрос о дополнительной очистке исследуемых образцов. Была проведена перекристаллизация исследуемого образца из этанола. Найденное значение температуры плавления составило 135°C, что соответствует литературным данным [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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

А.С. Васильев, П. Дроздова

ГУМИНОВЫЕ КИСЛОТЫ ТОРФА – СТИМУЛЯТОРЫ РОСТА ЛЬНА

Руководитель Е.А. Прутенская
Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

Одним из интенсивно изучаемых классов соединений, относимых к биостимуляторам, являются гуминовые вещества (ГВ). Гуминовые вещества оказывают прямое физиологическое влияние на растения, что проявляется в повышении проницаемости клеточных мембран, увеличении активности ферментов дыхания и т.д.[1].

Очевидно, что ГВ из сырья различного происхождения имеют различный состав компонентов [2]. В определенной степени этим объясняется различная степень отклика биологических объектов на обработки гуминовыми веществами, отмечаемая на многих сельскохозяйственных культурах и, особенно, в стрессовых условиях [3]. В связи с этим актуальной становится проблема стандартизации промышленных гуминовых препаратов [4].

Целью данной работы является изучение влияния гуминовых веществ из образцов торфа различного происхождения на прорастание семян льна при оптимальных и пониженных температурах.

В работе показано, что гуминовые вещества торфа, не зависимо от их происхождения, в оптимальных дозах стимулируют прорастание семян льна, увеличивают сырую биомассу проростков. Гуминовые вещества повышают неспецифическую устойчивость семян в стрессовых условиях. Показано разнообразие отклика сортов льна в широком диапазоне концентраций – от стимуляции до ингибирования ростовых процессов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Чудинова Ю.В. Влияние препаратов гуминовой природы на продуктивность льна. //Достижения науки и техники АПК. 2010. №12. С.38-39
2. Прутенская Е.А., Косивцов Ю.Ю., Быстрова Г.И. Характеристика гуминовых кислот различного происхождения. Вестник Тверского государственного технического университета. 2008. № 13. С. 246-249.
3. Belopukhov S.L., Grishina E.A., Dmitrevskaya I.I., Lukomets V.M., Uschapovsky I.V. Effect of humic-fulvic complex on flax fiber and seed yield characteristics. Известия ТСХА. 2015. вып. 4. С.71-81.
4. Якименко О.С., Терехова В.А. Гуминовые препараты и оценка их биологической активности для целей сертификации // Почвоведение.2011. №11. С. 1334-1343.

С.А. Васильев

О ВЛИЯНИИ СКОРОСТЕЙ НАГРЕВА И ОХЛАЖДЕНИЯ НА
ВЕЛИЧИНУ ГИСТРЕЗИСА ПЛАВЛЕНИЯ-КРИСТАЛЛИЗАЦИИ
НАНОКЛАСТЕРОВ Au

Руководитель В.М. Самсонов

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

В данной работе были проведены молекулярно-динамические компьютерные эксперименты, в ходе которых нанокластеры Au, содержащие 1000 атомов, нагревались и охлаждались при различных скоростях нагрева и охлаждения. В ходе экспериментов определялись температуры плавления и кристаллизации, после чего была построена зависимость этих параметров от скорости нагрева и охлаждения (рис. 1).

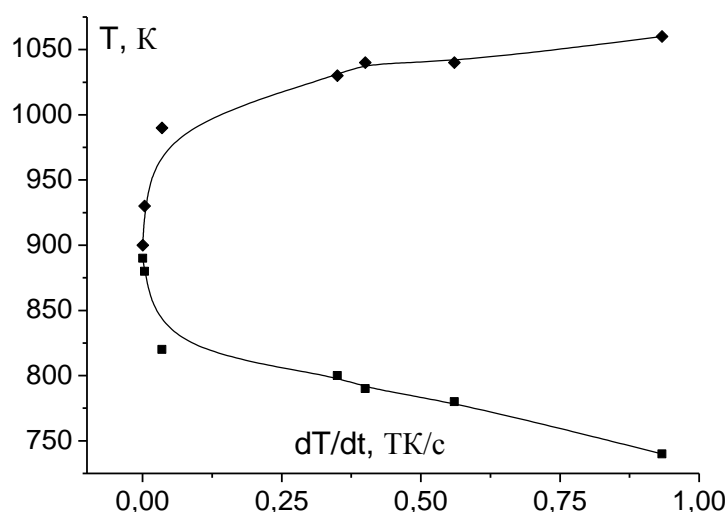


Рис. 1. Зависимость температуры плавления (♦) и температуры кристаллизации (■) от скорости нагрева и охлаждения.

Как видно из рис. 1 при скоростях порядка 3,5 ГК/с гистерезис практически полностью исчезает, что свидетельствует о том, что такая скорость нагрева и охлаждения является равновесной. Также стоит отметить тот факт, что для наночастиц скорости изменения температуры такого порядка являются обычными для компьютерных экспериментов. Для лабораторных экспериментов подобные оценки не производились.

К.А. Веселова

ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕТАЛЛОВ С
КОМПЛЕКСОНАМИ МОНОАМИННОГО ТИПАРуководитель В.М. Никольский
Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

В данной работе были исследованы ИК спектры комплексов Тl(III), In(III) с КМАК (X) и БКАК (Y) (см^{-1}). Характеристические частоты важнейших полос, полученные в результате расшифровки снятых спектров, представлены в таблице.

Таблица. Важнейшие характеристические частоты ИК спектров комплексов Тl(III), In(III) с КМАК (X) и БКАК (Y) (см^{-1})

Соединение	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$\nu_{\text{as}}(\text{C}-\text{O})$	$\nu_{\text{s}}(\text{C}-\text{O})$	$\Delta\nu(\text{C}-\text{O})$ ($\nu_{\text{as}}-\nu_{\text{s}}$)
HInY·H ₂ O	1720	1605	1390	215
HTlY·H ₂ O	1714	1613	1389	224
KInY·H ₂ O		1611	1392	219
KTlY·H ₂ O		1621	1384	237
InX·3H ₂ O		1609	1391	218
TlX·3H ₂ O		1619	1385	234

По разности $\Delta\nu = \nu_{\text{as}}^{(\text{C}-\text{O})} - \nu_{\text{s}}^{(\text{C}-\text{O})}$ определяется ковалентность связи С-О. Чем больше $\Delta\nu$, тем больше ковалентность. Как видно из табл. $\Delta\nu$ для комплексов Тl(III) больше, чем для In(III) и, следовательно, ковалентность связи М – O_{карб} в комплексах Тl(III) больше, чем в аналогичных комплексах In(III).

ИК спектры кристаллогидратов протонированных комплексонатов HTlX·H₂O, HInX·H₂O сходны между собой. Полосы 1714-1724 см^{-1} в этих комплексах, как и в свободной КМАК, принадлежат неионизированной карбоксильной группе –COOH. Следовательно, во всех этих комплексах отсутствует бетаиновая структура, а атом азота координирован ионом металла (образуется связь М – N).

ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ И ФАЗОВОГО СОСТАВА
 $R_2Fe_{10}Al_7$

Руководитель Е.М. Семенова

Тверской государственной университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Соединения R_2Fe_{17} представляют значительный практический и научный интерес как материалы для постоянных магнитов так как большинство из них характеризуются достаточно высокими температурами Кюри (T_C) и энергией магнитокристаллической анизотропии. Они обладают гексагональной кристаллической решеткой и высокими значениями магнитного момента благодаря большому содержанию железа. Однако ряд соединений этого типа при комнатной температуре имеют анизотропию типа «легкая плоскость» и недостаточно высокие температуры Кюри. Магнитные свойства могут быть существенно изменены введением различных примесей. В связи с этим, представляет интерес исследовать влияние легирования сплавов R_2Fe_{17} другими металлами, в частности алюминием. Сложность представляет получение таких материалов в однофазном или близком к однофазному состояниях. В связи с этим, в данной работе были проведены исследования микроструктуры серии образцов $R_2Fe_{10}Al_7$ (Gd, Tb, Dy, Ho, Y) методами оптической и электронной микроскопии, а также рентгенофазового анализа.

Исходные сплавы были получены методом индукционной плавки в атмосфере аргона. Изотермический отжиг образцов осуществлялся в трубчатой трехзонной печи TZF 15/610 при 900°C в течение 80 часов. Анализ микроструктуры выполнялся на оптическом микроскопе Axiovert200 MAT (Zeiss) методом оптической металлографии и на электронном микроскопе JEOL JSM-6610LV. Рентгенофазовый анализ порошкообразных образцов осуществляли на дифрактометре ДРОН-6.0 с использованием $FeK\alpha$ -излучения ($\lambda = 0,193735$ нм).

Установлено, что в рассматриваемых сплавах присутствуют две фазы, имеющие стехиометрию $R_2Fe_{10}Al_7$ ($R=Y, Tb, Dy, Gd, Ho$) и Fe_3Al . Включения вторичной фазы (Fe_3Al) после отжига не превышает 6%. Все соединения серии $R_2Fe_{10}Al_7$ имеют кристаллическую структуру типа Th_2Zn_{17} (ромбоэдрическая решетка, группа симметрии $R\bar{3}m$). Соединение Fe_3Al характеризуется кубической кристаллической решеткой (группа симметрии $Fm\bar{3}m$). Определены параметры кристаллической решетки соединений $R_2Fe_{10}Al_7$ ($R=Y, Tb, Dy, Gd, Ho$) и Fe_3Al .

Работа выполнена в рамках Государственного задания «Обеспечение проведения научных исследований».

В.С. Виноградов

АДДИТИВНЫЕ СХЕМЫ РАСЧЕТА СВОЙСТВ X-ЗАМЕЩЕННЫХ
ЭТАНА

Руководитель В. М. Смоляков

Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

Аддитивные схемы расчета свойств веществ составляются на основе небольшого количества опытных данных и позволяют расчетными методами определить свойства других соединений

При использовании данной аддитивные схемы рассчитаны различные параметры для X-замещенных этана. Для метил – замещенных этана: энтальпия образования (кДж/моль), для хлор - замещенных этана : энтропия, теплоемкость и стандартная энергия Гиббса (ΔG_{298}°). Расчеты произведены с помощью метода наименьших квадратов (МНК), полученные значения параметров сравнены с опытными данными.

Таблица 1. Расчёт теплоёмкости и энтропии (в Дж/моль·К), энергии Гиббса (в кДж/моль) хлорзамещённых этана

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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

Е.А. Волкова

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ В ИЗУЧЕНИИ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ НИТРОАЛКАНОВ

Руководитель М.Г. Виноградова

Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

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

В работе был проведен отбор топологических индексов (ТИ) с учётом их дискриминирующей способности, установлена аналитическая зависимость $\Delta_f H^0_{298(r)} = f(\text{ТИ})$ отвечающая наиболее тесной корреляционной связи между энтальпией образования и ТИ.

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

Так для нитроалканов имеем:

$$P_{C_n H_{2n+2-l}(NO_2)_l} = a + p_2 \Gamma_{CC} + p_2' \Gamma_{CN} + p_2'' \Gamma_{NN} + R \Delta_{CC} + \\ + R' \Delta_{CN} + R'' \Delta_{NN} + p_3 \tau_{CC} + p_3' \tau_{CN} + p_3'' \tau_{NN}$$

где $a = P_{CC} + P_{CN} + P_{NN}$.

Здесь p_2, p_3 , – соответственно число путей (рёбер) длины два и три; R – число троек смежных рёбер; Γ_{CC}, τ_{CC} , – эффективные взаимодействия пар атомов С соответственно через один и два атома и т.д.

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

В работе также построены графические зависимости вида “ $\Delta_f H^0_{298(r)}$ – ТИ”, “ $\Delta_f H^0_{298(r)}$ – номер изомера” и “ТИ – номер изомера”. Найдено, что в одних случаях наблюдается симбатное изменение энтальпии образования и топологического индекса, например, $\Delta_f H^0_{298(r)}$ и числа Винера W для изомеров $C_3H_7NO_2$ и $C_4H_9NO_2$, это свидетельствует о хорошей корреляции между $\Delta_f H^0_{298(r)}$ и ТИ. В других случаях 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”.

Е.С. Волчкова

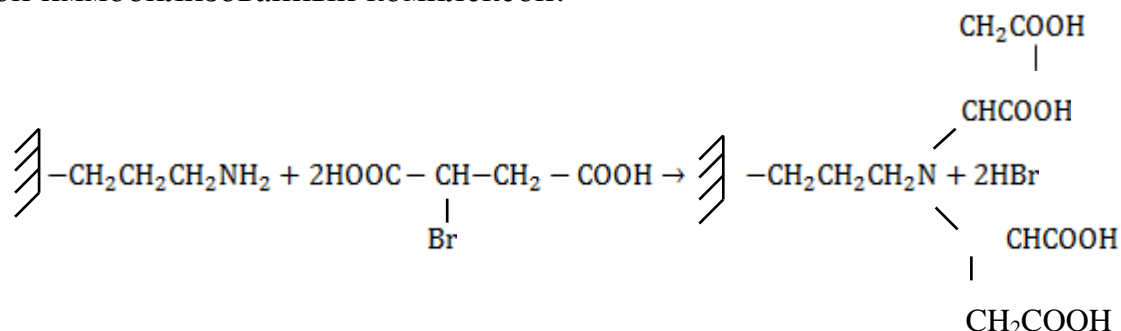
СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩЕГО СОРБЕНТА

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственный университет

Кафедра неорганической и аналитической химии

Существующие сорбенты имеют невысокие значения сорбционной емкости. Нами решена задача по увеличению сорбционной емкости по отношению к металлам за счет того, что к активированной поверхности матрицы по аминогруппам привиты по две молекулы бромантарной кислоты с образованием пятидентатного лиганда – иминодиянтарной кислоты (ИДЯК). Этот процесс легко осуществим в связи с тем, что в галоидокислотах атом галогена чрезвычайно склонен к реакциям обмена. Сорбционная емкость получаемого комплексобразующего сорбента в 2 раза выше сорбционной емкости известных комплексобразующих сорбентов[1]. Созданный сорбент[2] состоит из сополимеров стирола с дивинилбензолом и активного сорбирующего слоя, представляющего собой иммобилизованный комплексон:



Эффективность предлагаемого сорбента обеспечивается тем, что у закрепленного лиганда ИДЯК, благодаря высокой гидролитической и окислительно-восстановительной устойчивости образуются комплексы с металлами в нейтральной и кислой средах, причем строение ИДЯК и её высокая дентатность (четыре карбоксильных и одна аминная группировки) обеспечивают в кислой и нейтральной средах образование прочных комплексов металлов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рогожин С.В., Ямсков И.А., Пушкин А.С. и др.// Известия АН СССР. Серия химическая, 1976, №10, С.2378.
2. Заявка на изобретение №2015122875 от 16.06.2015 / Волчкова Е.С., Никольский В.М., Логинова Е.С., Толкачева Л.Н.

И.И. Воробьев

ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ В АНАЛИЗЕ ПРЕПАРАТОВ ДРОТАВЕРИНА

Руководители: Н.П. Лопина, Г. Е. Бордина
Тверской государственной медицинской университет
Кафедра химии

По оценкам экспертов, в прошлом году 80 процентов медикаментов, используемых в России, было произведено за границей. Экономический кризис и структурные проблемы в области здравоохранения, приведшие к росту цен на импортные лекарства, активизируют курс России на импортозамещение. Дискуссии об импортозамещении лекарственных препаратов сделали актуальным вопрос качества отечественных препаратов.

Объектом для исследования были выбраны препараты дротаверина различных производителей, так как согласно статистике, препараты дротаверина (Но-шпа, Дротаверин) являются одними из самых востребованных на фармацевтическом рынке.

В данной работе использовали метод ИК-спектроскопии с преобразованием Фурье. Запись ИК-спектров осуществляли на Фурье-ИК спектрометре «Equinox-55» фирмы Брукер.

На ИК-спектре дротаверина наблюдались 2 интенсивные полосы поглощения с максимумами при 1037 см^{-1} (что свидетельствует о наличии этокси групп) и 3380 см^{-1} (валентные колебания ароматических С-Н изохинолинового ядра). Полосы поглощения в области $1517\text{-}1603\text{ см}^{-1}$ связаны с наличием ароматического кольца углеродных атомов. Слабые пики при 2900 см^{-1} показывают валентные колебания С-Н связей ароматического кольца.

На ИК-спектре регистрировались все частоты основных связей в молекуле дротаверина. Анализ ИК-спектров показал, что состав исследуемых препаратов соответствует заявленной формуле, что оба спектра практически совпадают как по форме, так и по положению пиков поглощения.

Н.В. Востров

ИССЛЕДОВАНИЯ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА
СОЕДИНЕНИЙ $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$ ($x=1.2, 1.4$) ВБЛИЗИ МЕТАМАГНИТНОГО
ЗОННОГО ПЕРЕХОДА

Руководитель А.Ю. Карпенков

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Соединения $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$, с кубической структурой типа NaZn_{13} , обладают магнитным упорядочением при температуре от 200 и 262 К и имеют типичное поведение присущее инварным сплавам. С понижением содержания Si в соединениях $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$ наблюдается изменение рода фазового перехода от второго к первому [1]. Для образцов с $x \leq 1.5$ выше температуры Кюри наблюдается индуцированный магнитным полем зонный метамагнитный переход, который неизбежно влечет температурные и магнитные гистерезисы. Вследствие вышесказанного, а также для того, чтобы приблизить условия измерений к работе магнитного теплового насоса, в работе исследования адиабатического изменения температуры ΔT_{ad} проводились при разных режимах приложения магнитного поля: при однократном и шестикратном циклировании.

В работе исследованы температурные зависимости $\Delta T_{ad}(T)_{0 \rightarrow H}$ в случае однократного приложения поля ($\mu_0 H = 0 \rightarrow 1,93$ Тл) и в процессе циклических измерений для соединений $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$ ($x=1,4$ и $1,2$, соответственно). При однократном приложении поля в процессе охлаждения образца $\Delta T_{ad}(T)_{0 \rightarrow H}$ имеет максимальные значения 7,1 К при температуре 198,5 К для $x=1,4$ и 7,2 К при температуре 186 К для $x=1,2$. В случае нагревания образца максимальные значения $\Delta T_{ad}(T)$ наблюдаются при температурах 200,2 К для $x=1,4$ и 188 К для $x=1,2$ и равны 5,8 К и 6,1 К, соответственно, при этом ширина наблюдаемого температурного гистерезиса составляет порядка 2 К. После циклического приложения магнитного поля температурный гистерезис уменьшается практически до нуля, и $\Delta T_{ad}(T)_{0 \rightarrow H}$ при циклировании не зависит от выбора протокола измерения (нагрев или охлаждение). Эти значения составляют 5,63 К при температуре 200 К для $x=1,4$ и 5,92 К при температуре 188 К для $x=1,2$, что на 15–20% ниже максимального МКЭ, измеренного при первом намагничивании образца.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shen B.G., Sun J.R., Hu F.X., Zhang H.W., Cheng Z.H. // Adv. Mater. 2009. V.21. Issue 45. P.4545–564.

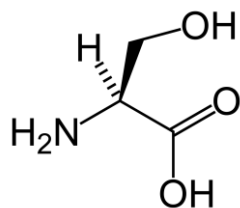
В.О. Выродова

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ИОНОВ Ag^+ С L-СЕРИНОМ

Руководитель М.В. Минина

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

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



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

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

Комплексообразование исследовали рН-метрическим методом. Раствор для титрования готовили непосредственно перед титрованием, смешивая растворы L-серина и AgNO_3 в мольном соотношении $\text{Ag}^+ : \text{Ser} = 3 : 1$. В качестве титранта использовали стандартный раствор NaOH $C = 0,049$ моль/л. В качестве электрода использовали комбинированный рН – электрод.

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

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

Д.К. Гайков, А.Н. Стужук, О.И. Ямщикова

ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА ИСКУССТВЕННЫХ ЛАТЕКСОВ ИЗ ТЕРМОЭЛАСТОПЛАСТОВ С ПОЛОЖИТЕЛЬНЫМ ЗАРЯДОМ ЧАСТИЦ

Руководитель И.А. Грицкова

Московский технологический университет

Кафедра высокомолекулярных соединений им. С.С. Медведева

Разработана концепция создания искусственных латексов из полимеров диен-стирольных термоэластопластов, прямой синтез которых не позволяет получить высокодисперсные суспензии с положительным и отрицательным зарядами частиц [1, 2]. Систематический анализ изменения динамической вязкости растворов полимеров в растворителях различной природы позволил рекомендовать в качестве растворителя диен-стирольных термоэластопластов циклогексан, в котором вязкость при концентрации 10% масс. составила 66.32 мПа*с. Показано, что дальнейшее увеличение количества полимера приводит к значительному росту вязкости раствора и является нецелесообразным [3]. Подобраны условия получения агрегативно и седиментационно устойчивых искусственных латексов с положительным зарядом частиц в интервале 30 - 45 мВ в присутствии четвертичных аммониевых соединений различного строения (Катамин АБ, Азол 129, Азол 138) и их смесей с неионным ПАВ (цетиловый спирт). Определены оптимальные массовые соотношения между ПАВ Азол 129/цетиловый спирт и Азол 129/Азол 138 и массовая концентрация ПАВ в расчете на полимер, обеспечивающие необходимую устойчивость [4]. Сравнение свойств пленок, полученных из растворов полимера и из искусственных латексов, показало, что их физико-механические свойства близки. Это открывает возможности использования искусственных латексов для получения маковых изделий [5].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лазурин Е.А., Самородов В.Т., Космодемьянский Л.В. Получение, свойства и применение латексов неэмульсионных полимеров. М.: ЦНИИТЭнефтехим. 1981.
2. Хазанович И.Г., Чечик О.С. Опыт производства и применения искусственного латекса полиизопрена. Л.: ЛДНТП. 1986.
3. А. Грицкова, О.И. Ботова, Р.О. Шитов, Е.А. Гринфельд. Получение искусственных латексов на основе изопрен-стирольного термоэластопласта // Вестник МИТХТ. 2014, Т.9, № 5, С.61-63.
4. Ботова О.И., Грицкова И.А., Гринфельд Е.А., Лобанова Н.А., Шитов Р.О. Влияние природы и концентрации эмульгатора на дисперсность и устойчивость искусственных латексов с положительным зарядом частиц // Каучук и Резина. 2015, №5, С.8-11
5. Чечик О.С., Еркова Л.Н. Латексы. Л.: Химия. 1983.

СОЗДАНИЕ ИОНОСЕЛЕКТИВНОГО ЭЛЕКТРОДА ДЛЯ ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ АСКОРБИНОВОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель Г.И. Мантров

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Потенциометрические методы анализа, особенно, с использованием ионоселективных электродов (ИСЭ) обладают такими выгодными отличительными характеристиками, как экспрессность и простота анализа. Применение такого метода для определения аскорбиновой кислоты в растворе не описано в литературе, поэтому целью данной работы стало создание ИСЭ для определения выбранной кислоты, изучение его характеристик и разработка методики определения аскорбиновой кислоты в лекарственных формах.

В работе использовали аскорбиновую кислоту ч.д.а., натриевую соль оксациллина, дибутилфталат (ДБФ) ч.д.а., поливинилхлорид (ПВХ) марки С-70 х.ч. Электродноактивное вещество (ЭАВ) получали путем смешивания раствора аскорбиновой кислоты с раствором натриевой соли оксациллина.

Пластифицированные мембраны имели следующий состав (в масс. %): ДБФ – 50, ПВХ – 45, ЭАВ – 5. ИСЭ перед использованием вымачивали в 0,05 М растворе аскорбиновой кислоты. Для определения электродных характеристик использовали электрохимическую ячейку:

Ag/AgCl	$2.08 \cdot 10^{-3}$ М р-р $C_6H_8O_6$ + 0.1 М р-р р КСl	Ионоселек тивная мембрана	Исследуемый раствор	Насыщенный раствор КСl	AgCl	Ag
---------	--	---------------------------------	------------------------	---------------------------	------	----

Полученные ИСЭ электроды обладают хорошими метрологическими характеристиками. Интервал линейности электродной функции находится в промежутке 10^{-1} – 10^{-4} моль/л, крутизна электродной функции близка к теоретическому значению, время отклика составляло 15-20 с. Показано, что потенциал ИСЭ не изменяется в интервале рН 2 - 6, поэтому такой интервал подходит для определения аскорбиновой кислоты.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. United States Pharmacopeia National Formulary, USP 26, NF 21. Rockville, 2003
2. E. M. Rakhmanko, V. V. Yegorov, A. L. Gilevich, Ion-Sel. Electrode Rev. 1992. P. 5-11

Д.А. Гусева, Е.С. Логинова

ИНДИКАТОРНАЯ БУМАГА ДЛЯ ЭКСПРЕСС-АНАЛИЗА СОДЕРЖАНИЯ НИТРАТОВ И НИТРИТОВ

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Индикаторная бумага для определения нитратов и нитритов рекомендуется для экспрессного определения содержания нитратов и нитритов в продуктах растениеводства, воде, пищевых продуктах, сточных водах различных предприятий [1]. Известные в литературе и применяемые в настоящее время составы для пропитки индикаторной бумаги обычно содержат канцерогенный реагент α -нафтиламин, индикаторная бумага не подлежит длительному хранению и сложна в изготовлении [2]. Новый состав для индикаторной бумаги прост в изготовлении [3]. Индикаторная бумага изготавливается двух видов: для определения суммарного содержания нитратов и нитритов; для определения содержания нитритов. Диапазон определяемых концентраций по нитратам составляет 20-1000 мг/дм³ (мг/кг), по нитритам - 2,5-800 мг/дм³ (мг/кг). Срок хранения бумаги в плотно закрытой таре и тёмном месте более двух лет.

Экстрагирование окрашенного азосоединения с хроматографической бумаги позволяет оценивать присутствие нитрит-ионов не только качественно, но и количественно фотометрическим методом по уравнению определения содержания нитрит-ионов:

$$C = 0,55 \cdot (A - 0,15), \text{ моль/дм}^3,$$

где А – оптическая плотность раствора.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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

Г.А. Демичев

АБСОРБЦИЯ ИОНОВ НЕКОТОРЫХ МЕТАЛЛОВ НА ПОЛИАНИЛИНЕ

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Электропроводный полимер-полианилин имеет в своей структуре донорные группы иминохиноидного типа и фенилдиаминного. Обе эти группы потенциально способны координироваться с ионами многих металлов. Это может привести к хемосорбции соответствующих ионов.

Целью настоящей работы было изучение абсорбционной способности полианилина по отношению к ионам меди, никеля и серебра.

Полианилин был синтезирован нами по традиционной методике, методом окислительной полимеризации анилина в кислой среде под действием персульфата аммония. В реакционную смесь был добавлен силикагель “СНЕМАРОЛ” с целью осаждения полианилина на последний. Полианилин был получен в виде соли эмиральдина. Полученный таким образом полианилин на силикагеле и был использован для экспериментов.

Абсорбцию измеряли статическим методом при 20⁰С и различном рН. Контроль за равновесной концентрацией ионов в растворе осуществляли комплексометрическим титрованием в случае определения никеля и меди, а в случае серебра использовалась косвенное титрование.

Эксперименты показали, что максимальная абсорбция наблюдается почти мгновенно, при этом было выявлено, что ионы никеля, меди и серебра абсорбируются полианилином в различной степени.

Были выявлены зависимости степени абсорбции от величины рН раствора, позволяющие сделать вывод о связи кислотно-основного состояния полианилина с сорбционными свойствами последнего.

Найденные закономерности можно считать продолжением комплексного исследования абсорбционных свойств полианилина, что имеет большое теоретическое и практическое значение и обладает высоким потенциалом как для дальнейшего изучения, так и использования в промышленности.

О.Ю. Дремлева

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОДЛИННОСТИ ПРЕПАРАТА «АЛФАВИТ. НАШ
МАЛЫШ» ПО РЕЗУЛЬТАТАМ АНАЛИЗА НА СОДЕРЖАНИЕ
КАЛЬЦИЯ И МАГНИЯ

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

О значении витаминов и минеральных веществ для детей и взрослых написано немало работ, тем не менее, на практике, обеспеченность людей этими пищевыми веществами продолжает оставаться далекой от потребности практически во всех возрастных категориях. Растущий организм ребенка особенно нуждается в дополнительном поступлении питательных веществ и нутриентов.

Нами осуществлена количественная оценка состава витаминно-минерального комплекса «Алфавит. Наш малыш». Основу этого препарата составляют такие элементы ПА-подгруппы, как кальций и магний. По результатам определения содержания этих металлов мы можем судить и о качестве препарата в целом.

Общее содержание кальция в организме человека составляет примерно 1,9% общего веса человека, при этом 99% всего кальция приходится на долю скелета, а 1% содержится в остальных тканях и жидкостях организма.

Установлено, что магний — самый важный минерал для сердца. Более трехсот различных ферментов в организме зависят от магния, и все же большинство людей не потребляют его в таких количествах, которые им необходимы.

В работе использовался титриметрический метод определения ионов кальция и магния. Было обнаружено, что в саше-пакетике №1 витаминно-минерального комплекса «Алфавит. Наш малыш» содержится 82,5% кальция от количества, заявленного изготовителем, а в саше-пакетике №2 магния – 86,25%. На следующем этапе выполнения магистерской диссертации планируется проверка витаминно-минерального комплекса на содержание цинка и железа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Скальный А.В. // Химические элементы в физиологии и экологии человека – М.: Издательский дом «ОНИКС 21 век»: Мир, 2004.
2. Забелина В.Д. Магний и магниесодержащие препараты – М.: Медицина, 2011.

С.Н. Ершов

СОВРЕМЕННЫЕ ОТЕЧЕСТВЕННЫЕ БИОКЕРАМИЧЕСКИЕ ИМПЛАНТАТЫ

Руководители: Н.П. Лопина, Г. Е. Бордина
Тверской государственной медицинской университет
Кафедра химии

Современный человек часто сталкивается с серьезными травмами. Хорошей заменой поврежденных суставов могут служить искусственные имплантаты, которых на сегодняшний день существует достаточно много видов. Имплантаты могут быть: цельнометаллические, пластиковые или смешанные. Однако, все эти материалы, хотя и нетоксичны, но всегда биоинертны и не могут образовывать связи с костью напрямую. Для улучшения биологических свойств имплантатов, используют апатитные покрытия природные и искусственные, чаще всего — гидраксиапатит, поскольку он схож по строению с минералами, из которых состоят кости. Кроме того, гидроксиапатит ($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$) в медицинских целях применяется как наполнитель, замещающий части утерянной кости. Известно, что для гидроксиапатита разработано множество методов синтеза, из которых наиболее распространенными является осаждение из водных и неводных растворов. В частности существует такой вариант:

$$10\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O} + 6\text{Na}_3\text{PO}_4 + 2\text{NaOH} \rightarrow \text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2 + 20\text{NaNO}_3 + 40\text{H}_2\text{O}$$

В указанной методике неводные среды использовались с целью предотвращения возможного гидролиза целевого продукта и внедрения в него растворенного в воде углекислого газа в форме карбонат-ионов CO_3^- . В Российской Федерации, в городе Новосибирск, компания НЭВЗ Керамикс разрабатывает и выпускает керамические изделия медицинского назначения (эндопротезы, имплантаты, имплантируемые системы, их элементы) на основе Al_2O_3 , в частности, имплантаты позвоночника. Следует отметить, что керамических аналогов в мире нет (запатентованная технология). Таким образом, можно утверждать, что в России возможно не только создание качественных биокерамических имплантатов, но и разработка принципиально новых технологий в этой области.

М.Д. Ефременко

ИСТОРИЯ РАЗВИТИЯ ХИМИЧЕСКОГО ОРУЖИЯ

Руководители: Н.П. Лопина, Г.Е. Бордина
Тверской государственной медицинский университет
Кафедра химии

Одним из видов оружия массового поражения является химическое оружие. Его поражающее действие основано на использовании боевых токсических химических веществ, к которым относят отравляющие вещества (ОВ) и токсины, оказывающие поражающее действие на организм человека и животных.

Ядовитые вещества стали применяться в ходе боевых действий большого масштаба в XIX веке. Однако рождение химического оружия, как средства ведения вооруженной борьбы в современном понимании следует относить ко времени 1-ой мировой войны.

Начавшаяся в 1914 году война вскоре после начала приобрела позиционный характер, что заставило искать новые наступательные вооружения. Немецкая армия стала применять массированные атаки позиций противника с помощью ядовитых и удушающих газов. 22 апреля 1915 г. на Западном фронте у городка Ипр (Бельгия) была проведена газовая атака хлором, впервые показавшая эффект массированного применения токсичного газа как средства ведения войны.

Во время Первой мировой войны применялись следующие отравляющие вещества: бром, бромистый бензил, фосген, иприт.

Между первой и второй мировыми войнами велась активная разработка нервно-паралитических ОВ, а именно: табун, зарин, зоман.

Международное обсуждение вопроса о запрещении химического и биологического оружия началось в 1968 году. А в 1992 была принята Конвенция о запрещении химического оружия (КХО). Это соглашение по контролю за вооружениями, которое запрещает производство, накопление и применение химического оружия. Однако в современном беспокойном мире все чаще приходят новости о его применении. В настоящее время в Сирии обнаружены запасы химического оружия. Имеется угроза его применения в затянувшемся вооруженном конфликте.

А.М. Жерихова

ЭНЕРГИЯ ГИББСА АЛКИНОВ

Руководитель М.Г. Виноградова
Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций “структура – энергия Гиббса” в алкинах.

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи:

1. Оценка составления и анализ экспериментальных данных по энергии Гиббса в исследуемых соединениях.
2. Построение расчётных схем и проведение численных расчетов,
3. Построение и анализ графических зависимостей “энергия Гиббса – число углеродных атомов” “энергия Гиббса – степень замещения”.

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

Анализ экспериментальных данных по энергии Гиббса алкинов позволил выявить следующие закономерности:

1. Энергия Гиббса зависит от длины цепи молекулы, причем для гомологов аналогичного строения эта зависимость носит линейный характер, что свидетельствует о постоянном энергетическом вкладе CH_2 -группы.

2) При увеличении длины цепи молекулы $\Delta_f G^0$ (г, 298) увеличивается

3) Разности энергии Гиббса между структурными изомерами алкинов достигают 17 кДж/моль, причем наибольшие значения $\Delta_f G^0$ (г, 298) имеют неразветвлённые алкины с тройной связью у первого атома углерода.

В работе также получены расчётные схемы. Так в третьем приближении имеем :

$$P_{C_n H_{2n-2}} = p_{c\equiv c} + (n-2)p_{c-c} + (2n-2)p_{c\equiv n} + x_{cc1} \Gamma_{cc} + x_{cc1}^* \Gamma_{cc}^* + x_{ccc1} \Delta_{ccc} + x_{cc2} \tau_{cc} + x_{cc2}^* \tau_{cc}^* + x_{cc3} \omega_{cc} + x_{cc3}^* \omega_{cc}^*$$

По приведенной формуле проведён численный расчёт энергии Гиббса ряда алкинов с C_2 – C_8 . Рассчитанные величины вполне согласуются с экспериментальными и позволяют предсказать в пределах ошибок опыта недостающие значения свойств членов исследуемого ряда.

О.И. Жестокова

ВЛИЯНИЕ КОМПОСТОВ С УЧАСТИЕМ ОСАДКОВ СТОЧНЫХ ВОД НА УРОЖАЙНОСТЬ ПОЛЕВЫХ КУЛЬТУР И КАЧЕСТВО ПРОДУКЦИИ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

На опытном поле Тверской сельскохозяйственной академии изучали удобрительное действие компостов с участием осадка сточных вод (ОСВ) г. Твери на урожайность полевых культур и качество зерна озимой ржи. Полученные на опыте данные за два года проведения исследований показали, что как на первой культуре – однолетних травах, так и на второй - озимой ржи, внесенные компосты из расчета 60 т/га позволили повысить урожайность на 55-96%, по сравнению с контролем. С учетом неоднозначного отношения ряда производителей к удобрениям, содержащим ОСВ, мы исследовали количество тяжелых металлов (ТМ) как в почве, так и в урожае. Применительно к их накоплению в почве, в наших исследованиях это не подтверждается. Не выявлено, сколько-нибудь, заметного накопления поллютантов и в продукции с удобренных вариантов (табл.). Действительно, некоторое весьма незначительное увеличение свинца, меди и цинка нами установлено, однако если это соотносить с ПДК, то никакого опасения для качества полученной продукции не представляет.

Таблица. Влияние компостов на содержание тяжелых металлов в зерне озимой ржи, 2014 г.. мг/кг

Вариант опыта	Pb	Cd	Cu	Zn	Ni
1. Контроль	0,040	0,005	1,5	4,0	0,05
2. ОСВ в чистом виде	0,049	0,005	1,9	5,1	0,06
3. ОСВ: опилки 1:2	0,047	0,005	1,8	4,8	0,06
4. ОСВ: опилки 1:3	0,045	0,005	1,7	4,6	0,06
5. ОСВ: опилки 1:5	0,044	0,005	1,7	4,6	0,05
6. ОСВ: торф 1:2	0,048	0,006	1,9	4,9	0,06
7. ОСВ: торф 1:3	0,046	0,006	1,8	4,7	0,05
8. ОСВ: торф 1:5	0,043	0,005	1,7	4,8	0,05
9. ОСВ: опилки 1:3+ биодоб.	0,044	0,005	1,8	4,4	0,05
10. ОСВ: торф 1:3+биодоб.	0,045	0,005	1,7	4,5	0,05
ПДК	0,5	0,1	5,0	50	0,5

ВЛИЯНИЕ КОМПЛЕКСОНАТА И МИНЕРАЛЬНЫХ УДОБРЕНИЙ НА ПРОДУКТИВНОСТЬ СТОЛОВОЙ МОРКОВИ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

На значительных площадях Нечерноземной зоны России дефицит микроэлементов в почве может служить препятствием к получению наибольшего эффекта от применения основных минеральных удобрений. Это связано тем, что недостаток микроэлементов приводит к нарушению важнейших биохимических процессов в растении. Для устранения дефицита отдельных микроэлементов в растениях, можно использовать комплексные минеральные удобрения для внекорневой подкормки. Однако, такой подход не всегда уместен, поскольку почвы не выровнены по почвенному плодородию, и некоторые элементы питания могут содержаться в избыточном количестве, а других будет не хватать.

Целью наших исследований являлось изучение действия комплексоната Zn,Cu,Co,B-ЭДДЯК, составленного на основе агрохимических исследований дерново-подзолистой почвы опытного участка

Схема полевого мелкоделяночного опыта за 2014-2015 гг. включала варианты: 1- контроль (без удобрений), 2,3,4-й - с NPK в расчетных дозах на получение соответственно 250, 300 и 350 ц/га, варианты 5, 6, 7 с обработкой семян комплексонатом, 8, 9, 10- аналогично 2,3 и 4, но с внекорневым использованием препарата. Некорневая подкормка проводилась дважды: в фазе пучковой зрелости и, спустя 2 недели, в период активного формирования корнеплодов. Полученная на опыте урожайность за два года проведения исследований представлена в таблице. Как обработка семян, так и некорневая подкормка по вегетирующим растениям обеспечили повышение урожайности на 9-60%, при этом внекорневая обработка оказалась эффективнее опудривания семян.

Таблица. Урожайность столовой свеклы на дерново-подзолистой почве за два года исследований

№ варианта	Урожайность, ц/га			Прибавка к контролю	
	2014 г.	2015 г.	средняя за два года	ц/га	%
1) без удобрений	250	360	305	-	-
2) 250 ц/га	386	420	403	98	32
3) 300 ц/га	419	480	450	145	47
4) 350 ц/га	434	536	485	180	59
5) 250 ц/га+опудривание семян	391	445	418	113	37
6) 300 ц/га+ опудривание семян	425	560	492	187	64
7) 350 ц/га+ опудривание семян	464	615	540	235	77
8) 250 ц/га+опрыскивание	430	580	505	154	50
9) 300 ц/га +опрыскивание	413	660	536	231	75
10) 350 ц/га +опрыскивание	423	725	574	269	88
НСР 0,05 ц/га	24,4	26,6	-	-	-

УДК 54(092.4)

Л.Е. Захарова

НОБЕЛЕВСКАЯ ПРЕМИЯ ПО ХИМИИ 2015 ГОДА

Руководители: Н.П. Лопина, Г. Е. Бордина
Тверской государственной медицинский университет
Кафедра химии

Современная медицина не стоит на месте и постоянно ищет новые способы лечения всевозможных заболеваний. Исследования лауреатов Нобелевской премии по химии 2015 года - Томас Линдаль, Пол Модрич и Азиз Санджар чрезвычайно продвинули медицину как науку, помогли понять более полно механизмы старения, возникновения и развития онкозаболеваний и целого ряда заболеваний наследственных.

Общие положения открытых учеными-химиками закономерностей таковы: дезоксирибонуклеиновая кислота не стабильна и подвержена изменениям, деформациям. На нее влияет множество факторов, с которыми течение жизни сталкивается каждый человек: это и ультрафиолет, и магнитные поля, и радиация, и много-много другого. Разрушения малы, но постоянны, они накапливаются, - работа организма в целом разлагается. Каждый из ученых предложил свой метод репарации. Метод Томаса Линдала – изъятие деформированных участков ДНК и замена их новыми, здоровыми. Таким образом, постепенно заменяется вся молекула ДНК. Метод Пола Модрича – исправление ошибок в ДНК клетками самостоятельно – в ходе процесса деления, обновления – по сути. Число ошибок уменьшается естественным путем. Метод Азиза Санджара наиболее, пожалуй, ювелирный, он предполагает вырезание отработанного нуклеотида, т.е. не работающий компонент просто удаляется.



Н.Н. Иванов

ХИМИЯ ПЕЧЕНИ

Руководители: Н.П. Лопина, Г. Е. Бордина
Тверской государственной медицинской университет
Кафедра химии

В организме человека происходят множество реакций, направленных на поддержание жизни организма. Главным органом, обеспечивающим обезвреживающую функцию веществ, является печень.

1. Обезвреживание ксенобиотиков (чужеродных веществ), поступающих в печень из пищеварительной системы проходит в два этапа. Первым этапом обезвреживания веществ является повышение гидрофильности гидрофобных веществ. Этот этап обязателен для гидрофобных веществ. В результате реакции гидроксилирования (одна из важнейших реакций первого этапа) повышается растворимость гидрофобного соединения, что снижает его токсичность. Вторым этапом является конъюгация неизмененных или химически модифицированных на первом этапе веществ с рядом метаболитов. В результате у ксенобиотиков повышается гидрофильность, благодаря чему они менее опасны для организма и могут быть выведены из него.

2. Лекарства могут выводиться из организма в неизменённом виде или же подвергаться химической модификации, которая может иметь три случая развития событий: 1) инактивация лекарственных веществ 2) повышение активности 3) образование токсических метаболитов.

3. Обезвреживание тяжелых металлов

В связывании и обезвреживании металлов принимает участие белок печени металлотионеин. Так, при попадании в организм ионов тяжелых Cd^{2+} , Hg^{2+} , Pb^{2+} металлов в печени происходит увеличение синтеза металлотионеинов – белков, которые прочно связывают эти ионы, тем самым не давая им конкурировать с необходимыми для жизнедеятельности ионами Fe^{2+} , Co^{2+} , Mg^{2+} за места связывания в ферментах.

4. В печени происходит катаболизм этанола.

Окисление алкоголя - сложный биохимический процесс, в который вовлекаются основные метаболические процессы клетки, в процессе которых могут образовываться токсические метаболиты. Например, повышение концентрации ацетальдегида вызывает нарушения в структуре белков, модификацию глутатиона. Таким образом, представленные данные свидетельствуют, что алкогольное поражение печени сопровождается нарушением важнейшей функции этого органа - детоксикационной.

С.А. Иванов, С.А. Соловьёв

АНАЛИЗ ПОЛИАМИДОВ МЕТОДОМ
ТЕРМОГРАВИМЕТРИИ

Руководитель Е.И. Лагусева

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии полимерных материалов

Термические методы анализа основаны на изучении изменений системы в условиях меняющегося температурного поля. Методы термического анализа при изучении высокомолекулярных соединений используются для определения фазовых переходов, радиационных повреждений полимерных материалов, теплот адсорбции и полимеризации, процессов сшивки, окисления, деструкции, и концентрации регистрируемого компонента примеси. Наибольшее распространение термические методы применительно к полимерам получили для исследования фазовых переходов, то есть процессов, в которых происходят изменения термодинамических функций (энтальпии, энтропии, внутренней энергии и объема) и порядка в системе. При термографическом анализе регистрируемой характеристикой вещества является температура (T) как функция времени (τ). При этом записывается термограмма в координатах T - τ . Наиболее ценную информацию получают методом дифференциально-термического анализа (ДТА), при котором измеряется разность температур ΔT исследуемого образца и инертного эталона. В качестве эталона используется вещество, не претерпевающее термических превращений в используемом температурном интервале. При этом термограмма записывается в координатах $\Delta T - T$.

Термогравиметрия или термогравиметрический анализ (ТГА) – метод термического анализа, при котором регистрируется изменение массы образца в зависимости от температуры. Этот метод анализа заключается в наблюдении массы исследуемой навески вещества при изменении её температуры. Результатом анализа являются ТГА-кривые – зависимости массы навески (или изменения массы навески) от температуры или времени. Для интерпретации результатов ТГ-анализа необходима обработка ТГ-кривых. В частности, производная от ТГ-сигнала (скорость изменения массы), представляемая кривой ДТГ, позволяет установить момент времени или температуру, при которой изменение веса происходит наиболее быстро.

На установке для дифференциально-термического и термогравиметрического анализа «Termoscan-2» были исследованы полиамиды марки 6Т и 6И.

В.В. Илларионова, В.А. Соломин

ВЛИЯНИЕ УДОБРЕНИЙ И БИОПРЕПАРАТОВ НА УРОЖАЙНОСТЬ ЗЛАКОВОЙ ТРАВΟΣМЕСИ

Руководитель: Ю.С. Королева

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра ботаники и луговых экосистем

Для обеспечения животноводства полноценными кормами с низкой себестоимостью большое значение имеют многолетние растения. Злаковые многолетние травы и их смеси занимают значительную часть в обеспечении кормовой базы. Важным условием достижения высокого уровня урожайности является удовлетворение потребности растений в элементах питания на каждом этапе органогенеза. Это достигается за счет применения минеральных удобрений и биологически активных препаратов [1, 2]. Поэтому в 2015 году были проведены исследования в полевом двухфакторном опыте на опытном поле Тверской ГСХА. В опыте изучали два фактора: Фактор А – фон: 1 – без удобрений; 2 - NPK на урожайность 2,5 т корм.ед.; 3 - NPK на урожайность 5,0 т корм.ед.; фактор В – препараты: 1 – без обработки; 2 - Байкал ЭМ-1; 3 - GREEN BOOM. Обработка луговых растений биопрепаратами проводилась в фазу полных всходов и после первого укоса.

В результате выявлено, что в условиях 2015 г. не получены запланированные уровни урожайности злаковой травосмеси. В среднем на первом фоне без применения удобрений и биопрепаратов получено 113ц/га, при однократной обработке растений биопрепаратами 126 ц/га, при двухкратной обработке 126,4 ц/га. На втором фоне в лучшем варианте суммарная урожайность составила 135, 138 и 142,5 ц/га соответственно при использовании биопрепарата GREEN BOOM. Недобор в среднем по фону составил 11,3 ц/га, 7,0 ц/га и 3,7 ц/га. На третьем фоне максимальная продуктивность травосмеси получена при двухкратном опрыскивании растений GREEN BOOM – 155,7 ц/га. В среднем по фону недобор составил 160, 136,3 и 128,9 ц/га соответственно. Применение биопрепарата Байкал ЭМ-1 оказалось менее эффективным.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Иванов Д.А. Адаптация технологии выращивания многолетних трав к ландшафтным условиям/ Д.А. Иванов, Н.Г. Ковалев, В.А. Тюлин, О.В. Карасева и др// Вестник Алтайского государственного аграрного университета, 2013.-№ 2(100).-С.17-21
2. Кузнецова С.Н. Влияние минерального удобрения на продуктивность тимофеевки луговой сорта «ВИК-9»/ С.Н. Кузнецова// Проблемы животноводства и кормопроизводства в России/ Сборник научных трудов по мат. 6 Всерос.науч-практич. конф.,2015.-Тверь: Тверская ГСХА, 2015.- С.240-242.

А.Е. Казьмин

ВЛИЯНИЕ СМЕСЕЙ КЛЕВЕРА СО ЗЛАКОВЫМ КОМПОНЕНТОМ НА КАЧЕСТВО ПОЛУЧАЕМОГО КОРМА

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

Одной из наиболее важных задач, стоящих перед агропромышленным комплексом Тверской обл. является развитие молочного животноводства и полная переработка получаемого молока в различные молочные продукты. Основными из них являются пакетированное молоко, сметана, ряженка, масло, сыры и др. изделия, которые должны быть представлены в удобной для покупателя упаковке и имели достаточный срок хранения и использования. Одной из составляющих успешного развития в регионе крупного рогатого скота, это обеспечение его качественными кормами и прежде всего растительного характера, поскольку такие корма по сравнению с концентрированными, значительно дешевле. Особое значение для региона в качестве грубых и сочных кормов имеет клевер. В то же время в чистом виде по ряду причин он практически не возделывается. Мы исследовали влияние ряда сортов клевера совместно с мятликовыми культурами на урожайность и качество полученного корма. Наиболее высокую урожайность позволила сформировать смесь клевера лугового сорта Топаз совместно с тимофеевкой сорта Ленинградская (5,1 т/га сена). Смеси других сортов клевера- Ранний 2 и ВИК 7 с мятликовыми травами уступили по урожайности на 10-37%. Особое значение для растительных кормов имеет их качественный состав. Нами определено содержание сухого вещества, сырого протеина и сырого жира (табл.). Установлено, что содержание сухого вещества и органических соединений колеблется в широких пределах и зависит от вида растений и сроков их скашивания.

Таблица. Содержание сухого вещества и органических соединений в биомассе многолетних травосмесей по годам пользования

Сорта клевера и мятликовый компонент	Мятликовый компонент: 1-первый год пользования; 2-второй год пользования							
	тимофеевка луговая		овсяница луговая		ежа -сборная		в среднем	
	1	2	1	2	1	2	1	2
Сухое вещество, %								
Ранний 2	24,4	21,7	22,1	23,0	26,6	24,2	23,6	21,6
6ВИК7	28,3	23,1	28,2	27,2	29,3	23,6	27,4	24,2
Топаз	29,3	24,4	24,4	25,3	27,3	22,9	27,2	22,5
Мятликовые	27,6	23,6	28,3	24,1	24,5	25,3	27,7	22,3
Сырой протеин, % от с.в.								
Ранний 2	10,9	14,2	13,8	13,4	13,1	12,6	12,9	13,5
ВИК7	10,4	11,9	12,9	11,0	10,9	14,2	11,2	12,4
Топаз	9,2	17,2	9,3	13,2	9,4	16,3	9,6	15,6
Мятликовые	6,4	19,7	4,8	12,4	9,0	17,1	7,6	16,6
Сырой жир, % с.в.								
Ранний 2	1,04	2,6	1,11	2,7	1,33	3,0	1,17	2,8
ВИК7	1,21	2,5	1,12	2,6	1,05	3,5	1,03	2,8
Топаз	1,32	2,5	1,46	2,5	1,40	3,0	1,24	2,8
Мятликовые	0,99	2,8	1,00	2,4	1,08	3,0	1,07	2,7

О МЕХАНИЗМЕ ПОРООБРАЗОВАНИЯ ПРИ ГЕЛЕОБРАЗОВАНИИ ИЗ РАСТВОРОВ ПОЛИМЕРОВ

Руководитель А.Р. Хабаров

Тверской государственный технический университет

Кафедра ЭВМ

При формовании химических волокон из растворов полимеров образуются вакуоли, крупные (размеров несколько микрометров) капиллярные пустоты, микроканалы. Проведен анализ экспериментальные данные из ряда работ [1] о системах полимер – растворитель – осадитель, в которых образуются вакуоли. На наш взгляд основная причина образования вакуолей – нарушение равновесия на фазовой границе. В данной работы предлагается гипотеза о механизме порообразования в волокнах аналогичном образования вязких пальцев и установлена качественная и количественная зависимость между свойствами компонентов системы формования и характеристиками вакуолей в волокне. Предлагается модель этого явления, основана на уравнениях для объяснения явления образования вязких пальцев [2]. Это явление заключается в вытеснении одной жидкостью другой. Поверхность раздела между этими жидкостями определяется действием капиллярных сил и их динамической вязкостью μ . Граница раздела двух жидкостей оказывается неустойчивой. Длина волны возмущения λ определяется выражением

$$\lambda = 2\pi(\sigma/(\mu_2/k_2 - \mu_1/k_1)(U - U_c))^{0.5} \quad (1)$$

где σ – коэффициент поверхностное натяжение на границе раздела между двумя жидкостями; μ_1, μ_2 – вязкости граничащих жидкости; U – скорости течения; k – геометрический параметр ячейки Хеле – Шоу [2]; индекс указывает на соответствие величины одной из жидкости. Для проверки гипотезы о применимости соотношения (1) к явлению образованию вакуолей предположим, что каждое возмущение на границе раздела раствор полимера – осадитель неустойчиво и при его развитии образуется вакуоль. Тогда λ будет оценкой расстояния между соседними порами, которая будет связана с поверхностной концентрацией пор зависимостей вида $\lambda \sim n^{-0.5}$, что соответствует зависимость $\lambda \sim \sqrt{\sigma}$. Для расчетов использовались экспериментальные зависимости об количестве пор на единицу площади (см^2) [1] для 10%-ного и 14%-ного растворов ПАН из работы [1] с осадительной ванной ДМАА:ВОДА. Результаты регрессионного анализа подтвердили гипотезу для некоторых экспериментальных данных с 90%–95%-ом интервалом доверительной вероятности, что объясняется малым объемом выборки экспериментальных данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Швагурцева Л.В. // Дисс. на соискание уч. ст. к.т.н., - С-Пб, 1999.
2. Федер Р. Фракталы. М.: Мир, 1988. – 324 с.

А.И. Калинин, Н.А. Соловьева

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ПРОМЫШЛЕННЫХ ЗАГРЯЗНЕНИЙ НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ПАСТУШЬЕЙ СУМКИ (*CAPSELLA BURSA-PASTORIS*)

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

В последнее время увеличение количества промышленных предприятий приводит к существенному загрязнению почвы, воздуха и воды. Продукты этих предприятий, попадая в атмосферу, поглощаются многими растениями, в том числе лекарственными. Накопление растениями веществ различного строения происходит как путем прямого действия загрязнителей на ассимиляционный аппарат (листья), так и путем косвенного воздействия через почву. В связи с этим возникает необходимость анализа химического состава растений, используемых в качестве лекарственного сырья. Целью работы является исследование экологического состояния промышленных зон с помощью анализа влияния загрязнений на химический состав пастушьей сумки (*Capsella bursa-pastoris*) методами Фурье-ИК и УФ спектроскопии. Образцы для данной работы были собраны в местах с различной антропогенной нагрузкой (д. Александровка, Тв. область, в 5-ти километрах от городской свалки; МО, д. Шаховская, зона минимальных воздействий). В традиционной и народной медицине пастушья сумка используется как кровоостанавливающее средство. Для регистрации ИК спектров разных частей растения (стебли, корни, листья) была использована стандартная методика приготовления таблеток с бромидом калия. Электронные спектры поглощения спиртовых и водных экстрактов исследуемого растения регистрировали в УФ диапазоне длин волн 200–800 нм. В результате спектральных исследований удалось обнаружить изменения в химическом составе различных частей пастушьей сумки в зависимости от места сбора. Анализируя полученные данные, можно установить, что химический состав пастушьей сумки чувствителен к воздействию антропогенных факторов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности (проект №4.1325.2014/К) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.

Р.У. Каримова, И. Шматов

СОЦИОЛОГИЯ СТАРЕНИЯ

Руководители: Н.П. Лопина, Г. Е. Бордина
Тверской государственной медицинский университет
Кафедра химии

Старость – неизбежный процесс, сущность которого сводится к появлению признаков усталости как отдельных органов и тканей, так и организма в целом.

Процесс старения начинается в разных органах и тканях не одновременно и протекает с разной интенсивностью. Во многом интенсивность старения зависит от врожденных, генетически детерминированных свойств тканей.

Нельзя точно диагностировать начало старения – оно начинается скрытно и затрагивает не все тело, а наиболее ранимый орган или систему.

Физиологические изменения, которые происходят в теле человека с возрастом, в первую очередь выражаются в снижении биологических функций и способности приспосабливаться к метаболическому стрессу. Эти физиологические изменения обычно сопровождаются психологическими и поведенческими изменениями.

Физиологические эффекты старения отличаются среди индивидуумов. Организм в целом с наступлением старости становится уязвим к многочисленным болезням, особенно хроническим, требуя больше времени и средств на лечение. Со времён Средневековья и Античности средняя продолжительность жизни в Европе оценивается между 20 и 30 годами. Сегодня продолжительность жизни значительно возросла, в результате чего всё больший процент составляют пожилые люди. Потому типичные для пожилого возраста онкологии и болезни сердца стали намного более распространены.

Возрастающая стоимость медицинской помощи вызывает определённые проблемы как среди самих пожилых людей, так и для обществ, которые создают специальные институты и целевых программ, направленных на помощь пожилым людям. Многие развитые страны ожидают значительное старение населения в ближайшее время, и потому беспокоятся об увеличении расходов для сохранения качества охраны здоровья на соответствующем уровне. Направления деятельности с целью преодоления этой проблемы заключаются в улучшении эффективности работы системы охраны здоровья, более целенаправленному оказанию помощи, поддержке альтернативных организаций оказания медицинской помощи и влиянию на демографическую ситуацию.

А.В. Кащеева

ВЛИЯНИЕ НЕКОРНЕВОЙ ПОДКОРМКИ МИКРОЭЛЕМЕНТАМИ НА ПРОДУКТИВНОСТЬ ЯЧМЕНЯ

Руководитель И. В. Велюханов

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
кафедра агрохимии и земледелия

Как известно, микроэлементы оказывают влияние на окислительно-восстановительные процессы в растениях, способствуют обмену веществ и процессу фотосинтеза, улучшают качество продукции.

Цель исследований – дать сравнительную оценку действия солей различных микроэлементов на продуктивность ячменя при некорневой подкормке посевов. Схема опыта 1-Cu(медный купорос), 2-Zn (серноокислый цинк), 3 -В (борная кислота), 4 – Mn (серноокислый марганец), 5 – контроль (без обработки), 6-S(коллоидная сера), 7-Mo(молибденовоокислый аммоний).

Наши наблюдения показали, что в 2015 году некорневые подкормки оказали неодинаковое влияние на рост, развитие растений ячменя. В фазу кущение-выход в трубку положительное действие некорневой подкормки микроэлементами наблюдалось по всем вариантам. Однако наибольшая высота растений оказалась при обработке посевов бором 30,0см, медным купоросом-28,8см, что на 4,0-2,8см выше по сравнению с контролем. В фазу колошения наибольшая высота растений оказалась при использовании коллоидной серы и составила 50,3см. Развитие листового аппарата имело противоположную тенденцию динамике роста. Наибольшая доля листьев в динамике от фазы кущения до колошения отмечалась при обработке посевов коллоидной серой, хотя в фазу кущения облиственность была на 5,5% меньше по сравнению с контрольным вариантом. В фазу колошения доля листьев на всех вариантах уменьшилась до 16,3% (Zn) – 17,1% (В).

Такая же закономерность наблюдалась и по развитию ассимиляционной поверхности.

Более полный налив зерна обеспечили подкормки посевов медным купоросом, молибденом, что позволило улучшить элементы структуры урожая. Количество зерен колебалось от 21,9 до 18,7 шт. соответственно, а масса зерна с колоса 1,03- 0,96 г. Обработка посевов молибденом, медью и серой способствовали лучшему кущению растений, повышению продуктивной кустистости и урожайности ячменя. Прибавка урожая составила 3,1 -8,0-8,7 ц/га по сравнению с контрольным вариантом и 7,5-14,2 ц/га по сравнению с обработкой Mn и В.

Таким образом, некорневая подкормка ячменя молибденом и медным купоросом способствовала увеличению урожайности зерна при достаточном обеспечении посевов влагой.

Э.Э. Кирьянова, О.А. Степанова

ТЕРМОХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ПЕРЕРАБОТКИ БИОМАССЫ

Руководитель Ю.В. Луговой

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Биомасса с низкой влажностью (сельскохозяйственные и городские твердые отходы) перерабатываются термохимическими процессами: прямым сжиганием, газификацией, пиролизом, ожижением, гидролизом.

Наиболее перспективными и все более широко применяемыми процессами являются термохимическая газификация и пиролиз. Газификация представляет собой процесс частичного окисления углеродсодержащего сырья, такого, как биомасса, торф или уголь с получением газообразного энергоносителя – генераторного газа. Полученный газ состоит из монооксида углерода, водорода, метана, диоксида углерода, небольшого количества углеводородных соединений более высокого порядка, таких как метан и этан, содержит пары воды, азот (при воздушном дутье) и различные примеси. Пиролиз представляет собой термическую деструкцию исходного вещества (реакция пиролиза подразумевает собой разрушение нормальной структуры вещества при помощи высокой температуры, с ограничением доступа кислорода). При этом можно получить весьма широкий диапазон продуктов — синтез-газ, бионефть (пиротопливо, пиролизная жидкость, пиролизное масло), биомазут, пироконденсат, древесную пирогенную смолу.

В данном исследовании проводились газификация торфа и пиролиз костры без использования катализаторов. Процессы проводились в интервалах температур 500-700 °С. Полученные результаты показали, что основными продуктами являются смеси газов, смолы и угольный остаток. В смеси газов присутствует метан, монооксид и диоксид углерода, водород.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кузьмин С.Н., Ляшков В.И., Кузьмина Ю.С. Биоэнергетика - Тамбов : Изд-во ФГБОУ ВПО «ТГТУ», 2011. – 80 с
2. Д. Л. Рахманкулов, Ф. Ш. Вильданов, С. В. Николаева, С. В. Денисов - Успехи и проблемы производства альтернативных источников топлива и химического сырья. Пиролиз биомассы / Башкирский химический журнал 2008 том 13 3-17 с.

Н.А. Колокольцова, Г.М. Хоменко

СИНТЕЗ ПОЛИАМИДА-6И ГАЗОЖИДКОСТНОЙ ПОЛИКОНДЕНСАЦИЕЙ

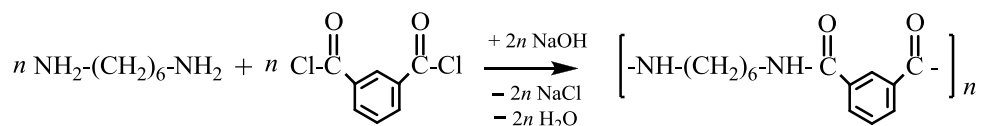
Руководитель Е.И.Лагуцева

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии полимерных материалов

Полиамиды – многофункциональные материалы конструкционного и антифрикционного назначения, широко применяются в различных отраслях промышленности. Расширение ассортимента марок и областей применения зависит от нового подхода к способам их синтеза.

Химическое строение и склонность к окислительным процессам при высоких температурах определили, что синтез жирноароматических полиамидов возможен низкотемпературными способами необратимой гетерофазной поликонденсации, например, газожидкостной поликонденсацией (на границе раздела жидкость-газ).

Суммарные уравнения реакционного формования при контакте газовой и водной фаз в общем виде включают две реакции: полиамидирование и акцептирование низкомолекулярного продукта поликонденсации щёлочью:



Носителем газовой фазы служит осушенный воздух (присутствие влаги повышает содержание свободных карбоксильных групп и осложняет протекание процесса генерирования газовой фазы).

Ацилирующий мономер газовой фазы (высокореакционноспособный изофталойлхлорид) в реакционную камеру поступает в состоянии перегретого пара. Жидкая фаза представляет собой водно-щелочной раствор ацилирующего мономера (гексаметилендиамина) и акцептора низкомолекулярного продукта поликонденсации – едкого натра.

Изучено влияние основных параметров, определяющих молекулярную массу и выход полимера (мольное соотношение мономеров на входе в реакционную камеру, температура жидкой и степень нагрева мономера газовой фаз). Один из основных технологических параметров, определяющих пенный гидродинамический режим процесса и производительность установки, – линейная скорость газовой фазы (w_r). Зависимости носят экстремальный характер: при внутреннем диаметре реакционной камеры 16 мм – $w_r = 25 - 35$ м/с, а при 50 мм – $w_r = 25 - 45$ м/с достигается максимум выхода и молекулярной массы полимера.

О.Е. Королева

ОТРАБОТКА РЕЦЕПТУР ВОДОРАЗБАВЛЯЕМЫХ ЭМАЛЕЙ С
ПОНИЖЕННОЙ ТЕМПЕРАТУРОЙ ОТВЕРЖДЕНИЯ

Руководитель Ю.Н. Смирнов

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии полимерных материалов

В машиностроении часто возникает необходимость окраски изделий в сборе. Для реализации данной задачи необходимо разработать водоразбавляемую (ВР) эмаль с пониженной температурой отверждения.

Модификация рецептур модельных эмалей велась в направлениях: повышения декоративных свойств, стабильности при хранении и нанесении; повышении физико-механических свойств, адгезии по черным и цветным металлам и по грунту Э-КЧ-0186; повышение защитных свойств покрытий на основе модельных эмалей в условиях статических испытаний (на водо-, масло- и бензостойкость). Образцы изготавливались на бисерной мельнице. Степень перетира выбрана постоянной во всех случаях – 25 мкм по "клину". Содержание нелетучих варьировалось в достаточно широких пределах, модификаторы нецелевого назначения не вводились. Образцы (и лаковая их часть) частично оставлялись на определение стабильности при хранении (в разведенном водой и исходном виде). Эмали разводились дистиллированной водой и наносились краскораспылителем при вязкости от 25 до 60 с по ВЗ-4 на стандартные стеклянные пластины из фотостекла, стали 08 кп и дюралюминия. Отверждение покрытий производилось после получасовой выдержки в камере конвективного типа при температурах 125 – 135 и 90 – 100 °С, соответственно, 23 – 35 и 60 – 90 минут.

Образцы покрытий после суточной выдержки при нормальных условиях испытывались на комплекс декоративных свойств (блеск по Б-2, внешний вид покрытия, состояние пигмента), физико-механических – адгезия по методу решетчатых надрезов, сопротивление удару. На статические испытания образцы покрытий выставлялись через трое суток после нанесения при комнатной температуре и при $60 \pm 0,1$ °С в воздушном моноstate на водостойкость. В ряде случаев покрытия на основе разрабатываемых эмалей испытывались на влагостойкость в камере Г-1, как самостоятельно, так и в комплексе с грунтовочным покрытием.

В результате проделанной работы получены положительные результаты по всем требованиям технического задания, за исключением показателя влагостойкости. В дальнейших работах необходимо рассматривать гидрофобизации покрытий на основе разрабатываемых эмалей, с тем, чтобы повысить влагостойкость до пяти циклов; только в этом случае рецептуру эмалей можно рекомендовать к внедрению.

А.А. Котельникова

ВЫДЕЛЕНИЕ ДНК ИЗ РАСТЕНИЙ. СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА НЕКОТОРЫХ СИСТЕМ ДЛЯ ВЫДЕЛЕНИЯ ДНК ИЗ РАСТЕНИЙ, ПРИСУТСТВУЮЩИХ НА РОССИЙСКОМ РЫНКЕ

Руководитель Э.М. Сульман

Тверской государственный университет
Кафедра химических технологий и биотехнологий

Проблема обнаружения генетически измененных продуктов питания (особенно сои и кукурузы), встает в наше время особенно остро. Среди основных методов, используемых для идентификации ГМО компонентов, наиболее часто встречается метод ПЦР (полимеразной цепной реакции), также дающий наиболее точные результаты. Этот метод включает в себя два этапа: 1) выделение ДНК, 2) непосредственно реакция ПЦР.

На начальном этапе выделения ДНК из клеток растений требуется эффективное разрушение клеточных стенок. При этом очень важно свести к минимуму процессы фрагментации ДНК. На следующем этапе важно провести очистку освободившейся высокомолекулярной ДНК от многочисленных примесей, присутствующих в растительном экстракте – полисахаридов, белков, липидов, пигментов и других. Концентрируют ДНК осаждением этанолом или изопропанолом. Очень важно получить высокоочищенные ДНК не содержащие ингибирующих примесей. Неполное удаление ингибиторов, полисахаридов и полифенолов приводит к угнетению дальнейших ферментативных реакций в процессе ПЦР и вызывает деградацию ДНК после длительного хранения.

Были протестированы следующие системы для выделения ДНК из клеток растений: «ДНК-сорб-С» (производитель интерлабсервис), «Сорб-ГМО-А» (производитель синтол), «СОРБ-ГМО-Б» (производитель синтол). В качестве объекта исследования использовалась генномодифицированная соя линии 87701, 89788, 27-04, 40-3-2, а также кукуруза MON 88017.

Данные линии выделялись с помощью перечисленных наборов согласно инструкции производителя. Генетически модифицированная мука смешивалась с «чистой мукой» в разных пропорциях: 0,1%, 1% и 5%.

Для всех образцов наиболее высокие результаты показала система «Сорб-ГМО-А» (производитель синтол). При использовании этой системы была достигнута наиболее высокая повторяемость, а также при последующих постановках ПЦР был замечен выход ДНК на более ранних циклах, по сравнению с остальными системами.

А.В. Котомкин

ИССЛЕДОВАНИЕ И СРАВНЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ 1-,2- И 3-ФТОРЗАМЕЩЕННЫХ АЛКАНОВ

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

Целью данной работы является сравнение индуктивного влияния фтора в гомологических рядах, отвечающих формулам $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_n-\text{CH}_2\text{F}$, где $0 \leq n \leq 7$, $\text{CHF}_2-(\text{CH}_2)_n-\text{CH}_3$, где $0 \leq n \leq 8$, $\text{CF}_3-(\text{CH}_2)_n-\text{CH}_3$, где $1 \leq n \leq 7$.

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

Сравнение данных для всех изученных соединений показало, что дальность индуктивного влияния от F – 4 группы CH_2 . В рядах моно- и дифторалканов отмечено уменьшение заряда на третьей от FCH_2 и F_2CH группе CH_2 по сравнению с соседними CH_2 группами. Предполагается, что это связано с проявлением стерического эффекта FCH_2 и F_2CH .

В результате сравнения $q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$ в рассмотренных рядах выделены электронные параметры переносимых групп. Сопоставление $q(R)$ так же позволило получить индивидуальные шкалы электроотрицательностей. Для монофторалканов: $\chi(\text{CH}_2) < \chi(\text{CH}_3) < \chi(\text{F})$, для дифторалканов: $\chi(\text{CH}) < \chi(\text{CH}_2) < \chi(\text{CH}_3) < \chi(\text{F})$, для трифторалканов: $\chi(\text{C}) < \chi(\text{CH}_2) < \chi(\text{CH}_3) < \chi(\text{F})$. Итоговая шкала электроотрицательности будет иметь вид: $\chi(\text{CH}) \leq \chi(\text{C}) < \chi(\text{CH}_2) < \chi(\text{CH}_3) < \chi(\text{F})$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. at all. Gaussian 03 (Revision E 0.1 SMP). Gaussian Inc., Pittsburgh PA, 2007.

Статья выполнена в рамках выполнения научно исследовательской работы «Разработка программного комплекса для расчета термодинамических свойств органических соединений» по договору с Фондом содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере №9498ГУ/2015 от 28.15.2015

Ю.А. Красильникова, А.В. Старовойтов

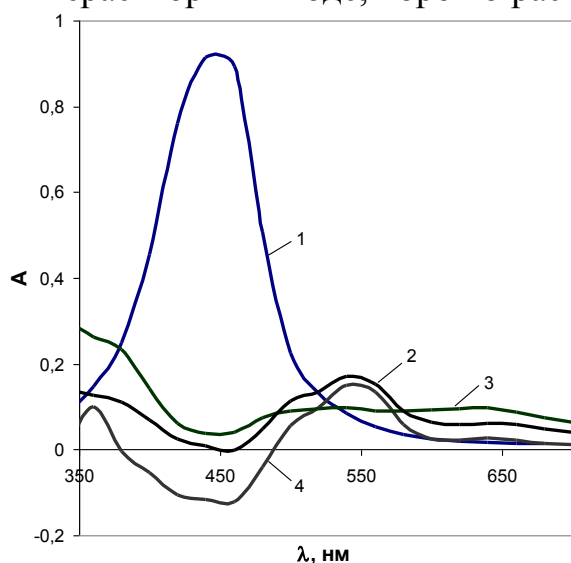
ФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗОЛОТА С ТИОКЕТОНОМ МИХЛЕРА С ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫМ ОСАЖДЕНИЕМ С ТЕЛЛУРОМ

Руководитель Ю.В. Чурсанов

Тверской государственной технической университет

Кафедра химии

Тиокетон Михлера (4,4'-бис-(диметиламино)тиобензофенон; ТКМ) высокочувствительный и избирательный реагент для спектроскопического определения золота и других благородных металлов [1]. ТКМ практически нерастворим в воде, хорошо растворяется в хлороформе, кетонах, спиртах.



Молекулы растворителя входят в состав комплексного соединения золота с ТКМ. При использовании бутанола или этанола (50–60 %) образуются комплексы состава $[\text{Au}(\text{TKM})(\text{Solv})_3]^+$ [1]. Стандартная методика: к пробе, содержащей Au(III), приливали 2,5 мл ацетатного буфера pH = 3,0; 1,0 мл 1×10^{-3} М раствора ТКМ в изопропанол (ИПС); 10 мл ИПС и доводили водой до 25 мл. В литературе [1] описаны различные методы пробоподготовки, в основном включающие экстракцию. Нами исследовано влияние

предварительного выделения золота соосаждением с теллуром на последующее определение с ТКМ, которое существенно расширяет возможности методики. Ранее осаждение с теллуром успешно применялось при проведении атомно-абсорбционного определения золота в растворах [2]. На рисунке показаны спектры, полученные на ПЭ-53008, кювета 1 см: 1 – ТКМ относительно смеси ИПС: вода (1:1); 2 – раствор золота (5 мкг) с теллуром (1 мг) относительно раствора Те (1 мг); 3 – раствор теллура (1 мг) относительно ТКМ; 4 – раствор золота (5 мкг) относительно ТКМ. При $\lambda = 540$ нм наличие теллура не мешает определению золота.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пилипенко А.Т., Рябушко О.П., Мацбура Г.С. // Заводская лаборатория. 1982. Т.48. № 5. С. 7–11.
2. Чурсанов Ю.В., Старовойтов А.В. // Вестник ТвГУ. Серия: Химия. 2013. № 15. С. 18–24.

Н.И. Кротова, Е.В. Рыбаков

ОЛИГОМЕРНЫЕ ПОВЕРХОСТНО-АКТИВНЫЕ ВЕЩЕСТВА НА ОСНОВЕ МЕТАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель: Ворончихина Л.И.

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Олигомерные поверхностно-активные вещества (ПАВ) занимают промежуточное положение между низкомолекулярными и высокомолекулярными ПАВ и широко используются в текстильной промышленности, в производстве химических волокон и других областях. В производстве химических волокон до настоящего времени остаются актуальными задачи повышения прочности, упругости, аппретирования готовых тканей и т.д. Эти задачи могут быть решены за счет применения новых олигомерных ПАВ.

В настоящей работе представлены результаты по синтезу и свойствам олигомерных ПАВ на основе метакриловой кислоты. Исследованы условия получения соединений реакций радикальной полимеризации в присутствии высших спиртов и их фракций в качестве телогенов - регуляторов молекулярной массы. В качестве инициатора использовали динитрил 2-азо-бис-изомасляной кислоты (ДАК); из высших спиртов были использованы октанол, додеканол и фракция (C_7H_{15} – C_9H_{19})ОН и синтанол А-3 (моноалкиловый эфир полиэтиленгликоля на основе первичных спиртов). При проведении реакции полимеризации в выбранных нами условиях (молярное соотношение кислота : телоген 5:1; концентрация кислоты 8,6%, телогена 27%, ДАК 0,2%, растворитель толуол, температура реакции 90 °С) предпочтительнее идет реакция образования олигомеров со степенью полимеризации от 156 до 49. Для всех синтезированных олигомеров была определена кинематическая вязкость однопроцентных водных растворов и средневязкостная молекулярная масса.

Показано, что молекулярная масса олигомеров изменяется в пределах от 13400 до 4200, олигомеры хорошо растворяются в полярных растворителях и не растворяются в неполярных. Исследование поверхностно-активных свойств однопроцентных водных растворов синтезированных соединений показало, что олигомеры являются поверхностно-активными соединениями и снижают поверхностное натяжение воды в пределах 49 – 62 мН/м.

А.А. Крылов

ВЛИЯНИЕ ОЗОНА НА АКТУАТОРНЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИАНИЛИНА

Руководитель Рясенский С.С.

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Ранее было показано, что под действием окислительно-восстановительного потенциала в водной среде происходит обратимое изменение механических свойств плёнки полианилина (ПАНи). Интересно было бы проследить влияние окислителей на механические свойства пленки ПАНи в газовой среде. Поэтому целью настоящей работы проследить влияние озона (O_3) на механических свойств актуатора. Для этого был использован озон, полученный с помощью тлеющего высоковольтного разряда. Концентрация озона в воздухе определялась йодометрическим титрованием. Концентрацию озона изменяли в интервале от 0 до 0,004М. Контроль за изменением геометрических параметров осуществлялся с использованием камеры для микроскопа. Для предотвращения появления шумов камера была помещена в клетку Фарадея. При этом плёнка ПАНи была нанесена на платиновую подложку толщиной 0,08мм и длиной 4 см. Толщина плёнки ПАНи 0,04 мм. Нанесение осуществлялось методом циклической вольтамперометрии (ЦВА) в одном растворе гидрохлорида анилина. Данное устройство было названо электрохимический актуатор (ЭХА). При воздействии озона на ЭХА происходило искривление слоя ПАНи вместе с подложкой, что и фиксировалось камерой. В результате было выяснено, что в интервале от 0 до 0,004М происходило пропорциональное концентрации отклонение ЭХА, а время отклика составило не более 1 секунды. Причем процесс релаксации практически не происходил. Вероятно этот эффект можно объяснить необратимым окислением ПАНи озоном. В результате изменяется структура ПАНи, которая приводит к изменению геометрических параметров. Для возврата ЭХА в исходное состояние достаточно поместить его в водную среду 0,02М гидрохлорида анилина и провести несколько циклов сканирования потенциала на ЦВА. Обнаруженный эффект может быть использован для создания газового сенсора с откликом на озон с непосредственным отсчётом показаний. Данный сенсор будет пиковым, то есть показывать максимальное значение озона за изучаемый промежуток времени.

П.Н. Крылов

ЭНЕРГИИ РАЗРЫВА СВЯЗИ В АЛКАНАХ И ИХ АНАЛОГАХ

Руководитель Ю.Г. Папулов

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Разработка теории и методов расчета свойств веществ на основе сведений о строении молекул – фундаментальная научная задача химии.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ СВЕДЕНИЯ ПО ЭНЕРГИЯМ РАЗРЫВА СВЯЗЕЙ СКУДНЫ И ПОРОЙ РАЗНОРЕЧИВЫ.

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

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи:

4. **ОЦЕНКА И АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ ПО ЭНЕРГИЯМ РАЗРЫВА СВЯЗИ В ИССЛЕДУЕМЫХ СОЕДИНЕНИЯХ.**

5. **ПОСТРОЕНИЕ РАСЧЁТНЫХ СХЕМ И ПРОВЕДЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ,**

6. **ПОСТРОЕНИЕ И АНАЛИЗ ГРАФИЧЕСКИХ ЗАВИСИМОСТЕЙ “ЭНЕРГИЯ РАЗРЫВА СВЯЗИ – СТЕПЕНЬ ЗАМЕЩЕНИЯ”.**

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” в исследуемых соединениях. Найдено, что они в общем случае нелинейны, однако линии замещения на одну и ту же группу симбатны между собой.

Данные зависимости позволяют графическим путем получить недостающие значения свойств.

Также в работе были выявлены отдельные закономерности, связывающие энергию разрыва связи со строением исследуемых соединений.

В результате проделанной работы проведена оценка состояния численных данных по энергиям разрыва связи в алканах и их аналогах, разобраны расчётные схемы и выведены рабочие формулы по которым проведены численные расчёты, согласующиеся с экспериментом, получены новые данные.

М.М. Кубарева

ПИРОЛИЗ СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННЫХ ОТХОДОВ РАСТИТЕЛЬНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

Руководитель Ю.В. Луговой

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

Непрерывный рост цен на традиционные типы энергоносителей способствует разработке эффективных методов переработки возобновляемого и экологически чистого сырья – биомассы. При пиролизе биомассы можно получить газообразные углеводороды, жидкие и твердые продукты.

На примере пиролиза биомассы было исследовано влияние размера фракции на выход газообразного продукта при температуре 500°C.

Исследование биомассы проводилось на лабораторной установке, состоящей из стального реактора периодического действия стационарного типа нагреваемого электропечью. Время проведения процесса составляло 40 минут.

В качестве биомассы использовалась шелуха семян подсолнечника с фракциями размером менее 0.25 мм, 0.25 - 0.45 мм, более 0.45 мм. Масса навески составляла 3 г. Исходная влажность сырья составляла 6.7 % по массе при зольности отходов 2.5 % исходного сырья.

Полученный газ анализировался на газовом хроматографе на содержание в нем углеводородов, Q, H₂, CO и CO₂.

Во время проведения процесса на 10 - 15 минутах наблюдается рост значений теплотворной способности (Q) получаемых газов. Максимальное значение теплотворной способности газа составило 25.34 кДж/моль, которое было получено на 13 минуте эксперимента при температуре процесса 500°C и размером фракции 0.25 мм. С увеличением размера фракции теплотворная способность снижается.

Наибольший выход газообразных углеводородов C₁ - C₄ наблюдался на 11 - 14 минутах у биомассы размером 0.25 мм. При дальнейшем проведении процесса наблюдается резкое снижение выхода газообразного продукта. У биомассы размером более 0.25 мм максимальный выход углеводородов наблюдался на 20 минуте.

Оптимальным размером фракции шелухи семян подсолнечника является размер 0.25 мм, поскольку дальнейшее уменьшение фракции ведет к образованию пыли, которая трудна как в получении, так и в использовании.

ПОСТУПЛЕНИЕ В ПОЧВУ ПИТАТЕЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ В СОСТАВЕ
ДОПУСТИМЫХ ДОЗ ЖИДКОГО НАВОЗА И РАСЧЕТНАЯ УРОЖАЙНОСТЬ ПОЛЕВЫХ
КУЛЬТУР

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

Характерной особенностью хозяйств животноводческого направления считается получение в земледелии высоких урожаев возделываемых культур за счет существующего (созданного) уровня плодородия почв и вносимых органических удобрений. Минеральные удобрения либо вообще не используются, или применяются в очень ограниченном количестве. Мы рассчитали поступление в почву элементов питания в составе допустимых доз применения жидкого навоза свиней, из расчета его внесения N200 (табл.). Расчет проводили на основании анализа навоза взятого непосредственно из скотных дворов хозяйства. При допустимом внесении в почву азота в N200, расчетная доза применения составляет 312 т. ($200:0,64=312$). Расчет провели на предполагаемое внесение под зерновую культуру (ячмень) и под картофель. На основании показателей агрохимической характеристики почв хозяйства выявили количество элементов, которое может быть усвоено указанными культурами непосредственно из почвы и какая при этом достижима расчетная урожайность.

Таблица. Поступление питательных веществ в почву в составе органических удобрений и их возможное использование с учетом коэффициента потребления

Доза внесения	Внесено в почву в составе навоза, кг на 1 га			Коэффициент использования %			Возможное потребление, кг на 1га		
	N	P ₂ O ₅	K ₂ O	N	P ₂ O ₅	K ₂ O	N	P ₂ O ₅	K ₂ O
312 (под зерновые)	200	209	324	0,30	0,30	0,55	60	62	178
312 (под картофель)	200	209	324	0,30	0,35	0,55	70	62	178

По зерновым культура урожайность составляет в пределах 10-13 ц/га, а по картофелю 70-116 ц/га. Если учесть, что урожайность формируется по элементу находящемуся в минимуме, то реальная урожайность картофеля составит 67-70 ц/га. С учетом обеспеченности почвы фосфором, урожайность могла бы быть от 86 до 116 ц/га, или на 28-61% выше. В действительности урожайность картофеля в Бежецком районе даже на не удобряемых участках достигается в пределах 100 ц/га и выше. Но это возможно, если культура возделывается на участках пашни находившейся до этого в виде залежи, либо после распашки трав, а также в результате мобилизации питательных элементов из почвенных запасов при проведении интенсивной обработки почвы. Последние два года (2014-15 гг.) в Тверской обл. урожайность картофеля в крупных агрофирмах достигает 600 ц/га. Однако это происходит при внесении минеральных удобрений из расчета 400-600 кг/га д.в., при одновременной 7-8 разовой обработке почвы против сорняков и болезней раз за период вегетации культуры. Относительно наличия в почвах предприятия калия, содержание которого ниже по сравнению с фосфором, то это соответствует общему положению в земледелии Тверской обл. Данные агрохимической службы свидетельствуют, что за последние годы количество калия в земледелии региона резко упало и данный элемент в настоящее время является лимитирующим.

Г.Ф. Куракин

ПОИСК ВОЗМОЖНЫХ ГОМОЛОГОВ ХЕМОКИНОВ ПОЗВОНОЧНЫХ У ПРОКАРИОТ

Руководитель Н.В. Костюк

Тверской государственной медицинской университет
Кафедра биологии

Вопрос о наличии гомологов хемокинов у одноклеточных организмов в настоящее время не изучен. В то же время сведения о выполнении хемокинами широкого круга функций в рамках хемотаксиса клеток [2, 3], а также об обнаружении сходных с интерлейкинами молекул у беспозвоночных, в том числе простейших [1], послужило причиной выдвижения нами гипотезы о наличии таковых. Нами производился поиск гомологов хемокинов позвоночных у прокариот. Найденные последовательности исследовались более детально на предмет гомологии хемокинам. Выполнялись также построение филогенетических деревьев, предсказание и анализ положения дисульфидных связей и вторичной структуры, анализ распределения консервативных и вариабельных участков белков. Первоначально были отобраны 8 последовательностей эубактерий, для одной из которых (Uni Prot ID A0A0Q7WNI9) были обнаружены гомологи среди белков археев группы Methanosarcina (белок с UniProt ID A0A0P0J056 и его ближайшие гомологи). Итого получилось 9 групп белков. Гомология между указанными белками и хемокинами составляла порядка 20 – 30% (параметр identity). На основании построения филогенетического дерева и поиска гомологий область поиска была сужена до 4 групп белков. Один из этих белков (UniProt ID A0A059DJG3), возможно, относится к группе тиоэстераз, гомологичных хемокинам на уровне отдельного фрагмента. Ещё один белок был исключён из рассмотрения на основе анализа вторичной структуры и распределения дисульфидных связей. Группа белка A0A0Q7WNI9 и группа белка A0A0P0J056 по результатам исследования оказались, вероятно, родственны друг другу. Изучение всеми описанными выше методами показывает наибольшую вероятность родства между этими группами белков и хемокинами. Но на сегодняшний день данный вопрос окончательно не решён.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ройт А., Бростофф Дж., Мейл Д. //М.: Мир, 2000.
2. Huising, Mark O., Stet, René J. M. et al. //Trends in Immunology, Volume 24, Issue 6, 306 - 312.
3. Zlotnik, Albert et al.// Albert Zlotnik, Osamu Yoshie, Hisayuki Nomiyama – Genome Biology2006 7:243.

Б.А. Кустарев

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ NO₂ В ВОЗДУХЕ ПРИ ПОМОЩИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ГАЗОВОГО СЕНСОРА

Руководитель С.С.Рясенский

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

На основании литературных данных, можно считать, что полианилин (ПАНИ) может быть использован в качестве рабочего тела при создании газовых сенсоров. При чём, учитывая, что электропроводность полианилина существенно зависит от его степени допирования, можно предположить, что это соединение наиболее эффективно будет реагировать на газы кислотной природы [1].

Для подтверждения этого, мы решили проверить отклик датчика на содержание NO₂ в воздухе. Для этого мы изготовили сенсор, который представлял собой гребёнку из золотых электродов, поверх которой был нанесён слой полианилина.

Диоксид азота был получен обычным химическим способом [2].

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

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

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

Изучили такой параметр сенсора, как температурная зависимость.

Изготовленный сенсор позволяет определять концентрацию диоксида азота ниже значения ПДК, поэтому он может найти практическое применение.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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

Д.С. Кутузов, К.А. Морозова, Н.В. Айдинян, Е.Е. Арямин, М.П. Брызгина

ЛАЗЕРНАЯ КОНОСКОПИЯ КАК МЕТОД КОНТРОЛЯ ВЗАИМНОЙ ОРИЕНТАЦИИ ОПТИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ ОДНООСНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Руководитель А.И. Колесников

Тверской государственный университет

Кафедра прикладной физики

В настоящее время исследование оптического качества кристаллов методом коноскопии получило новое развитие. Во-первых, применение лазерных оптических схем практически не ограничивает ни размеры исследуемых образцов, ни величину углов падения лучей на кристалл. Во-вторых, разработан точный математический аппарат, позволяющий вычислять теоретический вид изохром – наиболее информативных элементов коноскопических картин – для класса одноосных кристаллов, имеющих широкое применение в оптике, оптоэлектронике и фотонике.

Из кристаллов изготавливаются те или иные элементы, например, СЗП (светозвукопроводы) акустооптических устройств или лазерные стержни, причем почти все типы оптических элементов имеют одну или несколько пар взаимно параллельных граней. Это позволяет применять метод коноскопии не только для контроля оптической однородности одноосных кристаллов, но и с высокой точностью обнаруживать и численно оценивать отклонения геометрической формы элементов от формы, заданной требованиями конструкции и назначения. До недавнего времени такой контроль плоскостности, пирамидальности, отклонений от взаимной параллельности осуществлялся с помощью хотя и достаточно прецизионных, снабженных тензодатчиками, сопряженных с РС, но механических по принципу действия приборов – усовершенствованных микрометров.

В настоящей работе для кристаллов парателлурита впервые были рассчитаны отклонения формы изохром от теоретической, связанные с углом клина между противоположными оптическими гранями, который может образоваться при изготовлении элемента на этапах рентгеновской ориентации, резки, шлифовки и полировки поверхностей.

Экспериментальная проверка результатов расчетов на специально изготовленных из парателлурита крупногабаритных элементах – СЗП линии задержки импульсов фемтосекундных лазеров – не только подтверждает корректность разработанного математического аппарата, но и дает перспективу внедрения метода лазерной коноскопии в метрологию формы оптических элементов из любых одноосных кристаллов.

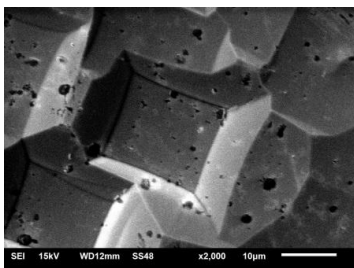
Е.Ю. Лаврова, М.Д. Кузьмина

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИСЛОКАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ

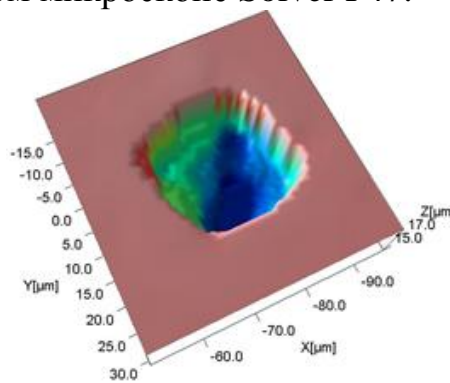
Руководители: А.И.Иванова, Р.М.Гречишкин
Тверской государственный университет
Кафедра прикладной физики

В настоящей работе представлено комбинированное применение различных методов и средств микроскопических наблюдений дислокационной структуры оптических кристаллов германия и парателлурита. Монокристаллы германия и парателлурита широко используются в ИК-оптике, акустооптике, оптоэлектронике, функциональной электронике и лазерных технологиях. Важной характеристикой кристаллов является их высокое структурное качество. Дислокации оказывают негативное влияние на механические, электрические и оптические свойства кристаллов, высокая плотность дислокаций сильно ограничивает использование монокристаллов.

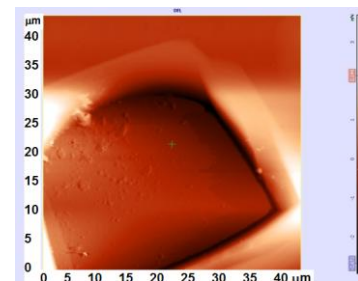
Для выявления дислокационной структуры германия и парателлурита был использован метод селективного химического травления. Травитель благодаря преимущественному растворению материала в полях напряжений материала вблизи дислокаций, приводит к образованию ямок травления на плоскости. Полученные дислокационные ямки травления были исследованы методами интерференционной профилометрии, оптической, электронной и атомно-силовой микроскопии. На рисунке представлены изображения дислокационных ямок травления на поверхности монокристалла германия, выращенного способом Чохральского в направлении $[100]$, полученные на растровом электронном микроскопе JEOL 6610LV, оптическом интерферометре NanoMap 1000WLI и сканирующем зондовом микроскопе Solver P47.



РЭМ-изображение
дислокационной ямки
(x 2000)
(JEOL 6610 LV)



3d – изображение
дислокационной ямки
(NanoMap 1000WLI)



3D – профиль
дислокационной ямки
(Solver P47)

Е.Ю. Лебедева

ДЕГАЗАЦИЯ ЖИДКИХ ТОРФЯНЫХ УДОБРЕНИЙ

Руководитель Е.А. Прутенская
Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии и химии

На сегодняшний день разработано большое количество эффективных органоминеральных удобрений, которые широко используются в сельском хозяйстве.

На стадии хранения готового продукта у производителей возникает проблема вспучивания емкостей с удобрением. Известно, что в готовых торфяных удобрениях микробиологические процессы протекают слабо, следовательно, причинами вспучивания могут являться необратимые химические и физические реакции, происходящие при изменении условий хранения готового продукта. Вспученные удобрения являются не пригодными для дальнейшего использования, следовательно, необходимо искать причины, по которым происходит данный процесс.

Главными задачами работы являлось выяснение причин вздутия готового жидкого торфяного удобрения и подбор метода дегазации продукта.

После проведения опытов по термостатированию проб удобрения при комнатной (20 °С) и повышенной (50 °С) температурах было выяснено, что в герметично закрытых упаковках с удобрением происходит в первую очередь физический процесс дегазации. Также в ходе исследований определили, что при добавлении в удобрение консерванта (сорбиновой кислоты, кремнекислого натрия или глицерина) интенсифицировался процесс дегазации и снижалось общее количество микроорганизмов в пробе [1].

На основании полученных можно предположить, что процесс дегазации подавляет развитие микрофлоры торфяного удобрения, а отсутствие в жидкой фазе растворенного газа приводит к снижению интенсивности процессов дыхания и брожения микроорганизмов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Прутенская, Е.А. Обоснование использования процесса дегазации в производстве жидких торфяных удобрений // Е.А. Прутенская, Е.Ю. Лебедева // Наука сегодня: теоретические и практические аспекты: сбор. науч. трудов по матер. международ. науч.-практ. конф. (Вологда, 23 декабря 2015 г.). - Вологда, 2015. - с. 144

АНАЛИЗ ФОРМЫ ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ОТКЛИКА ПЛЕНОК ЦТС, СФОРМИРОВАННЫХ НА СТАЛЬНЫХ ПОДЛОЖКАХ

Руководители: Богомолов А.А., Солнышкин А.В.
Тверской государственной университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Пленки цирконата титаната свинца состава $Pb(Ti_{0,45}Zr_{0,53}W_{0,01}Cd_{0,01})O_3$ на подложках из нержавеющей стали были получены в НИИ физики при Ростовском госуниверситете методом ВЧ-катодного распыления мишени из горячепрессованной керамики указанного выше состава. Толщина пленки и стальной подложки составляла ~ 1 мкм и ~ 70 мкм соответственно. Пироэлектрический отклик пленки измерялся в динамическом режиме при прямоугольной модуляции теплового потока ИК-диапазона ($\lambda=980$ нм, $W=220$ мВт). Экспериментально полученная форма отклика имеет достаточно сложную форму и представлена для частоты модуляции теплового потока 20 Гц на рис.1, а. В начальный момент воздействия излучения (нагрев) и по его окончанию (охлаждение) наблюдается достаточно резкий выброс тока – «пичок» с последующим постоянным по амплитуде сигналом – «полкой». Совпадение по фазе опорного и полезного сигналов свидетельствует о направлении вектора самополяризации пленки от подложки к ее свободной поверхности. Начальный выброс «пичок» обусловлен, по всей видимости, суммой вкладов от пироэффекта и пьезоэффекта самой пленки, что подтверждается теоретическим расчетом формы пироотклика по формуле, приведенной в работе [1] для трехслойных тонкопленочных структур (электрод-пленка-подложка), рис.1б.

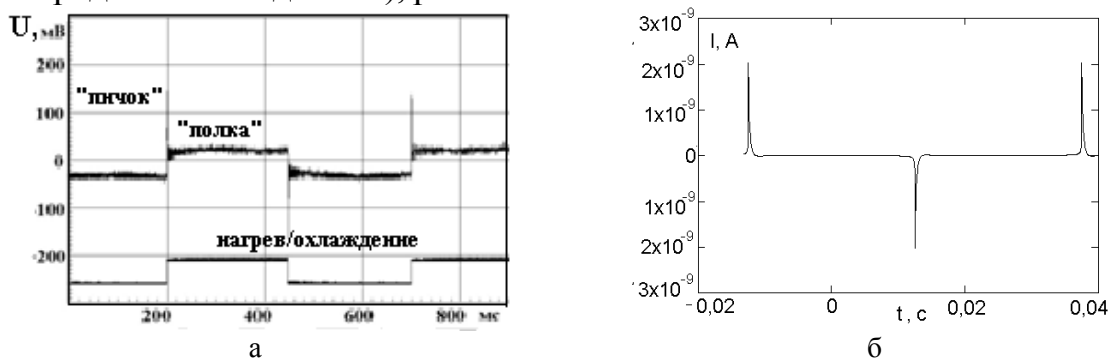


Рис.1. Формы электрических откликов пленки ПКР: а – экспериментально наблюдаемые; б – теоретически рассчитанные по формуле [1]. $f_{\text{мод}}$ – 20 Гц.

Экспериментально наблюдаемый постоянный по амплитуде сигнал – «полка» связан как с совместным разогревом пленки и подложки, так и за счет термических деформаций, возникающих вследствие разных значений коэффициентов теплового расширения пленки и подложки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zajosz H.J. // Thin Solid Films. 1979. V. 62. N2. P. 229 – 236.

Е.С. Логинова

СПОСОБ АНТИКОРРОЗИОННОЙ ОБРАБОТКИ ПОВЕРХНОСТИ ЧЕРНЫХ МЕТАЛЛОВ

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

Для улучшения антикоррозионной стойкости черных металлов и повышения технологичности изготовления и защиты от коррозии изделий из черных металлов нами предложен состава преобразователя ржавчины, позволяющий снизить негативное воздействие входящих в него химических соединений на природную среду [1].

Предложенный праймер-преобразователь коррозии углеродистых сталей содержит раствор ортофосфорной кислоты и оксида цинка в воде, где входящий в его состав галлат основной висмута может быть растворен в 0,1 N раствора динатриевой соли этилендиаминдиантарной кислоты в воде при следующем соотношении компонентов, г/л: ортофосфорная кислота - 180-240; оксид цинка - 4,2-5,6; галлат основной висмута - 40-80; динатриевая соль этилендиаминдиантарной кислоты 0,1 N раствора в воде - 160-320; вода - 415,8-554,4.

Галлат основной висмута (соль галло-элагодубильной кислоты) растворяется в 0,1 N водном растворе динатриевой соли этилендиаминдиантарной кислоты и присутствие названных компонентов обеспечивает образование координационных соединений, где в качестве ионов-комплексообразователей выступают железо, цинк и висмут, а лигандами являются галло-элагодубильная кислота и экологически безопасная этилендиаминдиантарная кислота. Эти координационные соединения прочно связаны с железной основой защищаемого от коррозии изделия и образуют сплошную феррозщитную пленку, которая не подвержена влиянию изменений температуры и не растворяется в органических растворителях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Патент РФ на изобретение № 2565170, опубл. 20.10.2015, бюл. № 29. «Способ антикоррозионной обработки поверхности черных металлов» / Никольский В.М., Логинова Е.С., Яковлев А.А.

А.В. Логунов, Д.С. Лютин, О.В. Долгасова

ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ НА ПРОЦЕСС ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ: «Де-Нол», «Омепразол»,
«Метронидазол»

Руководители: доц. Н.П. Лопина, доц. Г.Е. Бордина
Тверской государственной медицинской университет
Кафедра химии

На современном фармакологическом рынке обилие лекарственных средств. Врачи основывают своё назначение на фармакологических свойствах препаратов, но не всегда учитывают взаимодействие с другими лекарственными средствами. Однако, химическая структура применяемых лекарств различна, соединения могут взаимодействовать друг с другом. Результатом такого взаимодействия может быть как ослабление фармакологического действия препаратов (антагонизм), так и его усиление (синергизм).

Для исследования были взяты препараты, применяемые для лечения гастрита, гастродуоденита, дуоденита, повышенной кислотности желудка. Стандартное назначение представляет собой три препарата: «Де-Нол», «Омепразол», «Метронидазол». Они принимаются одновременно. Дозировка препарата соответствует стандарту: 1 таблетка «Де-Нол», 1 таблетка «Метронидазол», 1 таблетка «Омепразол». Объём для растворения каждой из таблеток в условиях эксперимента был принят за 100 мл. Так как желудок обладает кислой средой, то необходимо имитировать рН, приближённый к этим условиям. С этой целью был приготовлен 0,1М раствор HCl. Для фиксации рН были приготовлены индикаторы, покрывающие диапазон рН от 0 до 6,8.

В результате были получены данные о синергизме препаратов на физико-химическом уровне в плане повышения рН. Результаты данного исследования могут быть полезны для рационального дозирования и комбинирования данных препаратов при лечении воспалительных заболеваний желудка. Но полученные результаты требуют дальнейших исследований и уточнений.

М.Ю. Лукиенко

ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДЫХ КОМПЛЕКСОВ КОБАЛЬТА(II) С ЦЕФАЛОСПОРИНАМИ

Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Путем взаимодействия водных растворов хлорида кобальта(II) и натриевых солей цефалоспориновых антибиотиков цефазолина (НСzl), цефотаксима (НСxm) и цефтриаксона (Н₂Ctx) и получены в виде осадков розового цвета и исследованы их внутрикомплексные соли с Со(II). После промывания холодной водой на фильтре, осадки высушены на воздухе при комнатной температуре. Состав образцов определен методами электронно-зондового анализа с помощью энергодисперсионного спектрометра INCA Energy 350, используемого в качестве аналитической приставки к растровому электронному микроскопу JEOL JSM-6610LV и синхронного термического анализа на установке Netzsch STA 449 F3 Jupiter. Исследование методом ИК спектроскопии на приборе Bruker Equinox 55 показало смещение полос валентных колебаний $\nu(\text{C}=\text{O})$ амидной и бета-лактамной групп и $\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)_{\text{as}}$ карбоксилатной группы в сторону более высоких частот по сравнению со спектром соответствующей натриевой соли антибиотика, что можно расценивать как координацию этих групп с Со(II).

Образец	$\nu(\text{C}=\text{O})$ β -лактам	$\nu(\text{C}=\text{O})$ амид	$\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)_{\text{as}}$
<i>NaCzl·H₂O</i>	1761	1680	1605
<i>Co(Czl)₂·3H₂O</i>	1770	1691	1630
<i>NaCxm·H₂O</i>	1759	1647	1612
<i>Co(Cxm)₂·5H₂O</i>	1768	1672	1618
<i>Na₂Ctx·4H₂O</i>	1740	1649	1610
<i>CoCtx·5H₂O</i>	1765	1668	1620

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

Н.И. Лукьянова

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ БОРА В ВОДНОЛИГАНДНЫХ РАСТВОРАХ БОРНОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Массовая доля бора в организме человека составляет $10^{-5}\%$. Механизмы биологической активности бора изучены недостаточно. Избыток этого элемента вреден для организма человека. Недостаток бора в организме некоторых животных нарушает углеводно-фосфатный обмен [1].

Исследование комплексообразования бора с комплексонами, производными янтарной кислоты (КПЯК), проводили рН-потенциометрическим методом, титруя системы борная кислота – комплексон – вода щелочью при температуре $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ и ионной силе раствора, равной 0,1, в среде KNO_3 . Соотношение борная кислота – комплексон составляло 1:1. Полученные кривые титрования представлены на рисунке

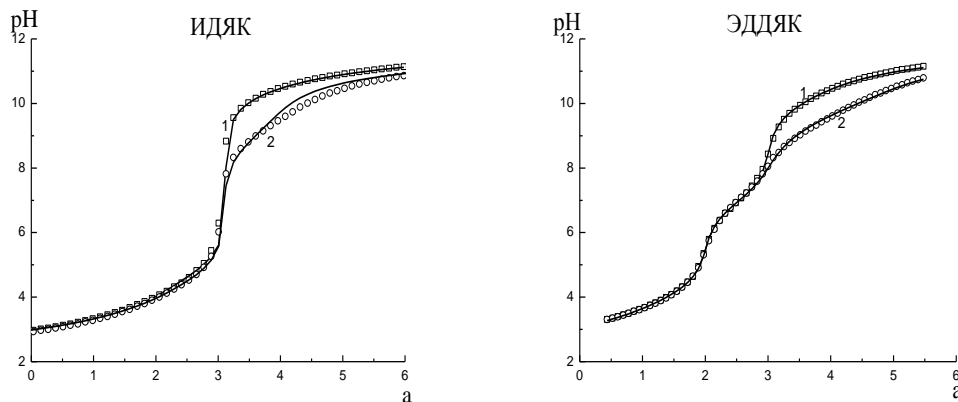


Рис. Кривые титрования КПЯК (1) и КПЯК с $\text{B}(\text{OH})_3$ (2). На кривых титрования точки – эксперимент, линии – расчет.

Для ИДЯК $\lg K_{\text{B}(\text{OH})_3\text{L}_4^-} = 4.85 \pm 0.06$; $\lg K_{\text{B}(\text{OH})_3\text{HL}_3^-} = 13.31 \pm 0.12$.

Для ЭДДЯК $\lg K_{\text{B}(\text{OH})_3\text{L}_4^-} = 3.94 \pm 0.01$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дедков Ю.М., Лозинская Е.Ф. // Химия и хим. технология. – 2002. – Т.45, №6. – С. 121.

А.М. Магомедов

ФОРМИРОВАНИЕ УРОЖАЙНОСТИ ЦУККИНИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ СЕЛЕНА

Руководители: О.В. Смирнова, Т.И. Смирнова
Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии и земледелия

Селен участвует в процессах метаболизма, повышает иммунитет, защищает организм от ядовитых веществ, уменьшает риск развития сердечно-сосудистых заболеваний и пр. Однако в Тверской области, расположенной на Восточно-европейской платформе, также ощущается дефицит селена, в том числе в сельскохозяйственной продукции и продуктах питания. Поэтому в условиях импортозамещения актуальной является разработка биологически активных и экологически безопасных соединений, включающих селен. К ним можно отнести комплексоны микроэлементов на основе комплексонов, производных янтарной кислоты - этилендиаминдиантарной кислоты (ЭДДЯК). Целью исследования стало изучение действия биологически активных комплексных соединений на рост и развитие цуккини.

Исследования проводились в 2015 г. на экспериментальном участке кафедры агрохимии, почвоведения и агроэкологии Тверской ГСХА. Общая площадь участка – 100 м², площадь учетной делянки – 2 м². Повторность опыта четырехкратная, расположение делянок – рендомизированное. В качестве опытной культуры выращивались кабачки сорта «Мавр». Схема опыта включала варианты: контроль (без удобрений и опрыскивание растений Н₂О); опрыскивание растений Н₂О или одним из следующих растворов: Na₂SeO₃, ЭДДЯК, Se-ЭДДЯК в дозе 100 мл/м² (дважды за вегетационный период с интервалом 4 недели).

В процессе роста и развития максимальным количеством фотосинтетических пигментов по отношению к остальным вариантам отличались листья растений, обработанные селеновым комплексом на фоне минеральных и органоминеральных удобрений: в среднем на 18-27% и на 15-23% по содержанию хлорофилла а и хлорофилла b соответственно, а также на 11-19% - по содержанию каротиноидов. Наибольшая урожайность плодов кабачков (2,17 кг/м²) и прибавка к контролю (1,0 кг/м²) получены на варианте с применением Se-ЭДДЯК, а наименьшие значения – на варианте с комплексом ЭДДЯК (1,43 кг/м² с прибавкой 0,16 кг/м² соответственно). Совместное опрыскивание растений эквимольными растворами ЭДДЯК и Se-ЭДДЯК позволило увеличить урожайность на 45% по отношению к контролю и на 11-23% по сравнению с остальными растворами (за исключением раствора комплексоната селена).

Е.О. Майорова, А.И. Бууева

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФИРНЫХ МАСЕЛ

Руководители: Н.П. Лопина, Г. Е. Бордина
Тверской государственной медицинской академии
Кафедра химии

Эфирные масла пользуются огромным спросом на международном рынке вследствие своих полезных свойств. Поэтому многие производители идут на различные ухищрения, чтобы увеличить выпуск конечной продукции. Проблема фальсификации на сегодняшний день особенно актуальна. Использование фальсифицированных эфирных масел может нанести большой вред здоровью. Высококачественные эфирные масла не могут быть дешевым продуктом, так как себестоимость их достаточно высока.

Сегодня мир переживает небывалый всплеск интереса к альтернативной и народной медицине. Значение эфирных масел особенно возрастает, когда резко ухудшается психологическая атмосфера, экологическая ситуация и геомагнитная обстановка.

Цель исследования: определить качество образцов эфирных масел, представленных на фармацевтическом рынке.

Материалы и методы: исследовано 9 образцов эфирных масел; для исследования использовались: пробирки, пипетки, стеклянные палочки, воронка, фильтровальная бумага, листы бумаги, колбы, цилиндры, водяная баня, спиртовка.

Проводилось тестирование масел на наличие: воды, жирных и минеральных масел и других примесей; оценивались органолептические свойства и индивидуальная чувствительность к исследуемым маслам.

Выводы:

1. В некоторых образцах эфирных масел обнаружены различные по происхождению примеси (жирные и минеральные масла, вода, синтетические эфиры органических кислот, смолы и растительные масла). Все образцы масел в той или иной степени разбавлены водой.
2. Определены некоторые органолептические и физико-химические свойства масел: цвет, прозрачность, растворимость, взаимодействие со спиртами и др.
3. Проведен тест на индивидуальную чувствительность, выявлены следующие аллергические реакции: покраснение и зуд кожи.

А.Л. Макушкин

ТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОВЕДЕНИЕ МАГНИТНОЙ ДОМЕННОЙ
СТРУКТУРЫ ГЕТЕРОГЕННЫХ ВЫСОКОКОЭРЦИТИВНЫХ СПЛАВОВ
(Sm,Zr)(Co,Cu,Fe)_z

Руководитель Е.М. Семенова

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Сплавы типа $(Sm,Zr)(Co,Cu,Fe)_z$ представляют собой сложную систему в которой гетерогенность выражена не только на микро-, но и на наноуровне. Благодаря такой структуре в сплавах реализуется высококоэрцитивное состояние с высокой температурной стабильностью. На микроуровне в сплавах обнаруживается две основных микроскопических структурных составляющих, ответственных за магнитные свойства: одна из них близка интегрально по составу к $Sm(Co,Cu,Fe)_5$ (составляющая *A*); вторая – к $Sm_2(Co,Cu,Fe)_{17}$ (составляющая *B*). Относительное содержание этих составляющих зависит от стехиометрического соотношения *z* (повышение *z* приводит к увеличению составляющей *B*). Основные магнитные характеристики и их температурная стабильность существенно зависят от относительного содержания этих составляющих. В работе [1] методами магнитных измерений было показано, что наилучшую температурную стабильность коэрцитивной силы демонстрируют материалы, в которых преимущественный объем занимает составляющая *A*. В данной работе была поставлена задача выполнить прямые наблюдения температурного поведения магнитной доменной структуры составляющих *A* и *B* в температурном интервале 300–1000 К, что позволит сделать обоснованный вывод о температурной стабильности их высококоэрцитивного состояния в заданном температурном интервале. Сплавы были получены по стандартной технологии [1] и подвергнуты серии термических обработок для того чтобы добиться различного структурного состояния. Затем зерна сплава выкалывались из слитков, ориентировались в магнитном поле и подвергались шлифовке и полировке. Исследования магнитной доменной структуры выполнялись на оптическом (Axiovert 200MAT (Zeiss)) и сканирующем зондовом (Solver P47 (NT-MDT)) микроскопах. Контроль магнитных параметров образцов осуществлялся методом магнитных измерений на вибрационном магнитометре с температурной приставкой. В работе проводится комплексный анализ данных магнитных измерений и результатов исследования доменной структуры сплавов $(Sm,Zr)(Co,Cu,Fe)_z$ в широком диапазоне температур.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lyakhova M.B., Semenova E.M., Ivanov R.P. High-temperature behavior of hard magnetic alloys $(R,Zr)(Co,Cu,Fe)_z$ ($R = Sm,Gd$) // Metal Science and Heat Treatment. 2015. V. 56. I. 11-12. P. 602-608.

УДК

М.Д. Малышев

ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛ МЕРКАПТИДА СЕРЕБРА: МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ

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

Водные растворы цистеина и нитрата серебра (ЦСР) относятся к достаточно интересным системам, поскольку демонстрируют способность к гелеобразованию при достаточно малом содержании реагентов. Достоверно установлено, что на ранних этапах созревания ЦСР в нем формируются кластеры и более крупные агрегаты из молекул меркаптида серебра (МС). Предполагается, что они выступают в роли супрамономеров при формировании геля сетки после введения в раствор соли инициатора. Однако на данный момент отсутствует точная информация о строении кластеров МС. Поэтому изучение особенностей взаимодействия молекул МС друг с другом и структуры кластеров на их основе является важной задачей с точки зрения понимания общих закономерностей гелеобразования в ЦСР.

В работе выполнено изучение особенности взаимодействия двух молекул МС посредством различных функциональных групп, таких как: AgS - 1, NH₂ - 2, C(O)OH - 3, NH₂ и C(O)OH - 4. Все энергетические и структурные характеристики систем рассчитывались в рамках полуэмпирического метода молекулярных орбиталей ZINDO/1. В результате выполненных расчетов было показано, что наиболее энергетически выгодным является формирование димеров МС при участии следующих пар функциональных групп 1-1, 3-3, 1-4, 1-2, 1-3, 1-4.

Полученные конфигурации использовались для пошагового построения кластеров на основе трех и четырех молекул МС с последующей минимизацией энергии системы. Все полученные кластеры имеют ассиметричное строение поскольку перекрестное связывание молекул МС может происходить за счет различных пар функциональных групп. Это может быть благоприятным для дальнейшего формирования супрамолекулярных агрегатов на их основе с фрактальной структурой.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства Науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности (№ 4.1325.2014/К).

О.И. Малярова

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ МАГНИТНОЙ ДОМЕННОЙ
СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЙ $Dy(Fe,Ti)_{12}$

Руководитель Е.М. Семенова

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Соединение $Dy(Fe,Ti)_{12}$ обладает кристаллической структурой типа $ThMn_{12}$ с широкой областью гомогенности, и демонстрирует огромное разнообразие магнитных свойств. Соединение характеризуется высокой магнитокристаллической анизотропией и температурой магнитного упорядочения, и поэтому рассматривается специалистами как перспективные материалы для постоянных магнитов. Сплавы были получены методом индукционной плавки в атмосфере аргона. Исследования магнитной доменной структуры выполнялись на оптическом микроскопе Axiovert200 MAT (Zeiss) методом полярного эффекта Керра и на сканирующем зондовом микроскопе Solver Next (NT-MDT) методом магнитно-силовой микроскопии. В работах [1,2] показано, что механическое воздействие на поверхность моно- и поликристаллов соединения $Dy(Fe,Ti)_{12}$ приводит к формированию неравновесной магнитной доменной структуры (ДС). Исследованию такой неравновесной ДС посвящена данная работа. Напряжения на поверхности шлифов создавались механической полировкой алмазными пастами в различных направлениях. В результате полировки формируется тонкий слой, в котором анизотропия отличается от массива образца. Доменная структура наглядно иллюстрирует это явление. При нагревании неравновесные домены поверхности трансформируются в доменную структуру типичную для одноосного магнетика. Тот же эффект наблюдается при комнатной температуре с течением времени. В работе приведены прямые наблюдения трансформации доменной структуры поверхности соединения $Dy(Fe,Ti)_{12}$ после воздействия напряжений методами оптической металлографии и топография полей рассеяния методами МСМ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Семенова Е.М., Ляхова М.Б., Скоков К.П., Грушичев А.Г., Мурзанов М.С., Пастушенков Ю.Г. Релаксационные процессы магнитной доменной структуры в соединениях $R(Fe,Ti)_{12}$ ($R=Tb,Dy$) // Перспективные материалы. Специальный выпуск. 2008. С. 338–342.
2. Пастушенков, Ю.Г., Скоков К.П., Грушичев А.Г., Ляхова М.Б., Семенова Е.М. Особенности доменной структуры соединений $RFeTi$ ($R = Tb, Dy$) с высоким содержанием железа // Вестник ТвГУ. Серия: Физика. 2005. Вып.2. № 9(15). С. 19–25.

А.Б. Матиив, Е.А. Савченко

ВЫДЕЛЕНИЕ ЧИСТОЙ КУЛЬТУРЫ МИКРОДОВОДРОСЛИ ХЛОРЕЛЛА И СПОСОБ ЕЕ КУЛЬТИВИРОВАНИЯ

Руководитель Е.А. Прутенская
Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии и химии

Хлорелла – одноклеточная водоросль, широко распространенная в природе. Интерес к хлорелле определяется богатейшим составом биологически активных веществ, высокой их концентрацией и сравнительно простой технологией получения больших количеств биомассы.

Для водорослей термин «одновидовой» означает культуру водорослей одного вида, и если культура не имеет загрязнителей, она называется «чистой» или «аксеничной».

Целью работы было получение аксеничной культуры микроводорослей хлореллы и изучение способов ее культивирования для получения биологически активных веществ.

В работе было проведено выделение чистой культуры водорослей, так как природный источник помимо хлореллы содержал бактерии и простейшие, обнаруженные при микроскопировании. Методом выделения был выбран посев на агаризованные среды с последующим пересевом. Было выяснено, что культура водорослей лучше растет при добавлении в бактериологический агар небольших количеств мочевины и определенных микроэлементов. Рост колоний хлореллы был отмечен на второй день, но только на чашках, которые стояли в ламинарном боксе при интенсивном освещении при комнатной температуре. Культивирование на чашках в термостате при температуре 26 – 27°C при освещении результатов не дало – колонии водорослей не образовывались. Для культивирования также использовалась полужидкая среда МРС-2. На данной среде колонии хлореллы не образовывались, однако в пробирках со средой начинался интенсивный процесс брожения, что свидетельствовало об инфекционной загрязненности природного источника анаэробными микроорганизмами. После получения чистой культуры проводилось культивирование суспензии хлореллы в лабораторной установке при постоянном освещении и барботировании. Использовались среды разного состава. В работе было выявлено, что наибольший прирост биомассы водоросли происходил на среде с мочевиной. Количество клеток определяли с помощью камеры Горяева. Таким образом, в данной работе был подобран метод выделения чистой культуры водоросли хлорелла, а также описан способ и среда для ее культивирования.

М.С. Матюшенко

ТЕРМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЭТИЛЕНДИАМИНДИАНТАРНОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Этилендиамин-N,N'-диянтарная (ЭДДЯК, Y) кислота является экологически безопасным и биологически активным комплексоном, что вызывает интерес к ее всестороннему исследованию. Выявлено, что она образует устойчивые комплексы с алюминием, вычислена ее константа устойчивости [1]. Для получения информации о строении комплексов, характере химических связей в них, их термической устойчивости были выделены средние комплексы алюминия с исследуемым комплексом в твердом виде и проведен их термический анализ.

Исследование термической устойчивости проводили на дифференциальном сканирующем калориметре STA 449F (производитель NETZSCH). Нагрев во всех случаях происходил в атмосфере воздуха.

Комплексопат	Стадии дегидратации, °С		Убыль массы, моль Н ₂ О	Температура разложения °С
	1	2		
Na[AlX]·5H ₂ O	100	-	4	>350

При нагревании комплексоната Al(III) с ЭДДЯК дегидратация протекает в 2 этапа, две молекулы воды находятся во внутренней сфере комплекса и связаны с металлом координационно (испаряются позже). Координационное число алюминия равно шести, с учетом количества внутрисферной воды, дентатность ЭДДЯК в этом комплексе равна четырем.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Толкачева Л.Н., Никольский В.М. Термодинамические характеристики образования комплексов иона Al³⁺ с иминодиянтарной кислотой в водных растворах. *Журн. физической химии*. 2012,3, 466 – 469.

М.Н. Маякова

АНТИМИКРОБНАЯ АКТИВНОСТЬ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ЦЕФАЛОСПОРИНОВЫХ АНТИБИОТИКОВ С КАТИОНАМИ МЕТАЛЛОВ

Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Современные статистические данные говорят об увеличении количества штаммов микроорганизмов, резистентных к антимикробным препаратам, в том числе и к широко применяемым антибиотикам цефалоспориновой группы. Ввиду этого, актуальным является постоянная разработка и создание новых эффективных лекарственных препаратов, которые должны обладать большей устойчивостью к действию бактериальных бета-лактамаз, вызывающих гидролиз бета-лактамной структуры ядра молекулы цефалоспоринов и инактивацию антибиотиков. Новым направлением в получении антибиотиков, устойчивых к действию бета-лактамаз, является синтез так называемых «металлоантибиотиков» - комплексных соединений анионов антибиотиков с катионами металлов. Представляет интерес сравнить полученные данные и определить тенденции в области металлокомплексов цефалоспоринов и их биологического эффекта. В результате проведенного анализа опубликованных работ по получению и исследованию химических свойств и биологической активности комплексных соединений цефалоспориновых антибиотиков можно сделать вывод о неоднозначном влиянии введения металла на бактерицидное действие антибиотиков, а также о влиянии условий получения металлокомплексных соединений цефалоспоринов. Рассмотрев несколько источников, можно говорить о противоречивости экспериментальных данных. Введение многих металлов повышает не только противомикробную функцию, но и увеличивает токсичность препарата. Важное практическое значение в этом отношении имеют соединения цинка, которые превосходят по активности другие металлы, обладают низкой цитотоксичностью, при введении в избытке он не кумулируется, а выводится из организма.

Е.С. Мигунова

КАТАЛИТИЧЕСКОЕ ГИДРИРОВАНИЕ КАРБОКСИЛЬНОЙ ГРУППЫ ЖИРНЫХ КИСЛОТ

Руководитель А.А. Степачёва

Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии и химии

Жирные спирты являются поверхностно активными веществами, которые широко используются в косметической, пищевой и фармацевтической промышленности как смягчающие средства, эмульгаторы, загустители. Особое применение находят жирные спирты с длиной цепи C18 и выше. Они используются в форме эмульсий или производных [1].

Жирные спирты в основном получают путем каталитического гидрирования жирных кислот, метиловых эфиров и восков (сложные эфиры жирных кислот) на никелевых, медных, платиновых, рутениевых или палладиевых катализаторах. Традиционно используют медно-хромовые катализаторы, однако гидрирование в их присутствии требует высоких температур (200-300 °С) и давлений 20-30 МПа [2]. Известно, что благородные металлы, такие как Ru, Rh, Pt и Pd, активны в гидрировании жирных кислот. В связи с этим разработка более эффективных катализаторов для осуществления селективного синтеза спиртов в приемлемых условиях реакции весьма актуальна [3].

Изучен процесс жидкофазного гидрирования стеариновой кислоты в неполярном растворителе – додекане. Реакция проводилась при температуре 200 °С, давлении водорода 20 атм, в присутствии ряда катализаторов на основе металлов восьмой группы – палладия, платины и рутения, нанесенных на различные подложки. Анализ жидкой фазы осуществлялся с помощью газового хроматографа масс-спектрометра. Эффективность процесса оценивалась по значениям конверсии стеариновой кислоты, а также селективности по стеариловому спирту.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Myers D. // John Wiley & Sons. New York. 2005.
3. Turek T. // Catalitical Reviews. 1994. Vol. 36. P. 645–683.
3. Симакова И.Л. // Журнал СФУ. Химия. 2015. Т.8. № 3. С. 439-449.

А.Н. Милорадова

ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ ОДНОАТОМНЫХ СПИРТОВ.
ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Руководитель Ю.Г. Папулов

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

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

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

- анализ экспериментальных данных по исследуемым соединениям,
- подбор топологических индексов (ТИ) и построение расчётных схем
- проведение численных расчётов,
- построение и анализ графических зависимостей.

В работе была проведена оценка состояния численных данных по энтальпии образования одноатомных спиртов, выявлены отдельные закономерности.

Были получены аналитические зависимости $P=f(\text{ТИ})$ наиболее точно коррелирующие с энтальпией образования рассматриваемых соединений.

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

Так для одноатомных спиртов имеем:

$$P_{C_nH_{2n+1}OH} = a + b + p_2\Gamma_{CC} + p_2'\Gamma_{COH} + R\Delta_{CCC} + R'\Delta_{CCOH} + \\ + p_3\tau_{CC} + p_3'\tau_{COH} + p_4\omega_{CC} + p_4'\omega_{COH} + p_5\nu_{CC} + p_5'\nu_{COH}.$$

где $a = p_{CC} + p_{COH}$, $b = p_{C-H}$.

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.

По полученным формулам проведён численный расчёт энтальпии образования ряда одноатомных спиртов. Рассчитанные величины, в общем, согласуются с экспериментальными.

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

ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА ПРОЦЕССЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ
ТГС С ПРИМЕСЬЮ Ti^{3+} И АТГС С ПРИМЕСЬЮ Mn^{2+}

Руководитель Н.Н. Большакова

Тверской государственной университет

Кафедра физики конденсированного состояния

Настоящая работа поставлена с целью получения дополнительной информации о влиянии отжига и легирования кристаллов ТГС ионами титана (Ti^{3+}), а так же L- α - аланином и марганцем ($ATGS:Mn^{2+}$) на их диэлектрические свойства и процессы переполяризации.

Исследования проведены на образцах монокристаллов ТГС, легированных ионами титана различных концентраций от 10^{-5} до $0,3 \cdot 10^{-3}$ вес.%, а так же $ATGS:Mn^{2+}$, содержащих 10 мол.% L- α - аланина и марганец. Образцы представляли собой плоскопараллельные пластины полярного (перпендикулярно вектору спонтанной поляризации) среза. На отполированные полярные срезы образцов наносились серебряные электроды методом вакуумного напыления.

Емкость образцов измерена с помощью универсального моста Е7-4. Диэлектрическая проницаемость рассчитана по формуле плоского конденсатора. Процессы переключения образцов исследованы с помощью схемы Сойра-Тауэра на частоте 50 Гц.

Установлено, что величины диэлектрической проницаемости после отжига образцов $TGS:Ti^{3+}$ возрастают для большинства из них на 17-20 процентов. Значения переключаемой поляризации изменяются в пределах погрешности эксперимента. Величины коэрцитивного поля в отожженных образцах уменьшаются от 4 до 30 процентов. В отличие от характеристик кристалла $TGS:Ti^{3+}$, величины диэлектрической проницаемости для $ATGS:Mn^{2+}$ колеблются от 30 до 60, переключаемой поляризации от 0,8 до 2,1. Значения коэрцитивных полей и полей смещения возрастают от 230 до 460, коэффициента униполярности от 0,6 до 0,9.

Проведенные исследования показывают, что отжиг приводит к увеличению значений диэлектрической проницаемости и уменьшению аналогичных для коэрцитивного поля кристаллов $TGS:Ti^{3+}$. Это свидетельствует об увеличении подвижности доменных стенок кристаллов $TGS:Ti^{3+}$, ранее стабилизированных дефектами. Для $ATGS:Mn^{2+}$ диэлектрическая проницаемость так же имеет существенное увеличение, а значения коэрцитивных полей не имеет однозначной тенденции: возможно как уменьшение, так и увеличение коэрцитивных полей, что свидетельствует о не равномерном вхождении примеси при росте кристаллов.

А.С. Морозова

ФОРМИРОВАНИЕ ЗАПРОГРАММИРОВАННЫХ УРОЖАЕВ ОВСА И ЯРОВОЙ ТРИТИКАЛЕ В ЧИСТОМ И СМЕШАННОМ ПОСЕВАХ

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра технологии производства, переработки и хранения продукции
растениеводства

Наиболее полное использование биологического потенциала культур, сортов и гибридов во многом зависит от технологии возделывания, способной обеспечивать удовлетворение потребностей их в основных жизненно важных факторах. Основным методом оптимизации условий формирования урожайности является программирование.

Цель исследований – изучить особенности формирования урожайности овса и яровой тритикале в чистом и смешанном посевах при внесении расчетных доз удобрений; выявить лучшие варианты технологии, обеспечивающие получение запрограммированных урожаев.

Исследования проводили в 2015 г. – в многофакторном полевом опыте на опытном поле Тверской ГСХА на дерново – среднеподзолистой остаточной карбонатной глееватой почве на морене, супесчаной по гранулометрическому составу.

Схема опыта включала факторы: А – фон минерального питания: А₁ – без удобрения (по эффективному плодородию), А₂ – NPK в расчете на урожай 3,0 т/га, А₃ – NPK в расчете на – 4,0 т/га, В – виды посева: В₁ – чистый посев овса, В₂ – чистый посев яровой тритикале, В₃ – смешанный посев (50 + 50 %) овса с яровой тритикале. Площадь учетной делянки 36 м², повторность – 4х кратная. Объекты исследований, сорта: овса – Кречет, яровой тритикале – Гребешок.

В опыте соблюдали запрограммированную технологию. предшественник – озимая тритикале. Дозы удобрений рассчитывали балансовым методом. В опыте выполнили все запланированные наблюдения и определения по современным методикам.

В результате выявлено, что наиболее оптимальные условия для формирования урожайности на удобренных фонах создавались в смешанных посевах (таблица). Так, на 2 фоне получена прибавка урожая 0,28 т/га (6,8 %), На 3-ем – 0,74 т/га (16,9 %). Тритикале уступала по урожайности овсу, особенно значительно на неудобренном фоне – на 0.35 т/га (12,3 %). Внесение расчетных доз NPK позволило получить запрограммированные и близкие к ним урожаи в чистых посевах: на 1 фоне – 2,85; на 2-ом – 4,11, на 3-ем – 4,38 т/га. В смешанных они были на 6,8 и 16,9 % выше. Смешанные посевы экономически более выгодны.

К.А. Морозова, Д.С. Кутузов, Н.В. Айдинян,
Д.В. Хохлов, С.С. Рыбина, М.С. Воронцов

ОТРАЖАТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ ПАРАТЕЛЛУРИТА С ПОВЕРХНОСТЯМИ, ПОЛУЧЕННЫМИ МЕТОДОМ ХИМИКО- МЕХАНИЧЕСКОЙ ПОЛИРОВКИ

Руководитель А.И. Колесников
Тверской государственный университет
Кафедра прикладной физики

В настоящей работе представлено объяснение оптического эффекта, заключающегося в том, что при освещении полированных поверхностей кристаллов парателлурита с ориентацией (110) лучом непрерывного лазера видимого диапазона отраженный луч дает на экране в дальней зоне, помимо круглого центрального яркого пятна (мода TEM_{00}), а также окружающей его типичной спекл-картины, две крест-накрест расположенные светлые полосы, простирающиеся далеко за пределы диаметра пятна. При вращении кристалла вокруг падающего луча балки креста на экране поворачиваются соответственно повороту кристалла, что прямо указывает на связь наблюдаемой картины с тонкой структурой микрорельефа полированных поверхностей. В процессах обработки оптических поверхностей кристаллов использована как обычная технология механической обработки, так и разработанная на кафедре технология химико-механической полировки с подтравливающей добавкой. Сравнительные исследования рельефа поверхностей, обработанных указанными методами, показали, что параметр шероховатости R_a у поверхностей, полученных с применением подтравливающей добавки, удается уменьшить с 40 нм (величины, типичной для чисто механической полировки) до 18 – 22 нм. Фурье-анализ изломов поверхностей показал, что остающиеся после полировки неровности составляют поверхности, почти исключительно имеющие кристаллографическую ориентацию (100), а это – плоскости спайности парателлурита. Таким образом, именно оставшиеся выступы с одинаковой ориентацией, попадающие в область, освещаемую наиболее интенсивной частью лазерного луча, дают отражения в четырех направлениях, образующих балки креста. Дальнейшие исследования позволили установить, что и для более гладких поверхностей данный эффект имеет место, но ослаблен на порядок и с трудом поддается наблюдению. Полученный результат предполагает более широкое внедрение в практику технологии химико-механической полировки оптических элементов из парателлурита.

Насрин Намичемази

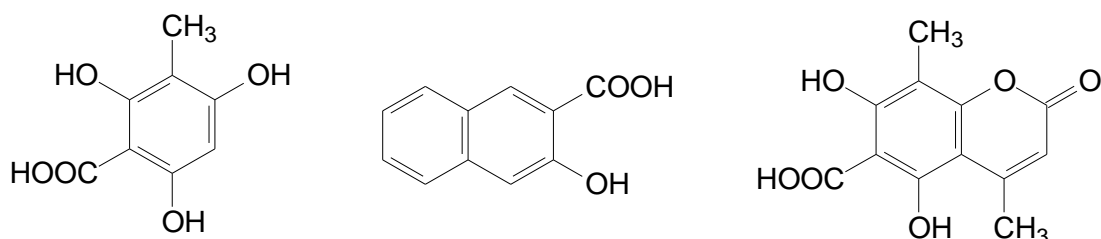
КОМПЛЕКСНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ
С α -ГИДРОКСИКАРБОНОВЫМИ АРОМАТИЧЕСКИМИ КИСЛОТАМИ

Руководитель О.В. Ковальчукова

Российский университет дружбы народов
Кафедра общей химии

Известно, что α -гидроксикарбоновые ароматические кислоты (салициловая, пирокатехиновая, α -резорциловая, флороглюциновая и другие кислоты) проявляют биологическую активность, активно используются в аналитической химии в качестве реагентов для количественного определения катионов металлов, а также в синтетической органической химии. Низкие температуры их декарбоксилирования (160 – 240°C) в сочетании с хорошими комплексообразующими свойствами приводят к тому, что металлокомплексы α -гидроксикарбоновых ароматических кислот могут вызывать определенный интерес в качестве прекурсоров для образования наноразмерных частиц металлов и их оксидов методом термического разложения.

Исходя из вышесказанного, изучены процессы комплексообразования ряда двух- и трехвалентных переходных металлов с α -гидроксикарбоновыми ароматическими кислотами следующего строения:



Изучены процессы комплексообразования в растворах, показано, что титрование растворами солей металлов приводит к смещению лигандных полос поглощения в электронных спектрах. В спектрах появляются изобестические точки, что указывает на равновесие реакций комплексообразования. Построены кривые насыщения и рассчитаны составы комплексов и константы образования.

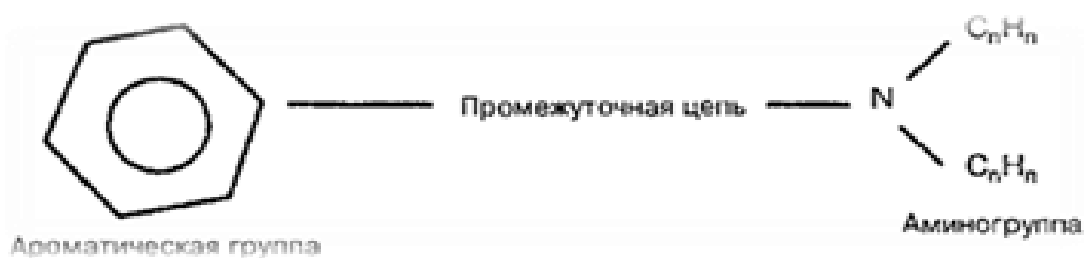
Из водно-этанольных слабощелочных растворов металлокомплексные соединения выделены в кристаллическом состоянии, совокупностью химических и физико-химических методов исследования с привлечением квантово-химического моделирования (DFT B3LYP) определены их состав и строение.

Е.Д. Наумова

ОБЕЗБОЛИВАЮЩЕЕ ДЕЙСТВИЕ МЕСТНЫХ АНЕСТЕТИКОВ И ИХ СТРУКТУРА

Руководители: Н.П. Лопина, Г. Е. Бордина
Тверской государственной медицинской университет
Кафедра химии

Анестетик – это соединение, которое уменьшает или полностью устраняет чувствительность, воздействуя либо на весь организм человека в целом (общий анестетик), либо на его отдельную область (местный анестетик). Классифицируются местные анестетики по химической структуре (сложные эфиры (Кокаин) и амиды (Лидокаин)) и по поколениям (I - кокаин в 1860, II - новокаин в 1905, III – лидокаин в 1943, IV - мепивакаин в 1957, V - артикаин в 1972). Т.к. эфирные связи нестойки, быстро гидролизуются эстеразами тканей и плазмы, а также наиболее токсичны, чем анестетики класса амидов, то на сегодняшний день в современной стоматологии для обезболивания используются амидные анестетики V поколения: Артикаин (его производные) и Ропивакаин. Фармакокинетика местных анестетиков зависит не только от физико-химических свойств анестетиков, но также от способа их введения, дозы, места инъекции, добавления к раствору вазоконстриктора (гидролиз соли, рН применяемого раствора и константы диссоциации анестетика (pK_a), транспорта через мембрану).



Ароматическая и аминогруппы ответственны за прохождение через ткани, оболочки и мембраны. Промежуточная часть, а именно, тип химической связи, классифицируют местные анестетики на аминоэфирные или эфирные(-COO-): прокаин, тетракаин и др., и аминоамидные или амидные(-NHCO-): лидокаин, артикаин и др. Благодаря этой цепочке молекула обладает анестезирующими свойствами.

Таким образом, на наш взгляд актуальным является сотрудничество теоретических и клинических дисциплин, кафедр, с целью лучшего понимания действия лекарственных препаратов.

А.П. Невская, Т.Т. Зенин

МЕХАНИЗМЫ ДОЛГОВРЕМЕННОЙ ПАМЯТИ

Руководители: Н.П. Лопина, Г. Е. Бордина
Тверской государственной медицинский университет
Кафедра химии

Память – это способность живых организмов запоминать, сохранять и воспроизводить информацию о событиях, воздействовавших на них ранее. Основой долговременной памяти является энграмма, своеобразный «отпечаток» памяти, который формируется в результате обучения.

Молекулярные теории памяти:

1) Теория информационных молекул памяти.

Первые гипотезы, которые связали запоминание с биохимическими изменениями в нервной ткани, были созданы на основе опытов Г. Хидена. Согласно этим опытам, образование следов памяти происходит вместе с изменением свойств РНК и белков в нейронах.

2) Гипотеза переноса памяти

В 1970-е годы Д. Унгар предположил, что определенные белки принимают участие в хранении энграмм памяти. Основное положение гипотезы: «Один пептид — один акт поведения»

Медиаторная теория памяти.

Р.И. Кругликов в 1986 г. разработал концепцию, согласно которой холинэргическая медиаторная система находится под модулирующим влиянием со стороны моноаминоэргической системы. Под этим влиянием происходит запуск цепи биохимических внутриклеточных процессов, которые приводят к более эффективному образованию энграмм.

Гипотеза Линча и Бодри.

Повторная импульсация в нейроне сопровождается увеличением концентрации кальция в постсинаптической мембране, что приводит к расщеплению одного из ее белков. В результате этого освобождаются ранее неактивные глутаматрецепторы. За счет увеличения их числа возникает состояние повышенной проводимости синапса.

Таким образом, память нельзя рассматривать как нечто статичное, находящееся строго в одном месте или в небольшой группе клеток. Память существует в динамичной и относительно распределенной форме.

13-КОНСТАНТНАЯ СХЕМА РАСЧЕТА СВОЙСТВ АЛКАНОВ $C_{11}H_{24}$

Руководитель Ю.Г. Папулов

Тверской государственной университет

Кафедра физической химии

В данной работе впервые сформирован гомологический ряд 159 алканов $C_{11}H_{24}$ и построена аддитивная схема расчета их физико-химических свойств, учитывающая влияние валентных взаимодействий атомов, невалентных взаимодействий через один атом и парных и кратных невалентных взаимодействий через два и три атома по цепи молекулы алкана (см. таблицу). По полученной формуле впервые проведены численные расчеты восьми физико-химических свойств 159 алканов $C_{11}H_{24}$, неизученных экспериментально.

$$P_{C_nH_{2n+2}} = ncrc + nc-crc-c + nc-c-crc-c-c + nc-c(c)-crc-c(c)-c + \sum_{i=1} \sum_{j=0, m=2; i \leq m} n_{i-j=0-m} P_{i-j=0-m} \quad (1)$$

Таблица 1. Числовые значения параметров аддитивной схемы (1) для расчета физико-химических свойств алканов $CH_4 - C_{11}H_{24}$.

Параметры схемы в графах	dH°_f газ кДж/моль	$\Delta H_{\text{атом}}$ кДж/моль	ЛНТК кал/моль	$L^{\circ}298$ кДж/моль	dH°_f , жид. кДж/моль	Sf, кДж/моль	$\Delta G^{\circ}_{f,298}$ кДж/моль	Lg Kp
nC	-75,484	1664,12	2172,8	5,745	86,332	181,446	-50,453	8,835
X-C	67,957	-503,937	-38,24	1,498	-76,201	-134,031	68,844	-12,158
X-C-X	-13,329	13,329	-1472,2	-1,806	15,640	-8,583	-9,875	1,909
X-C(X)-X	4,439	-4,439	869,45	0,281	-6,555	-4,882	4,887	-1,019
C ₁ -Co-C ₂	-0,917	0,917	170,14	-1,584	-1,045	6,212	-2,532	0,403
C ₁ -Co-C ₃	3,181	-3,181	-5,92	1,239	-1,674	-3,508	3,495	-0,613
C ₁ -Co-C ₄	-3,494	3,494	-47,37	-0,816	1,949	5,487	-2,785	0,530
-C ₂ -Co-C ₂	1,126	-1,126	-293,42	0,968	0,879	-6,236	2,486	-0,467
-C ₂ -Co-C ₃	-2,009	2,009	476,74	-1,466	-1,314	6,371	-1,972	0,349
-C ₂ -Co-C ₄	4,594	-4,594	-782,60	1,944	1,108	-4,977	1,002	-0,124
-C ₃ -Co-C ₃	5,091	-5,091	-783,87	1,137	0,033	-10,861	3,350	-0,504
-C ₃ -Co-C ₄	-3,455	3,455	1264,7	-0,760	-6,464	19,237	1,909	-0,501
C ₄ -Co-C ₄	-6,603	6,603	1682,1	0,331	25,066	-49,320	-8,152	1,444
N Эксп. данных	93x13	93x13	87x13	53x13	53x13	105x13	160x13	99x13
Макс. откл.	7,14	7,14	790,32	7,06	8,61	10,85	12,34	0,898

Каждый коэффициент схемы (1) это число способов наложения цепи определенной длины L_1, L_2, L_3, L_4 и более сложных подграфов на МГ рассматриваемой молекулы (см. табл.1). Подграфами молекул $CH_4 - C_{32}H_{66}$ являются также и сами молекулярные графы молекул исследуемого ряда поскольку, например, граф молекулы $CH_3-CH_2-CH_3$ (атомы водорода „стерты“) является подграфом молекулы $CH_3-CH_2-CH_2-CH_3$, может быть наложен на нее дважды.

13-КОНСТАНТНАЯ СХЕМА РАСЧЕТА ЭНТАЛЬПИЙ ПЛАВЛЕНИЯ И СУБЛИМАЦИИ АЛКАНОВ C₁₁H₂₄

Руководитель Папулов Ю.Г.

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

В данной работе впервые сформирован гомологический ряд 159 алканов C₁₁H₂₄ и построена аддитивная схема расчета их физико-химических свойств, учитывающая влияние валентных взаимодействий атомов, невалентных взаимодействий через один атом и парных и кратных невалентных взаимодействий через два и три атома по цепи молекулы алкана (см. таблицу). По полученной формуле впервые проведены численные расчеты двух физико-химических свойств 159 алканов C₁₁H₂₄, неизученных экспериментально.

$$P_{C_nH_{2n+2}} = nrc + nc - cpc - c + nc - c - cpc - c - c + nc - c(c) - cpc - c(c) - c + \sum_{i=1} \sum_{j=0, m=2; i \leq m} n_{i-j=0-m} P_{i-j=0-m} \quad (1)$$

Таблица 1. Числовые значения параметров аддитивной схемы (1) для расчета физико-химических свойств алканов CH₄ – C₁₁H₂₄.

Параметры схемы в графах	Энтальпия плавления	Энтальпия сублимации	Параметры схемы в графах	Энтальпия плавления	Энтальпия сублимации
nC	-371,806	7,680	-C₂-Co-C₂	827,905	1,119
X-C	469,511	2,037	-C₂-Co-C₃	-1252,434	-1,411
X-C-X	830,964	-3,660	-C₂-Co-C₄	1990,334	1,263
X-C(X)-X	-1111,335	0,010	-C₃-Co-C₃	2382,616	4,595
C₁-Co-C₂	-801,240	-1,307	-C₃-Co-C₄	-3204,076	-7,499
C₁-Co-C₃	418,258	0,529	C₄-Co-C₄	3489,600	18,824
C₁-Co-C₄	-130,913	0,931			
Статистические характеристики					
	Энтальпия плавления		Энтальпия сублимации		
N Эксп. данных	48		50		
Макс. отклонение	1861,66 кал/моль (в точке нонан)		13,90 кДж/моль (в точке н-нона-декан)		
Козф. корреляции	0,97962		0,98788		
Среднеабсолют. знач.	484,20 кал/моль		2,42 к Дж/моль		

Каждый коэффициент схемы (1) это число способов наложения цепи определенной длины L₁, L₂, L₃, L₄ и более сложных подграфов на МГ рассматриваемой молекулы (см. табл.1). Подграфами молекул CH₄-C₃₂H₆₆ являются также и сами молекулярные графы молекул исследуемого ряда поскольку, например, граф молекулы CH₃-CH₂-CH₃ (атомы водорода, стерты) является подграфом молекулы CH₃-CH₂-CH₂-CH₃, может быть наложен на нее дважды т.п.

Д.Ю. Нилов

13-КОНСТАНТНАЯ СХЕМА РАСЧЕТА ЭНТАЛЬПИЙ ОБРАЗОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ АЛКАНОВ C₁₁H₂₄

Руководитель Ю.Г. Папулов

Тверской государственной университет

Кафедра физической химии

В данной работе впервые сформирован гомологический ряд 159 алканов C₁₁H₂₄ и построена аддитивная схема расчета их физико-химических свойств, учитывающая влияние валентных взаимодействий атомов, невалентных взаимодействий через один атом и парных и кратных невалентных взаимодействий через два и три атома по цепи молекулы алкана (см. таблицу). По полученной формуле впервые проведены численные расчеты энтальпий образования кристаллических алканов C₁₁H₂₄ 159 алканов C₁₁H₂₄, неизученных экспериментально.

$$P_{C_nH_{2n+2}} = ncrc + nc-crc-c + nc-c-crc-c-c + nc-c(c)-crc-c(c)-c + \sum_{i=1}^n \sum_{j=0, m=2; i \leq m}^{n-j=0-m} P_{i-j=0-m} \quad (1)$$

Таблица 1. Числовые значения параметров аддитивной схемы (1) для расчета физико-химических свойств алканов CH₄ – C₁₁H₂₄.

Параметры схемы в графах	Энтальпия кристаллических алканов	Параметры схемы в графах	Энтальпия кристаллических алканов
nC	-83,352	-C ₂ -C ₀ -C ₂	-0,725
X-C	65,537	-C ₂ -C ₀ -C ₃	1,458
X-C-X	-9,377	-C ₂ -C ₀ -C ₄	-1,025
X-C(X)-X	4,204	-C ₃ -C ₀ -C ₃	-5,504
C ₁ -C ₀ -C ₂	1,421	-C ₃ -C ₀ -C ₄	16,137
C ₁ -C ₀ -C ₃	1,637	C ₄ -C ₀ -C ₄	-45,647
C ₁ -C ₀ -C ₄	-2,649		
Статистические характеристики			
		Энтальпия кристаллических алканов	
Число экспериментальных данных		50	
Максимальное отклонение		13,82 кДж/моль (в точке нона-декан)	
Коэффициент корреляции		0,99933	
Среднеабсолютное отклонение		2,37 кДж/моль	

Каждый коэффициент схемы (1) это число способов наложения цепи определенной длины L₁, L₂, L₃, L₄ и более сложных подграфов на МГ рассматриваемой молекулы (см. табл.1). Подграфами молекул CH₄-C₃₂H₆₆ являются также и сами молекулярные графы молекул исследуемого ряда поскольку, например, граф молекулы CH₃-CH₂-CH₃ (атомы водорода, стерты) является подграфом молекулы CH₃-CH₂-CH₂-CH₃, может быть наложен на нее дважды т.п.

АГРОХИМИЧЕСКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ЗЕМЕЛЬ ОХОТХОЗЯЙСТВА
«РАМЕШКОВСКОЕ РАЙОННОЕ ОБЩЕСТВО ОХОТНИКОВ И РЫБОЛОВОВ»

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии и земледелия

Рамешковский р-он Тверской обл. традиционно считался сельскохозяйственным. Общая площадь пашни в нем составляла свыше 70 тыс.га. и до конца 80-х годов функционировало 27 коллективных хозяйств (КХ). На начало второго десятилетия нынешнего столетия КХ практически полностью прекратили свое существование, а которые остались, имеют в обработке не более 10-15% пашни от той площади, которую они обрабатывали раньше. В р-не сделана ставка на развитие фермерских и крестьянских хозяйств, хотя они обрабатывают немногим более 7% имеющейся пашни. Еще в меньшей степени, чем пашня, используются природные сенокосы и пастбища. Выведенные из активного с/х оборота земли не остаются совсем не востребованными. Основная площадь их используется охотничьими хозяйствами, и являются кормовой базой для диких животных и боровой птицы. В настоящее время в районе охотничьи угодья занимают лесные, сельскохозяйственные, водные и др. площади, наиболее подходящие по своему значению для обитания диких животных, птиц и рыб. Общественная организация под названием «Рамешковское р-ное общество охотников и рыболовов» занимает площадь 101 тыс. га, что составляет 40% от всей площади р-на. В соответствии с соглашением охотхозяйство осуществляет проведение мероприятий по сохранению охот.ресурсов и среды их обитания, реализует право на их добычу, создание охотничьей инфраструктуры в границах охот.угодий. В нем предусмотрены виды охот.ресурсов, в отношении которых предоставлено право на добычу. К ним отнесены: копытные животные: лось, кабан, косуля; медведи- медведь бурый; пушные животные- волк, лисица, енотовидная собака, рысь, барсук, куница, норка, выдра, хорь, бобр, ондатра, белка, заяц-беляк, заяц-русак; птицы- глухарь, тетерев, рябчик. Мы исследовали агрохимические свойства бывших пахотных угодий, дерново-подзолистых почв (ДПП), в том числе наличие в них тяжелых металлов (табл.). Полученные данные свидетельствуют, что основная площадь их имеет избыточную кислотность (66,8%), среднюю и повышенную обеспеченность подвижным фосфором (71,7%), низкую и среднюю обеспеченность обменным калием (79,3%). Применительно к зольным элементам, некоторое возрастание их в перегнойном слое почвы возможно в результате привнесения из нижележащих горизонтов корневыми системами растений. Кислотность же необходимо ликвидировать посредством внесения известковых материалов.

Таблица. Обеспеченность ДПП охотхозяйства ТМ, мг/кг почвы, подвижные формы

№ п/п	Обеспеченность	Медь		Цинк		Марганец	
		га	%	га	%	га	%
1	Низкая	527	62,7	840	100	-	-
2	Средняя	313	37,3	-	-	778	92,6
3	Высокая	-	-	-	-	62	7,4

В.В. Орлов

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СТИМУЛЯТОРОВ РОСТА РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ НА РАННИЕ ЭТАПЫ РАЗВИТИЯ *LINUM USITATISSIMUM*

Руководитель Е.В. Ожимкова

Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии и химии

Одним из перспективных эффективных приемов повышения урожайности сельскохозяйственных культур является применение росторегулирующих веществ, балансирующих питание растений до оптимального уровня. Данный прием приобретает особую актуальность при производстве экологически чистой продукции, так как позволяет обеспечить положительное влияние на сельскохозяйственные растения без применения минеральных удобрений и химических средств реактивов [1].

Лен культурный широко возделывается в северных и средних широтах европейской части России, в частности, в Тверской области [2]. В последние годы во всем мире возрос интерес к использованию семян льна в связи с их лечебными и пищевыми свойствами, а также к использованию котонизированного льняного волокна в текстильной промышленности.

В представленной работе на примере нескольких сортов льна масличного и льна-долгунца исследовано влияние стимуляторов роста растений различной химической природы (раствор Кнопа, коммерческое бактериальное удобрение, а также водные и спиртовые экстракты *Picea abies* в различных концентрациях) на ранние этапы развития *Linum usitatissimum* при различных температурных и световых режимах. В качестве контрольного эксперимента был проведен опыт без стимуляторов роста. Эффективность исследуемых стимуляторов оценивали по скорости появления зародышевых корней и побегов, а также по повышению устойчивости семян к пониженным температурам.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гармаш Н.Ю. Микроэлементы в интенсивных технологиях производства зерновых культур / Н.Ю. Гармаш, Г.А. Берестов, Г.Б. Морозова // Агрехимический вестник. 2011. № 5
2. Семенова Е.Ф. Аллелопатическая оценка льна культурного *Linum usitatissimum* L. / Е.Ф.Семенова, Е.В. Преснякова, Н.А. Морозкина, Т.М. Фадеева // Научно-технический бюллетень Всероссийского научно-исследовательского института масличных культур. 2011. Вып. 1

М.Н. Павлов

ФОРМИРОВАНИЕ УРОЖАЙНОСТИ СОРТОВ ТОПИНАМБУРА В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ФОНА МИНЕРАЛЬНОГО ПИТАНИЯ И ФОТОПЕРИОДИЗМА

Руководитель З.И. Усанова

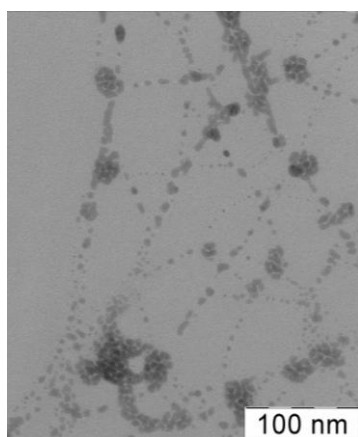
Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра технологии производства, переработки и хранения продукции
растениеводства

Изучено влияние фотопериодизма на формирование урожайности разных по скороспелости сортов топинамбура (Скороспелка и Интерес) на двух фонах минерального питания (без удобрения и расчетная доза на урожайность 40 т/га клубней + 40 т/га ботвы) в трехфакторном полевом опыте на опытном поле ТГСХА в 2014- 2015 г. Исследованы два срока (на 10-й и на 20-й день после всходов) и четыре продолжительности сокращения длины дня: без затенения (контроль), 10, 20 и 30 дней. Показано, что наибольший урожай клубней формируется у сорта Скороспелка (до 47,7 т/га), а ботвы - у сорта Интерес (до 54,6 т/га). Внесение удобрения позволило увеличить урожай ботвы и клубней. В 2014 году, в условиях засушливого лета данный фактор оказал слабое влияние на урожайность топинамбура, в 2015 при увеличении количества влаги прибавки в урожае были более значительными. При этом на неудобренном фоне в среднем за два года и по вариантам затенения сформирована урожайность по сорту Скороспелка 17,4 т/га зеленой массы и 30,2 т/га клубней, по сорту Интерес 36,8 т/га зеленой массы и 21,7 т/га клубней, а на удобренном – у сорта Скороспелка 25,3 и 44,1 т/га, у сорта Интерес – 48,4 и 27,8 т/га. Наиболее сильно реагирует на затенение позднеспелый сорт Интерес, у которого наблюдалось цветение главных побегов (с 4 сентября) при более продолжительном затенении (30 дней) на 20-й день после всходов. Меньшая продолжительность (10 дней) при том же сроке позволяет получить наибольшую прибавку по урожаю клубней (до 5,1 т/га – 19,0%), а меньший срок (на 10-й день после всходов) при продолжительности 20 дней обеспечивает максимальную прибавку урожая ботвы (до 9 т/га – 20,0 %). Реакция растений сорта Скороспелка слабее и неоднозначна по годам. В 2014 году 20-и дневное затенение на 20-й день после всходов позволило получить наибольшую прибавку в урожае клубней (до 9,3 т/га – 24,7%), а на 10-й день после всходов при той же продолжительности затенения дало максимальную прибавку в урожае ботвы (до 3,1 т/га – 12,9 %). В 2015 году максимальные прибавки урожая клубней получены при затенении на 10 день после всходов в течении 30 дней (5,1 т/га - 10 %) и на 20-й день в течении 10 дней (5,4 т/га - 11 %); зеленой массы - при затенении на 20 день после всходов в течении 10 дней (2,7 т/га - 10 %).

Т.В. Перезова

ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЕ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ L-ЦИСТЕИНА И НИТРИТА СЕРЕБРА

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



ПЭМ микрофотография
образца геля на основе
 $Cys-AgNO_2$ (1:1)

Гелеобразование в низкоконтрированных растворах на основе низкомолекулярных желаторов (простейших аминокислот и их производных) – редкое явление. В рамках данной работы были изучены процессы самоорганизации при взаимодействии L-цистеина с нитритом серебра ($AgNO_2$) с привлечением широкого комплекса инструментальных методов анализа: вискозиметрии, рН-метрии, динамического светорассеяния (ДСР), измерения Z-потенциала, просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), УФ и Фурье-ИК спектроскопии.

Открыто явление гелеобразования в низкоконтрированных (0.01 М) водных растворах L-цистеина и $AgNO_2$ при соотношениях компонентов 1:1 и 1.00:1.25.

Измерения показали, что значения вязкости и скорость гелеобразования для двух систем оказались различными. Структурирование системы при молярном соотношении «цистеин-нитрит» (1:1) происходит быстрее, но в то же время образовавшийся гидрогель оказался менее прочным, чем гель с избытком серебра. Общий заряд частицы оказался положительным, а Z-потенциал в среднем составил 30 милливольт. Исследование величины рН в рассматриваемых системах показало, что наблюдается тенденция к увеличению значения рН для образцов с избыточным содержанием серебра в растворе. С ростом времени стояния в обоих случаях наблюдается уменьшение величины рН. Предложен механизм формирования гелей, заключающийся в формировании супрамолекулярных цепей и фрактальных кластеров из молекул меркаптида серебра и построении затем пространственной гель-сетки (см. рис.).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности (проект №4.1325.2014/К), государственного задания "Обеспечение проведения научных исследований" на базе ЦКП Тверского государственного университета и Германо-российского междисциплинарного научного центра G-RISC

Н.С. Плюхликова

ПАМЯТИ ВЕЛИКИХ УЧЕНЫХ-ХИМИКОВ

Руководители: доц.Н.П. Лопина, доц.Г. Е. Бордина
Тверской государственной медицинский университет
Кафедра химии

В 2015 году исполнилось бы 165 лет со дня рождения двум великим ученым-химикам Ле Шателье и М.Г. Кучерову.

Анри Луи Ле Шателье внес значительный вклад в химию цементов, процессов горения и изучение многих реакций между газами; одним из первых применил термодинамику к химии и металлургии. Ле Шателье занимался проблемой обжига и затвердевания цемента. На основе своих исследований он создал теорию затвердевания цемента, иначе называемой теорией «кристаллизации». В 1881 г. совместно с М.Бертло и Ф. Малларом он занялся исследованием процессов воспламенения, горения и взрыва.

В 1884 г. Ле Шателье сформулировал принцип динамического равновесия, ныне носящий его имя. При активном участии Ле Шателье физическая химия и химическая технология превратились в самостоятельные, активно развивающиеся области науки.

Ле Шателье был удостоен многих наград: в 1886 г. он стал кавалером ордена Почётного легиона, в 1916 г. получил медаль Дэви Лондонского королевского общества.

Имя М.Г. Кучерова занимает одно из первых мест в истории органического синтеза. Открытая им реакция превращения ацетилен в уксусный альдегид в присутствии ртутных солей (1881) положила начало техническому использованию ацетилен в качестве исходного продукта для получения многочисленных химических продуктов. Особенно мощное развитие в результате открытия М.Г. Кучерова получила промышленность синтетической уксусной кислоты, используемой сейчас для получения сотен различных веществ. М.Г. Кучеров известен работами в области непредельных углеводов. Однако исследования Кучерова показали, что такой механизм реакции маловероятен. Галоидалкилы с галогеном, стоящим у углеводорода с кратной связью, трудно вступают в реакцию замещения, т.к. связь атома галогена с углеродом прочна. Проведенный опыт гидратации ацетилен блестяще подтвердил предложение ученого.

За открытие реакции гидратации ацетилен в присутствии солей ртути М.Г. Кучеров в 1885 г получил премию Русского физико-химического общества.

НЕКОТОРЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗУЧЕНИЯ ВЛИЯНИЯ СМЕСЕЙ ОСАДКА СТОЧНЫХ ВОД С ОРГАНИЧЕСКИМИ НАПОЛНИТЕЛЯМИ НА ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДЕРНОВО-ПОДЗОЛИСТЫХ ПОЧВ

Руководитель И.Н. Барановский
Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии и земледелия

В настоящее время одной из важных проблем экологической службы страны является выработка приемлемых и безопасных технологий утилизации осадков сточных вод, получаемых в процессе очистки сточных канализационных вод. Нами изучается влияние смесей осадков сточных вод (ОСВ) г. Твери с органическими наполнителями (опилками, торфом, соломой) в разном соотношении на питательный режим почвы и урожайность опытной культуры (однолетние травы на зеленый корм). Опыт заложен на дерново-подзолистой супесчаной почве на экспериментальном поле ТГСХА. Полученные данные по содержанию в почве подвижных форм азота, фосфора, калия, а также органического вещества и урожайность зеленой массы однолетних (табл. 1) свидетельствуют, все смеси ОСВ с органическими наполнителями обеспечили заметно большее накопление в почве исследуемых элементов, по сравнению с контролем. В наибольшей степени это отмечено на вариантах ОСВ с торфом. Особое значение этих смесей для дерново-подзолистых почв имеет наличие в них органического вещества, оказывающего многогранное влияние на плодородие почвы. На фоне всех удобренных вариантов его содержание возросло на 6-18%, притом, чем шире отношение ОСВ: наполнитель, тем ниже процентное возрастание в почве перегноя. Максимальная урожайность зеленой массы трав (473 ц/га) сформировалась на вариантах со смесью ОСВ с торфом, прибавка контролю 62-80%

Таблица 1 – Содержание подвижных форм питательных веществ в слое 0-20 см и урожайность опытной культуры, средние показатели

№ п/п	Вариант опыта	NO ³⁻ , мг/кг	NH ⁴⁺ , мг/кг	P ₂ O ₅ , мг/кг	K ₂ O, мг/кг	C _{орг} , %	Урожайность, ц/га
1	Контроль	9,0	9,95	230,8	119,3	1,27	275
2	ОСВ:опилки 1:1	12,7	14,9	258,5	141,7	1,48	473
3	ОСВ:опилки 1:2	12,1	13,9	250,6	136,2	1,42	445
4	ОСВ:опилки 1:3	10,9	12,5	246,4	131,1	1,35	430
5	ОСВ:торф 1:1	14,6	17,0	259,7	160,2	1,50	495
6	ОСВ:торф 1:2	13,8	15,5	251,7	147,7	1,46	462
7	ОСВ:торф 1:3	12,8	13,6	236,0	154,3	1,40	445
8	ОСВ:солома 1:1	14,1	16,8	254,7	141,1	1,46	442
9	ОСВ:солома 1:2	13,7	15,3	245,5	128,6	1,42	420
10	ОСВ:солома 1:3	13,0	14,0	240,5	64,5	1,38	380
	Сред. значение	11,5	13,1	247,4	139,7	1,41	427

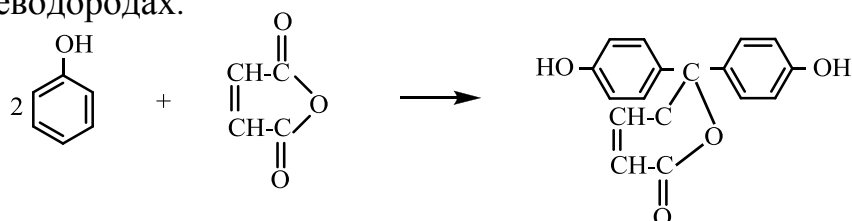
Е.В. Пономарев

СИНТЕЗ ФЕНОЛМАЛЕИНА И ПОЛИМЕРОВ НА ЕГО ОСНОВЕ

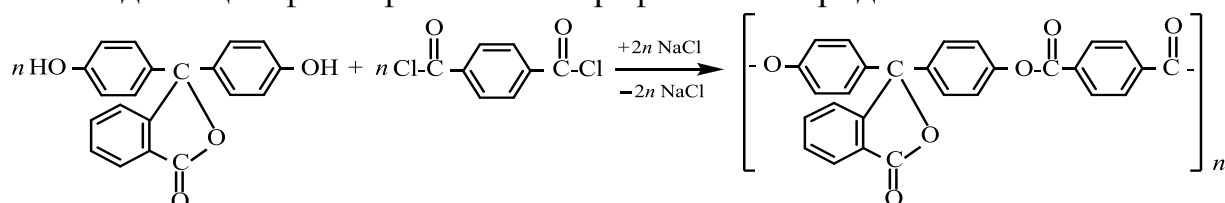
Руководитель Б.К. Крупцов

Тверской Государственный технический университет
Кафедра технологии полимерных материалов

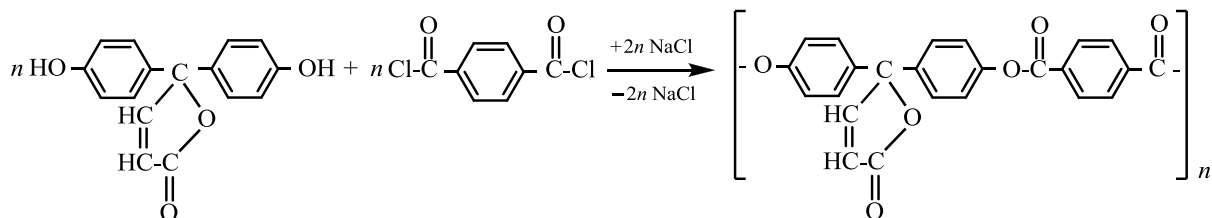
Проведены работы по оптимизации методики синтеза фенолмалеина конденсацией фенола с малеиновым ангидридом. Наилучшие выходы наблюдались при соотношении компонентов 5 : 3 температуре 125-135 °С, время конденсации не менее 8 часов, в качестве катализатора использовалась концентрированная серная кислота (несколько капель). Полученный продукт представляет собой порошок белого цвета, с температурой плавления 301 °С, растворимый в спиртах, кетонах и галогенуглеводородах.



Определены физико-химические характеристики полученного бисфенола. Проведены пробные синтезы полимера полиарилата, конденсацией фенолмалеина с терефталойлхлоридом, аналогично реакции поликонденсации фенолфталеина с терефталойлхлоридом.



полиарилат на основе фенолфталеина



полиарилат на основе фенолмалеина

Работа продолжается. Планируется в дальнейшем разработка методики получения полиарилата на основе фенолмалеина.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Webster and Kamstra, Proc. S. D. Acad. Sci., 30, 40 (1951).

И.В. Попов

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯВЛЕНИЯ СМАЧИВАНИЯ В ТВЕРДОМ СОСТОЯНИИ

Руководитель В.М. Самсонов

Тверской государственный университет

Кафедра общей физики

Явления смачивания и растекания наноразмерных капель различных металлов широко используются в различных технологических процессах (пайка, сварка). Явление смачивания в твердом состоянии (СТС) известно в гораздо меньшей степени [1]. В данной работе изучалась эволюция системы Au(наночастица)/Au(подложка) при температурах, заведомо ниже макроскопической температуры плавления Au.

Для изучения СТС были проведены молекулярно-динамические компьютерные эксперименты с использованием программы, разработанной А.Г. Бембелем и В.М. Самсоновым [2]. Она основывается на использовании алгоритма скоростей Верле и потенциала сильной связи. В ходе экспериментов наночастицы Au, содержащие 5000 атомов, помещались на подложку из Au с небольшим зазором. После формирования локального контакта между частицей и подложкой начиналось растекание. Подложка выступала в двух вариантах: жесткая (все атомы закреплены) и с подвижным слоем. Были получены соответствующие значения краевых углов смачивания. Для данной системы имеет место неполное смачивание. В случае подложки с незакрепленными атомами наблюдалось также десмачивание в верхнем монослое подложки.

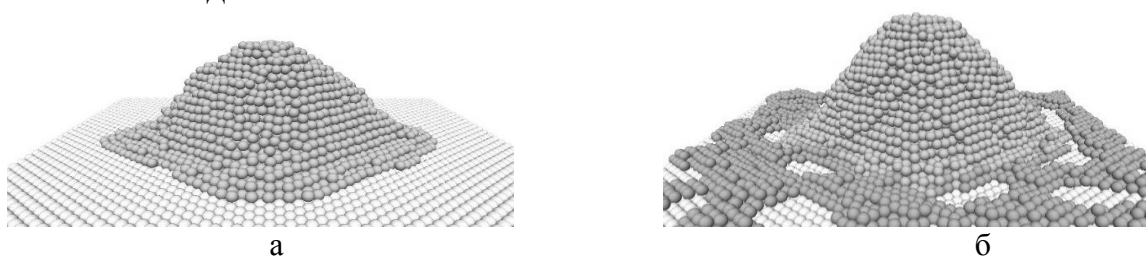


Рис. 1. Конечные конфигурации частицы Au, содержащей 5000 атомов на грани Au (100) при температуре $T=900$ К: а — жестко закрепленная подложка, б — подвижный слой атомов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Missaen J.M. Solid state spreading in the Cu/Cu system. // Journal of materials science. 2005. V 40. № 9. P. 2277-2284.
2. Бембель А.Г. Молекулярно-динамическое моделирование структурных и фазовых превращений в свободных нанокластерах и наночастицах на поверхности твердого тела. Дисс. к.ф.-м.н. Тверь, 2011. 173 с.

О.И. Постнова

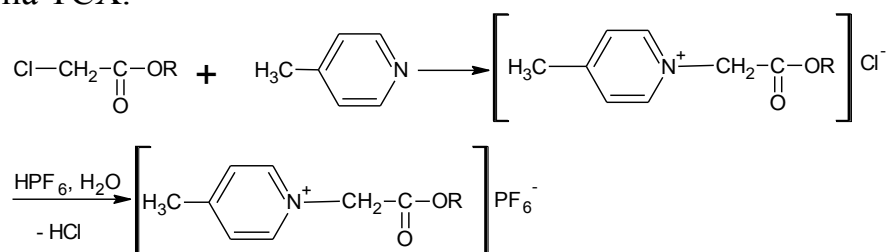
ГЕКСАФТОРФОСФАТЫ N-АЛКОКСИКАРБОНИЛМЕТИЛ Г-ПИКОЛИНИЯ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ АНТИМИКРОБНЫЕ ПРЕПАРАТЫ

Руководитель О.Е. Журавлев

Тверской государственной университет

Кафедра органической химии

Четвертичные аммониевые соединения, содержащие в молекуле один или два высших радикала, уже много лет применяют в медицинской практике в качестве противомикробных средств. Несомненно, что на биологическую активность четвертичных солей аминов оказывает влияние как природа катиона, так и аниона, поэтому замена традиционных галогенид-анионов в структуре соли на объемные типа $[PF_6]^-$, $[BF_4]^-$, $[FeCl_4]^-$ и другие анионы должна сказаться на изменении их биологической активности. Подобные соединения – четвертичные соли пиридиния, имидазолия, содержащие объемные гидрофобные или гидрофильные анионы и находящиеся в жидком состоянии в широком интервале температур, называемые ионными жидкостями (ИЖ). Ионные жидкости, содержащие в качестве катиона пиридиниевый фрагмент с длинноцепочечным алкильным заместителем, могут быть потенциальными противомикробными агентами. В настоящей работе проведен синтез хлоридов и гексафторфосфатов N-алкоксикарбонилметил γ -пиколиния и изучена их антимикробная активность. На рисунке представлена схема синтеза хлоридов и гексафторфосфатов N-алкоксикарбонилметил γ -пиколиния. Все синтезированные соединения охарактеризованы по данным ИК-спектроскопии и элементного анализа. Чистота соединений подтверждена ТСХ.



где R: C_2H_5 , C_4H_9 , C_6H_{13} , $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$, $\text{C}_{12}\text{H}_{25}$

Антимикробную активность полученных соединений изучали методом диффузии в агар на среде Muller-Hinton по отношению к различным тест-культурам микроорганизмов. Проведенное исследование показало, что замена аниона Cl^- на PF_6^- в составе солей четвертичного γ -пиколиния приводит к увеличению бактериостатического действия соединений.

И.А. Пресняков

НОВЫЙ СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ НАНОКРИСТАЛЛОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Руководитель О.Е. Журавлев

Тверской государственной университет
Кафедра органической химии

Полупроводниковые нанокристаллы с размером в интервале 2–15 нм, состоящие из 10^3 – 10^5 атомов, созданные на основе неорганических полупроводниковых материалов Si, InP, CdSe, ZnS и т. д., покрытые монослоем стабилизатора, получили название «квантовые точки» (КТ).

Уникальные оптические свойства квантовых точек делают их перспективным материалом для применения в самых различных областях. Одними из наиболее перспективных областей применения квантовых точек являются биология и медицина.

Метод коллоидного синтеза обладает рядом преимуществ: возможностью контролировать процесс роста наночастиц, например, с помощью варьирования температурных параметров, получать наночастицы в виде порошка; относительно невысокими температурами синтеза; возможностью синтезировать наночастицы с небольшим разбросом геометрических параметров (дисперсия среднего размера 5–10%).

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

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

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках проектной части Государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 4.1325.2014/К)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Васильев Р.Б., Дирин Д.Н.// Квантовые точки: синтез, свойства и применение. Методические материалы. М. 2007. 34 с.

И.И. Проценко, А.О. Зайковская

ПОЛУЧЕНИЕ ПОЛУПРОДУКТОВ СИНТЕЗА КОМПОНЕНТОВ ЖИДКИХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ТОПЛИВ ПУТЕМ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ КОНВЕРСИИ ЛЕВУЛИНОВОЙ КИСЛОТЫ

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

В настоящее время наблюдается растущий интерес к производству биотоплива на основе левулиновой кислоты (ЛК). ЛК является важным соединением, которое может быть получено с помощью кислотного гидролиза лигноцеллюлозной биомассы [1], и может служить предшественником в синтезе гамма-валеролактона (ГВЛ). ГВЛ – весьма перспективный универсальный промежуточный продукт для производства топливных добавок и химикатов, таких как ароматические углеводороды (топливные присадки), алкены с короткой цепью (топливо для реактивных двигателей) и алканы с длинной цепью (дизельное топливо) [2]. Вследствие высокого интереса к ГВЛ, его эффективное производство в настоящее время является предметом интенсивных исследований, сконцентрированных на восстановлении ЛК и ее сложных эфиров молекулярным водородом в присутствии металлсодержащих катализаторов. Современные исследования показали, что наиболее активным и селективным катализатором гидрирования ЛК является Ru/C [3]. Однако если реакцию проводят в мягких условиях и в экологически чистых растворителях (воде), то для увеличения производительности требуется добавление со-катализаторов или повышение температуры. Необходимо отметить, что ключевым фактором, оказывающим влияние на поведение Ru-содержащих катализаторов селективного гидрирования ЛК, является размер частиц Ru. Поэтому, альтернативой промышленному катализатору Ru/C могут служить новые катализаторы на основе частиц Ru наноразмерного диапазона, стабилизированных полимерной матрицей сверхсшитого полистирола (СПС), которые обладают огромной площадью поверхности и обеспечивают высокую каталитическую активность. Обнаружено, что синтезированные в рамках проводимых исследований Ru-содержащие катализаторы на основе СПС не уступают по своим характеристикам Ru/C и могут служить основой совершенствования процесса синтеза ГВЛ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 15-08-01469).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gürbüz E.I. [et al.] // ChemSusChem. 2011. Vol. 4. Iss. 3. P. 357-361.
2. [Hengst](#) K. [et al.] // Applied Catalysis A: General. 2015. Vol. 502. P. 18-26.

А.С. Радин

МНОГОЦЕЛЕВОЙ ИНДИКАТОР АММИАКА В ВОЗДУХЕ

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской Государственный университет

Кафедра неорганической и аналитической химии

Напряженная экологическая ситуация требует создания чувствительных и селективных методов анализа. С минимальными затратами оперативно проводить контроль загрязнений атмосферы позволяют газовые сенсоры, работа которых может быть основана на разных механизмах. Наиболее перспективные являются сенсоры химического типа, характеристики которых изменяются в зависимости от концентрации регистрируемого компонента атмосферы. Аналитический процесс включает адсорбцию на чувствительном слое молекул определяемого вещества и последовательность взаимообусловленных химических реакций. Одним из распространенных в промышленности веществ является аммиак. Аммиак используется во всех отраслях промышленности, производство азотной кислоты и удобрений, производство аммиачной воды, аммиак применяется также как хладагент в промышленных, профессиональных и даже бытовых холодильниках. Данный проект был направлен на создание универсального индикатора аммиака, который может быть использован как самостоятельное изделие, так и в качестве визуального индикатора газообразного аммиака для контроля за загазованностью парами аммиака и нахождения течей из трубопроводов ресиверов и др. емкостей, содержащих жидкий, газообразный и водный растворы аммиака, а также в качестве чувствительного элемента в составе первичных преобразователей для газоанализаторов аммиака. Задача была реализована путем разработки индикатора аммиака, работа которого основана на обратимом изменении рН среды при взаимодействии кислотно-основного индикатора бром-тимолола синего с аммиаком, в ходе которого в видимом диапазоне плавно и обратимо изменяется цвет индикатора, в зависимости от концентрации аммиака. Разработан способ серийного изготовления избирательной индикаторной ленты, которая обратимо и избирательно взаимодействует с аммиаком, которую можно нарезать на отдельные индикаторы, и определять концентрацию аммиака визуальным или посредством оптопары, состоящей из светодиода и фотоприемника. Благодаря низкой стоимости материалов и простоте технологического процесса, данная разработка может быть очень быстро внедрена в серийное производство индикаторов, и первичных преобразователей, на основе которых можно изготавливать газоанализаторы аммиака. Как уже было сказано в предыдущем разделе изменение цвета лежит в видимом спектральном диапазоне длин волн $7 \cdot 10^{-5} - 4 \cdot 10^{-5}$ см. Данный переход дал возможность разработать простую оптопару, состоящую из дешевых фотоприемников и светодиодов. На основе такой оптопары могут быть созданы первичные преобразователи аммиака, которые могут быть совместимы с уже серийно выпускающимися газоанализаторами.

А.А. Раенков

ИЗМЕРИТЕЛЬ БОЛЬШИХ СОПРОТИВЛЕНИЙ

Руководитель О.В. Малышкина
Тверской Государственный университет
Кафедра прикладной физики

В настоящее время изоляционные материалы широко применяются при изготовлении различных коммуникаций (провод, кабель и т.п.). Именно они являются защитным барьером от поражения электрическим током. Поэтому при выполнении электромонтажных работ, необходимо проверять качество изоляционных материалов. Для этого применяются специальные приборы – тераомметры.

Цель нашей работы – разработать концепцию тераомметра, измеряющего большие сопротивления на современной технологической базе. В отличие от типичных тераомметров [1], построенных на вакуумных лампах, основу нашего прибора составляют микросхемы.

Разрабатываемое устройство (рис.1) состоит из трёх принципиальных схем: схема источника питания, преобразователь напряжения, усилитель малого тока. Главным преимуществом устройства является диапазон измерительных напряжений с шагом 10–100–1000 В (в ламповых максимальное измерительное напряжение не более 100 В), при этом диапазон измеряемых сопротивлений 10^3 – 10^{13} Ом. Применение микросхем позволяет уменьшить энергопотребление устройства и улучшить такие параметры, как стабильность показаний и точность измерений.

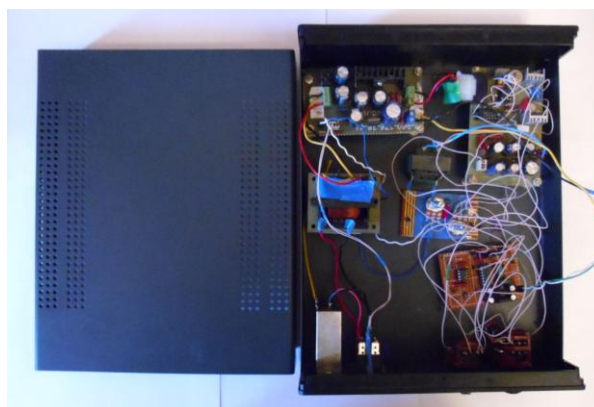


Рис.1 Внутреннее устройство прибора

Данный прибор может применяться в следующих отраслях: энергетика, промышленность, научные исследования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Грибанов Ю. И. Измерение слабых токов, зарядов и больших сопротивлений: Массовая радио-библиотека, выпуск 459 / Ю. И. Грибанов – М.: Книга по Требованию, 2012. – 82 с.

Б.Л. Рамазанов

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ХЕЛАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ И УДОБРЕНИЙ НА ДЕРНОВО-ПОДЗОЛИСТОЙ ПОЧВЕ

Руководители О.В. Смирнова, Т.И. Смирнова
Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии и земледелия

Получение высоких урожаев сельскохозяйственных культур на дерново-подзолистых почвах невозможно без использования эффективных органических или минеральных удобрений, а также биологически активных соединений (например, хелатных комплексов с некоторыми эффективными лигандами, одним из которых является ЭДДЯК – этилендиаминдиантарная кислота). *Цель исследования:* изучение действия разных форм химических соединений селена на разных фонах питания на агрохимические показатели почвы и урожайность опытной культуры. Исследования проводились в 2015 г. на экспериментальном участке с общей площадью – 100 м². Площадь учетной делянки составила 2 м², повторность вариантов – четырехкратная, расположение делянок – рендомизированное. Агрохимическая характеристика почвы: гумус – 2,3-2,4%; содержание фосфора – 202-205 мг/кг, калия – 130-140 мг/кг; рН_{kcl} – 5,8-6,0. Схема опыта включала варианты: контроль (без удобрений и опрыскивание растений H₂O); опрыскивание растений H₂O или одним из следующих растворов: Na₂SeO₃, ЭДДЯК, Se-ЭДДЯК на разных фонах питания: минеральном и органоминеральном в сравнении с вариантами без внесения удобрений в почву. Доза органоминерального удобрения составляла 700 кг/га, дозы минеральных удобрений рассчитывались с учетом химического состава агрогумата. Химический анализ показал, что агрогумат калия обладал слабощелочной реакцией, высоким содержанием азота (2,75%) и низким – фосфора (0,36%). Высокое количество калия в удобрении (8,15%) связано с особенностями технологий его получения. В течение вегетационного периода количество нитратного азота, подвижного фосфора и обменного калия снижалось с июня по август. При этом наибольшим содержанием питательных элементов в течение всех периодов наблюдений отличался вариант с минеральными удобрениями и комплексонатом селена (в среднем на 25-45% по отношению к контролю и на 10-18% по сравнению с органоминеральным фоном). Наибольшая урожайность плодов кабачков (3,79 кг/м² и 3,59 кг/м²) и прибавка к контролю (2,61 кг/м² и 2,1 кг/м²) получены на вариантах с применением Se-ЭДДЯК на фоне минеральных удобрений или агрогумата, а наименьшие значения – на варианте с комплексоном ЭДДЯК и агрогуматом калия (1,69 кг/м² с прибавкой 0,51 кг/м² соответственно).

Д.И. Рыбаков, С.А. Васильев

КОНФИГУРАЦИИ МАЛЫХ КЛАСТЕРОВ ГЦК-МЕТАЛЛОВ:
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Руководитель В.М. Самсонов

Тверской государственной университет
Кафедра общей физики

В продолжение предыдущих работ [1, 2] осуществлялось молекулярно-динамическое моделирование малых нанокластеров для различных металлов. Цель данного исследования являлось определения различных равновесных конфигураций нанокластеров ГЦК металлов в диапазоне размеров $N=10-60$ атомов. Полученные результаты свидетельствуют о наличии несферических конфигураций для некоторых кластеров ($N=19$). Также проведено аналогичное исследование для наночастиц, находящихся в поле силовой подложки.

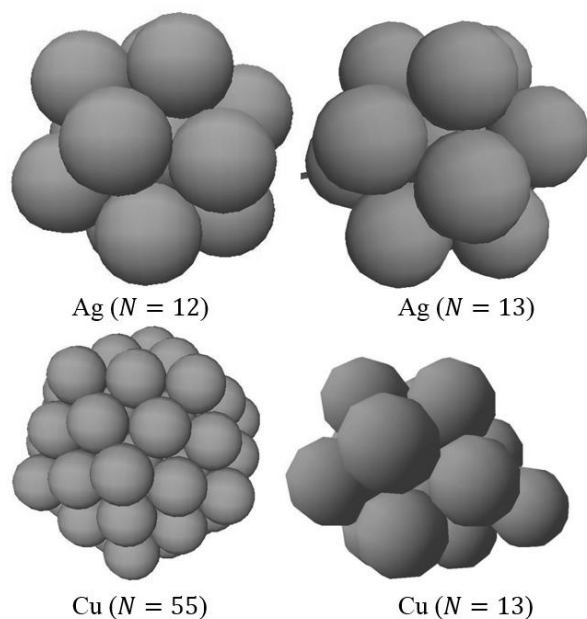


Рис. 1. Некоторые равновесные конфигурации различных кластеров ГЦК-металлов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Васильев С.А., Рыбаков Д.И. Структурные магические числа для нанокластеров ГЦК-металлов: молекулярно-динамическое моделирование. // Тезисы докладов XXII Каргинских чтений Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых «Физика, химия и новые технологии», 2015. С. 27.
2. Васильев С.А., Рыбаков Д.И., Самсонов В.М. Структурные магические числа для нанокластеров переходных металлов: атомистическое моделирование. // Материалы международной научно-технической конференции «INTERMATIC-2014» 1-5 декабря 2014 г., Москва. С. 26-28.

И.И. Рыбаков

ГАЗОВЫЙ СЕНСОР НА ДВУОКИСЬ СЕРЫ

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет

Кафедра неорганической и аналитической химии

Контроль содержания паров SO_2 в воздухе имеет важное значение в экологическом и технологическом плане. Важным элементом для подобного рода мониторинга является газовый сенсор с откликом на SO_2 . Поэтому целью настоящей работы было создание резистивного газового сенсора с откликом на пары SO_2 на основе полианилина.

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

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

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

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

Показана возможность изготовления газового сенсора на SO_2 на основе плёнки полианилина.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сенсор 3E-HCl-[электрон. Ресурс]-режим доступа: <http://www.analitika-servi.irnd.ru/page506.html>
2. Matsuguchi M., Okamoto A., Sakai Y.// Sens. And Actuators. B. 2003. v. 94, №1. С. 46-52.

М.О. Савельев

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ В РАСТВОРАХ L-ЦИСТЕИНА И ПЕРХЛОРАТА СЕРЕБРА

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

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

В работе изучили процесс комплексообразования в системе на основе водных растворов L-цистеина и перхлората серебра с помощью УФ спектроскопии и динамического светорассеяния (ДСР).

Для исследования были получены 12 образцов с фиксированной концентрацией цистеина (3 мМ), при этом концентрацию перхлората серебра варьировали в широких пределах.

№	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Cys	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6
AgClO ₄	0,4	0,45	0,5	0,6	0,65	0,7	0,75	0,8	0,9	1	1,1	1,2

Установлено, что в результате смешивания водных растворов исходных компонентов при определенном молярном соотношении образуются не растворимые в воде комплексы. Образцы, не образовавшие осадок, были исследованы с помощью метода УФ спектроскопии в течение 30 мин сразу после смешивания исходных компонентов и через 1 день. Согласно спектральным данным в спектрах образцов (1,2,3) наблюдается увеличение интенсивности двух полос поглощения с максимумами ≈ 230 и 270 нм. Образцы 11 и 12 с соотношением компонентов 1:1,83; 1:2 имели желтоватый оттенок. УФ спектроскопия зафиксировала увеличение двух характеристических полос поглощения с максимумами ≈ 220 и 310 нм. Образцы под номерами 4, 5, 6, 7, 10 выпали в осадок, а образцы 8 и 9 опалесцируют. Методом ДСР обнаружено, что в данных системах образуются агрегаты с бимодальным распределением частиц по размерам.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности (проект №4.1325.2014/К), государственного задания "Обеспечение проведения научных исследований" на базе ЦКП Тверского государственного университета

К.Е. Сальникова

ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ГИДРИРОВАНИЯ ФУРФУРОЛА

Руководитель Лакина Н.В.

Тверской Государственный Технический Университет
Кафедра биотехнологии и химии

Каталитическое гидрирование фурфурола представляет собой промышленно перспективный процесс получения биотоплив и ценного сырья химической промышленности (Рис.).

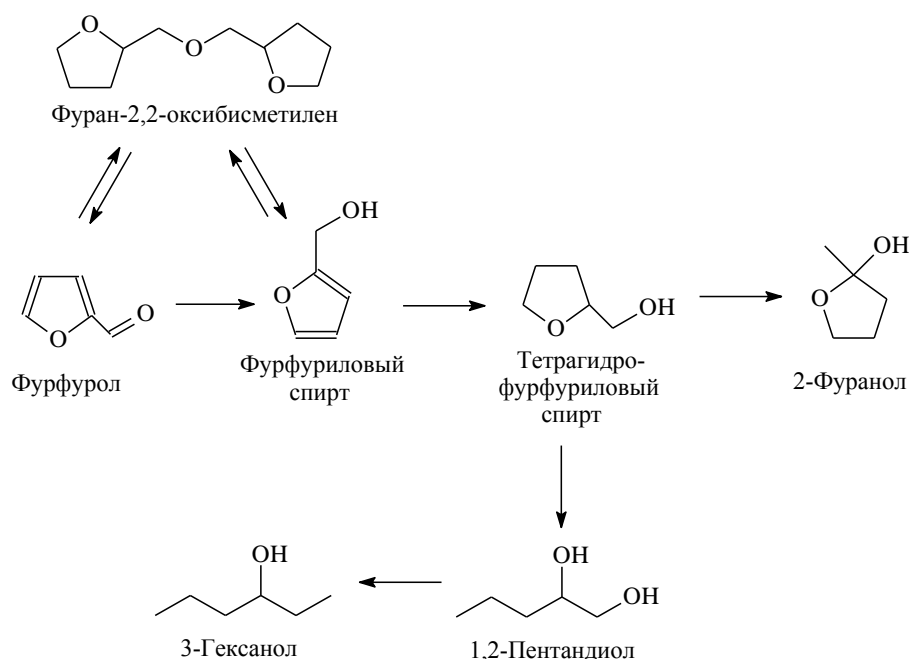


Рис. Схема каталитического гидрирования фурфурола и основные продукты реакции

Производные фурфурола находят широкое применение:

- в качестве эффективных добавок к бензинам, повышающим октановое число, улучшающими антидетонационные свойства и уменьшающие содержание вредных веществ в отработавших газах;
- могут являться решением проблемы утилизации отходов деревообрабатывающей и сельскохозяйственной промышленности;
- в промышленности в качестве растворителя лаков, красителей, синтетического каучука, различных смол, эфиров целлюлозы, полистирола и винацетата.

Промышленное производство с высоким выходом фурфурилового спирта и тетрагидрофурфурилового спирта основано на процессе гидрирования фурфурола в жидкофазных или газофазных условиях в присутствии соответствующих металлических катализаторов.

Т.Ю. Селина

ФАЗОВОЕ ПОВЕДЕНИЕ ТРИБЛОК-СОПОЛИМЕРОВ С БЛОКАМИ РАЗНОЙ ЖЕСТКОСТИ

Руководитель А.С. Павлов

Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

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

В результате исследований таких систем были обнаружены интересные морфологии, среди которых особо следует выделить морфологию гексагонально упакованных цилиндров (Hex*), возникающую при понижении температуры в результате фазового перехода из обычной гексагональной фазы (Hex). Отметим, что существование данной морфологии было также доказано методом самосогласованного среднего поля в работе [1].

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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

А.Д. Сеньковский, А.С. Смирнов

ТЕРМОИНДУЦИРОВАННЫЕ ИМПУЛЬСНЫЕ ПРОЦЕССЫ
ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ PIN-PMN-PT

Руководитель Н.Н. Большакова

Тверской государственной университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Настоящая работа поставлена с целью получения информации о термоиндуцированных импульсных процессах и стабильности поляризованного состояния тройных систем свинецсодержащих монокристаллических твердых растворов (PIN-PMN-PT) в широком температурном диапазоне, включающем точку Кюри. Кристаллы имели следующий состав: 24%Pb(In_{1/2}Nb_{1/2})O₃–49%Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃–27%PbTiO₃.

Установлено, что при первичном и вторичном нагреваниях образца в области ромбоэдрической фазы в интервале температур (20-120)°C наблюдаются единичные импульсы незначительной амплитуды. Это свидетельствует об устойчивости поляризованного состояния кристалла и формировании в нем внутреннего поля в процессе его поляризации.

Нагревание образцов с переходом через точку Кюри (T_c=185°C) вызывает его деполяризацию. Поляризация образцов при T=20°C вызывает интенсификацию термоиндуцированных процессов перестройки доменной структуры. С увеличением напряженности поляризующего поля скорость следования скачков переключения, обусловленных нагреванием образцов PIN-PMN-PT, возрастает.

Нагревание образцов в присутствии внешнего постоянного поля 120 В·см⁻¹ вызывает появление большого числа импульсов, полярность которых свидетельствует о наличии в образцах внутреннего электрического поля, обусловленного поляризацией кристалла. Характер температурных зависимостей, скорости следования импульсов, их полярность и поведение во внешних полях свидетельствуют о том, что наблюдаемые импульсы являются тепловым эффектом Баркгаузена.

С увеличением напряженности внешнего приложенного к образцу поля температурный интервал интенсивного следования скачков переключения возрастает. Аналогичную тенденцию имеет и скорость следования скачков переключения. Это свидетельствует об интенсификации термоиндуцированных процессов перестройки доменной структуры кристаллов PIN-PMN-PT с ростом напряженности внешнего приложенного к образцу поля. В ромбоэдрической фазе процессы перестройки доменной структуры кристаллов PIN-PMN-PT происходят более интенсивно, чем в тетрагональной. Это можно объяснить ролью не 180° - доменов в процессах переполяризации кристаллов.

В.А. Сильченко

ТЕХНОЛОГИЯ ПЕРЕРАБОТКИ БОБОВЫХ КУЛЬТУР С ЦЕЛЬЮ ПОЛУЧЕНИЯ БЕЛКОВ

Руководитель Э.М. Сульман

Тверской государственной технической университет
Кафедра Биотехнологии и Химии

Целью работы является усовершенствование технологии переработки белковых культур

В связи с имеющейся продовольственной проблемой возникает необходимость использовать нетрадиционные источники пищевого белка. Одним из перспективных направлений увеличения ресурсов продовольствия, повышение биологических и профилактических свойств пищевых продуктов является использование высококонцентрированных форм легкоусвояемых растительных белков [1].

Перспективным источником получения белков является растительное сырье, обладающее высокой биологической ценностью. Это такие бобовые, как фасоль, соя, чечевица, люпин, нут. Фасоль является важным источником растительного белка. Он легко усваивается и состоит из таких необходимых аминокислот, как триптофан, лизин, аргинин, тирозин, метионин [2].

Преимущественно для извлечения белков используют 8-10% растворы нейтральных солей и буферы. При исследованиях определяли оптимальные условия выделения белков: изменяли соотношение массы фасоли к объему буфера, рН экстрагента, температуру выделения. Было определено, что соотношение навески фасоли и буфера влияет на качество и количество извлекаемых веществ. Для очистки белковых фракций от природных фенольных соединений, а также липидов использовали органические растворители.

Выход белковых веществ от а.с.в. фасоли составил не менее 30%. Конечный продукт не содержит крахмала, липидов и практически фенольных соединений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гончаренко, Е.В. Неисчерпаемая кладовая /Е.В. Гончаренко // Масложировая промышленность. — 2002, № 3. — С. 12-13.
2. Пигарева, Т.В. Альтернативные источники растительного белка для обогащения комбинированных пищевых систем. / Т.В.Пигарева, С.С. Забурунов, И.А.Глотова // Успехи современного естествознания. – 2011, №7. С. 176.

П.В. Сеницына, Е.С. Морозова

КОНВЕРСИЯ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ В ГЛИКОЛИ С ПРИМЕНЕНИЕМ РУТЕНИЕВЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ

Руководитель О.В. Манаенков

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

Целлюлоза является одним из наиболее перспективных видов возобновляемых ресурсов. В настоящее время всё большее внимание в научной и промышленной областях уделяется работам, направленным на разработку эффективных методов конверсии растительной биомассы в сырьё для химической и топливной промышленности, в частности в этилен- и пропиленгликоль (ЭГ и ПГ) [1].

Новые возможности открывает использование магнитноотделяемых катализаторов на основе магнитных наночастиц (МНЧ) [2]. МНЧ подвергаются функционализации и служат подложкой для формирования каталитических комплексов. Данные катализаторы обладают большой удельной площадью поверхности, возможностью упрощенного отделения наночастиц от катализатора посредством внешнего магнитного поля.

Основная задача направлена на исследование процесса гидрогенолиза целлюлозы в среде субкритической воды в присутствии Ru-содержащего катализатора на основе МНЧ оксида железа - 5 % Ru-Fe₃O₄-SiO₂, подбор оптимальных условий процесса, обеспечивающих максимальный выход гликолей.

Полученные результаты показали, что исследуемый катализатор эффективен в процессе гидрогенолиза целлюлозы до ЭГ и ПГ. В условиях: температура 255 °С, парциальное давление водорода 60 бар, время процесса 50 минут, 0,1167 ммоль рутения в составе катализатора 5 % Ru-Fe₃O₄-SiO₂ на 1 г целлюлозы и в присутствии крекирующего агента (гидроокиси кальция), суммарная селективность по гликолям достигает 40 % (21 % - ПГ и 19 % - ЭГ). При этом происходит полная 100 %-ная конверсия целлюлозы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Manaenkov O.V., Matveeva V.G., Sulman E.M., Filatova A.E. et al // Topics in Catalysis. 2014. vol. 57. No 17-20. pp. 1476-1482.
2. Bronstein L.M., Shifrina Z.B. // Chem. Rev. 2011. vol. 111. pp. 5301-5344.

М.И. Скобин, Т.В. Крюков

ОСАЖДЕНИЕ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ($\text{Na}_2[\text{FeHepArg}]$,
 $\text{Na}_3[\text{MnHepArg}]$, $\text{Na}_3[\text{ZnHepArg}]$, $\text{Na}_2[\text{ZnHHepArg}]$) ИЗ ВОДНЫХ
СИСТЕМ: $\text{Fe}^{3+} - \text{Na}_4\text{Hep} - \text{Arg}^-$, $\text{Mn}^{2+} - \text{Na}_4\text{Hep} - \text{Arg}^-$, $\text{Zn}^{2+} - \text{Na}_4\text{Hep} - \text{Arg}^-$

Руководитель М.А.Феофанова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Гепарин – биополимер класса гликозаминогликанов, синтезируется в печени и легких животных. В форме натриевой или кальциевой соли гепарин широко используется в медицине как антикоагулянт прямого действия. Для получения необходимых комплексных соединений (FeHepArg^{2-} , MnHepArg^{3-} , ZnHepArg^{3-} , ZnHHepArg^{2-}) был применен метод математического моделирования, использующий данные рН-метрического исследования систем: $\text{Fe}^{3+} - \text{Na}_4\text{Hep} - \text{Arg}^-$, $\text{Mn}^{2+} - \text{Na}_4\text{Hep} - \text{Arg}^-$, $\text{Zn}^{2+} - \text{Na}_4\text{Hep} - \text{Arg}^-$, где соотношение компонентов (ион металла : гепарин : аминокислота) в растворе было определено, как 1 : 1 : 1.

На основе результатов математического моделирования были построены концентрационные диаграммы распределения комплексных форм (FeHepArg^{2-} , MnHepArg^{3-} , ZnHepArg^{3-} , ZnHHepArg^{2-}) в исследуемых системах, после чего эти соединения были получены в твердом виде.

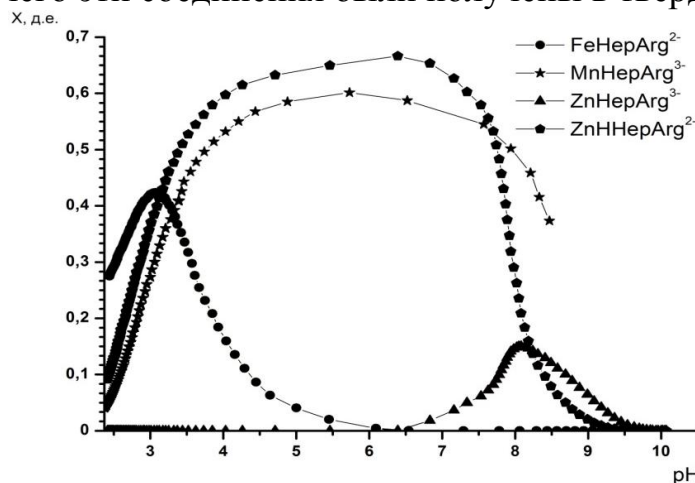


Рис.1. Концентрационная диаграмма распределения комплексных форм (FeHepArg^{2-} , MnHepArg^{3-} , ZnHepArg^{3-} , ZnHHepArg^{2-}).

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

А.В. Соколов

АДДИТИВНАЯ СХЕМА РАСЧЕТА ΔG_{298}^0 X-ЗАМЕЩЕННЫХ БЕНЗОЛА

Руководитель В. М. Смоляков

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Построение аддитивных схем расчета свойств веществ на основе феноменологических методов позволяет решать задачи массового расчета, хотя и требуют для своего использования определенного количества исходных данных.

На примере данных расчета стандартных энергий Гиббса (ΔG_{298}^0) метил замещенных бензола, полученных с помощью метода наименьших квадратов (МНК), и сравнения их с опытными данными показана работоспособность аддитивной схемы. Аддитивные схемы выполнены в различных приближениях.

Таблица 1. Расчет по (2) свойств X-замещенных $C_6H_6 D_{6h}$.

Бензол D_{6h}	Опыт	Расч.	Бензол D_{6h}	Опыт	Расч.
C_6H_6	129,7	129,7	1,2,3- C_6X_3	124,6	124,6
C_6H_5X	122,0	122,0	1,2,4,5- C_6X_4	119,5	119,5
пара- C_6X_2	121,1	121,1	1,2,3,5- C_6X_4	118,7	118,7
мета- C_6X_2	118,9	118,9	1,2,3,4- C_6X_4	123,4	123,4
орто- C_6X_2	122,1	122,1	C_6X_5	123,3	123,3
1,2,4- C_6X_3	116,9	116,9	C_6X_6	130,2	130,2
1,3,5- C_6X_3	144,7	144,7			

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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

Е.М. Соколова

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ
ЦЕФТАЗИДИМА С ИОНАМИ *d*-ЭЛЕМЕНТОВ

Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

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

Н.А. Соловьева

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ОПТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ
АНАЛИЗА ИЗМЕНЕНИЙ В ХИМИЧЕСКОМ СОСТАВЕ
ПОДОРОЖНИКА БОЛЬШОГО (*PLANTÁGO MÁJOR*), ВЫЗВАННЫХ
ВЛИЯНИЕМ АНТРОПОГЕННОГО ФАКТОРА

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

Изучение и контроль состояния окружающей среды включают исследование различных природных объектов, систем и определения в них загрязняющих химических веществ, нарушающих сложившееся экологическое равновесие в природе. Растения отрицательно реагируют на наличие в воздухе даже в малых дозах токсических веществ, т.е. выполняют индикаторную функцию. Такие растения-биоиндикаторы могут использоваться как для выявления отдельных загрязнителей воздуха, так и для оценки качественного состояния природной среды. Таким образом, актуальной задачей является исследование изменений химического состава растений, вызванных влиянием антропогенного фактора, в рамках экологического мониторинга. Целью работы является сравнительный анализ влияния антропогенного фактора на химический состав подорожника большого (*Plantágo májor*), собранного в 2013 и 2015 годах, методами оптической спектроскопии (Фурье-ИК и УФ спектроскопического анализа). Сбор растений осуществлялся в идентичных условиях (месяц сбора, погодные условия) в одних и тех же промышленных районах города Твери. В результате сравнительного анализа подорожника большого обнаружены различия в ИК спектрах образцов, а также в электронных спектрах поглощения спиртовых экстрактов исследуемого растения в УФ области в зависимости от года сбора. В то же время отмечена тенденция сохранения уровня чувствительности подорожника к определенным узлам экологической напряженности, проявляющаяся как в ИК, так и в УФ диапазонах длин волн. В связи с этим можно предположить, что в период 2013-2015 гг. изменилась рабочая мощность некоторых промышленных предприятий, и, следовательно, количество выбросов загрязняющих веществ в атмосферу.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности. Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности (проект №4.1325.2014/К) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.

А.Б. Сорокина

ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ ТИОЭФИРОВ

Руководитель М.Г. Виноградова
Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

Экспериментальные сведения по энтальпии образования в различных классах органических и иных соединениях скудны и порой разноречивы. Поэтому разработка теории и методов расчета свойств веществ на основе сведений о строении молекул является актуальной задачей современной химии.

Целью настоящей работы является – установление через аналитические выражения и/или графические зависимости количественных корреляций “структура – энтальпия образования” в тиоэфирах.

Для достижения поставленной задачи в работе применялись – феноменологические методы, методы статистического анализа и линейной алгебры. В работе проведена оценка состояния численных данных по энтальпии образования тиоэфиров, выявлены отдельные закономерности:

- энтальпия образования зависит от длины цепи молекулы, причем для гомологов аналогичного строения эта зависимость носит линейный характер, что свидетельствует о постоянном энергетическом вкладе СН_2 -группы;

- при увеличении длины цепи молекулы значение $-\Delta_f H^0_{298(\text{r})}$ увеличивается;

- разности энергий между структурными изомерами тиоэфиров достигают 19 кДж/моль, причем наибольшие значения $-\Delta_f H^0_{298(\text{r})}$ имеют разветвленные тиоэфиры.

Для тиоэфиров в четвертом приближении имеем :

$$P(\text{C}_n\text{H}_{2n+1})_2\text{S} = h_{\text{cc}}p_{\text{c-c}} + h_{\text{cs}}p_{\text{c-s}} + h_{\text{cn}}p_{\text{c-n}} + x_{\text{cc}1}\Gamma_{\text{cc}} + x_{\text{cs}1}\Gamma_{\text{cs}} + \\ + x_{\text{ccc}1}\Delta_{\text{ccc}} + x_{\text{ccs}1}\Delta_{\text{ccs}} + x_{\text{cc}2}\tau_{\text{cc}} + x_{\text{cs}2}\tau_{\text{cs}} + x_{\text{cc}3}\omega_{\text{cc}} + \\ + x_{\text{cs}3}\omega_{\text{cs}} + x_{\text{cc}4}v_{\text{cc}} + x_{\text{cs}4}v_{\text{cs}}$$

По приведенной формуле проведен численный расчёт энтальпии образования ряда тиоэфиров. Рассчитанные величины, в общем, вполне согласуются с экспериментальными.

Так как в результате нехватки экспериментальных данных получилась система с линейнозависимыми столбцами, то параметр v_{cs} пропадает, а параметры p_{cc} , p_{cn} и $p_{\text{c-s}}$ были заменены на параметр a .

Где $a = p_{\text{cc}} + p_{\text{c-s}} + p_{\text{cn}}$.

И.И. Спиридонов

АРМИРУЮЩИЕ НАПОЛНИТЕЛИ ДЛЯ КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Руководитель Е.И. Лагусева

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии полимерных материалов

Для получения композитных материалов могут использоваться волокна различной природы: керамические (стеклянные, углеродные), полимерные, металлические. Стекловолоконное волокно получило наиболее широкое распространение в производстве композитных изделий благодаря высоким механическим показателям, относительной простоте производства и наличию сырьевой базы. Свойства основных видов армирующих волокон приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Свойства основных видов армирующих волокон

Волокно	Плотность, кг/м ³	Прочность, МПа	Модуль упругости, ГПа	Относительное удлинение при разрыве, %
Стекловолоконное	2480-2550	1470-4900	49-123	1,5-5,4
Органическое	1140-1480	490-3530	4,5-147	2-18
Углеродное	1300-1950	392-3420	196-392	0,5-2
Борное	2340-2650	1960-3920	348-430	0,4-1
Стальное	7850-8100	3420-4450	196-207	0,3-2

Разнообразие свойств композитных материалов может быть приумножено комбинированием армирующих и связующих материалов. Широкое распространение получили композитные стеклоуглеродные, углерод-полиимидные и стеклоарамидные пластики. Комбинация свойств достигается с как помощью послойного расположения различных армирующих материалов, так и с помощью тканей комбинированного плетения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

3. В.А.Калинчев // Намотанные стеклопластики. М., «Химия», 1986. 272 с.
4. Прочность стекла. Сборник статей // Под редакцией д.т.н. проф. В.А. Степанова. М., «Мир», 1969. 340 с.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ РАДИОНУКЛИДОВ В ПОЧВАХ,
ПРИЛЕГАЮЩИХ К КАЛИНИНСКОЙ АЭС

Руководитель Смирнова О.В.

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии и земледелия

Любая работающая АЭС является источником: газообразных (в том числе радиоактивных) выбросов в атмосферу; выбросов большого количества тепла; жидких радиоактивных отходов. С целью выявления влияния Калининской АЭС на прилегающие земли, были проведены полевые исследования, а именно заложена сеть пробных площадей, характеризующих их природное окружение. Преобладающим типом почв в регионе Калининской АЭС являются дерново-подзолистые почвы, а в локальных понижениях, на поверхностях низкого гипсометрического уровня встречаются гидроморфные и полугидроморфные почвы. Они представлены дерново-глеевыми, торфянистыми или торфянисто-перегнойными почвами. В почвах, используемых в земледелии, происходит перемешивание техногенных радионуклидов при вспашке, вследствие чего наблюдается равномерное распределение радионуклидов в пределах пахотного горизонта мощностью 25-30 см. Фиксации радионуклидов способствует тяжелый гранулометрический состав, высокое содержание гумуса, высокая емкость катионного обмена, насыщенность основаниями, нейтральная реакция (рН). Содержание в почвенных образцах K^{40} варьировало от $210,52 \pm 55,20$ до $453,00 \pm 72,42$ Бк/кг; Th^{232} - от $8,02 \pm 3,62$ до $41,03 \pm 5,54$ Бк/кг; Ra^{226} - от $9,31 \pm 3,35$ до $21,45 \pm 5,07$ Бк/кг; Cs^{137} - от $1,41 \pm 1,35$ до $7,92 \pm 2,36$ Бк/кг. По плотности выпадения Cs^{137} исследованные пробы статистически не отличались от содержания Cs^{137} в почве до начала работы КАЭС. В целом пробы почвы соответствовали требованиям СанПиН 2.1.7.1287-03 «Санитарно-эпидемиологические требования к качеству почвы». Интенсивность и направленность миграции радионуклидов по обменным цепочкам в природных биогеоценозах определяются множеством причин: геоморфологической структурой местности, ее гидрологическими особенностями, климатическими условиями района размещения атомной станции, состоянием и физико-химической характеристикой почв, состоянием растительного покрова, биологической активностью животных организмов, непосредственным вмешательством человека в процессе сельскохозяйственной деятельности. В пределах исследованных территорий распределение химических соединений зависело от почвообразующих пород, рельефа, почвенного покрова. Наиболее контрастно оно проявилось на уровне элементарных ландшафтов.

В.А. Сурнина

СРАВНЕНИЕ БРОДИЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ ХЛЕБОПЕКАРНЫХ ДРОЖЖЕЙ

Руководитель Е.Р.Усовик

10 класс МБОУ СШ №45

О дрожжах люди знают давно. Тысячи лет их используют в приготовлении алкоголя – от эля до виски. В современном мире дрожжи нашли широкое применение. Чаще всего их используют в пищевых технологиях, например в производстве хлеба. Приготовление дрожжевого хлеба – одна из древнейших технологий. В этом процессе используется преимущественно *Saccharomyces cerevisiae*. Они способны осуществлять спиртовое брожение с образованием множества вторичных метаболитов, которые обуславливают вкусовые и ароматические качества хлеба. Спирт испаряется в процессе выпечки. При расстойке теста в массе появляются пузыри углекислого газа, заставляющие его «подниматься» и после выпечки придающие хлебу губчатую структуру и мягкость. Аналогичный эффект вызывает внесение в тесто соды и кислоты (обычно лимонной), но в этом случае вкус и аромат хлеба уступает таковому, приготовленному с использованием дрожжей. Аромат хлеба зависит от качества дрожжей. На прилавках магазинов огромный выбор дрожжей: прессованных, гранулированных, инстантных. Покупая их мы полагаемся на честность и ответственность производителя. В связи с этим целью работы стало определение и сравнение бродильной активности сухих хлебопекарных дрожжей.

В работе использовались различные марки сухих дрожжей. Для исследования были выбраны 5 образцов сухих дрожжей для приготовления хлебобулочных изделий фирм Dr.Oetker, Ракмауа, Саф-момент для сдобы, пиццы и быстродействующие. Были определено, что все образцы осуществляют процесс брожения, но наибольшей активностью обладают дрожжи фирмы Ракмауа. Образец фирмы Сафмомент для сдобы способен быстро осуществлять подъем теста только при добавлении сахарозы. При этом было выяснено, что в данном образце достаточное количество дезактивированных клеток, поэтому бродильная активность проявляется при внесении дисахарида, который расщепляется зимазным комплексом. В исследовательской работе было определено, что внесение хлорида натрия в жидкую опару подавляет процесс газообразования. Поэтому данный компонент необходимо вносить после расстойки. Таким образом, в работе было показано, что не все товарные дрожжи обладают одинаковой бродильной активностью.

М.Д. Табагари

СПЕКТРОМЕТРИЯ СЫВОРОТКИ КРОВИ САХАРНОГО ДИАБЕТА 1 И 2 ТИПА

Руководитель И.А. Беляева

ГБОУ ВПО Тверской ГМУ Минздрава России
Кафедра химии

Сахарный диабет приобрел эпидемический характер, являясь одной из наиболее частых причин инвалидности и смертности. Он входит в первую триаду в структуре болезней взрослого населения: рак, склероз, диабет. Среди тяжелых хронических заболеваний у детей сахарный диабет также занимает третье место, уступая первое место бронхиальной астме и детскому церебральному параличу.

Основные причины роста заболеваемости: урбанизация, малоподвижный образ жизни, дефекты питания, стрессы, повышение количества лиц пожилого населения.

Цель исследования: анализ изменения в ИК-спектре сыворотки крови связанные с патологией сахарного диабета 1 и 2 типа.

ИК- спектрометрию сыворотки крови проводили у 10 человек (5 женщин и 5 мужчин). Кровь брали из кубитальной вены натошак, с последующим ее центрифугированием. В работе был использован аппаратно-программный комплекс (АПК) «ИКАР», работающий в девяти широких диапазонах, в области $3500-963 \text{ см}^{-1}$. Анализ проводили в кюветах KRS. Время исследования одного образца объемом 0,02мл, не превышало 30 секунд. Первичную обработку сигнала проводили на базе операционной системы Windows XP (MATLAB 6.5 Math Works Inc) (лицензия №146229).

При сравнении спектра установлены достоверные отличия показателей пропускания (П.П) ($p < 0,05$) в диапазонах 3500-3100, 1729-1533, 1470-1330 см^{-1} , что связано с изменениями связей $-\text{OH}$, $-\text{NH}$, $-\text{NH}_2$, $-\text{CH}$, $-\text{CH}_2$, $-\text{CH}_3$, $-\text{C}=\text{C}-$ входящих в состав белков, амидных групп сфингомиелинов, холестерина и его эфиров, а также валентные колебания $\text{C}=\text{O}$ сложноэфирных групп фосфолипидов и деформационного колебания угла связи воды. Данные результаты подтверждаются анализом дисперсий П.П., которые имеют достоверные отличия в диапазоне 3500-3100 см^{-1} . При этом в области 3085-2732 см^{-1} нами установлены достоверные различия, связанные с колебаниями с метильных и метиленовых групп, входящих в состав всех компонентов крови.

Выводы: установлено, что патология сахарного диабета отражается в ИК - спектре сыворотки крови в следующих диапазонах: 3500-3100, 3085-2732, 1729-1533, 1470-1330 см^{-1} .

ИОНОСЕЛЕКТИВНЫЙ ЭЛЕКТРОД С ТРАНСДЬЮСЕРОМ ДЛЯ
ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИОНА ТЕТРАЦИКЛИНА

Руководитель С.С. Рясенский
Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Для определения содержания тетрациклина предложены методики, основанные на фотометрическом методе анализа. В то же время известно, что на многие лекарственные вещества возможно создать ионоселективные электроды. Поэтому целью настоящей работы было создание ионоселективного электрода с откликом на тетрациклин. При создании электрода мы изготавливали ионоселективную мембрану, содержащую поливинилхлорид, дибутилфталат и электрод активное вещество в соотношении 5:40:55. Электрод активное вещество представляет собой ионный ассоциат катиона тетрациклина и молибдодокремниевой кислоты. Этот ассоциат был получен путем взаимодействия тетрациклина гидрохлорида и молибдодокислоты в водном растворе при эквимолярном соотношении компонентов. Электрод активное вещество выпадало в виде труднорастворимого осадка, который несколько раз промывали водой, высушивали при комнатной температуре и использовали для изготовления электрода. Мы изготовили ионоселективный электрод в двух вариантах: классический (с внутренним электродом сравнения и ионоселективной мембраной) и с ионно-электронным трансдюсером. Ионно-электронный трансдюсер – это пластифицированная мембрана, состоящая из поливинилхлорида, дибутилфталата и полианилина в соотношении 25:40:35. Ионно-электронный трансдюсер находился между ионоселективной мембраной и токоотводом. Исследование электродных функций подготовленных электродов показало, что оба они имеют крутизну электродной функции 59 mV/pC , что соответствует теоретическим значениям. При этом диапазон линейности составляет 1-6. Этот диапазон является достаточным для большинства измерений. Время отклика у электродов с трансдюсером значительно меньше, чем традиционного электрода. Время жизни электрода с трансдюсером составляет 8-9 месяцев, в то время как классический переставал работать уже через 4 месяца. Дешевизна и доступность материалов при изготовлении трансдюсера делает этот электрод более перспективным. Эффективность работы электрода была подтверждена при помощи анализа готовой лекарственной формой тетрациклина гидрохлорида (производитель «Биосинтез»). Анализ проводили методом прямой потенциометрии с использованием изготовленных электродов и методом потенциометрического титрования раствора нитрата серебра с серебряным индикаторным электродом. Результаты анализа имеют хорошие соответствия. Поэтому можно считать, что цель работы достигнута.

М.С. Тютликова

ТВЕРДОКОНТАКТНЫЕ ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЦЕФОТАКСИМА

Руководитель Е.Г. Кулапина

Саратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н.Г. Чернышевского

Кафедра аналитической химии и химической экологии

Среди современных антибиотиков одну из самых представительных и важных групп составляют цефалоспорины третьего поколения. Входящий в эту группу высокоэффективный лекарственный препарат – цефотаксим эффективен в отношении многих грамположительных и грамотрицательных бактерий. Интенсивность эффекта применяемого лекарственного препарата находится в прямой зависимости от его концентрации в организме человека.

Существует большое число современных методов определения цефалоспориновых антибиотиков: хроматографические, спектроскопические, электрохимические и др. Ионметрический метод является одним из наиболее перспективных.

Для разработки твердоконтактных потенциометрических сенсоров в качестве электроактивных соединений (ЭАС) в работе были использованы ионные ассоциаты тетрадециламмония (ТДА) и диметилдистеарилламмония (DMDSA) с комплексными соединениями серебра (I) – цефотаксим $\text{Ag}(\text{Ceftx})_2$. Пластифицированную мембрану получали смешением ЭАС, растворителя-пластификатора дибутилфталата, циклогексанона и поливинилхлорида (соотношение ПВХ:ДБФ по массе равно 1:3). В качестве электронного проводника применяли графит ($C_{\text{ЭАС}}=3.2\%$). Полученные электроды перед работой кондиционировали в 10^{-3} М растворе цефотаксима.

Электроаналитические характеристики сенсоров на основе различных ЭАС идентичны: интервал линейности электродных функций составляет $1 \cdot 10^{-4}$ - $1 \cdot 10^{-1}$ М, угловые коэффициенты равны 56 ± 5 мВ/рС, время отклика 120-180 с.

Сенсоры на основе $\text{Ag}(\text{Ceftx})_2\text{TDA}$ проявляют чувствительность к цефтриаксону и цефепиму, коэффициенты потенциометрической селективности $K_{ij} \approx 1$. Сенсоры применимы для определения цефотаксима в ротовой жидкости.

А.В. Тянтов

ЭНЕРГЕТИКА ЗАМЕЩЕННЫХ ЭТИЛЕНА

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

Установление закономерностей, связывающих свойства веществ со строением их молекул, относится к числу ключевых проблем современной химии. Эти закономерности можно использовать для систематизации молекул данного класса, предсказания физических свойств и реакционной способности соединений, для поиска новых веществ и материалов с заданными свойствами.

Для нахождения количественных соотношений структура-свойство (КССС) применяются разные подходы. Среди них важное место занимают феноменологические методы, основывающиеся на модели: молекула - система взаимодействующих атомов. Эти методы не исключают, а дополняют другие расчётные методы (методы квантовой химии, молекулярной механики и т.д.) прежде всего тем, что менее трудоёмки и успешно справляются с решением задач массового расчёта физико-химических свойств органических соединений.

Аддитивные схемы расчёта, к которым приводят феноменологические методы, для отдельных классов соединений (например, замещённых этилена) развиты крайне недостаточно. Кроме того, ряд вопросов (например, взаимосвязь между схемами, выявление удобных и достаточно точных приближений) остаются открытыми.

В качестве объектов исследования в работе взяты замещённые этилена.

Важность выбранных объектов несомненна. Этилен и его замещённые играют большую роль в промышленности, так как являются продукцией одних отраслей химической промышленности и одновременно сырьём для других её отраслей. Так, на основе этилена вырабатываются полиэтилен, поливинилхлорид, полистирол, этанол, хлористый этил, ряд кислот, окись этилена. Объёмы производства и потребления замещённых этилена чрезвычайно велики. Однако широкое применение этих веществ часто сдерживает отсутствие необходимых термодинамических и иных данных. Экспериментальные сведения о свойствах исследуемых соединений скудны и весьма разноречивы. Это показывает, что развитие расчётных методов исследования весьма актуально.

М.Ю. Удальцова, Н.А. Немыгина

ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕР-СОДЕРЖАЩИХ ПАЛЛАДИЕВЫХ СИСТЕМ В РЕАКЦИИ КРОСС-СОЧЕТАНИЯ СУЗУКИ

Руководители: Л.Ж. Никошвили, Э.М. Сульман
Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

Реакция кросс-сочетания Сузуки между арил-галидами и арил-бороновыми кислотами – один из наиболее распространенных и эффективных методов синтеза биариллов, которые являются важными полупродуктами в синтезе фармацевтических препаратов, лигандов и полимеров [1, 2]. В настоящее время наиболее перспективными катализаторами для кросс-сочетания Сузуки являются системы на основе палладиевых наночастиц или комплексов, стабилизированных полимерами [3-5]. Однако, несмотря на успехи, достигнутые в некоторых случаях, общим недостатком всех существующих для этой реакции каталитических систем является потеря каталитической активности в результате вымывания палладия из катализатора [6].

Данная работа посвящена изучению палладиевых катализаторов на основе свёрнутого полистирола (СПС) в реакции кросс-сочетания Сузуки 4-броманизола и фенилбороновой кислоты. В рамках данного исследования был синтезирован ряд катализаторов с различным содержанием металла, типом СПС и природой прекурсора ($\text{PdCl}_2(\text{CH}_3\text{CN})_2$, $\text{Pd}(\text{OAc})_2$, PdCl_2 , $\text{PdCl}_2(\text{C}_6\text{H}_5\text{CN})_2$). Кинетические исследования были выполнены при варьировании природы основания, состава растворителя, соотношения субстрата и катализатора, температуры реакции, а также состава газовой фазы (воздух, азот или водород). Было обнаружено, что использование данных катализаторов позволяет достичь высокой селективности по 4-метоксибифенилу (более 95% при конверсии 4-броманизола > 98%) за время реакции менее 1 часа.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (Проект: RFMEFI57414X0121).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Jung J.-Y., Taher A., Hossain S., Jin M.-J. // Bulletin of the Korean Chemical Society. 2010. Vol. 31. P. 3010.
2. Pan C. [et al.] // Catalysis Communication. 2008. Vol. № 9. P. 321.
3. Bai L., Wang J.-X. // Adv. Synth. Catal. 2008. Vol. 350. P. 315.
4. Colacot T.J., Carole W.A., Neide B.A., Harad A. // Organometallics. 2008. Vol. 27. P. 5605.
5. Wang D., Astruc D. // Coord. Chem. Rev. 2013. Vol. 257. P. 2317.
6. Cantillo D., Kappe C.O. // ChemCatChem. 2014. Vol. 6. P. 3286.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОНИТОРИНГА ПЛОДОРОДИЯ ПАХОТНЫХ ПОЧВ
ТВЕРСКОЙ ОБЛАСТИ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

Агрохимическим центром "Тверской" произведена современная оценка агрохимического состояния плодородия почв на пашне Тверской обл. по данным выполненных туров агрохимического обследования. Установлено, что около 30% земель с разными по происхождению почвами, имеют агрохимический бонитет, позволяющий получать урожайность зерновых культур более 30 ц/га без применения удобрений. Лишь на некоторых участках требуется минимальная доза недостающего в почве элемента. Примерно 15% всей площади пашни нуждаются во внесении рекомендованных доз удобрений для достижения такого урожая и 15-17% площади пашни необходимо проведение комплексного агрохимического окультуривания. Рациональное распределение удобрений непосредственно в хозяйстве по конкретным полям, требует наличия информации не в общем, а в частности по каждому земельному участку, входящему в севооборот. С этой целью разрабатываются агрохимические картограммы, позволяющие оценить как общее плодородие земельного участка, так и слабые его стороны, через относительные оценки агрохимических параметров. На их основе создается банк информации об агрохимических свойствах конкретных земельных участков. Однако должного влияния на решение проблемы экономически рационального и агрономически эффективного использования земельного фонда области это пока не оказывает. Нами проанализированы результаты мониторинга плодородия почв по всем хозяйствам Зубцовского р-на, расположенного в юго-западной части Тверской обл. Ранжируя площади пахотных почв различных хозяйств по величине обменной кислотности (показатель рН), содержанию подвижного фосфора и обменного калия, можно разработать экономически целесообразный уровень затрат, необходимый для достижения благоприятных значений показателей, обеспечивающих тах продуктивность агроценоза. Нами выделено 5 почвенных групп. В первую группу включены площади почв пахотных земель хозяйств, которые могут быть эффективно использованы в производстве без дополнительных затрат. Доля таких почв в районе составляет 25% площади земельного фонда района. Чуть менее благополучны угодья 2-й группы, составляющие 13,5%. В 3-ю, 4-ую и 5-ую группу включены площади почв, которые без вложения определенных затрат не могут эффективно использоваться для производства с/х продукции. На долю таких почв приходится соответственно 4,1; 18,3; 39,1%, а всего в сумме 61,5% в общем объеме пахотной площади р-на. Наши данные свидетельствуют, что более половины площади пашни Зубцовского р-на (61,5%) занимают почвы, требующие применения удобрений и химической мелиорации. Именно по этой причине в тех хозяйствах, которые ежегодно засевают свои земельные площади без внесения удобрений и устранения избыточной кислотности, урожайность возделываемых культур остается на низком уровне. Для них важно использовать весь комплекс мер по окультуриванию таких почв и применению на них современных почвозащитных технологий, исключаяющих повышенные минерализационные процессы, происходящие в почве.

Е.А. Холкина, Т.Е. Худякова

ПРИМЕНЕНИЕ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ Pd-Zn СИСТЕМ В РЕАКЦИИ СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ 2-МЕТИЛ-3-БУТИН-2-ОЛА

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

Селективное гидрирование ацетиленовых спиртов широко используется в тонком органическом синтезе и является важным промышленным каталитическим звеном при получении синтетических душистых веществ и жирорастворимых витаминов [1]. Наибольшее распространение в реакциях гидрирования тройной связи алкинолов получили гетерогенные палладиевые катализаторы. С целью увеличения селективности по целевым продуктам реакции – алкенам, Pd катализаторы модифицируют путем введения второго металла [2]. Применение Zn в качестве модификатора способствует образованию с активным металлом биметаллического сплава [3], в котором увеличивается расстояние между атомами Pd, что способствует уменьшению вероятности формирования прочно сорбированных промежуточных продуктов.

Было проведено исследование каталитических свойств биметаллических Pd-Zn систем на основе сверхсшитого полистирола (СПС) при варьировании типа СПС, содержания палладия, соотношения активного металла (Pd) и металла-модификатора (Zn). Тестирование катализаторов проводилось в реакции селективного гидрирования 2-метил-3-бутин-2-ола. Анализ катализата осуществлялся методом газовой хроматомасс-спектрометрии (Shimadzu GCMS-QP2010S).

По результатам экспериментов было установлено, что с увеличением содержания металла-модификатора происходит снижение каталитической активности биметаллической системы. При этом селективность по целевому продукту реакции увеличивалась. Было найдено оптимальное соотношение Pd/Zn=1/1, при котором наблюдалась наибольшая селективность – 96% при 99% конверсии субстрата. В то же время, было показано, что при дальнейшем увеличении содержания Zn активность и селективность значительно снижаются, что, вероятно, связано блокировкой активных центров Pd оксидом цинка.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bonrath W., Eggersdorfer M., Netscher T. // Catal. Today. 2007. Vol.121. P.45.
2. Coq B., Figueras F. // J. Mol. Catal. A: Chemical. 2001. Vol.173. P.117.
3. Халилов И.В. [и др.] // Катализ в промышленности. 2013. Т.5. С.29.

Л.А. Храброва

ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ ГАЛОГЕНЗАМЕЩЁННЫХ
АЛКАНОВРуководитель М.Г. Виноградова
Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

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

В работе рассмотрены аддитивные методы и схемы расчёта; дана их классификация, охарактеризовано соподчинение. Использовались также методы статистического анализа и линейной алгебры.

В работе проведена оценка состояния численных данных по энтальпии образования галогензамещённых алканов, выявлены отдельные закономерности:

- энтальпия образования галогензамещённых алканов зависит от длины цепи молекулы, причем для гомологов аналогичного строения эта зависимость носит линейный характер, что свидетельствует о постоянном энергетическом вкладе CH_2 -группы;

- при увеличении длины цепи молекулы значение $\Delta_f H_{298(\text{г})}^0$ увеличивается;

- разности энергий между структурными изомерами в галогензамещённых алканах достигают 26 кДж/моль.

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

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

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

В работе также проведены численные расчеты по энтальпии образования галогензамещённых алканов, согласующиеся с экспериментом.

Н.П. Христова

КИПРЕЙ УЗКОЛИСТНЫЙ КАК ИСТОЧНИК АНТИОКСИДАНТОВ

Руководитель Т.И. Смирнова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

Дефицит в рационе человека и животных веществ, характеризующихся антиоксидантной активностью, способствует возникновению целого ряда патологических состояний, вызванных нарушениями функций сердечно-сосудистой системы, головного мозга, ослаблением иммунитета. К числу активных антиоксидантов относятся витамины группы Р – свыше десятка флавоноидов – соединений растительного происхождения. в основе молекул которых имеется флавоновый скелет.

В рационе жителей умеренных широт одним из основных источников Р-активных веществ служит чай (лист и побеги камелии китайской). Кроме собственно чая распространены и его местные заменители: латиноамериканский – мате (листья и побеги кустарника падуба парагвайского,) и африканский – ройбуш (листья и побеги кустарника ройбуш). В России традиционным заменителем чая служил т.н. копорский чай (ферментированный лист кипрея узколистного, в настоящее время почти забытый).

Целью представленного исследования было определение антиоксидантной ценности копорского чая и неферментированного листа кипрея узколистного в сравнении с различными сортами чёрного и зелёного чая (листья и побеги камелии китайской), а также распространённых его заменителей – мате(листья и побеги кустарника падуба парагвайского) и ройбуша (листья и побеги кустарника ройбуш). В двукратной повторности определяли содержание Р-активных веществ в 2-х образцах копорского чая, в 2-х образцах неферментированного листа кипрея; в чёрных и зелёных чаях 18 различных торговых марок, а также в образцах мате и ройбуша – по 2 образца. Если принимать среднее содержание флавоноидов в проанализированных образцах чёрного чая за 100%, то в зелёном чае этих веществ обнаружено 107%, в мате – 74%, а в ройбуше – 31%, в копорском чае – 370%, а в неферментированном листе кипрея – 704%. Из литературных источников известно, что лист кипрея содержит много аскорбиновой кислоты (приблизительно в 3 раза больше, чем в апельсинах). Поскольку это соединение в организме человека действует как синергист витаминов группы Р, можно сделать вывод о том, что копорский чай и в ещё большей степени неферментированный (зелёный) лист кипрея могут служить ценными источниками антиоксидантов и вполне заслуживают включения в наш рацион питания.

Т.Е. Худякова, Е.А. Холкина

ПРИМЕНЕНИЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПАЛЛАДИЙ-СОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРОВ В РЕАКЦИИ СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ

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

Селективное гидрирование тройной углеродной связи диметилэтинилкарбинола (ДМЭК) до соответствующего спирта с двойной связью диметилвинилкарбинола (ДМВК) является одной из основных стадий при производстве синтетических душистых веществ и витаминов А, Е и К [1]. Наибольшее распространение в качестве активного металла гетерогенных катализаторов гидрирования получил палладий. Исторически первым промышленным катализатором селективного гидрирования алкинолов стал предложенный Линдларом 5%-Pd/CaCO₃, модифицированный ацетатом свинца и хинолином, обеспечивающий селективность 95% при 100% конверсии субстрата [2]. Одним из способов повышения активности и селективности каталитических систем является последовательное модифицирование Pd катализаторов катионами металлов первой группы (Na⁺, K⁺) [3].

Палладиевый катализатор на основе полимерной матрицы сверхсшитого полистирола марки MN100 – 0.5%-Pd/MN100, был модифицирован соединениями щелочных металлов: NaOH, KOH, K₂CO₃, Na₂CO₃, KH₂PO₄ и NaH₂PO₄. Все каталитические системы прошли тестирование в реакции селективного гидрирования ДМЭК, по результатам которого было показано, что варьирование природы прекурсора оказывает сильное влияние на поведение катализаторов.

На основании полученных результатов можно сделать вывод, что введение соединений щелочных металлов способствует значительному повышению каталитической активности и селективности. При этом наибольшая селективность (98% при 100% конверсии субстрата) достигалась при модификации палладиевого катализатора KOH. Данная каталитическая система сохраняла стабильность в течение трех повторных циклов, не утратив при этом исходные показатели.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bonrath W., Eggersdorfer M., Netscher T. // Catal. Today. 2007. Vol.121. P.45.
2. Lindlar H. // Helv. Chim. Acta. 1952. Vol.35. P.446.
3. Cho H.-B. [et al.] // Bull. Korean Chem. Soc. 2008. Vol.29. P.2434.

А.В. Чирков, В.В. Иванов

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ В МОНОКРИСТАЛЛАХ SBN С
ПРИМЕСЯМИ

Руководитель В. В. Иванов

Тверской государственной университет
Кафедра физики конденсированного состояния

В данной работе проведены исследования влияния примесей европия в монокристаллах SBN на температурную зависимость электропроводности и на частотные зависимости электрической емкости.

Измерения проводились на образцах SBN:61 конгруэнтного состава с примесями европия с концентрациями 4000ppm, 8000ppm и 16000ppm.. Исследуемые образцы представляют собой пластинки полярного z-среза. Электропроводность монокристаллов SBN исследовалась на постоянном электрическом токе. Значение удельной проводимости для монокристалла SBN с примесью европия с концентрацией 4000 ppm изменяется в пределах от $1,81 \cdot 10^{-8} \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$ до $1,45 \cdot 10^{-7} \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$, с концентрацией 8000ppm – от $2,85 \cdot 10^{-8} \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$ до $7,0 \cdot 10^{-7} \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$. с концентрацией 16000 ppm – от $2,96 \cdot 10^{-8} \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$ до $2,65 \cdot 10^{-7} \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$ в исследованном интервале температур. Наибольший темп роста электропроводности наблюдается для кристаллов SBN с примесью европия с концентрацией 8000 ppm. Для беспримесного монокристалла SBN и для кристаллов с примесями европия характерно экспоненциальное изменение электропроводности, о чем свидетельствуют линейные зависимости $\ln\sigma/\sigma_0(1/T)$ в области температур 20-80⁰С. Для линейных участков зависимости $\ln\sigma/\sigma_0(1/T)$ были вычислены значения энергии активации: $E_a(4000\text{ppm}) = 0,46\text{эВ}$ $E_a(8000\text{ppm}) = 0,49\text{эВ}$ $E_a(16000\text{ppm}) = 0,50\text{эВ}$. Выполнены исследования частотной зависимости емкости образцов. Выяснено, что с ростом частоты емкость уменьшается для всех образцов. Эту зависимость можно объяснить релаксационной поляризацией. Показано что примеси европия изменяют величину электропроводности и повышают энергию активации. Полученные результаты можно объяснить исходя из механизма поляронной проводимости. Электрон в результате релаксации на уровне полярона малого радиуса понижает свою энергию. Переход электрона из иона Nb^{4+} на примесный центр или наоборот требует затрат энергии для искажения решетки, так же как и в случае перехода электрона между ионами бария. Электрон, находящийся в примесном центре, образует новое поляронное состояние с другой энергией, т.е. в качестве поляронных центров могут служить донорно-акцепторные центры с участием примесей и собственных дефектов.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ РАЗНОЛИГАНДНЫХ КОМПЛЕКСОВ Ni(II) С L-ЦИСТЕИНОМ МЕТОДОМ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ

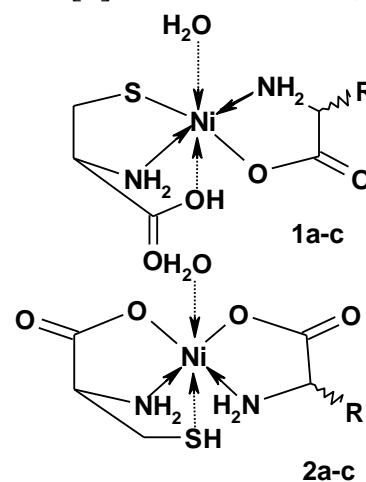
Руководитель Т. В. Берестова

Башкирский государственный университет

Кафедра физической химии и химической экологии

L-цистеин является одним из важнейших медиаторов межмолекулярного связывания фрагментов биомолекул через дисульфидные мостики и играет ключевую роль в образовании вторичной структуры белка [1]. В связи с этим, исследование структуры разнолигандных аминокислотных комплексов с L-цистеином [2] - возможных интермедиатов биохимических реакций, является важной и актуальной задачей.

Методом ИК спектроскопии изучены разнолигандные комплексы $[\text{Ni}(\text{}^b\text{L}_1 \text{}^b\text{L}_2)](\text{H}_2\text{O})$ 1a-c и 2a-c (где $\text{}^b\text{L}$ - бидентантный лиганд, $\text{}^b\text{L}_1 = L\text{-cys}$, $\text{}^b\text{L}_2 = \text{gly}(1)$, $L\text{-ala}(2)$, $DL\text{-val}(3)$), полученные в результате комплексообразования Ni(II) с L-цистеином и соответствующими α -аминокислотами. Установлено, что реакция идет не селективно, а с образованием структурных изомеров 1a-c и 2a-c в соотношении ~ 3:1 (таблица).

Таблица. Характеристические полосы поглощения комплексов Ni(II) 1,2a-c (cm^{-1})

Соединение	Выход, %	Полосы поглощения функциональных групп		
		$\nu_{\text{as}}(\text{COO}^-)$	$\nu_{\text{s}}(\text{COO}^-)$	$\Delta\nu_{\text{as,s}}(\text{COO}^-)$
$[\text{Ni}(\text{gly})(L\text{-cys})](\text{H}_2\text{O})$ 1a	71	1582	1405	177
$[\text{Ni}(\text{gly})(L\text{-cys})](\text{H}_2\text{O})$ 2a		1622	1383	239
$[\text{Ni}(L\text{-ala})(L\text{-cys})](\text{H}_2\text{O})$ 1b	85	1583	1408	175
$[\text{Ni}(L\text{-ala})(L\text{-cys})](\text{H}_2\text{O})$ 2b		1622	1383	239
$[\text{Ni}(DL\text{-valH})(L\text{-cys})](\text{H}_2\text{O})$ 1c	79	1583	1401	182
$[\text{Ni}(DL\text{-val})(L\text{-cys})](\text{H}_2\text{O})$ 2c		1622	1383	239

Показано, что подобные изомеры получают благодаря N-, S- (1a-c) и O-, N-координации лигандов (2a-c), что оказывает влияние на ИК характеристики образующихся соединений. Выявлено, что структурные изомеры $[\text{Ni}(\text{}^b\text{L}_1 \text{}^b\text{L}_2)](\text{H}_2\text{O})$ 1,2a-c отличаются антисимметричными $\nu_{\text{as}}(\text{COO}^-)$ и симметричными $\nu_{\text{s}}(\text{COO}^-)$ валентными колебаниями, а также величиной $\Delta\nu_{\text{as,s}}(\text{COO}^-)$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shaesta Q. // Res. J. Chem. Sci. Vol. 4(3), 32-35, 2004.
2. Шагиева Л.С., Берестова Т.В. // Вест. Башк. ун-та, №1, 2016.

С.А. ШКУРИН

ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНОК
P(VDF-TRFE) + УНТ

Руководитель А.В. Солнышкин

Тверской государственной университет
Кафедра физики конденсированного состояния

В последнее время значительно вырос интерес к полярным материалам, обладающим малой плотностью, хорошей эластичностью, значительной пьезоэлектрической и пироэлектрической активностью. Основное внимание уделяется композитам с сегнетоэлектрической полимерной матрицей на основе поливинилиденфторида (PVDF) или его сополимеров с включениями углеродных нанотрубок (УНТ).

В работе исследовалась пироэлектрическая активность композиционных полимерных пленок на основе сегнетоэлектрического сополимера поливинилиденфторида-политрифторэтилена (P(VDF-TrFE)) с добавлением углерода (УНТ) динамическим и квазистатическим методами. Композитные образцы, содержащие от 0 до 5% объемных процентов углеродного наполнителя, получены методом кристаллизации из раствора. Толщина пленочных образцов варьировалась в пределах $20 \div 30$ мкм в зависимости от процентного содержания углеродных нанотрубок. После поляризации образцы композита обнаруживают заметный пироэлектрический отклик.

Обнаружено различие в поведении пироэлектрического отклика при воздействии теплового потока на противоположные стороны образцов как в случае сополимерных пленок без наполнителя, так и содержащих включения УНТ, что может быть связано с неоднородным распределением поляризации. В последнем случае поведение пироэлектрического отклика свидетельствует о существовании слоя с ярко выраженной неоднородностью в распределении поляризации вблизи поверхности образца с выходом « \rightarrow » P_s , причем этот слой обладает повышенной пироэлектрической активностью по сравнению с остальным объемом композита. Сравнение результатов пироэлектрических измерений для образцов сополимера P(VDF-TrFE) и композита P(VDF-TrFE)+УНТ показывает, что ярко выраженное неоднородное распределение поляризации в пленочных композитах связано с внедрением включений сегнетоэлектрического углеродных нанотрубок в полимерную матрицу.

ЭФФЕКТИВНОСТЬ БАКОВОЙ СМЕСИ ГЕРБИЦИДОВ В ПОСЕВАХ ЯЧМЕНЯ

Руководитель А.А. Акимов

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

В условиях современного интенсивного земледелия борьба с сорняками – один из важнейших элементов системы земледелия, от которого зависит увеличение урожайности сельскохозяйственных культур. Сорные растения в значительной степени влияют на баланс элементов питания, физические и биологические свойства почвы, водно-воздушный, тепловой и световой режимы агрофитоценоза, т. е. на плодородие почвы. Большая засоренность сельскохозяйственных угодий, особенно пахотных земель, не дает возможности обеспечить высокую культуру земледелия на полях [1]. По данным ЦИНАО, площади зерновых культур, засоренных в средней и сильной степени, составляют более 60% площадей, что связано с особенностями земледелия. В условиях современного земледелия задача сельскохозяйственного производства заключается не в полном уничтожении сорняков, а в поддержании их на том уровне, который не оказывал бы отрицательного влияния на урожай культурных растений. Целью данной работы являлось изучение биологической и хозяйственной эффективности баковой смеси гербицидов в посевах ячменя при использовании органических удобрений на основе куриного помета. Для достижения этой цели был заложен и проведен двухфакторный полевой опыт по следующей схеме: Фактор А (гербициды в посевах ячменя): 1 – без гербицидов; 2 – гранстар (10 г/га) + эстет (400 мл/га) + пума супер 75 (800 мл/га); Фактор В (удобрения на основе куриного помета): 1 – контроль (без удобрений); 2 – пометно-опилочный компост, 10 т/га; 3 – биокомпост на основе куриного помета, 10 т/га; 4 – верми-удобрение «Биостронг», 10 т/га. В результате исследований в 2015 году выявлено, что наибольшая урожайность ячменя (45,5 ц/га) получена в варианте с применением пометно-опилочного компоста на фоне внесения баковой смеси гербицидов гранстар+эстет+пума супер 75, а наименьшая (30,1 ц/га) – в варианте без применения удобрений и гербицидов. Большую прибавку урожая (7,7 и 12,8 ц/га или 25,6 и 39,1%) обеспечило внесение пометно-опилочного компоста, как без применения, так и с применением баковой смеси гербицидов. Наибольшая хозяйственная эффективность баковой смеси гербицидов получена при использовании пометно-опилочного компоста и биокомпоста – 20,4 и 17,6% при биологической эффективности, равной 90,6 и 94,9% соответственно.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Баздырев, Г.И. Защита сельскохозяйственных культур от сорных растений / Г.И. Баздырев. – М.: Издательство «Колос». – 2004. – 328 с.

Д.С. Шомуродов

ВЛИЯНИЕ УДОБРЕНИЙ И СОЕДИНЕНИЙ СЕЛЕНА
НА ПРОДУКТИВНОСТЬ ЦУККИНИ

Руководитель О.В. Смирнова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии и земледелия

Урожайность возделываемых культур определяется уровнем питательного режима почв, а также эффективностью применяемых биологически активных соединений (комплексонов и комплексонатов).

Целью исследований являлось изучение влияния удобрений и соединений селена на урожайность цуккини сорта «Мавр». Площадь опытного участка – 200 м²; площадь учетной делянки – 2 м², повторность опыта – четырехкратная, расположение делянок – рендомизированное.

Наибольшая урожайность опытной культуры (таблица 1) получена при использовании Se-ЭДДЯК на удобренных фонах. Наименьшие результаты выявлены на вариантах с комплексоном, как на фоне удобрений, так и без их применения.

Таблица 1 – Урожайность цуккини, кг/м²

Вариант опыта	Средняя урожайность, кг/м ²	Прибавка к контролю, кг/м ²
1. Контроль (обработка растений H ₂ O)	1,25	-
2. Обработка растений раствором Na ₂ SeO ₃	1,64	0,39
3. Обработка растений раствором ЭДДЯК	1,59	0,34
4. Обработка растений раствором Se-ЭДДЯК	2,29	1,04
5. Обработка растений растворами ЭДДЯК и Se-ЭДДЯК	1,79	0,54
6. Агрозумат калия и обработка растений H ₂ O	2,07	0,82
7. Агрозумат калия и обработка растений раствором Na ₂ SeO ₃	2,51	1,26
8. Агрозумат калия и обработка растений раствором ЭДДЯК	1,88	0,63
9. Агрозумат калия и обработка растений раствором Se-ЭДДЯК	3,79	2,54
10. Агрозумат калия и обработка растений ЭДДЯК и Se-ЭДДЯК	2,68	1,43
11. N ₆₀ P ₆₀ R ₆₀ и обработка растений H ₂ O	2,15	0,90
12. N ₆₀ P ₆₀ R ₆₀ и обработка растений раствором Na ₂ SeO ₃	2,44	1,19
13. N ₆₀ P ₆₀ R ₆₀ и обработка растений раствором ЭДДЯК	2,25	1,00
14. N ₆₀ P ₆₀ R ₆₀ и обработка растений раствором Se-ЭДДЯК	3,97	2,72
15. N ₆₀ P ₆₀ R ₆₀ и обработка растений растворами ЭДДЯК и Se-ЭДДЯК	3,25	2,00
НСР ₀₅		0,30

К.Н. Юдкин

МОДЕРНИЗАЦИЯ УЗЛА ГЕРМЕТИЗАЦИИ ЦЕНТРОБЕЖНОГО КОМПРЕССОРА

Руководитель: Е.В.Черкасова

Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева
Кафедра химии, технологии неорганических веществ и наноматериалов

Центробежные компрессорные машины получили широкое распространение в химической, нефтяной и газовой промышленности. Центробежные компрессоры (ЦК) в составе технологических установок незаменимы при производстве высококачественного бензина и смазочных материалов, переработке углеводородов и их производных, производства удобрений, транспортировки и сжижении природного газа.

Применение ЦК в производственных циклах повышенной опасности предъявляет существенные требования к надёжности их отдельных узлов и агрегата в целом. По данным, приведённым авторами [1] наиболее слабыми узлами турбомашин являются опорно-уплотнительные системы роторов.

Целью настоящей работы являлось определение возможности и целесообразности использования различных типов газодинамических уплотнений для компрессоров.

Система обеспечения циркуляции уплотнительного масла, включающая маслобак, фильтры, маслоловушки, насосы высокого давления, арматуру и теплообменники существенно усложняет конструкцию ЦК и приводит к удорожанию агрегата в целом.

Вышеперечисленные недостатки системы концевых уплотнений корпуса сжатия ЦК можно исключить применением системы «сухих» газодинамических уплотнений (СГУ), которые не требуют громоздкой и энергоёмкой системы обеспечения работоспособности [2]. При этом исключается загрязнение сжимаемого газа маслом, снижаются потери мощности на трение в уплотнениях, повышается ресурс их работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Максимов В.А., Баткис Г.С. Трибология подшипников и уплотнений жидкостного трения высокоскоростных турбомашин / В.А. Максимов, Г.С. Баткис. – Казань: Фэн, 1998. – 428 с.
2. Новиков Е.А. Разработка, исследование и внедрение «сухих» газодинамических уплотнений центробежных компрессорных машин: дис. д-ра технич. наук. – Казань, 2014. – 280 с.

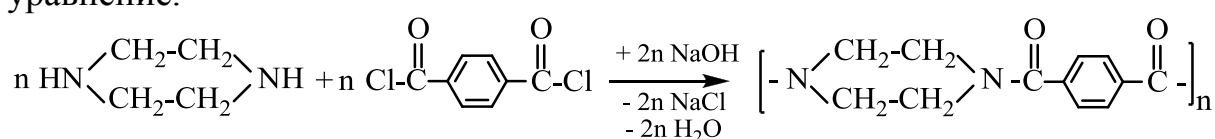
А.В. Яковлева

ОСОБЕННОСТИ СИНТЕЗА ПОЛИПИПЕРАЗИНТЕРЕФТАЛАМИДА
ГАЗОЖИДКОСТНОЙ ПОЛИКОНДЕНСАЦИИ

Руководитель В.А.Никифоров

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии переработки полимеров

Жирноароматические полиамиды получают гетерофазной неравновесной газожидкостной поликонденсацией. Синтез ПА ПТ газожидкостной поликонденсацией описывает суммарное (брутто) уравнение.



В состав водной фазы вводят акцептор хлористого водорода, в качестве которого могут быть использованы щелочи КОН, NaOH и Na₂CO₃.

Полипиперазинтерeftаламид (ПТ) обладает фибридообразующими свойствами: полимер способен самозвязываться в композиции с волокнами, образуя листовидные структуры. Полимер характеризуется сорбционными свойствами, которые обусловлены наличием положительного или отрицательного ζ-потенциала на поверхности макромолекул, сорбирует катионы и анионы. Это свойство позволяет использовать полиамид ПТ в качестве сигаретного фильтра.

Однако при производстве ПА ПТ наблюдается низкий выход продукта (ε_{ХА} не более 65 – 70 %). Одним из путей повышения выхода продукта является увеличение времени пребывания реагентов в реакционной зоне путём понижения линейной скорости газовой фазы в 2 – 3 раза. Учитывая пониженную реакционную способность пиперазина (вторичного диамина) в сравнении с гексаметилендиамином, следует уменьшить линейную скорость газовой фазы (W_Г) до 15 – 20 м/с, что подтверждено экспериментально.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Газожидкостная поликонденсация: Монография /В.А. Никифоров, Е.А. Панкратов, Е.И. Лагусева, А.В. Берёзкин. Тверь: ТГТУ, 2004. 268 с.
2. Полипиперазинфталамиды / В.А. Никифоров, Е.А. Панкратов, Н.Б. Барбашинова, Е.И. Лагусева // Физико-химия полимеров. Синтез, свойства и применение; Вып. 13: Сб. научн. тр. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2007.– С. 232-238.

Р.В. Яркова

ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ И УДОБРИТЕЛЬНОЕ ДЕЙСТВИЕ ОСВ С ОРГАНИЧЕСКИМИ СУБСТРАТАМИ НА УРОЖАЙНОСТЬ КАРТОФЕЛЯ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

За последние годы в РФ все большее количество даже небольших городов и сельских поселений переходят на централизованное водоснабжение и сливную канализацию, которая предусматривает очистку сточных канализационных вод. В результате формируется осадок сточных вод (ОСВ), который с одной стороны является проблемным продуктом при его длительном хранении на картах складирования, а с другой, может представлять ценное органическое удобрение. Мы исследовали ОСВ г. Твери и выявили их удобрительное действие, как в чистом виде, так и совместно с торфом и опилками на дерново-подзолистой почве при внесении под картофель. Перед закладкой опыта определили агрохимические показатели осадков, которые показали, что по мере возрастания срока хранения их, увеличивается зольность и в переводе на сухое вещество повышается количество общих форм азота и зольных элементов (табл.).

Таблица. Химический состав и реакция ОСВ на разных стадиях их хранения

Показатели	По ГОСТу	Фактически		
		Свежий	10-12 месяцев	8-10 годичный
Органическое вещество, %	Не менее 20	66,1	61,6	27,3
Реакция, рН сол.	5,5 – 5,8	7,5	7,6	7,5
Общего азота (N), %	Не менее 0,6	3,33	4,15	4,27
Общего фосфора (P ₂ O ₅), %	Не менее 1,5	1,65	2,19	2,21
Общего калия (K ₂ O), %	-	0,25	0,31	0,33
Зольность, %	-	31,5	36,7	72,2

Дозы ОСВ в 25 и 50 т/га, внесенные в дерново-подзолистую почву, повысили урожайность картофеля, по сравнению с контролем (120 ц/га), соответственно на 50 и 90 ц/га. Совместное использование ОСВ (25 т/га) с соломой и торфом обеспечило урожайность клубней картофеля в 195 и 225 ц/га соответственно. Это свидетельствует о том, что с учетом не совсем благоприятных физических свойств дерново-подзолистых почв, они в большей степени отзывчивы на внесение осадков не в чистом виде, а в смеси с органическими наполнителями. Такие смеси оказывают разрыхляющее влияние на почву, тем самым улучшая водно-воздушный режим, складывающийся в почве. Это особенно важно для такой культуры, как картофель, у которой лучший налив клубней происходит в почвах с меньшей плотностью сложения пахотного слоя.

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Абсалан А.	4
Аверкин Д.В.	5
Адамян А.Н.	6
Акимова К.Е.	7
Аксенов А.А., Соловьева Н.А.	8
Аксенова А.В.	9
Акулов Д.В.	10
Андрианова Я.В.	11
Арефьев Д.В., Барина М.Н.	12
Бабуркин П.О.	13
Бадоскин Д.Д.	14
Базанова Э.А.	15
Барсукова М.С., Сергеева А.В., Тарасова Р.Н.	16
Белова А.А., Крипкина Е.А.	17
Белова И.С.	18
Беляева Е.В.	19
Бугрова Е.А.	20
Василенко П.С.	21
Васильев А.С., Дроздова П.	22
Васильев С.А.	23
Веселова К.А.	24
Веселов И.И., Карпенков А.Ю.	25
Виноградов В.С.	26
Волкова Е.А.	27
Волчкова Е.С.	28
Воробьев И.И.	29
Востров Н.В.	30
Выродова В.О.	31
Гайков Д.К., Стужук А.Н., Ямщикова О.И.	32
Грачева К.А.	33
Гусева Д.А., Логинова Е.С.	34
Демичев Г.А.	35
Дремлева О.Ю.	36
Ершов С.Н.	37
Ефременко М.Д.	38
Жерихова А.М.	39
Жестокова О.И.	40
Жигалова Ю.Э.	41
Захарова Л.Е.	42
Иванов Н.Н.	43
Иванов С.А., Соловьёв С.А.	44

Илларионова В.В., Соломин В.А.	45
Казьмин А.Е.	46
Калабин Н.А.	47
Калинин А.И., Соловьева Н.А.	48
Каримова Р.У., Шматов И.	49
Кашеева А.В.	50
Кириянова Э.Э., Степанова О.А.	51
Колокольцова Н.А., Хоменко Г.М.	52
Королева О.Е.	53
Котельникова А.А.	54
Котомкин А.В.	55
Красильникова Ю.А., Старовойтов А.В.	56
Кротова Н.И., Рыбаков Е.В.	57
Крылов А.А.	58
Крылов П.Н.	59
Кубарева М.М.	60
Кузьмин С.И.	61
Куракин Г.Ф.	62
Кустарев Б.А.	63
Кутузов Д.С., Морозова К.А., Айдинян Н.В., Арямин Е.Е., Брызгина М.П.	64
Лаврова Е.Ю., Кузьмина М.Д.	65
Лебедева Е.Ю.	66
Ли И.Л.	67
Логинова Е.С.	68
Логунов А.В., Лютин Д.С., Долгасова О.В.	69
Лукиенко М.Ю.	70
Лукьянова Н.И.	71
Магомедов А.М.	72
Майорова Е.О., Буева А.И.	73
Макушкин А.Л.	74
Мальшев М.Д.	75
Малярова О.И.	76
Матив А.Б., Савченко Е.А.	77
Матюшенко М.С.	78
Маякова М.Н.	79
Мигунова Е.С.	80
Милорадова А.Н.	81
Михайлов М.А., Шемякин А.А.	82
Морозова А.С.	83
Морозова К.А., Кутузов Д.С., Айдинян Н.В., Хохлов Д.В., Рыбина С.С., Воронцов М.С.	84

Намичемази Н.	85
Наумова Е.Д.	86
Невская А.П., Зенин Т.Т.	87
Нилов Д.Ю.	88
Нилов Д.Ю.	89
Нилов Д.Ю.	90
Олейник Е.Н.	91
Орлов В.В.	92
Павлов М.Н.	93
Перевозова Т.В.	94
Плюхликова Н.С.	95
Подолян Е.А.	96
Пономарев Е.В.	97
Попов И.В.	98
Постнова О.И.	99
Пресняков И.А.	100
Проценко И.И., Зайковская А.О.	101
Радин А.С.	102
Раенков А.А.	103
Рамазанов Б.Л.	104
Рыбаков Д.И., Васильев С.А.	105
Рыбаков И.И.	106
Савельев М.О.	107
Сальникова К.Е.	108
Селина Т.Ю.	109
Сеньковский А.Д., Смирнов А.С.	110
Сильченко В.А.	111
Синицына П.В., Морозова Е.С.	112
Скобин М.И., Крюков Т.В.	113
Соколов А.В.	114
Соколова Е.М.	115
Соловьева Н.А.	116
Сорокина А.Б.	117
Спиридонов И.И.	118
Сулейманова Ш.Ф.Г.	119
Сурнина В.А.	120
Табагари М.Д.	121
Титова Е.Р.	122
Тютликова М.С.	123
Тянтов А.В.	124
Удальцова М.Ю., Немыгина Н.А.	125
Фирсов С.С.	126

Холкина Е.А., Худякова Т.Е.	127
Храброва Л.А.	128
Христоева Н.П.	129
Худякова Т.Е., Холкина Е.А.	130
Чирков А.В., Иванов В.В.	131
Шагиева Л.С.	132
Шкурин С.А.	133
Шоля П.С.	134
Шомуродов Д.С.	135
Юдкин К.Н.	136
Яковлева А.В.	137
Яркова Р.В.	138