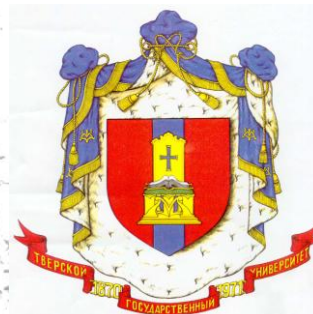




ФОНД СОДЕЙСТВИЯ РАЗВИТИЮ

малых форм предприятий в научно-технической сфере



XVII РЕГИОНАЛЬНЫЕ КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ

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

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

ТВЕРЬ 2010

Федеральное агентство по образованию
Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Тверской государственный университет»

XVII РЕГИОНАЛЬНЫЕ КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ

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

25 марта 2010 года

г. Тверь

Тезисы докладов

ТВЕРЬ 2010

Ответственные за выпуск:

доктор химических наук П. М. Пахомов,

кандидат химических наук С. Д. Хижняк.

XVII Региональные Каргинские чтения: Тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2010. – 103 с.

Областная научно-техническая конференция молодых учёных в рамках Региональных Каргинских чтений проводится ежегодно начиная с 1999 г., а с 2007 г. она входит в перечень аккредитованных мероприятий Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере по программе «УМНИК». В сборнике представлены доклады студентов, аспирантов, молодых учёных тверских вузов, а также некоторых вузов Москвы и Санкт-Петербурга. Рассмотрены современные проблемы физики, химии и новых технологий.

Настоящий сборник издан на средства РФФИ (грант № 09-03-06078Г).

При проведении XVII Региональных Каргинских чтений финансовую поддержку оказали администрация Тверской области и фирма «Брукер».

© Тверской государственный университет, 2010

© Авторы статей, 2010

Е.П. Алексеева

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ОКСАЦИЛЛИН–СЕРЕБРЯНЫХ
ГИДРОГЕЛЕЙ

Руководители: П.М. Пахомов, В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Установлено, что антибиотики группы пенициллина в водном растворе способны образовывать с ионами Ag^+ устойчивые комплексы состава AgL и AgL_2 . При низкой концентрации реагентов (антибиотика и AgNO_3) образуется бесцветный прозрачный раствор. При повышении концентрации до 0,1 моль/л серебряные комплексы бензилпенициллина и ампициллина образуют осадки белого цвета. Комплексы оксациллина в тех же условиях образуют белый коллоидный раствор, который в течение нескольких минут превращается в бесцветный прозрачный тиксотропный гель, при интенсивном перемешивании его стеклянной палочкой образуется вязкая жидкость, быстро застудневающая. Методом ИК спектроскопии установлено, что гелеобразование не влияет на химическую структуру оксациллина. Гелеобразование в системе $\text{NaOxa}-\text{AgNO}_3$ возможно при мольном соотношении компонентов от 1 : 1 до 1 : 9. Оптимально соотношение $\text{NaOxa} : \text{AgNO}_3 = 1,75 : 1$. В этом случае гель образуется уже при концентрации NaOxa 0,03 моль/л. При увеличении доли NaOxa его концентрация, необходимая для гелеобразования, повышается до 0,07 моль/л, а получаемый гель легче изменяет форму. При соотношении 10 : 1 образуется только бесцветная прозрачная вязкая жидкость. Учитывая, что для низкомолекулярных веществ гелеобразование в разбавленных растворах не характерно, можно предположить, что в системе $\text{NaOxa}-\text{AgNO}_3$ образуются полимерные комплексы состава $[\text{NaAg}(\text{Oxa})_2]_n$, которые и являются основой молекулярной сетки геля. Гель с оптимальным соотношением компонентов (1,75 : 1) выдерживает нагревание до 80 °С, не теряя формы и прозрачности, однако при этом происходит изменение его окраски от бесцветной к жёлтой и далее к тёмно-коричневой.

Оксациллин–серебряный гель перспективен для применения в медицине как весьма удобная комбинированная лекарственная форма антибиотика и серебра, обладающая антимикробным и ранозаживляющим действием.

Работа выполнена при финансовой поддержке АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы» (2009–2010 гг.), проект № 2.1.1/6867.

П.А. Алманцева, Е.М. Кузьмина, В.А. Семендяев, В.А. Скульбеда,
Е.А. Судницына

ИНУЛИН В РАСТИТЕЛЬНОМ СЫРЬЕ

Руководитель Т.И. Смирнова

Тверская государственная медицинская академия

Кафедра общей и биорганической химии

В последнее время всё большее внимание диетологов и фармацевтов привлекает растительное сырьё, пригодное для получения низкокалорийных пищевых продуктов и БАДов – биологически активных добавок к пище. К таким растениям относят топинамбур и лекарственные растения: одуванчик, цикорий, девясил. Все они содержат в качестве основного запасного вещества инулин.

Для организма человека инулин служит пребиотиком: улучшает работу кишечника, состав кишечной микрофлоры, способствует повышению иммунитета, снижает уровень холестерина в крови, оказывает положительное влияние на функции печени и даже уменьшает риск возникновения рака кишечника.

Сырьём для получения инулина из числа культивируемых в Тверской области растений мог бы служить топинамбур. Нами были проанализированы на содержание инулина образцы топинамбура, предоставленные кафедрой растениеводства ТГСХА (зав. каф. профессор З.И. Усанова). Они заготовлены в конце сентября (до заморозков) и в начале ноября (по прошествии заморозков), выращены как без применения удобрений, так и на фоне с внесением расчётной дозы макроудобрений (НРК).

Содержание инулина и фруктозы определяли спектрофотометрическим методом при $\lambda = 513$ и 486 нм соответственно (КФК-3-01 «30МЗ»). Результаты определения представлены в таблице:

№ п/п	Время уборки	Удобрения (НРК)	Содержание (%)	
			фруктоза	инулин
1	сентябрь	–	2,42 ± 0,18	12,63 ± 2,11
2	сентябрь	+	5,68 ± 0,31	19,33 ± 2,62
3	ноябрь	–	5,36 ± 0,10	8,57 ± 3,02
4	ноябрь	+	6,62 ± 0,48	13,84 ± 2,92

По результатам анализов можно сделать выводы: 1) внесение удобрений существенно увеличивает содержание инулина в клубнях топинамбура; 2) содержание инулина в клубнях убывает при перенесении растением отрицательных температур. Последнее объясняется активацией фермента инулазы, гидролизующей инулин до фруктозы.

Я.В. Андрианова

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЯ В ВОДНЫХ
РАСТВОРАХ Cys–AgNO₃ ПОД ВЛИЯНИЕМ ХЛОРИД-АНИОНОВ

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

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Механизм гелеобразования в системе на основе низкомолекулярных компонентов – аминокислоты L-цистеин и нитрата серебра – представляет особый интерес, так как образование геля в этой системе происходит при очень низком содержании исходных компонентов, которые, кроме того, являются биологически активными. Образующийся при этом гидрогель может найти различные области применения, например, в качестве матрицы для изготовления фармакологических препаратов разного спектра действия. Целью настоящей работы является изучение процессов гелеобразования в данной системе под влиянием хлоридов аммония и некоторых металлов (никеля, кобальта, магния, алюминия).

Установлено, что сразу после смешивания исходных растворов цистеина и нитрата серебра образуется меркаптид серебра, поэтому раствор становится мутным. Гелеобразование в системе возможно только после так называемой стадии созревания (2–16 ч) и введения электролита. Наиболее устойчивые и прочные гели получают, применяя в качестве инициатора гелеобразования сульфат или сульфит натрия.

В результате эксперимента с хлоридами (NH₄⁺, Ni²⁺, Co²⁺, Mg²⁺, Al³⁺) удалось определить области концентраций, в которых происходит формирование тиксотропного геля для каждого катиона. В частности, гели, образованные хлоридами никеля и кобальта, оказались более прочными в широком диапазоне концентраций, сохраняя при этом устойчивость при комнатной температуре в течение 7–8 дней. Гели, иницированные хлоридом магния и алюминия, менее устойчивы (2–3 дня) и образуются в сравнительно узком интервале концентраций.

С помощью просвечивающей электронной микроскопии установлено, что структура гель-сетки образцов с хлорид-анионами резко отличается от образцов с кислородсодержащими анионами (SO₄²⁻, WO₄²⁻, MoO₄²⁻). Разная структура образцов геля, содержащих электролиты с различными анионами, подтверждается спектральными исследованиями (ИК диапазон) образцов геля, полученных путём вымораживания.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы» (2009–2010 гг.), проект № 2.1.1/6867.

Е.С. Анискина, Е.М. Мухина

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОЛИАНИЛИНОВОГО ТРАНСДЮСЕРА В ИОНОСЕЛЕКТИВНЫХ ЭЛЕКТРОДАХ

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

При лечении ряда заболеваний часто используются различные антибиотики. В диагностических целях важно уметь определить содержание антибиотиков в различных объектах.

Используемые в настоящее время методики для определения антибиотиков не позволяют провести экспресс-анализ. В то же время известно, что для определения ряда антибиотиков усиленно используется ионометрический метод. Для реализации этого метода необходимо иметь соответствующий ионоселективный электрод. Цель настоящей работы – использование полианилинового трансдюсера для создания твёрдоконтактных ионоселективных электродов для определения эритромицина и тетрациклина.

Замена внутреннего электрода сравнения ионно-электронным трансдюссером позволяет существенно улучшить метрологические характеристики электрода.

В качестве ионно-электронного трансдюссера мы выбрали электропроводный полимер – полианилин (ПАНИ). Конструкция электродов представляет собой многослойную структуру, основой которой служил графитовый токоотвод. Сверху этого токоотвода была нанесена полимерная мембрана, содержащая 25 % ПАНИ. К этой мембране прикреплена ионоселективная мембрана с ЭАВ в воде ионного ассоциата фосфорномолибденовой кислоты с антибиотиком, полученная по традиционной схеме.

Электродная функция изготовленных электродов представляет собой прямую в интервале рС 1–4,5. Линейность электродной функции была подтверждена с использованием критерия Фишера. При этом крутизна функции составила 42–45 мВ/рС. Рабочий диапазон рН составил 3–6 единиц рН, что вполне приемлемо для большинства практических задач. Время отклика не превышает 50 с. Высокая надёжность изготовленного электрода подтверждена при помощи ионометрического определения содержания эритромицина и тетрациклина в модельных смесях.

Таким образом, применение ионоэлектронного трансдюссера позволяет изготавливать надёжные ионоселективные электроды с откликом на некоторые антибиотики.

Е.И. Антонова

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЯЖЁЛЫХ МЕТАЛЛОВ НА ЛИШАЙНИК
HYPOGYMNA PHYSODES (L.) NYL. МЕТОДОМ ИК СПЕКТРОСКОПИИ

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

В связи с интенсивным развитием промышленности и транспорта загрязнение атмосферы становится глобальной проблемой современного мира. Среди различных загрязнителей тяжёлые металлы и их соединения образуют значительную группу токсикантов, во многом определяющих антропогенное воздействие на экологическую структуру окружающей среды и на самого человека [1]. Из-за возрастающих масштабов производства и применения тяжёлых металлов, высокой токсичности, способности накапливаться в организме человека, оказывать вредное влияние даже в сравнительно низких концентрациях эти химические загрязнители должны быть отнесены к числу приоритетных.

Благодаря уникальным свойствам лишайники стали использовать для оценки степени загрязнения атмосферного воздуха [2].

В настоящее время мало известно о механизмах накопления лишайниками тяжёлых металлов, поэтому цель настоящей работы – изучение воздействия тяжёлых металлов на лишайник *Hypogymnia physodes* с помощью модельного эксперимента.

Методика исследований заключалась в том, что образцы лишайника *Hypogymnia physodes* находились над 20 % растворами солей тяжёлых металлов $ZnCl_2$, $MnCl_2 \cdot 4H_2O$, $Cd(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$, $Pb(NO_3)_2$ в четырёх герметично закрытых эксикаторах. Через определённое время (1, 2, 3 недели и 1 месяц) одновременно отбирали образцы лишайника для ИК спектрального анализа. Высушенные образцы использовали для приготовления таблетки с KBr по стандартной методике. ИК спектры образцов регистрировались на Фурье–ИК спектрометре «Equinox 55» фирмы «Bruker».

Результаты модельного эксперимента показали наличие характеристических полос, отвечающих за катион металла. На ИК спектрах также видны изменения в химической структуре самого лишайника, произошедшие под влиянием тяжёлых металлов.

Необходимо провести дальнейшие исследования по установлению характера взаимодействия различных солей тяжёлых металлов с химическими компонентами лишайника.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Голубкова Н.С., Малышева Н.В. // Ботан. журн., 1978. Т. 63, № 8. С. 1145–1152.
2. Бязров Л.Г. Лишайники в экологическом мониторинге. М., 2002. С. 336.

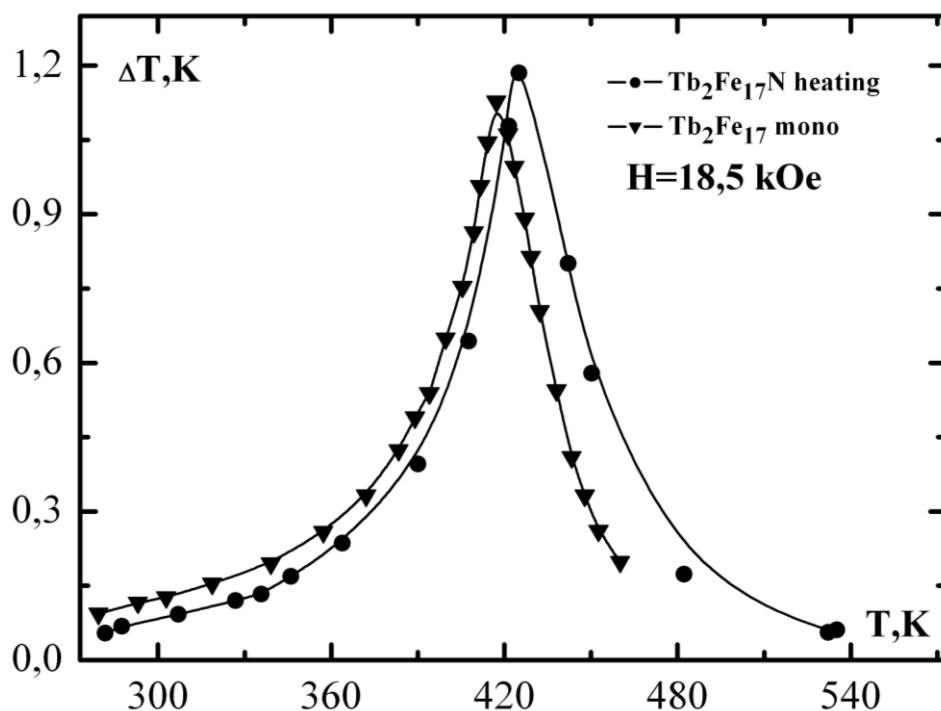
А.И. Арефьев

ВЛИЯНИЕ ВНЕДРЕНИЯ АТОМОВ АЗОТА НА ВЕЛИЧИНУ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ R_2Fe_{17}

Руководитель К.П. Скоков

Тверской государственной университет
Кафедра магнетизма

В качестве объектов исследования в данной работе были выбраны монокристаллические образцы интерметаллических соединений R_2Fe_{17} . Азотирование образцов производилось на кафедре высоких давлений химического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова в лаборатории Вербецкого. Измерения магнитокалорического эффекта (МКЭ) проводились прямым методом в полях до $H = 18,5$ кЭ.



Магнитокалорический эффект соединений Tb_2Fe_{17} вдоль лёгкой оси и $Tb_2Fe_{17}N$ в поле 18,5 кЭ

Как видно из графика, внедрение атомов азота в кристаллическую структуру монокристалла Tb_2Fe_{17} привело к увеличению величины МКЭ (~ 10 %) и незначительному смещению температуры Кюри.

Причиной увеличения МКЭ явилось возрастание величины намагниченности в результате изменений параметров кристаллической решётки из-за внедрения атомов азота в кристаллическую структуру монокристаллов интерметаллического соединения*.

* Koyama K., Fujii H. // Physical Review B. 2000. V. 61, № 14. P. 9475–9493.

С.П. Асташкина, О.В. Иванова, О.О. Коськов, А.М. Манукян

**ИЗМЕНЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ФРУКТОЗАНОВ В ЛЕКАРСТВЕННОМ
СЫРЬЕ ПОД ДЕЙСТВИЕМ МАГНИЕВОГО КОМПЛЕКСА
ЭТИЛЕНДИАМИН–N,N'–ДИАНТАРНОЙ КИСЛОТЫ**

Руководитель Т.И. Смирнова

Тверская государственная медицинская академия
Кафедра общей и биорганической химии

Фруктозаны (инулин и инулоиды) – важнейшая группа биологически активных веществ для многих видов лекарственного сырья: корней одуванчика, цикория, лопуха, корней и корневищ девясила. Присутствие этих веществ обеспечивает иммуномодулирующий, гипогликемический, противовоспалительный и нормализующий обмен веществ в организме эффекты. Увеличение их содержания улучшает качество лекарственного сырья.

С целью выяснения влияния обработки растений этилендиаминдисульфатом магния (Mg-ЭДДЯК) на уровень содержания фруктозанов в лекарственном сырье был поставлен полевой опыт. Участки естественного биоценоза (луг) с одуванчиком лекарственным в качестве доминирующего растения в течение лета 2009 г. трёхкратно обрабатывали миллимолярными растворами: первый – MgSO₄, второй – ЭДДЯК, третий – Mg-ЭДДЯК, четвёртый (контрольный) – H₂O dest.

Спирто-водные экстракты сырых корней одуванчика, собранных в 3-й декаде сентября, проанализировали спектрофотометрическим методом (фотометр КФК-3-01 «30МЗ») с применением калибровочного графика.

Результаты анализа:

<i>№ п/п</i>	<i>Состав раствора для обработки</i>	<i>Массовая доля инулина (%)</i>
1	MgSO ₄	23,0 ± 1,8
2	ЭДДЯК	20,7 ± 2,2
3	Mg-ЭДДЯК	28,1 ± 3,0
4	H ₂ O dest	19,5 ± 1,6

Как видно, обработка растений раствором Mg-ЭДДЯК вызывает увеличение содержания фруктозанов по сравнению с контролем более чем на 8 %, что подтверждает значительное биостимулирующее действие этилендиаминдисульфата магния.

И.А. Барабонова

ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ
ПРИ ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКЕ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА
ИНСТРУМЕНТАЛЬНОЙ СТАЛИ

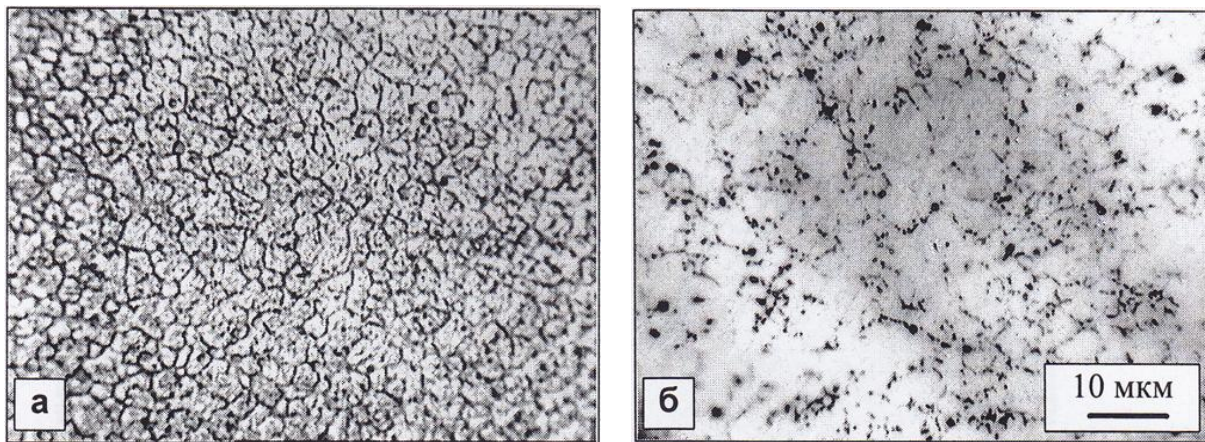
Руководитель Л.Е. Афанасьева

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии металлов и материаловедения

Использование лазерной обработки металлических материалов является перспективным в связи с возможностью целенаправленной организации структуры поверхностных слоев за счёт направленной кристаллизации, дисперсионного упрочнения и, как следствие, получения высокого комплекса механических и эксплуатационных свойств [1; 2].

В настоящей работе исследовали влияние высокоскоростной кристаллизации при лазерной закалке с оплавлением поверхности на микроструктуру и микротвёрдость быстрорежущей стали.

Зона оплавления глубиной до 50 мкм имеет мелкозернистое строение с размером зерна менее 5 мкм (рисунок, а). На рисунке, б представлено распределение карбидов M_6C , выявленное селективным травлением. Из-за высоких скоростей охлаждения ледебуритная эвтектика не образуется.



Микроструктура быстрорежущей стали в зоне оплавления

Структура стали в зоне закалки из жидкой фазы представлена мартенситом с повышенным содержанием остаточного аустенита и высокодисперсными карбидами. Микротвёрдость около 900 НV.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Григорьянц А.Г. Технологические процессы лазерной обработки. М., 2006.
2. Бровер Г.И. // Упрочняющие технологии и покрытия. 2005. № 12. С. 8–13.

Я.В. Боднарчук, В.В. Боднарчук

ТРАНСФОРМАЦИЯ ПОВЕРХНОСТНОЙ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ
МОНОКРИСТАЛЛА $\text{Sm}(\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x)_5$ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНЕГО
МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Руководитель О.Б. Дегтева

Тверской государственный университет
Кафедра магнетизма

В качестве объектов исследования в данной работе выбраны монокристаллические образцы $\text{Sm}(\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x)_5$. Наблюдение доменной структуры (ДС) проводилось на микроскопе «Neophot 30» в магнитных полях до $H = 5$ кЭ.

Выявленная доменная структура на базисной плоскости монокристалла $\text{SmCo}_{3,0}\text{Ni}_{2,0}$ после размагничивания обратным полем (РОП) и знакопеременным полем (РПП), убывающим по амплитуде, представлена на рис. 1 и 2.

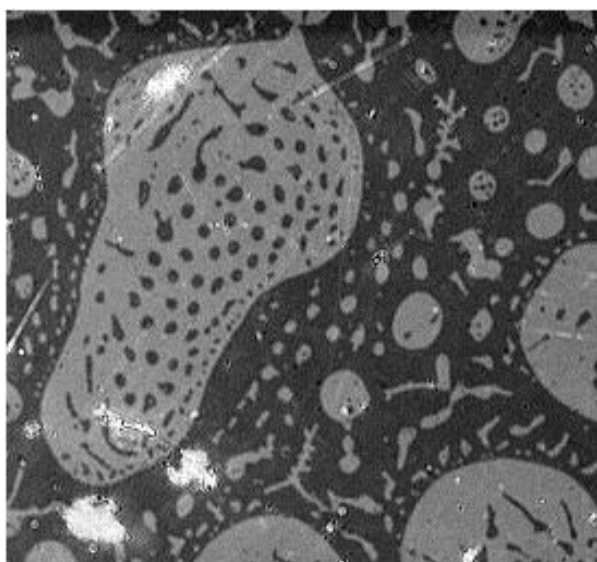


Рис. 1. Доменная структура соединения $\text{SmCo}_{3,0}\text{Ni}_{2,0}$ на базисной плоскости, выявленная методом полярного эффекта Керра (после РПП) (размер кадра 45×45 мкм)

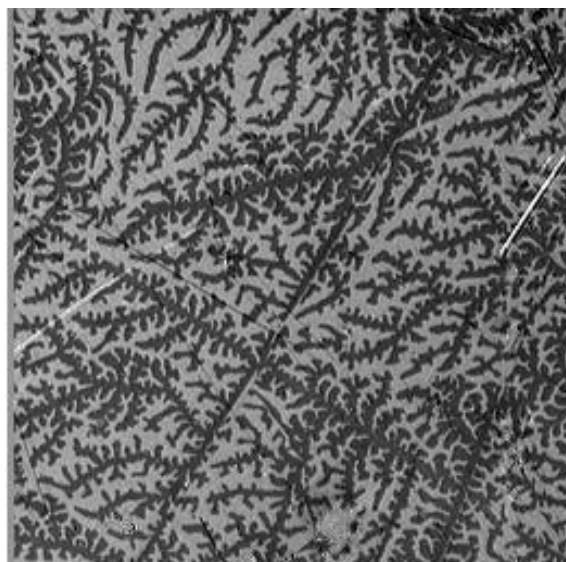


Рис. 2. Доменная структура соединения $\text{SmCo}_{3,0}\text{Ni}_{2,0}$ на базисной плоскости, выявленная методом полярного эффекта Керра (после РОП) (размер кадра 45×45 мкм)

Наблюдаемые домены имеют вид папоротников (рис. 2) либо видоизменённых папоротников (рис. 1), т.е. вид поверхностной ДС существенно зависит от способа размагничивания образцов.

Таким образом, анализ полученных изображений позволил сделать вывод о характере процессов намагничивания в исследуемой группе сплавов.

А.А. Бойкова, Е.К. Медведева

РАСЧЁТ СВОЙСТВ ХУ-ЗАМЕЩЁННЫХ МЕТИЛАМИНА ПО АДДИТИВНОЙ СХЕМЕ В ПАРНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Руководитель В.М. Смоляков

Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

По аддитивной схеме проведён расчёт энтальпий образования ХУ-замещённых метиламина $Y_n X_l H_{2-l-n} N - CH_{3-k-m} X_k Y_m$, где $X, Y = CH_3, C_2H_5$ – одновалентные заместители, а k, m, l, n – число заместителей у атома углерода и азота соответственно. В парном приближении не далее чем через один атом по цепи молекулы (без учёта поворотной изомерии) схема запишется в виде

$$P_{Y_n X_l H_{2-l-n} N - CH_{3-k-m} X_k Y_m} = a_0 p_0 + k p_1 + l p_2 + k^2 p_3 + l^2 p_4. \quad (1)$$

Здесь p_0, p_1, p_2, p_3, p_4 – эмпирические параметры, а a_0, k, l, k^2, l^2 – коэффициенты схемы. Числа взаимодействий, выраженные через степени замещения, имеют вид:

$$\begin{aligned} \xi_{CH_0} &= 3 - k - m, \quad \xi_{NH_0} = 2 - l - n, \quad \xi_{CX_0} = k, \quad \xi_{NX_0} = l, \quad \xi_{CX_0} = k, \\ \xi_{NY_0} &= n, \quad \eta_{HH_1}^C = \frac{1}{2}(3 - k - m) \cdot (2 - k - m), \quad \eta_{HH_1}^N = \frac{1}{2}(2 - l - n) \cdot (1 - l - n), \\ \eta_{HX_1}^C &= (3 - k - m) \cdot k, \quad \eta_{HX_1}^N = (2 - l - n) \cdot l, \quad \eta_{HY_1}^C = (3 - k - m) \cdot m, \\ \eta_{HY_1}^N &= (2 - l - n) \cdot n, \quad \eta_{XX_1}^C = \frac{1}{2}k \cdot (k - 1), \quad \eta_{XX_1}^N = \frac{1}{2}l \cdot (l - 1), \\ \eta_{XY_1}^C &= k \cdot m, \quad \eta_{XY_1}^N = l \cdot n, \quad \eta_{YY_1}^C = \frac{1}{2}m \cdot (m - 1), \quad \eta_{YY_1}^N = \frac{1}{2}n \cdot (n - 1). \end{aligned} \quad (2)$$

По схеме (1) проведён расчёт $\Delta_f H^0_{298,16 K, газ}$ 30 ХУ-замещённых метиламина ($X, Y = CH_3, C_2H_5$), некоторые из которых приведены в таблице.

Расчёт $\Delta_f H^0_{298,16 K, газ}$ некоторых метилэтилзамещённых метиламина

ХУ-зам. метиламина	$\Delta_f H^0_{298,16 K, газ}$		ХУ-зам. метиламина	$\Delta_f H^0_{298,16 K, газ}$	
	опыт	расч.		опыт	расч.
CH_3-NHX	25,4	25,40	CH_2X-NX_2	–	24,34
CH_2Y-NH_2	–	24,27	$CHXY-NHX$	–	27,73
CH_2X-NHY	–	26,60	CH_2Y-NXY	–	25,40

Необходимые параметры найдены следующими (в кДж/моль):
 $p_0 = 24,27, k = 2,792, l = 3,39, k^2 = 0,462, l^2 = -2,26$.

А.В. Бурцев, А.Н. Юпатов

УСТАНОВКА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕРМОИНДУЦИРОВАННЫХ
БЫСТРОПРОТЕКАЮЩИХ ПРОЦЕССОВ В
СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ

Руководитель Б.Б. Педько

Тверской государственной университет
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Характерной особенностью всех релаксоров является отсутствие структурного макроскопического фазового перехода: структура релаксора представляет собой неполярную матрицу, в которой возникают полярные кластеры, их размеры по разным оценкам колеблются от 100 до 1000 Е. Полярные кластеры зарождаются при температуре, называемой температурой Бёрнса, которая существенно выше температуры, соответствующей пику диэлектрической проницаемости.

В проделанной работе наблюдались импульсные процессы выше температуры диэлектрической проницаемости, которые авторами связываются с изменением состояния поляризации отдельных областей и кристалла в целом. Нами сделано предположение о возможном определении температуры Бёрнса посредством наблюдения вышеуказанных импульсов.

В результате определена необходимость разработать установку для исследований протекания термоиндуцированных скачкообразных процессов в кристаллах сегнетоэлектриков-релаксоров при температурах, существенно превышающих температуру максимума диэлектрической проницаемости.

Принцип работы собранной установки аналогичен работе классической установки по исследованию кинетики перестройки доменной структуры сегнетокристаллов.

Проведены исследования протекания термоиндуцированных импульсных процессов в сегнетоэлектрических кристаллах выше температуры максимума диэлектрической проницаемости.

А.А. Быховец

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ СЕГНЕТОКЕРАМИКИ ЦТС-46

Руководитель Н.Н. Большакова

Тверской государственной университет

Кафедра сегнето- и пьезоэлектриков

Сегнетоэлектрическая керамика нашла широкое применение не только для изготовления пьезоэлементов, но и пьезоэлектрических актюаторов. Успешное использование многослойных актюаторов (МКА) стало возможным благодаря разработке сегнетомягкого материала ЦТС-46 с пониженной температурой спекания.

Цель настоящей работы – получение информации об электрофизических характеристиках и процессах переключения пьезокерамики ЦТС-46 и сравнение импульсных процессов, возникающих в пьезоэлементах и опытном образце актюатора, изготовленном на основе данной керамики.

№	d , мм	ϵ	$tg \delta$	$\gamma, \cdot 10^{-4} \text{ Кл/К}\cdot\text{м}^2$	$d_{31}, \cdot 10^{-12} \text{ Кл/Н}$
1	1	750	0,18	3,7	2,1
2	1	700	0,19	4,1	2,0
3	1	750	0,19	3,9	2,1
4	1	750	0,19	4,2	2,0
5	1	700	0,18	3,6	2,2

В таблице приведены результаты исследований электрофизических характеристик пьезокерамики ЦТС-46. Видно, что образцы толщиной $d = 1$ мм имеют приблизительно одинаковые значения диэлектрической проницаемости, тангенса угла диэлектрических потерь, пьезокоэффициента и пьезомодуля, что свидетельствует об однородности состава керамики.

Установлено:

1. Синтезированная керамика ЦТС-46 имеет достаточно однородный состав и высокую степень поляризованности, о чём свидетельствуют практически одинаковые значения электрофизических характеристик для образцов соответствующих толщин;
2. Приложение к пьезоэлементам ЦТС-46 внешнего постоянного электрического поля вызывает процессы их поляризации;
3. При ступенчатом увеличении и уменьшении полей в интервале от 0 до 4 кВ/см зависимости числа скачков переключения от поля носят гистерезисный характер.

Д.А. Вагунин

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ АГРОЭКОЛОГИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ
НА ПРОДУКТИВНОСТЬ КОЗЛЯТНИКА ВОСТОЧНОГО
И ЕГО СМЕСЕЙ С ЗЛАКОВЫМИ ТРАВАМИ

Руководитель В.А. Тюлин

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра ботаники и кормопроизводства

Реформирование сельскохозяйственного производства привело к образованию различных форм собственности. Новые экономические отношения создали предпосылки для поиска нетрадиционных подходов к проблемам экологии, энерго- и ресурсосбережения. Использование нетрадиционных кормовых культур наряду с традиционными (бобово-злаковые травосмеси) в кормопроизводстве привлекает внимание. Одной из таких культур является козлятник восточный, отличающийся долголетием, высокой продуктивностью, зимостойкостью и холодостойкостью, высокой азотфиксирующей способностью.

Исследования проводили на агроэкологическом полигоне ВНИИМЗ в 2008–2009 гг. На микроландшафтах южного склона, вершины холма и северного склона изучали адаптивные реакции козлятника восточного.

Наибольшая урожайность сухой массы была отмечена на посевах козлятника одновидового глеевой почвы, составив в среднем 21,6 т/га. Наибольшее количество кормовых единиц было получено на посевах козлятника одновидового глеевой почвы, составив в среднем 17,3 к.е.

Процент участия козлятника на посевах с тимофеевкой составлял от 70,3 % на глеевой почве без применения удобрений до 76 % на глееватой почве без применения удобрений. На посевах травосмеси козлятника и овсяницы, козлятник восточный так же доминировал на всех разновидностях почв, составляя от 69,8 % на глубокооглеенной почве с уровнем минерального питания в 6 тыс. к.е. до 75,9 % на глееватой почве без удобрений. На посевах травосмеси козлятника, овсяницы и тимофеевки козлятник сильно доминировал на глеевой почве и составил в среднем 95,8 %. На глубокооглеенной и глееватой почве процентное соотношение изменялось в среднем от 78,3 до 80,6 % соответственно.

Наибольшие денежные затраты были при возделывании козлятника и тимофеевки на глеевой почве, составив 10,8 тыс. руб/га. Условно чистый доход составлял от 35,3 тыс. руб/га на посевах козлятника и овсяницы глееватой почвы до 73,5 тыс. руб/га на посевах козлятника и тимофеевки глеевой почвы. Наибольший уровень рентабельности отмечен при возделывании козлятника одновидового глеевой почвы, составив 681,8 %. Наибольшая окупаемость отмечена на посевах козлятника одновидового глеевой почвы, составив 7,82 руб/руб затрат.

А.С. Васильев

ИЗМЕНЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА ХОЗЯЙСТВЕННОЙ
ПРОДУКТИВНОСТИ ЯРОВЫХ ХЛЕБОВ ПЕРВОЙ ГРУППЫ
ПОД ВЛИЯНИЕМ АГРОКЛИМАТИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ
В ПЕРИОД ГЛОБАЛЬНОГО ПОТЕПЛЕНИЯ КЛИМАТА

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра растениеводства

Широко обсуждаемая в настоящее время проблема глобального потепления климата актуальна и для Тверской области.

В связи с этим нами была поставлена задача – изучить зависимость урожайности яровых зерновых культур региона (яровой пшеницы, ячменя и овса) от основных погодных факторов, характеризующих условия вегетационного периода растений. В качестве объекта исследований было выбрано одно из самых успешных хозяйств Верхневолжья – колхоз «Красный Октябрь» Сонковского района. Для сравнительной оценки были взяты усредненные данные урожайности по району. Характеристика агроклиматических условий проводилась по МС Красный Холм. Все расчёты велись по Б.А. Доспехову (1985).

Статистический анализ данных за последние 16 лет выявил среднюю положительную зависимость урожайности овса по району от суммы осадков ($r = 0,54$). Из множественных линейных уравнений плоскости регрессии наиболее достоверным ($T_{\phi} = 3,25$ при $t_{05} = 2,16$) и надёжным ($F_{\phi} = 4,73$ при $F_{05} = 3,80$) является уравнение зависимости среднерайонной урожайности овса от сумм эффективных температур и осадков.

Исследования показали, что по всем культурам урожайность находится в более тесной положительной связи со среднесуточной температурой воздуха за май и август, а также с суммой осадков за май, июнь–июль и в обратной – со среднесуточной температурой за июнь–июль и суммой осадков за август. Наиболее сильная корреляционная зависимость прослеживается между урожаем яровой пшеницы в колхозе и суммой осадков за май ($r = 0,89$), а также между урожаем овса по району и суммами осадков за июнь ($r = 0,67$) и июль ($r = 0,73$).

Анализ криволинейной связи выявил сильную функциональную зависимость урожайности яровой пшеницы по району от суммы осадков за июнь ($\eta_{yx} = 0,80$).

Таким образом, на примере конкретного хозяйства видно, что путём широкого использования современных агротехнологий, пока ещё слабо развитых в регионе, можно значительно снизить зависимость урожайности от агроклиматических условий.

А.В. Виноградов

ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ SBN СО ВСТРЕЧНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИЕЙ

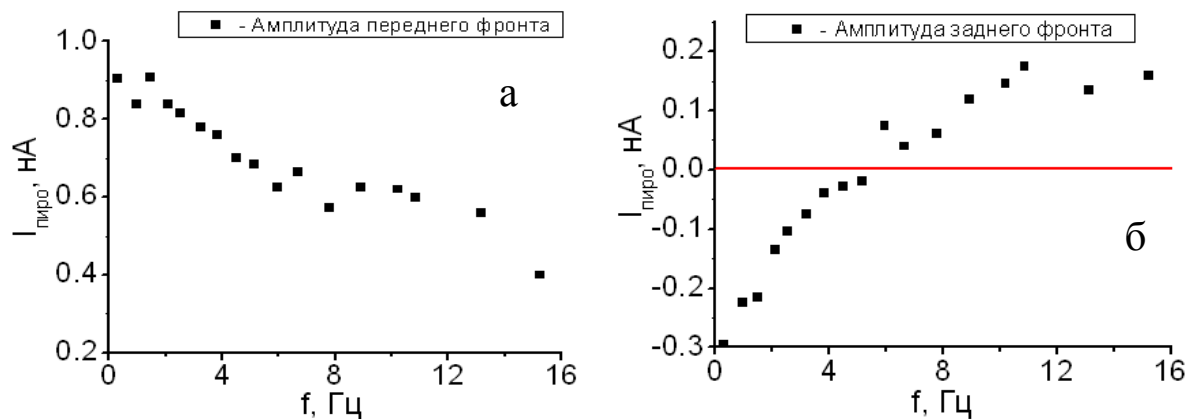
Руководители: А.В. Солнышкин, А.А. Богомолов

Тверской государственной университет
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Цель настоящей работы – являлось исследование пироэлектрического эффекта динамическим методом в образцах монокристаллов ниобата бария-стронция (SBN: 0,61 и SBN: 0,75) с системой встречных доменов.

Кристаллы выращены модифицированным методом Степанова в НЦЛМиТ ИОФ РАН. Образцы представляли собой пластины полярного z-среза толщиной $1 \div 2$ мм с нанесёнными серебряными электродами.

На основе осциллограмм пироэлектрического тока при воздействии модулированного лазерного излучения на образцы получены частотные зависимости амплитуды соответствующей началу импульса тока (рисунок, а) и его окончанию (рисунок, б).



Частотная зависимость пироотклика образца кристалла SBN: 0,61 для амплитуд переднего (а) и заднего (б) фронтов

Как видно из представленных на рисунке результатов, с увеличением частоты ток, соответствующий началу импульса, уменьшается, а ток, соответствующий окончанию импульса в интервале от 0 до 5 Гц, имеет противоположное направление. Это свидетельствует о неоднородном распределении поляризации, что может быть связано с существованием в образцах кристаллов SBN системы доменов со встречной поляризацией.

К.О. Воробьёва, В.Е. Ситникова

ХАРАКТЕРИСТИКА РАССЕЙВАЮЩИХ ЧАСТИЦ В ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЕ МЕТОДАМИ ОПТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

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

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

В настоящее время полимерные композиционные материалы находят широкое применение. Введение в полимерную матрицу наполнителей различной химической природы, геометрической формы и концентрации даёт возможность получать композиты с необходимыми свойствами. Для регулирования этих свойств следует контролировать распределение частиц наполнителя и их агрегацию в полимере. В связи с этим возникает необходимость разработки экспериментального метода для характеристики частиц наполнителя внутри полимерной матрицы.

Нами ранее для этих целей был предложен метод оптической спектроскопии. Цель настоящей работы – проверка возможностей развитого спектроскопического подхода для анализа частиц наполнителя в полимерных композитах и других модельных системах.

Объектами исследования служили композиционные плёнки поливинилового спирта (ПВС), полученные из 5 % водного раствора полимера, со следующими наполнителями: монтмориллонит с размером частиц 0,2, 0,5 и 1 мкм; наночастицы CaCO_3 , TiO_2 и талька. Раствор полимера с наполнителем подвергали обработке в ультразвуковой ванне в течение 35 с с целью уменьшения агрегации частиц наполнителя. В качестве модельной системы использовали водные суспензии с теми же наполнителями, отличающимися геометрической формой и величиной показателя преломления. ИК спектры в диапазоне 7000–400 cm^{-1} записывали на Фурье–ИК спектрометре «Equinox 55», а спектры в УФ и видимом диапазонах – на приборе «Specord M40». Расчёт распределения частиц по размерам из спектроскопических данных проводили с помощью программы Origin. Для контроля спектральных данных размеры частиц и их распределение исследовали также на оптическом микроскопе «Neophot 30».

В результате проведённой работы определены распределение частиц по размерам и их средний размер. Установлено, что при увеличении концентрации частиц наполнителя в композите и суспензии происходит агрегация частиц.

Работа выполнена при поддержке гранта Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере (контракт № 6972р/9585) (УМНИК).

В.В. Гребешков
 МАКРОЦИКЛИЧЕСКИЙ ЛИГАНД $\text{ц}-(\text{NH})_4\text{C}_8\text{H}_{16}\text{Ni}$:
 ПЕРЕЧИСЛЕНИЕ ИЗОМЕРОВ ЗАМЕЩЕНИЯ

Руководители: В.М. Смоляков, Д.Ю. Нилов
 Тверской государственный университет
 Кафедра физической химии

Решена задача перечисления и систематизации изомеров замещения по С–С-связям макроциклического лиганда $\text{ц}-(\text{NH})_4\text{C}_8\text{H}_{16}\text{Ni}$ на основе теоремы Д. Пойа. Операции симметрии группы D_{2d} ($E, C_2, 2C'_2, 2S_4, 2\sigma_d$) индуцируют на множестве мест возможного замещения $\text{ц}-(\text{NH})_4\text{C}_8\text{H}_{16}\text{Ni}$ подстановки, записываемые в виде циклов через символы $f_l^\alpha, f_m^\beta, \dots$, где α, β, \dots – число циклов соответственно порядка l, m, \dots : $E = f_1^{16}$, $C_2 = f_2^8$, $2C'_2 = f_2^8$, $2S_4 = 2f_4^4$, $2\sigma_d = 2f_2^8$. Сумма всех f_l^α , делённая на порядок группы, даёт *циклового Z индекс* группы для подсчёта числа изомеров без учёта свойств хиральности:

$$Z_2(D_{2d}) = 1/8(f_1^{16} + 5f_2^8 + 2f_4^4). \quad (1)$$

Формула симметрии, учитывающая и зеркальные изомеры, запишется в виде:

$$Z_1(D_2) = 1/4(f_1^{16} + 3f_2^8), \quad (2)$$

а для подсчёта числа ахиральных (учитываются только операции второго рода) и хиральных пар (ХИП) изомеров соответственно в виде (таблица):

$$Z^{Achir.}(D_{2d}) = 1/2(f_2^8 + f_4^4), \quad (3)$$

$$Z^{XIII}(D_{2d}) = 1/8(f_1^{16} + f_2^8 - 2f_4^4). \quad (4)$$

X-, XY-, ... замещённые $\text{ц}-(\text{NH})_4\text{C}_8\text{H}_{16}\text{Ni}$ распадаются на $\rho(m) = 231$ семейство.

Число X- и XY-замещённых изомеров лиганда $\text{ц}-(\text{NH})_4\text{C}_8\text{H}_{16}$ по С–С-связям
 в семействах, вычисленное по (1–4)

Семейства	$Z_2(D_{2d})$	Z^{XIII}	Z^{Achir}	Семейства	$Z_2(D_{2d})$	Z^{XIII}	Z^{Achir}
h^{16}	1	0	1	$h^{11}x^5$	546	546	0
$h^{15}x$	2	2	0	$h^{10}x^6$	1036	1008	28
$h^{14}x^2$	20	16	4	h^9x^7	1430	1430	0
$h^{13}x^3$	70	70	0	h^8x^8	1654	1616	38
$h^{12}x^4$	246	230	16	h^7x^9	1430	1430	0

Когда все заместители разные, имеем N^{izom} : по $Z_2(D_{2d})$ – 2615348736000 изомеров, по $Z_1(D_2)$ – 5230697472000, а по Z^{XIII} – 2615348736000, по $Z^{Achir.}(D_{2d})$.

Распределения XY-, XYZ-, ... замещённых можно получить аналогичным образом.

И.В. Гринев

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ
К ИССЛЕДОВАНИЮ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
КОНДЕНСИРОВАННЫХ ПЛЁНОК

Руководители: В.В. Зубков, В.М. Самсонов

Тверской государственный университет
Кафедра теоретической физики

На основе метода функционала плотности проведены расчёты распределения плотности в равновесных леннард-джонсовских плёнках. Рассматривались как очень тонкие адсорбционные, так и смачивающие слои. Было установлено, что профили плотности характеризуются наличием выраженных максимумов, которые свидетельствуют о высокой степени позиционной упорядоченности молекул в слое.

Основными входными параметрами при расчётах были: относительное давление $s = p/p_s$, где p_s – давление насыщенного пара, приведенная температура $\tau = T/T_c$, где T_c – критическая температура для данного вещества; отношения размерных $\sigma_s^* = \sigma_s/\sigma_l$ и энергетических $\varepsilon_s^* = \varepsilon_l/\varepsilon_s$ параметров парного потенциала, характеризующего взаимодействие между молекулами адсорбента и адсорбата.

Основные результаты и выводы:

1. Увеличение относительного давления приводит не только к возрастанию величины плотности, но и к появлению дополнительных монослоев в адсорбционном слое;
2. Увеличение приведённого энергетического параметра подложки приводит к аналогичному эффекту;
3. Увеличение же температуры приводит к некоторому уменьшению плотности (и степени заполнения слоя). Поведение плотности в целом остаётся тем же, но появление второго пика происходит при большем значении энергетического параметра подложки;
4. Можно заключить, что увеличение размеров атомов подложки по сравнению с размерами атомов адсорбата уменьшает адсорбцию.

Н.В. Гриц

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ЛАНДШАФТНЫХ УСЛОВИЙ НА ПРОДУКТИВНОСТЬ ОВСА ПОСЕВНОГО

Руководитель В.А. Тюлин

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра ботаники и кормопроизводства

При дифференцированном размещении зерновых культур с учётом местных климатических и орографических факторов возможно создание условий для повышения продуктивности и её устойчивости, а также для увеличения экономической эффективности землепользования.

Исследования проводили на агроэкологическом полигоне ВНИИМЗ в 2007–2009 гг. На микроландшафтах северного и южного склонов и вершине холма изучали адаптивные реакции овса посевного.

Урожайность зерна овса за годы исследований была выше на склоне северной экспозиции – до 24,1 ц/га на транзитном АМЛ. В этом варианте при длине метёлки в 12,5 см формировалось до 35 зёрен. На транзитно-аккумулятивном АМЛ этого склона было получено 23,2 ц/га. В 2008 г. на этом микроландшафте отмечена наибольшая урожайность овса посевного – 37,9 ц/га. На продуктивность овса посевного значительное влияние оказывало содержание легкогидролизующего азота. Оптимальное содержание легкогидролизующего азота в почве, при котором урожайность овса достигает максимальных значений, – 7,2–9,2 мг-экв./100 г. Сила влияния данного фактора 29,2 %.

Положительное влияние на продуктивную кустистость овса посевного оказывала пористость аэрации почвы (37,5 %). Оптимальная величина данного показателя 20–28 %, т.е. большая часть пор должна быть заполнена водой, потому что овёс посевной по сравнению с другими культурами более влаголюбив. Формирование массы 1000 зёрен на 12,8 % обеспечивает содержание в почве подвижного фосфора. Большая масса 1000 зёрен образуется при содержании в почве 24–44 мг/100 г подвижного фосфора.

В среднем за годы исследований наиболее ценное по содержанию питательных веществ зерно овса посевного получено на северном склоне – в среднем по вариантам содержание белка составляет 9,8 %, жира до 5,63 %.

Затраты на выращивание овса посевного были выше на АМЛ склона северной экспозиции (до 5147,6 руб.), несмотря на это, они полностью окупаются полученной продукцией и дают максимальный по сравнению с другими вариантами условно-чистый доход. Рентабельность производства овса на транзитном АМЛ – 180,9 %.

И.А. Груздев

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ СОЕДИНЕНИЙ ТЕЛЛУРА С КИСЛОРОДОМ

Руководитель Ю.М. Смирнов

Тверской государственный университет

Кафедра прикладной физики

В работе проведён анализ данных о различных соединениях теллура с кислородом, таких, как TeO_3 , Te_2O_5 , Te_4O_9 , TeO_2 , и нескольких аморфных модификаций.

Известны три фазы соединения TeO_2 : 1) тетрагональная фаза со структурой рутила; 2) орторомбическая фаза со структурой броекита; 3) вторая тетрагональная фаза – искажённая структура рутила (парателлурит).

В работе рассмотрены свойства парателлурита, пока единственной фазы TeO_2 , полученной в виде искусственных монокристаллов. Высокое акустооптическое качество парателлурита сочетается с хорошими тепловыми и механическими характеристиками. Парателлурит обладает значительным двупреломлением и оптической активностью с левым вращением плоскости поляризации. Для создания акустооптических приборов на основе парателлурита особый интерес представляет дифракция света на медленной акустической сдвиговой волне, распространяющейся в плоскости (001) с направлением $\mathbf{K} [\bar{1}10]$ и поляризацией $\mathbf{S} [1\bar{1}0]$.

Точечная группа парателлурита – 422, пространственные группы: $D_4^4 = P4_12_12$ и $D_4^7 = 4_32_12$. Считается, что TeO_2 имеет решётку типа Q (по другим системам Γ_Q или tP).

Рассмотрено предположение, полученное на основе данных исследования двойниковой структуры парателлурита, о его гипотетической прафазе группы m3m.

Показано, что с помощью метода симметрично-группового анализа, основанного на группах и операциях симметрии, можно получить доказательство возможности наличия модификации P222 для парателлурита, имеющего группу симметрии P422. (Известно, что при комнатной температуре и давлении 8,86 kbar TeO_2 претерпевает фазовый переход 2 рода $D_4^4 - D_2^4$.)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Смирнов Ю.М. Нано- и гетероструктуры в электронике. Тверь, 2008.
2. Блистанов А.А. Кристаллы квантовой и нелинейной оптики. М., 2000.
3. Гуфан А.Ю., Гуфан Ю.М. // Физ. тв. тела. 2006. Т. 48, вып. 2. С. 328–333.
4. Mirgorodski A.P., et. al. // Journal Phys. and Chem. Solids. 2000. V. 61. P. 501–509.

М.В. Гуляев

ОПТИМИЗАЦИЯ МИНЕРАЛЬНОГО ПИТАНИЯ И ГУСТОТЫ СТОЯНИЯ В ТЕХНОЛОГИИ ВОЗДЕЛЫВАНИЯ ЯРОВЫХ ЗЕРНОВЫХ КУЛЬТУР

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра растениеводства

Для условий Верхневолжья актуальным является изучение сравнительной продуктивности новых сортов разных видов яровых зерновых культур (пшеница, тритикале, ячмень, овёс) при программном выращивании их в посевах разной густоты по экологически безопасным технологиям.

В связи с этим мы в 3-факторном полевом опыте на окультуренной дерново-среднеподзолистой, остаточной карбонатной глееватой почве на морене, супесчаной по гранулометрическому составу. Фактор А – культуры: яровая пшеница, яровая тритикале, ячмень, овёс. Фактор В – фоны минерального питания, рассчитанные на урожайность: 1 – 25 ц/га (урожайность в производстве, УП); 2 – 35 ц/га (ДВУ по биогидротермическому потенциалу продуктивности). Фактор С – нормы высева – 4, 5, 6, 7 млн всхожих семян на 1 га. Объекты исследований – сорта яровой пшеницы – Курская, яровой тритикале – Ульяна, ячменя – Сонет, овса – Друг.

В результате исследований выявлено, что наиболее урожайным в условиях повышенного увлажнения 2009 г. был овёс, который на 1-м фоне в среднем по нормам высева сформировал урожайность 34,7 ц/га, на 2-м – 36,9 ц/га; наименее урожайным – ячмень: на 1 фоне – 15,3, на 2-м – 18,8 ц/га. Яровая пшеница накопила урожайность на 1-м фоне – 27,2, на 2-м – 31,3 ц/га, яровая тритикале соответственно – 28,0 и 37,1 ц/га.

Более высокую прибавку урожая от усиления фона – 9,1 ц/га (32,5 %) – обеспечило возделывание тритикале. Ближе к оптимальным условиям в агроценозах для всех изучаемых культур сложились при норме высева 6 млн всхожих семян на га, что способствовало получению наибольших урожаев зерна на обоих фонах. Так на 1-м фоне получено по пшенице 28,6 ц/га, по тритикале – 35,4, по ячменю – 16,0, овсу – 37,0 ц/га, а на 2-м фоне соответственно – 33,7; 39,4; 21,4 и 38,2 ц/га. Это позволило получить урожайность выше запрограммированного уровня.

Таким образом, в условиях 2009 г. наиболее урожайными были овёс и тритикале, которые на обоих фонах минерального питания в лучшем варианте технологии возделывания обеспечили получение урожайности выше запрограммированных уровней за счёт оптимизации густоты стояния и минерального питания. Их возделывание при программном выращивании является перспективным.

П.В. Гусев, Д.А. Чалова, К.А. Азатян

СТИМУЛИРУЮЩЕЕ ДЕЙСТВИЕ ИМИНОДИСУКЦИНАТА МАГНИЯ
НА *SACCHAROMYCES CEREVISIAE*

Руководитель Т.И. Смирнова

Тверская государственная медицинская академия
Кафедра общей и биоорганической химии

При изучении биологической активности комплексонов и их воздействия на окружающую среду следует учитывать тот факт, что в жидких средах, будь то биологические жидкости в составе растительных и животных организмов, почвенный раствор или вода открытого водоёма, комплексоны, обладающие высокой хелатирующей способностью, образуют комплексы с катионами металлов. Следовательно, воздействие на живую и неживую природу в естественных условиях оказывают не свободные комплексоны, а их комплексонаты. Все упомянутые водные среды, кроме ионизированного кальция, обязательно содержат и магний, выполняющий в организмах роль макроэлемента. Катионы магния в живой клетке входят в состав многих ферментов, а в митохондриях способны активировать почти все ферменты, требующие наличия двухзарядных катионов металлов.

С целью сравнения биологической активности иминодисукцинатного комплекса магния (Mg-ИДЯК) и неорганической соли $MgSO_4$ в полной синтетической среде культивирования $MgSO_4$ (4 ммоль/л) заменяли таким же количеством Mg-ИДЯК. Затем 50 мл среды культивирования и 5 г прессованных пекарских дрожжей помещали на 2 часа в колбу Эрленмейера объёмом 250 мл с пробкой и сернокислотным затвором. Массу выделившегося диоксида углерода определяли по убыли массы колбы за время опыта. По массе CO_2 рассчитывали интенсивность брожения, а по окончании опыта – ещё и число микробных тел в единице объёма среды культивирования. Опыт проведён в пятикратной повторности.

Было обнаружено, что в среде, содержащей комплексонат, интенсивность брожения возрастает на $8,5 \pm 2,2$ % и число микробных тел увеличивается до $2 \cdot 10^{10}$ м.т./см³ по сравнению со средой, содержащей $MgSO_4$ ($1,2 \cdot 10^{10}$ м.т./см³). Следовательно, можно предположить, что Mg-ИДЯК усваивается дрожжами лучше неорганической соли и служит не только источником ионов Mg^{2+} , но и дополнительным источником аммонийного азота, а также органических кислот.

Д.А. Дмитриев, Д.А. Тимофеев

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ РАССМОТРЕНИЕ МАНЖЕТЫ ЖИДКОСТИ
МЕЖДУ ДВУМЯ СФЕРИЧЕСКИМИ НАНОЧАСТИЦАМИ

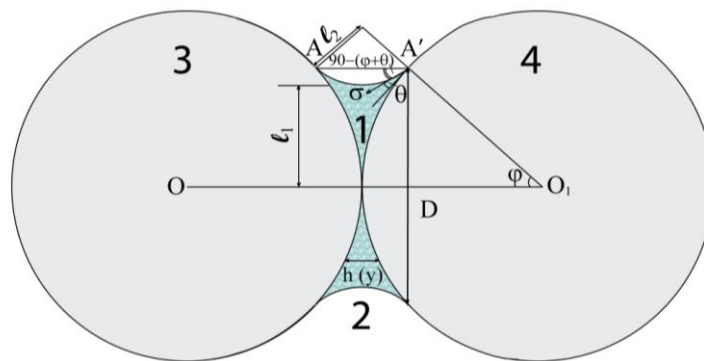
Руководитель Н.Ю. Сдобняков

Тверской государственный университет
Кафедра теоретической физики

В рамках термодинамической теории возмущений на основе определения равновесной формы манжеты жидкости между двумя твёрдыми сферическими наночастицами исследована избыточная свободная энергия такой наносистемы:

$$\Psi = \Psi_c + U_{34}^{(ss)}(R, l) = 2U_{13}^{(ls)}(R, l, l_1) - \frac{1}{2}U_{12}^{(ll)}(r, l, l_1) - U_{13}^{(ll)}(R, l, l_1) + U_{34}^{(ss)}(R, l),$$

где фаза 1 – жидкая манжета, фаза 2 – внешняя по отношению к системе среда, фазы 3, 4 – твёрдые сферические частицы, Ψ_c – избыточная свободная энергия манжеты.



Геометрия рассматриваемой системы (θ – краевой угол смачивания, σ – поверхностное натяжение на границе жидкость–газ)

Установлено, что при увеличении размера твёрдых сферических частиц избыточная свободная энергия постоянной по объёму манжеты имеет последовательные локальные экстремумы (причем с увеличением объёма манжеты число экстремумов может увеличиваться), а с ростом радиуса твёрдых наночастиц нелинейно увеличивается. Для исследования стабильности такой системы можно ввести в рассмотрение «условное» расклинивающее давление $\Pi^*(\bar{h}) = -\partial(\Psi/S_c)/\partial\bar{h}$, где S_c – площадь контакта манжеты с твёрдыми сферическими наночастицами, \bar{h} – эффективная средняя толщина манжеты, а также критерий устойчивости $\partial\Pi^*(\bar{h})/\partial\bar{h} < 0$, согласно которому можно установить значение толщин, для которых условие устойчивости плёнки выполняется.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 10-03-00129-а, 10-03-97502-р_центр_а и гранты Президента РФ № МК-649.2010.3).

А.М. Дожделев

ВЛИЯНИЕ ТЕРМООБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ БЫСТРОРЕЖУЩЕЙ СТАЛИ С ПОВЫШЕННЫМ СОДЕРЖАНИЕМ СЕРЫ ПОСЛЕ ГАЗОЛАЗЕРНОЙ РЕЗКИ

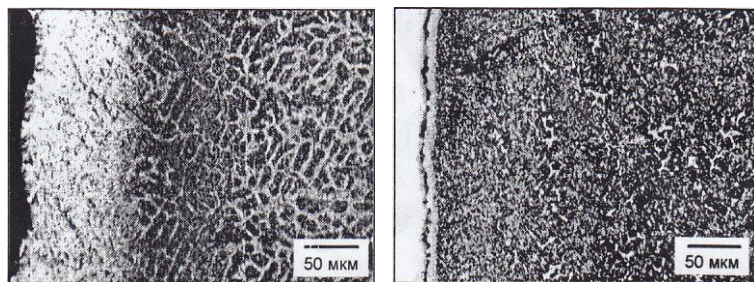
Руководитель С.Е. Ильяшенко

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии металлов и материаловедения

При разработке различных технологий и материалов существенным фактором является экономия дорогостоящих элементов, входящих в состав быстрорежущих сталей. С этой целью широко используется биметаллический инструмент с рабочей быстрорежущей кромкой, наплавленной на корпус из низколегированной конструкционной стали. Структура наплавленной быстрорежущей стали определяется скоростью охлаждения от температуры ликвидус до температуры окружающей среды, является типичной для литой стали и имеет дендритный характер. Она состоит из ледебуритной эвтектики, остаточного аустенита, мартенсита и карбидов. Различные виды термической обработки существенно влияют на структуру и свойства наплавленной быстрорежущей стали.

Цель данной работы – исследование микроструктуры наплавленной быстрорежущей стали после низкотемпературного отпуска.

Наплавку осуществляли дугой прямого действия на постоянном токе обратной полярности в защитной среде аргона порошковой проволокой, по химическому составу близкой к быстрорежущей стали Р9М4К8 с повышенным содержанием серы (до 0,24 %). После наплавки образцы подвергали низкотемпературному отпуску для снятия внутренних напряжений и разрезали на лазерном комплексе «Bysprint» компании «Bystronic». Затем образцы отжигали при $T = 740\text{ }^{\circ}\text{C}$ в течение 20 минут. Микроструктуру наплавленной стали исследовали на металлографическом микроскопе МИМ-8 после травления в 3 % спиртовом растворе азотной кислоты.



Структура наплавленной быстрорежущей стали Р9М4К8 после газолазерной резки:
а – исходное состояние,
б – после отжига

В результате исследования выявлено, что отжиг существенно влияет на толщину оплавленной зоны и зоны термического влияния. Как видно из представленных микрофотографий, структура наплавленного металла в исходном состоянии содержит ледебуритную эвтектику в виде сетки по границам зёрен. После отжига происходит перекристаллизация наплавленного слоя, что приводит к коагуляции карбидов, а металлическая матрица состоит из сорбитообразного перлита, что обусловлено распадом аустенита и его переходом в перлитную структуру.

А.М. Дожделев

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ БЫСТРОРЕЖУЩЕЙ СТАЛИ С ПОВЫШЕННЫМ СОДЕРЖАНИЕМ СЕРЫ ПОСЛЕ ГАЗОЛАЗЕРНОЙ РЕЗКИ

Руководитель С.Е. Ильяшенко

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии металлов и материаловедения

Изготовление биметаллического инструмента, в котором в качестве основного металла используются конструкционные стали, а режущие кромки изготавливают из быстрорежущей инструментальной стали, обладающей высокими твёрдостью, износостойкостью и теплостойкостью, является перспективным направлением, позволяющим экономить до 90 % дорогостоящих легирующих элементов. Тем не менее, обладая высоким комплексом механических и технологических свойств, быстрорежущие стали уступают по теплостойкости твёрдым сплавам, что существенно на высоких скоростях резания. В литературе имеются противоречивые данные о влиянии микродобавок некоторых поверхностно-активных элементов, обуславливающих эффект самосмазывания инструмента, на его обрабатываемость и износостойкость. Таким элементом может служить сера, которая, образуя сульфиды, снижает адгезионное изнашивание. Целью данной работы было исследование микроструктуры и свойств наплавленной быстрорежущей стали с повышенным содержанием серы после газолазерной резки.

На заготовки из горячекатаной полосы стали 30ХГСА осуществляли одноваликовую наплавку порошковой проволокой, по химическому составу близкой к быстрорежущей стали Р9М4К8 с повышенным содержанием серы (до 0,24 %), дугой прямого действия на постоянном токе обратной полярности в защитной среде аргона. После наплавки образцы подвергали низкотемпературному отпуску для снятия внутренних напряжений и разрезали на лазерном комплексе «Bysprint 2» компании «Bystronic» с параметрами, обеспечивающими хорошее качество оплавленной поверхности после резания. Микроструктуру наплавленной стали исследовали на металлографическом микроскопе МИМ-8 после травления в 3 % спиртовом растворе азотной кислоты. Микротвёрдость измеряли на приборе ПМТ-3.

В результате исследования получены фотографии микроструктуры различных зон наплавленной быстрорежущей стали после газолазерной резки. Микротвёрдость в зоне оплавления составила 870 НУ, а в зоне термического влияния понизилась до 670 НУ. В наплавленном металле, не подверженном термическому воздействию, значения микротвёрдости не превышали 770 НУ. Таким образом, структура наплавленной стали с повышенным содержанием серы после газолазерной резки состоит из зоны оплавления, зоны термического влияния и основного металла, существенно различающихся по твёрдости и микроструктуре.

О.И. Дубкова

АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫЙ ФИЛЬТРУЮЩИЙ МАТЕРИАЛ НА ОСНОВЕ НАТУРАЛЬНОГО ШЁЛКА И НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА

Руководитель Е.С. Сашина

Санкт-Петербургский государственный университет технологии и дизайна

Актуальными являются исследования, связанные с получением на поверхности и в структуре биосовместимых и биологически легко разрушаемых природных полимерных материалов наночастиц серебра, которые обладают антимикробными свойствами.

Цель данной работы – создание текстильного фильтрующего материала для дезинфекции воздуха помещений и салонов автомобилей, обладающего высокой воздухопроницаемостью и стабильными антимикробными свойствами. Идея основана на применении волокна натурального шёлка, антимикробные свойства которому придаются путём введения микроколичеств серебра, находящегося в наноразмерной форме. Химический состав и особенности структуры шёлковых волокон обеспечивают восстановление серебра из растворов его солей на поверхности волокна, в том числе без использования восстановителей, и стабилизацию наночастиц серебра, не позволяя им агломерироваться. Высокорастворимая поверхность наночастиц обуславливает антимикробные свойства материала при незначительных количествах серебра.

Задачей исследований является оптимизация способа восстановления серебра в структуре волокна в виде частиц с большой величиной отношения площади поверхности и объёма, что позволяет добиться высокой антимикробной активности.

Нами изучена возможность стабилизации наночастиц серебра в матрице фиброина натурального шёлка *Bombyx mori*, подобран способ проведения данного процесса – интеркаляция наночастиц серебра в полимерную матрицу методом химического восстановления металла из его соли (AgNO_3) с использованием различных восстановителей и без них. В качестве восстановителей выбраны борогидрид натрия и метол. В результате работы изучена кинетика восстановления серебра из раствора нитрата серебра с использованием борогидрида натрия, метола и без восстановителя при различном времени восстановления, исследованы морфология и размеры частиц серебра, определено влияние количества восстановленного серебра на бактериостатические свойства материала.

Данный материал может быть использован в качестве фильтрующего антимикробного материала для обеззараживания воздуха детских палат, а также как антисептическая составляющая салонного автомобильного фильтра.

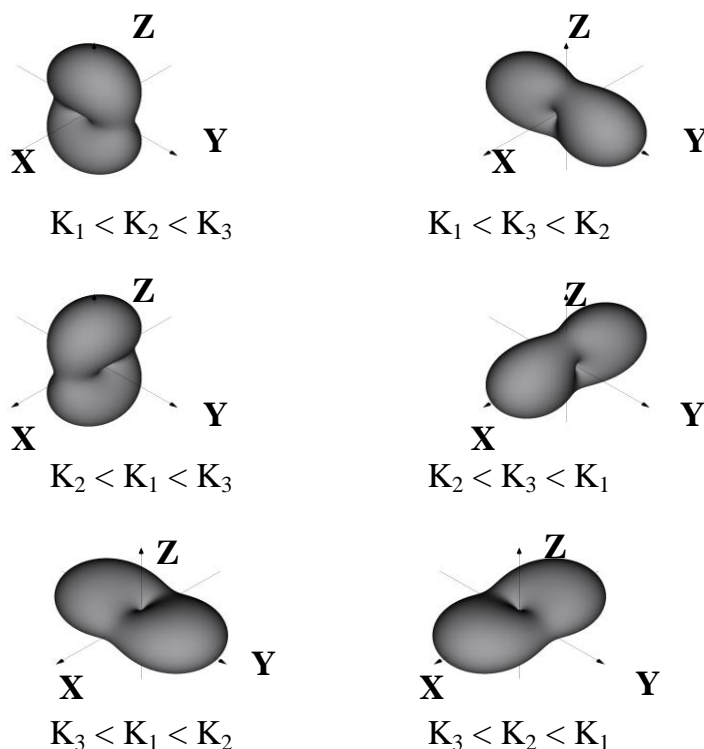
О.В. Жданова

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МАГНИТОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ АНИЗОТРОПИИ РОМБИЧЕСКИХ МАГНЕТИКОВ

Руководитель М.Б. Ляхова

Тверской государственный университет
Кафедра магнетизма

Проведён теоретический анализ магнитокристаллической анизотропии ромбических кристаллов. Функция энергии МКА ромбических магнетиков исследована на экстремумы. Установлено, что в ромбических кристаллах реализуется единственный тип МКА. В кристалле всегда существуют две выделенные взаимно перпендикулярные оси, одна из которых является осью лёгкого намагничивания (ОЛН), а другая – осью трудного намагничивания (ОТН), обе оси совпадают с осями второго порядка кристаллической решётки. Ориентация ОЛН и ОТН относительно элементарной ячейки ромбического кристалла (рёбер ячейки a , b , c) определяется соотношением констант МКА. Изменения положения минимума (ОЛН) и максимума (ОТН) функции энергии МКА ромбических кристаллов наглядно видны на трёхмерных изображениях, приведённых на рисунке.



Трёхмерные изображения функций МКА ромбических кристаллов при различных соотношениях констант МКА

О.Е. Журавлёв

НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА ПАРАМАГНИТНЫХ ИОННЫХ
ЖИДКОСТЕЙ

Руководители: Л.И. Ворончихина, Р.М. Гречишкин

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

Ионные жидкости сейчас применяются как термически устойчивые растворители, экстрагенты и со-растворители. Недавно японские учёные сообщили о новых свойствах ионных жидкостей, полученных ими на основе 1-бутил-3-метилимидазолий хлорида, 1-бутиронитрил-3-метилимидазолий хлорида и хлорида железа (III)*. Они упоминали об аномально сильной магнитной восприимчивости полученных солей к небольшому постоянному магниту, таким образом имея сходство с классическими магнитными жидкостями с частицами магнетита.

Нами были синтезированы четвертичные соли пиридиния, морфолиния, имидазолия, пиперидиния, различающиеся структурой органического катиона, и на их основе получены парамагнитные ионные жидкости с анионами $[\text{FeCl}_4]^-$, $[\text{MnCl}_4]^{2-}$.

Полученные жидкости были охарактеризованы по данным спектроскопии в видимой области (максимумы при 534, 619 и 688 нм) для $[\text{FeCl}_4]^-$ аниона, по данным ИК спектроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния, а также элементным анализом. Значения магнитной восприимчивости солей близки к магнитной восприимчивости растворов FeCl_3 ($\sim 480 \cdot 10^{-9} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$). Отклик на магнит качественно был такой же, как и в работе японских учёных, однако такая магнитная восприимчивость на несколько порядков меньше чем у классических магнитных жидкостей. Нами проведены измерения магнитной восприимчивости ряда жидкостей на модифицированных магнитных весах, сделаны выводы о влиянии структуры органического катиона, количества, структуры и длины заместителей на магнитную восприимчивость синтезированных парамагнитных ионных жидкостей. Проведены измерения плотности, температуры плавления полученных соединений. Сделаны выводы о влиянии органического катиона на макроскопические свойства синтезированных соединений.

Полученные ионные жидкости были использованы в качестве буферных сред для левитации диамагнитных макрообъектов (рис, чечевица, пластинки кремния и меди) и микрообъектов (сферические частицы меди диаметром 5–10 мкм).

* Hayashi S. and Hamaguchi H. // Chem. Letters. 2004. V. 33. P. 1590.

УДК 543:664.683.9 (470.331)

А.В. Загумённова

АНАЛИЗ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ, ВЛИЯЮЩИХ НА КАЧЕСТВО ТОРТОВ, РЕАЛИЗУЕМЫХ В Г. ТВЕРИ

Руководитель М.Н. Брославская

Тверской государственной университет

Кафедра физико-химической экспертизы биоорганических соединений

Ассортимент тортов, представленных в кондитерских магазинах, чрезвычайно широк, но не всегда качество соответствует требованиям ОСТа № 10-060-95 «Торты и пирожные. Технические условия»*.

Цель работы – исследовать и проанализировать факторы, влияющие на качество тортов, изучить их основные товароведные характеристики.

Для проведения экспериментальной части работы в качестве образцов взяты торты «Полёт», «Сказка», «Прага» – производители ЗАО «Хлеб», «Волжский пекарь», «РосСвит», «Уют».

В работе по ОСТ № 10-060-95 определили:

- массовую долю влаги методом высушивания. Его сущность заключается в высушивании навески изделия и полуфабриката при определённой температуре (130 °С) до постоянно сухой массы и определении потери массы по отношению к навеске (ГОСТ 5900-73);
- массовую долю общей сернистой кислоты. Для этого использован йодометрический метод (ГОСТ 26811-86), который основан на переводе свободного и связанного сернистого ангидрида в натриевую соль сернистой кислоты, которую затем в кислой среде титруют йодометрически;
- содержание сахара. Вели определение этого параметра йодометрическим методом (ГОСТ 5903-89). В основе метода лежит восстановление щелочного раствора меди некоторым количеством раствора редуцирующих веществ и определение количества образовавшегося оксида меди (I) или невосстановившейся меди йодометрическим способом.

Полученные результаты проведённого физико-химического анализа обсуждены в связи с качеством тортов. Сделаны выводы и даны рекомендации по качеству тортов на примере изученных образцов.

* Технический регламент на кондитерскую продукцию № 469750-4.

И.В. Заонегина, А.В. Питык

МОДИФИЦИРОВАННЫЙ ТРАНСДЮСЕР
В ИОНОСЕЛЕКТИВНЫХ ЭЛЕКТРОДАХ

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

В медицине при лечении ряда заболеваний часто используются различные витамины. Поэтому важно уметь определить содержание витаминов в различных объектах, включая технологические и биологические.

Известно, что для определения ряда сложных органических катионов используется ионометрический метод. Для реализации этого метода необходимо иметь соответствующий ионоселективный электрод. Для стабилизации потенциала ионоселективных электродов часто используют ионно-электронный трансдюсер на основе полианилина. Этот трансдюсер имеет существенный недостаток – значительный отклик на рН.

Цель настоящей работы – создание модифицированного трансдюсера (не имеющего отклика на рН) и использование его при создании твёрдоконтактного ионоселективного электрода для определения витамина В₆. Модифицированный полианилиновый трансдюсер мы получили следующим образом: во-первых, электрохимический синтез проводили в присутствии монохлоруксусной кислоты; во-вторых, после осаждения полианилиновой плёнки на платиновую подложку мы обработали полученную заготовку в насыщенном растворе натриевой соли монохлоруксусной кислоты. После этой обработки трансдюсер полностью потерял отклик на рН. Сверху трансдюсера был нанесён слой ионоселективной мембраны, содержащей в качестве электроактивного вещества ионный ассоциат фосфорномолибденовой кислоты с витамином В₆. Предварительные испытания изготовленного электрода показали, что он имеет широкий диапазон линейности электродной функции. Электрод практически не реагирует на изменение рН в интервале от 3 до 7. Электрод имеет быстрый отклик и стабильную величину потенциала. С использованием данного электрода было определено содержание витамина В₆ в модельной смеси и готовой лекарственной форме – пиридоксин гидрохлорид (производство Veropharm).

Применение модифицированного трансдюсера позволяет повысить стабильность потенциала ионоселективного электрода в широком диапазоне рН.

А.В. Зелинский

ИЗМЕНЕНИЕ ПЛОДОРОДИЯ ПОЧВ, ВЫВЕДЕННЫХ ИЗ АКТИВНОГО СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Дерново-подзолистые почвы составляют основу пахотного фонда Нечернозёмной зоны России. Уровень их естественного плодородия, как правило, невысок. Но путём применения необходимых приёмов улучшения плодородия около 15 % пахотных аналогов данных почв к началу 90-х гг. XX в. было доведено до степени хорошей окультуренности.

К сожалению, за последние два десятилетия площадь обрабатываемых земель в России сократилась на 18–20 % от общей площади пашни. Выведенные из активного сельскохозяйственного оборота земли зарастают сорняками, на больших массивах они покрыты кустарником и мелколесьем. Поэтому важно провести их мониторинг для выявления изменения уровня плодородия, а также формируемой на таких землях биомассы. В перспективе часть таких земель всё же будет возвращена в активное сельскохозяйственное использование, а на второй части следует получать растительную биомассу, из которой можно производить биогаз, иные необходимые для страны материалы и продукты либо подвергать залесению.

До настоящего времени исследований, направленных на изучение изменения свойств дерново-подзолистых почв при прекращении антропогенного воздействия, проводилось крайне мало. По имеющимся данным выведение почв из севооборотов заметно сказывается на их показателях (таблица).

Запасы гумуса и азота в дерново-подзолистой песчаной почве различных угодий (Ленинградская область)

<i>Угодье</i>	<i>Запасы гумуса в слое 0–30 см, т/га</i>	<i>Запасы гумуса в слое 0–50 см, т/га</i>	<i>Запасы азота в слое 0–30 см, кг/га</i>
1. Лес	41,94	48,90	2100
2. Пашня	61,20	81,60	4000
3. Залежь 10 лет	56,11	73,80	3550
4. Залежь 20 лет	60,19	74,07	3050
5. Залежь 60 лет	49,97	60,54	2500
6. Вторичный лес	52,56	61,20	2300

Как видно, при прекращении антропогенного воздействия на 10–20 лет запасы гумуса в слое 0–30 см остаются практически неизменными, а в более глубоких слоях (0–50 см) они несколько уменьшаются. Спустя 60 лет после прекращения окультуривания запасы гумуса резко снижаются. Аналогичная ситуация наблюдается и под вторичным лесом. Запасы азота в почвах объектов исследований полностью коррелируют с соответствующими запасами гумуса.

Н.В. Золотарёва

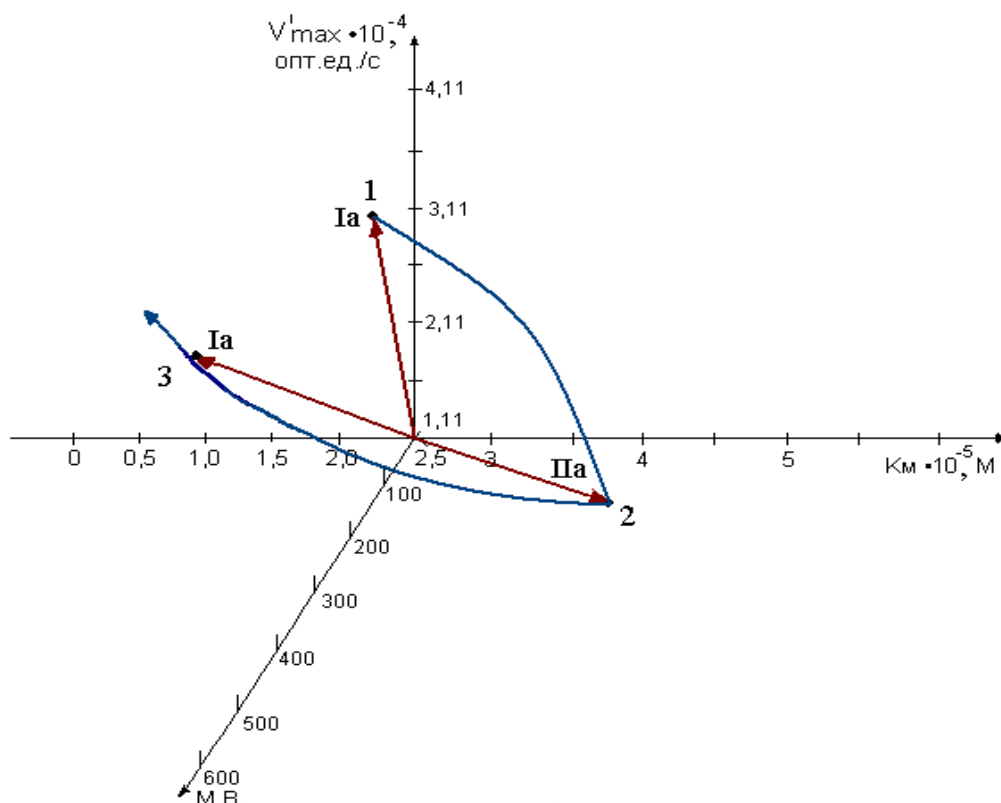
ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ «ПОРТРЕТ» ФЕРМЕНТАТИВНОЙ РЕАКЦИИ,
КАТАЛИЗИРУЕМОЙ АЛКОГОЛЬДЕГИДРОГЕНАЗОЙ, В
ПРИСУТСТВИИ РАЗЛИЧНЫХ ЭФФЕКТОРОВ

Руководитель Г.П. Лапина

Тверской государственной университет

Кафедра физико-химической экспертизы биорганических соединений

Нами* получена и построена кривая течения ферментативной реакции, катализируемой алкогольдегидрогеназой (АДГ) печени лошади, как геометрическое место точек, последовательно занимаемых подвижным концом трёхмерных \vec{L} -векторов биокаталитической реакции в соответствующем пространстве трёхмерной $K'_M V'$ -системы координат (рисунок) при добавлении препаратов зорекс, унитиол и пирацетам.



Активация АДГ печени лошади препаратами унитиол (1), пирацетам (2) и зорекс (3) в трёхмерной $K'_M V'$ -системе координат

Сложная форма кривой течения реакции присуща только тем случаям, когда при воздействии активаторов изменяется не только интенсивность, но и тип и соответственно механизм изучаемой ферментативной реакции, что и выявлено в данной работе.

* Лапина Г.П., Золотарева Н.В. // Вестник ТвГУ. Сер. Биология и экология. 2009. Вып. 11, № 2. С. 56–62.

Т.Ю. Зыков, А.С. Антонов, Д.А. Ким

ИЗУЧЕНИЕ ФРАКТАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ ПОКРЫТИЯ ЗОЛОТА
МЕТОДОМ СКАНИРУЮЩЕЙ ТУННЕЛЬНОЙ МИКРОСКОПИИ

Руководитель Н.Ю. Сдобняков

Тверской государственный университет
Кафедра теоретической физики

Наноразмерные по толщине плёнки различных материалов находят широкое применение во всех направлениях нанотехнологии. Особый интерес представляют наноразмерные плёнки с фрактальной структурой, получаемые в условиях, далёких от равновесного состояния и на основе самоорганизации.

В данной работе проведено исследование поверхности (профиля) тонких металлических плёнок золота на диэлектрической подложке (слюде) с помощью сканирующего зондового микроскопа в режиме СТМ. Нами определены характерные линейные размеры рельефа поверхности объектов (впадин и выступов), а также фрактальная размерность поверхности гетероструктур D_f или профиля D_L

$$N = (R/a)^{D_{f,L}},$$

где N – число частиц в кластере, R – линейный размер кластера, a – размер частиц, из которых состоит кластер. Если структура объекта самоподобна, то график зависимости натурального логарифма числа частиц от натурального логарифма размера объекта будет линейным, а тангенс угла наклона определяет фрактальную размерность.

Анализ полученных нами зависимостей показывает, что для поверхности в целом наблюдается линейная зависимость как для размерности профиля, так и для размерности поверхности, и, следовательно, структура поверхности является фрактальной. Для изучения структуры также используют построение гистограммы вероятности обнаружения кластеров с определённой фрактальной размерностью на определённых участках поверхности (профиля), которая позволяет провести анализ распределения отдельных фрагментов покрытия по фрактальной размерности, а также установить величину фрактальной размерности, преобладающей для данной поверхности. Для профиля и поверхности исследованного образца наиболее вероятное значение фрактальной размерности лежит соответственно в диапазоне $1,75 \leq D_L \leq 2,00$ и $2,25 \leq D_f \leq 2,50$.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 10-03-00129-а, 10-03-97502-р_центр_а и гранты Президента РФ № МК-649.2010.3).

А.Е. Иванов

ИЗМЕНЕНИЕ СВОЙСТВ ДЕРНОВО-ПОДЗОЛИСТЫХ ПОЧВ
ПОСЛЕ ПРЕКРАЩЕНИЯ АНТРОПОГЕННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

В условиях кризиса последних десятилетий недостаток материально-технических ресурсов привёл к уменьшению площадей пашни, притом не только малопродуктивных почв, но часто и хорошего качества, экологический потенциал которых остался невостребованным по экономическим причинам. Земли, оказавшиеся невостребованными для земледелия, переходят в разряд залежных и бросовых, в резервации сорных растений, вредителей и возбудителей болезней.

Обследование бросовых почв на пашне (около 42 млн га) по агрохимическим показателям проводится агрохимической службой страны выборочно с периодичностью 15–20 лет. В ходе обследования выявлено снижение количества гумуса на 10 %. На площади 1370 тыс. га проводилось определение кислотности, подвижных форм фосфора и калия. Общая площадь кислых почв на залежи составила свыше 40 %, тогда как на эксплуатируемой пашне – менее 32 %. Доля очень сильнокислых почв на залежи оказалась в 4 раза выше, чем на пашне. Почв со средней степенью кислотности на залежных землях выявлено более 12 %, а на находящихся в севооборотах – 9 %.

Среднее содержание подвижного фосфора в залежных почвах заметно ниже, чем в пахотных. Разница достигает 40 мг/кг почвы. На обследованной площади залежей почв с очень низким и низким (до 50 мг/кг) количеством подвижного фосфора в целом по РФ имеется 45 %. Для сравнения доля земель с такой обеспеченностью данным элементом на почвах пашни находится в пределах 20 %. На пахотных землях почв с высоким (более 150 мг/кг) содержанием фосфора 22 % и гораздо ниже на залежи (13%).

Еще большая, чем по фосфору, разница в содержании обменного калия в почвах залежи и пашни, составляя 75 мг/кг почвы. На залежных землях почв с очень низкой (менее 40 мг/кг) обеспеченностью обменным калием в 1,5 раза больше, чем в пахотных. Одновременно почв с низким количеством калия на залежных землях чуть меньше (7 %) по сравнению с пашней (10 %), но зато на пашнях в 2 раза больше почв с очень высоким содержанием калия (свыше 250 мг/кг).

В среднем по всем агрохимическим показателям почвы залежи характеризуются более низкими значениями по сравнению с почвами пашни. В наибольшей степени это касается количества гумуса, подвижных форм фосфора, калия и величины кислотности.

Н.В. Ильяшенко

ИЗУЧЕНИЕ МЕТОДАМИ ОПТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ
ИЗМЕНЕНИЙ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА *POTENTILLA ERECTA* L.
ПОД ДЕЙСТВИЕМ АНТРОПОГЕННОГО ФАКТОРА

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

Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

В настоящее время растёт число заболеваний различной природы, и не всегда применение синтетических лекарственных препаратов эффективно при их лечении. В связи с этим становится актуальным использование средств из натурального растительного сырья. Одним из таких объектов является лапчатка прямостоячая (*Potentilla erecta* (L.) Raeusch.), корневище которой используют как противовоспалительное, кровоостанавливающее и вяжущее средство. Известно также, что растения способны накапливать различные вещества из окружающей среды, поэтому их сбор желательно производить в местах с минимальной антропогенной нагрузкой.

Цель данной работы – изучение изменения химического состава подземных органов *P. erecta* в местах с антропогенной нагрузкой методами Фурье–ИК и УФ-спектроскопии. В ходе исследования был проведён сравнительный анализ ИК спектров образцов корневищ *P. erecta*, собранных в Осташковском р-не Тверской обл., являющейся фоновой зоной, и г. Твери в местах с различным антропогенным загрязнением и УФ спектров их водно-спиртовых экстрактов. Для записи ИК спектров использовали стандартную методику приготовления таблеток с KBr. Регистрация спектров проводилась на спектрометре «EQUINOX 55» фирмы «Bruker». Запись УФ спектров проводилась на двулучевом УФ спектрофотометре «Specord M40». Основные различия в ИК спектрах были отмечены для полосы поглощения $\sim 1693 \text{ см}^{-1}$ ($\nu_{\text{C=O}}$), усиление которой характерно для спектров образцов из мест с признаками загрязнения. Заметные изменения характерны для полос $\sim 1519 \text{ см}^{-1}$ (Амид II) и $\sim 1317 \text{ см}^{-1}$ (ν_{SO_2}). В УФ спектрах экстрактов *P. erecta* присутствуют полосы с максимумом поглощения $\lambda_{\text{max}} = 276\text{--}279 \text{ нм}$, характерные для соединений фенольного ряда. Величина оптической плотности (D) изменяется: высокое значение получено для образцов из фоновой зоны, меньшая величина – в спектрах образцов из мест с признаками загрязнения. Для идентификации фенольных соединений использовали комплексообразователи (хлористый алюминий, ацетат натрия). Использование спектральных методов может найти широкое практическое применение в качестве экспресс-анализа для изучения лекарственного растительного сырья на фармацевтическом производстве.

М.В. Каменщиков

ПРОВОДИМОСТЬ ТОНКИХ ПЛЁНОК ЦТС, СФОРМИРОВАННЫХ С ИЗБЫТКОМ ОКСИДА СВИНЦА

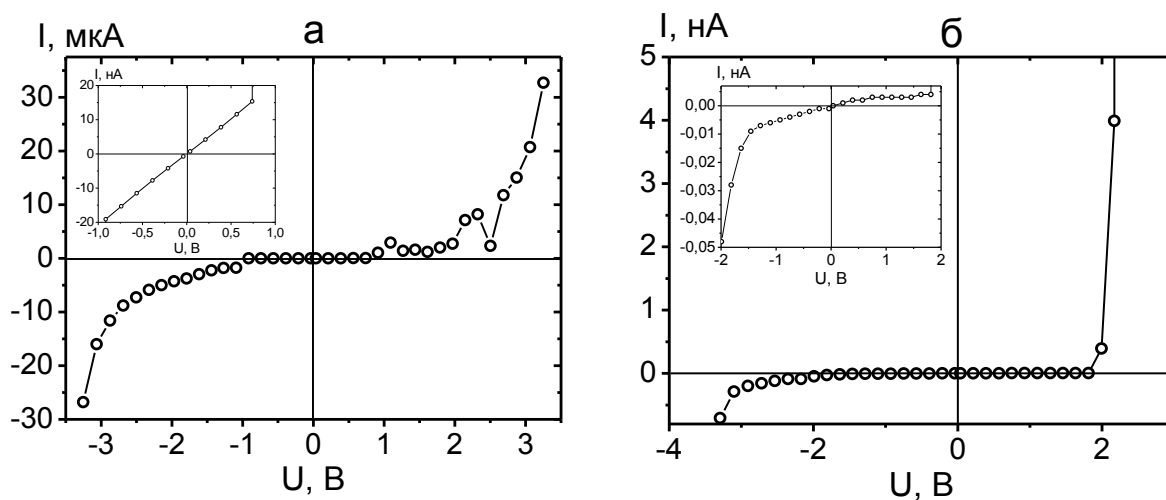
Руководители: А.В. Солнышкин, А.А. Богомолов

Тверской государственной университет
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

В последнее время тонкие сегнетоэлектрические плёнки на основе цирконата титаната свинца $Pb(Zr_{1-x}Ti_x)O_3$ (ЦТС) находят все большее применение для создания устройств неразрушаемой памяти при отключенном питании (NVFRAM) с высокой плотностью записи информации. Токи утечки являются одним из главных учитываемых факторов при работе этих устройств. Целью настоящей работы являлось исследование механизмов проводимости тонких плёнок ЦТС.

Исследования проводились на плёночных гетероструктурах Pt/PZT/Pt, сформированных на кремниевых подложках. Образцы изготовлены в ФТИ им. Иоффе (Санкт-Петербург). Исследования проводимости выполнены методом вольт-амперных характеристик (ВАХ). Ток, протекающий через образец, усиливался с помощью усилителя постоянного тока У5-11.

На основании экспериментальных данных можно выделить два основных типа ВАХ, которые представлены на рисунке.



Как видно из рисунка (а), ВАХ имеет достаточно симметричный вид. В области малых полей ($-1 \div 1$ В) I - V зависимость является линейной, тогда как при дальнейшем увеличении напряжения ВАХ становится нелинейной. Другой тип ВАХ, представленный на рисунке (б), имеет нелинейный вид и в области малых полей, причём зависимость носит диодный характер.

В работе обсуждаются интерфейсно и объёмно контролируемые механизмы транспорта носителей заряда.

А.Г. Канарейкин

ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНОК P(VDF-TrFE) + ЦТБС

Руководители: А.В. Солнышкин, А.А. Богомолов

Тверской государственный университет
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

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 керамических перовскитных сегнетоэлектриков – твёрдых растворов системы цирконата титаната свинца (ЦТС).

В настоящей работе проведены исследования пироэлектрической активности композиционных полимерных плёнок на основе сегнетоэлектрического сополимера поливинилиденфторида-политрифторэтилена (P(VDF-TrFE)) с добавлением порошкообразного керамического сегнетоэлектрика цирконата титаната бария свинца (ЦТБС) динамическим и квазистатическим методами. Композитные образцы, содержащие от 0 до 50 объёмных процентов керамического наполнителя, получены методом кристаллизации из раствора. Толщина плёночных образцов варьировалась в пределах $20 \div 100$ мкм в зависимости от процентного содержания керамики. После поляризации образцы композита обнаруживают заметный пироэлектрический отклик.

Обнаружено различие в поведении пироэлектрического отклика при воздействии теплового потока на противоположные стороны образцов в случае сополимерных плёнок как без наполнителя, так и содержащих включения керамики ЦТБС, 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 , причём этот слой обладает повышенной пироэлектрической активностью по сравнению с остальным объёмом композита. Сравнение результатов пироэлектрических измерений для образцов сополимера P(VDF-TrFE) и композита P(VDF-TrFE) + ЦТБС показывает, что ярко выраженное неоднородное распределение поляризации в плёночных композитах связано с внедрением включений сегнетоэлектрической керамики в полимерную матрицу.

Д.Ю. Карпенков, А.Ю. Карпенков

АНОМАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА МОНОКРИСТАЛЛОВ Gd_2Fe_{17}

Руководитель К.П. Скоков

Тверской государственный университет
Кафедра магнетизма

В данной работе мы изучаем удельное сопротивление Холла монокристаллов Gd_2Fe_{17} для широких диапазонов температуры и прикладываемых магнитных полей и для различных ориентаций магнитного поля относительно оси лёгкого намагничивания (ось a).

Сплавы редкоземельных металлов с 3d-переходными металлами составляют обширный класс магнетиков, обладающих широким спектром уникальных магнитных характеристик. В частности, эффект Холла вносит аномальную поправку, пропорциональную намагничиванию материала, в дополнение к обычному, который является результатом силы Лоренца.

На графиках представлены температурные зависимости аномального эффекта Холла для трёх ориентаций монокристалла: рис. 1 – $\Pi\Pi OЛH$, $\Pi\Pi b$; рис. 2 – $\Pi\Pi OЛH$, $\Pi\Pi c$; рис. 3 – $\Pi\Pi OTH$, $\Pi\Pi a$. Стоит отметить, что удельное сопротивление АЭХ, измеренное с прикладываемым магнитным полем вдоль ОЛH, почти в полтора раза превышает значение для направления трудного намагничивания.

Измерения эффекта Холла проводились с участием сотрудников Института материалов Арагона (Сарагоса, Испания). Отдельная благодарность за помощь в проведении исследований выражаем профессору Иоланте Станкевич.

Работа выполнена при поддержке гранта Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере № 6972p/9585.

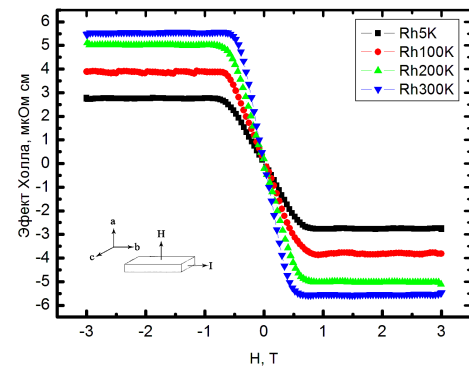


Рис. 1

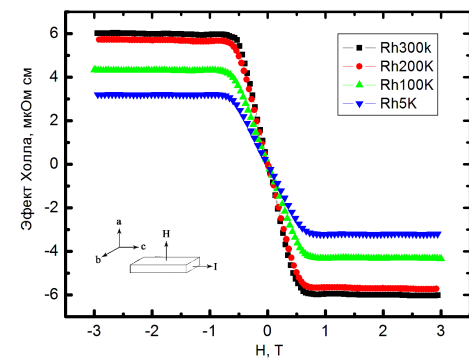


Рис. 2

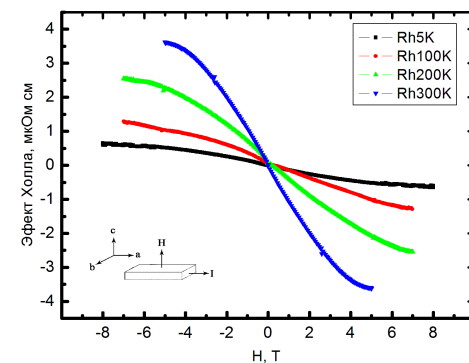


Рис. 3

С.А. Карпушкин

ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ МАГНИТНОЙ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ С ПОМОЩЬЮ МАГНИТНОЙ СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Руководитель Ю.В. Кузнецова

Тверской государственный университет
Кафедра магнетизма

Магнитно-силовая микроскопия (МСМ) является эффективным средством исследований магнитных структур на субмикронном уровне. Получаемые с помощью МСМ изображения являются пространственным распределением Z -составляющих магнитного поля по поверхности образца*.

При проведении магнитных исследований прежде всего необходимо отделить «магнитные» изображения от изображений рельефа, т.е. минимизировать влияние рельефа на изображение распределения магнитных сил. Для решения этой проблемы магнитные измерения проводятся по двухпроходной методике. На первом проходе определяется рельеф поверхности по контактному или прерывисто-контактному методам. На втором проходе каждой линии сканирования кантилевер приподнимается над поверхностью на заданное расстояние dZ и сканирование осуществляется в соответствии с запомненным рельефом. Для получения лучшего результата в сканировании необходимо в каждом конкретном случае подбирать значения для dZ .

В данной работе наблюдение доменной структуры проводилось на установке сканирующего зондового микроскопа Solver P47. В качестве объектов исследования были выбраны монокристаллические образцы редкоземельных интерметаллидов.

Показано, что при высотах dZ от 0 до 150 нм влияние рельефа заметно искажает картину распределения магнитных полей рассеяния, которая фиксируется полуконтактным методом. При увеличении высоты dZ до 700 нм происходит уменьшение влияния рельефа. При дальнейшем увеличении значения dZ магнитно-силовые изображения становятся размытыми и ухудшается их качество.

В работе сделан вывод о том, что оптимальное расстояние между колеблющимся зондом и поверхностью образца должно находиться в интервале от 100 нм до 200 нм.

* Миронов В.Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии. Нижний Новгород, 2004.

В.А. Кизилин

ЭВОЛЮЦИЯ ПЕТЕЛЬ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ГИСТЕРЕЗИСА
В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ТОНКОПЛЁНОЧНЫХ
КОНДЕНСАТОРАХ

Руководители: А.В. Солнышкин, О.Н. Сергеева

Тверской государственной университет
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Сегнетоэлектрические тонкие плёнки являются перспективными материалами в качестве функциональных элементов современной микроэлектроники, в частности для создания сегнетоэлектрической энергонезависимой памяти с произвольным доступом к ячейкам (FeRAM). Основным материалом для элементов, используемых в FeRAM, а это сегнетоэлектрические транзисторы и конденсаторы, являются смешанные полиметаллические оксиды, спекаемые в сегнетоактивные керамики. Наиболее распространённым является семейство цирконата титаната свинца (PZT) с общей формулой $Pb(Zr_xTi_{1-x})O_3$.

Физические основы работы FeRAM заключаются в процессах переключения спонтанной поляризации функциональных сегнетоэлектрических элементов внешним электрическим полем. Одним из основных методов исследования процессов переполаризации является метод изучения петель диэлектрического гистерезиса, который позволяет изучать эффекты смещения петли гистерезиса (imprint effect), деградации петель гистерезиса после многократного переключения поляризации, уменьшения остаточной поляризации после многократного считывания информации и т.д.

Цель настоящей работы – усовершенствование методики изучения петель диэлектрического гистерезиса на основе схемы Сойлера–Тауэра и комплексное исследование процессов переполаризации в сегнетоэлектрических конденсаторных структурах, содержащих в качестве активного элемента тонкую плёнку PZT.

В ходе выполнения работы создана экспериментальная установка, позволяющая изучать эффекты, связанные с переключением поляризации, в тонких сегнетоэлектрических плёнках толщиной < 1 мкм с учётом проводимости плёнок при различных частотах внешнего электрического поля.

На основе полученных данных изучены эффекты, сопровождающие процесс эволюции петель диэлектрического гистерезиса в гетероструктурах Pt/PZT/Pt, сформированных подложках из кремния и ситалла.

Д.Н. Кириллова

КРИСТАЛЛОМОРФОЛОГИЯ НИНГИДРИНА В ЗАВИСИМОСТИ
ОТ УСЛОВИЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

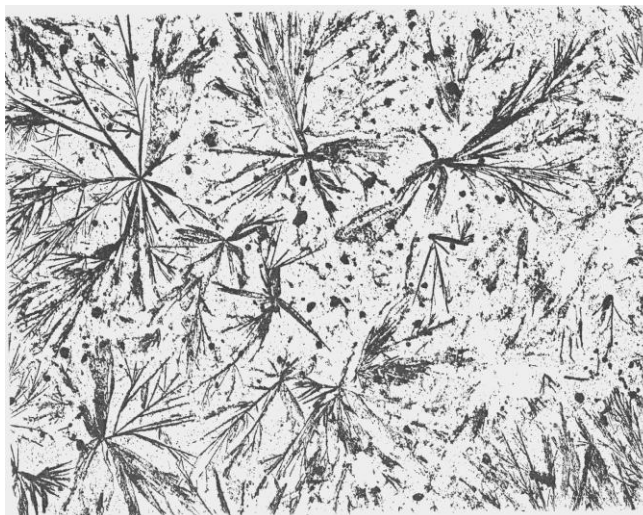
Руководитель Ю.М. Смирнов

Тверской государственный университет
Кафедра прикладной физики

Понимание механизмов взаимодействия различных органических соединений необходимо при создании новых эффективных препаратов, при разработке новых методик диагностики и лечения различных заболеваний. Одной из таких методик может стать кристалломорфологический анализ кристаллических структур, получаемых при кристаллизации веществ в тканях и жидкостях организма человека.

В настоящей работе исследовался нингидрин, являющийся перспективным реагентом при кристалломорфологической диагностике. Нингидрин (трикетогидрин-денгидрат) – это органическое соединение ($C_9H_6O_4$), имеющее в своём строении ароматическое кольцо, две гидроксильные и кето- группы. С помощью программы HyperChem 8.0 были построены физико-химические модели нингидрина и произведён расчёт ряда физико-химических свойств молекулы и кристалла нингидрина.

Кристаллы нингидрина выращивали в гелевом растворе, приготовленном на основе жидкого стекла. Полученные кристаллы нингидрина имели форму дендритов типа ламелей (рисунок).



Дендрит нингидрина

Проведён эксперимент по выращиванию кристаллов нингидрина в биологической среде. Был взят спиртовой раствор нингидрина со слюной. Полученные результаты говорят о чувствительности нингидрина к самым незначительным отклонениям от равновесных условий при кристаллизации и склонности к образованию сложных форм кристаллов – вискероов, дендритов, сферолитов.

Задача дальнейших исследований – отработка методики кристаллизации нингидрина в биологической среде для применения в дальнейшем в области диагностики заболеваний.

Ю.В. Козловская

ИЗУЧЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ СВОЙСТВ АЛЬБУМИНОВЫХ БЕЛКОВ СЕМЯН ЛЬНА

Руководитель Г.П. Лапина

Тверской государственной университет

Кафедра физико-химической экспертизы биоорганических соединений

В связи с недостаточной изученностью* структуры и свойств тонких поверхностных слоёв белков цель данной работы – изучение поверхностных свойств альбуминов семян льна. Объектами работы были выбраны семена травянистого однолетнего растения льна долгунца сорта «Томский-10». Методом максимального давления пузырька изучено влияние рН и ионной силы раствора (I) на поверхностную активность альбуминов льна. Установлено, что при возрастании ионной силы от 0 до 0,3 М изотермы поверхностного натяжения веерообразно поднимаются вверх, а изотермы адсорбции, соответственно, – вниз.

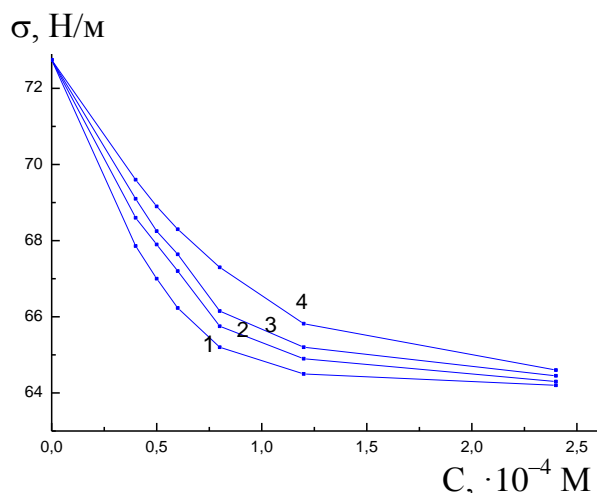


Рис. 1. Изотермы поверхностного натяжения водного раствора альбуминовых белков семян льна при варьировании ионной силы (I, М): 1 – 0; 2 – 0,1; 3 – 0,2; 4 – 0,3

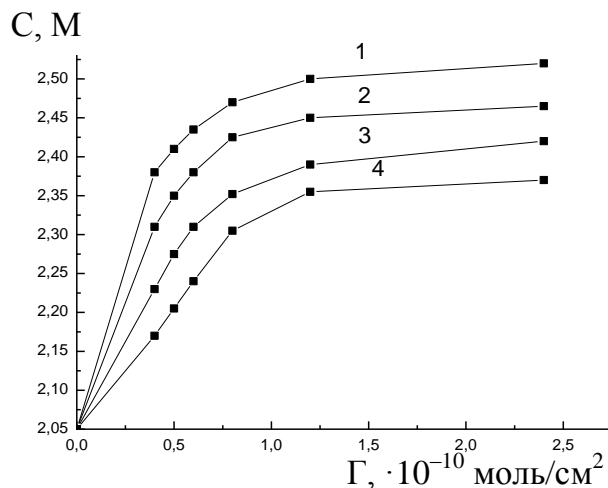


Рис. 2. Изотермы адсорбции водного раствора альбуминовой фракции семян льна при различных значениях ионной силы (I, М): 1 – 0; 2 – 0,1; 3 – 0,2; 4 – 0,3

Далее были рассчитаны адсорбционные характеристики: максимальная адсорбция (Γ_{max}), площадь, приходящаяся на молекулу (S_{mol}), и толщина адсорбционного слоя (h), – которые позволили построить молекулярную модель структуры адсорбционного слоя из альбуминовых белков и подтвердить её с использованием метода электронной микроскопии.

* Козловская Ю.В., Лапина Г.П. // Материалы научной сессии «Применение поверхностно-активных веществ в сельском хозяйстве: производство и переработка сельхозпродукции». Белгород, 2009. С. 52–54.

В.Н. Колобков

НОВОЕ В ТЕХНОЛОГИИ ВОЗДЕЛЫВАНИЯ ЯРОВЫХ ЗЕРНОВЫХ КУЛЬТУР

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра растениеводства

Актуальной проблемой сельского хозяйства является увеличение производства зерна экономичным и экологически чистыми способами. В этом плане большой интерес представляет возделывание наиболее продуктивных сортов яровых зерновых культур по экологически безопасной технологии, повышение использования генетического потенциала современных сортов. К числу таких приёмов относится возделывание сортов в блендах, которое предусматривает повышение урожайности за счёт наиболее полного использования растениями и посевами в целом основных факторов роста и развития и в связи этим – снижение энергетических затрат, себестоимости зерна, повышение рентабельности зернового производства.

В связи с этим нами в 2009 г. проведены комплексные исследования в 3-факторном полевом опыте на дерново-среднеподзолистой остаточной карбонатной глееватой почве на морене, супесчаной по гранулометрическому составу. Фактор А – фон минерального питания: 1 – умеренный, расчётная доза NPK – 25 ц/га (урожай в производстве); 2 – повышенный, расчётная доза NPK – 35 ц/га (по биотермическому потенциалу продуктивности). Фактор В – культуры: яровая пшеница, ячмень и овёс, фактор С 1 – чистый посев одного сорта; 2 – чистый посев другого сорта; 3 – смесь сортов (в %): 50 + 50; 4 – 25 + 75; 5 – 75 + 25. Объекты исследований сорта разного происхождения яровой пшеницы – Курская и Иволга, ячменя – Сонет и Абава, овса – Друг и Буг.

В результате исследований выявлено, что в условиях 2009 г. из сортов более урожайными были: у яровой пшеницы – Иволга – 29,8 ц/га, прибавка к сорту Курская 10,8 ц/га; у ячменя – Сонет – 12,8 ц/га, прибавка к сорту Абава 2,9 ц/га; у овса – Буг – 32,0 ц/га, прибавка к сорту Друг 10,0 ц/га.

Все культуры наибольший урожай на 2-м фоне сформировали в блендах: яровая пшеница при соотношении 25 % Курская + 75 % Иволга (44,1 ц/га), прибавка к чистому посеву сорта Иволга составила 9,6 ц/га (27,8 %); ячмень – при соотношении 50 % Сонет + 50 % Абава (19,8 ц/га), прибавка к сорту Сонет – 1,0 ц/га (5,3 %); овёс при соотношении 50 % Друг + 50 % Буг (38,7 ц/га), прибавка к чистому посеву сорта Буг – 3,7 ц/га (10,5 %).

Таким образом, применение в технологии возделывания смеси сортов разного происхождения (блендов) позволяет получать дополнительно по яровой пшеницы до 9,6 ц/га (27,8 %), по ячменю до 3,2 ц/га (25 %), по овсу 3,7 ц/га (10,5 %) и является более выгодным, чем посев сортов в чистом виде.

Д.Ю. Константинов

КРИОГЕННАЯ ОБРАБОТКА ИНСТРУМЕНТАЛЬНОЙ СТАЛИ ПОСЛЕ ЛАЗЕРНОЙ ЗАКАЛКИ С ОПЛАВЛЕНИЕМ ПОВЕРХНОСТИ

Руководитель Л.Е. Афанасьева

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии металлов и материаловедения

Одним из перспективных технологических процессов повышения износостойкости режущих инструментов является обработка рабочих поверхностей концентрированными потоками лазерного излучения. При лазерной закалке с оплавлением поверхности скорости нагрева имеют значения порядка 10^4 – 10^6 °С/с, охлаждения – 10^3 – 10^5 °С/с [1; 2]. При таком высокоскоростном нагреве и охлаждении диффузионная подвижность атомов углерода уменьшается настолько, что трудно осуществить лазерную закалку при оптимальной степени аустенизации, т.е. с достаточным насыщением твёрдого раствора и минимальным растворением карбидной фазы. Для высоколегированных сталей существует очень узкий интервал режимов, при которых формируется оптимальный комплекс свойств.

В связи с тем что контроль всех взаимосвязанных параметров в условиях обработки больших партий инструмента сложен, в данной работе предлагается комбинированный метод упрочнения – лазерная закалка и криогенная обработка. Криогенная обработка выполнялась непосредственно после лазерного воздействия охлаждением всего образца в среде жидкого азота до температуры ниже окончания мартенситного превращения. В работе изучались микроструктура и микротвёрдость инструментальных сталей на различных этапах упрочнения. Криогенная обработка даёт прирост твёрдости инструментальных быстрорежущих сталей на 700–1100 МПа в зависимости от зоны лазерного воздействия. Это связано с превращением остаточного аустенита в мартенсит. Применение криогенной обработки не приводит к растрескиванию образцов после извлечения из жидкого азота и в процессе испытаний.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Григорьянц А.Г. Технологические процессы лазерной обработки. М., 2006.
2. Солоненко В.Г. // Технология металлов. 2009. № 4. С. 7–14.

Ю.С. Кошкидько

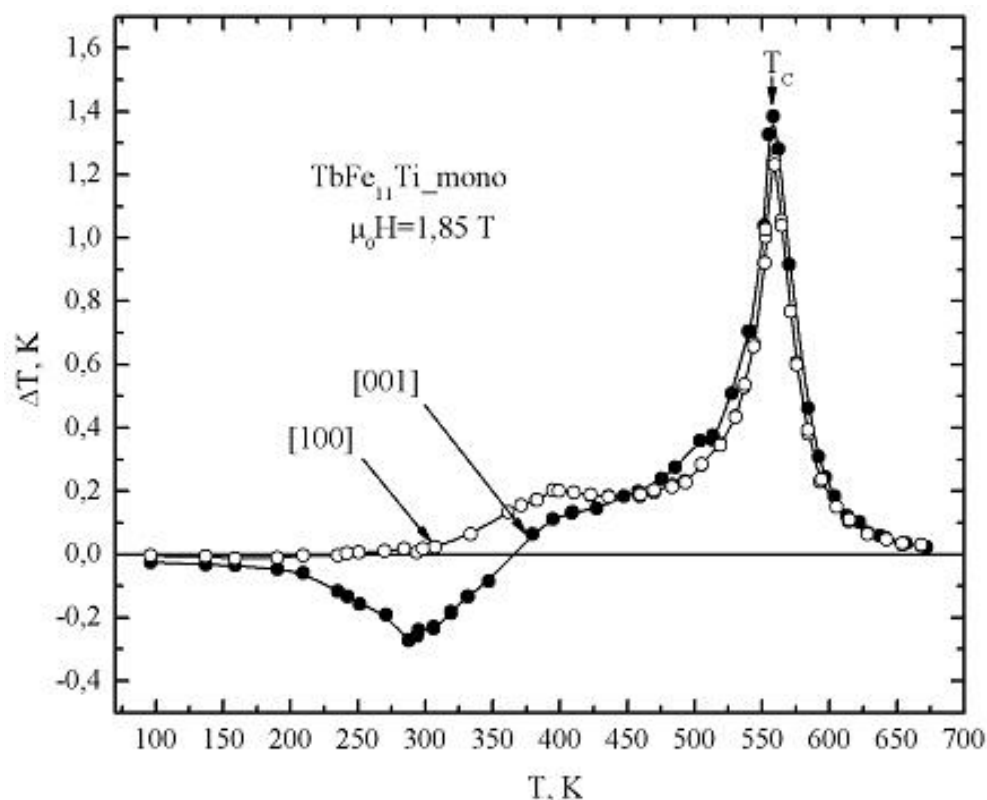
АНИЗОТРОПИЯ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА МОНОКРИСТАЛЛОВ $RFe_{11}Ti$

Руководитель Ю.Г. Пастушенков

Тверской государственной университет

Кафедра магнетизма

Соединения $RFe_{11}Ti$ обладают высокими значениями намагниченности, констант магнитокристаллической анизотропии и температуры Кюри, что делает эти соединения перспективными для создания на их основе постоянных магнитов. Данные соединения характеризуются кристаллической структурой $ThMn_{12}$, в них выделяют две магнитные подрешётки (решётки РЗМ и 3d-металла). Однако на сегодняшний день соединения $RFe_{11}Ti$ остаются малоизученными. В литературе практически полностью отсутствуют сведения о магнитотепловых свойствах данных магнетиков.



МКЭ монокристалла $TbFe_{11}Ti$, измеренный вдоль
кристаллографических направлений [100] и [001]

Проведённые исследования позволили определить влияние магнитной анизотропии на величину магнитотеплового эффекта МКЭ. Как видно из рисунка, величина МКЭ монокристалла $TbFe_{11}Ti$ существенно зависит от ориентации образца в магнитном поле, что свидетельствует об анизотропии МКЭ.

В.В. Кудрин

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИВЫХ НАМАГНИЧИВАНИЯ ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ МАГНЕТИКОВ С УЧЁТОМ ЧЕТЫРЁХ КОНСТАНТ АНИЗОТРОПИИ

Руководитель К.П. Скоков

Тверской государственной университет
Кафедра магнетизма

Исследования с помощью компьютерного моделирования применяются сегодня в различных областях науки, в том числе и для исследования процессов перемагничивания малых частиц.

В применяемом в данной работе модельном построении предполагается, что магнитный материал находится в однодоменном состоянии. Достоинства этого метода состоят в простоте вычислений и возможности получения аналитических решений для полевых зависимостей намагниченности.

Данный метод был применён для определения констант магнитной анизотропии из кривых намагничивания. При этом константы анизотропии использовались как параметры, с помощью которых рассчитанная аналитическая кривая наилучшим образом совпадает с экспериментальными данными полевой зависимости намагниченности.

В ходе работы был разработан алгоритм расчётов и создана компьютерная программа для расчёта кривых намагничивания цилиндрических, тетрагональных и гексагональных магнетиков в однодоменном состоянии. Выполнены необходимые расчёты для определения констант анизотропии для соединения Tb_2Fe_{17} при температурах 5, 50, 100, 200, 300 К и построена температурная зависимость констант анизотропии K_1 , K_2 , K_3 , K_4 (рис. 1). Кроме того, в программе реализована возможность графического представления поверхностей энергии анизотропии цилиндрических, тетрагональных и гексагональных магнетиков (рис. 2).

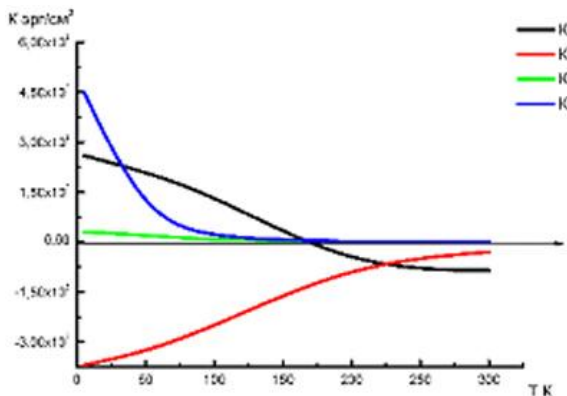


Рис. 1. Температурная зависимость констант анизотропии для соединения Tb_2Fe_{17}

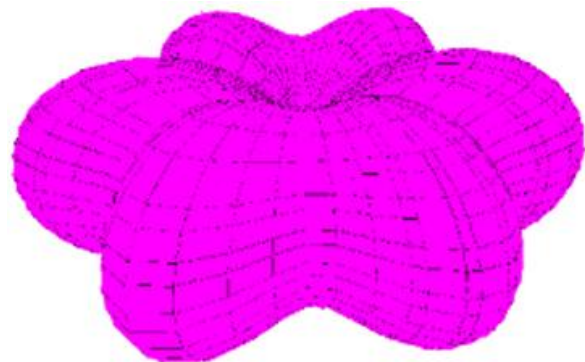


Рис. 2. Поверхность энергии анизотропии типа лёгкая ось гексагонального магнетика

Д.С. Кучер

НАБЛЮДЕНИЯ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЙ RCO_5
В ОБЛАСТИ СПИН-ПЕРЕОРИЕНТАЦИОННЫХ ПЕРЕХОДОВ
МЕТОДАМИ ОПТИЧЕСКОЙ И МАГНИТНО-СИЛОВОЙ
МИКРОСКОПИИ

Руководитель Е.М.Семёнова

Тверской государственный университет
Кафедра магнетизма

Соединения RCO_5 , где R – редкоземельный ион, обладают рядом интересных особенностей, таких, как высокая температура Кюри (≈ 1000 К), рекордная величина магнитной энергии на единицу объёма (32 МГс Э) в случае $SmCo_5$, изменение с ростом температуры направления лёгкого намагничивания при R = Nd, Pr, Tb, Dy, Ho, большие значения констант анизотропии (≈ 108 эрг/см³) [1; 2].

Исследованиям структуры и магнитных свойств сплавов постоянных магнитов RCO_5 посвящено большое число работ. Основной этап развития магнитотвёрдых материалов RCO_5 – 60 и 70-е годы XX в. Однако в настоящее время интерес к этим соединениям возобновился, поскольку на них наблюдается значительный магнитокалорический эффект в области спин-переориентационных переходов (СПП) [3]. Кроме того, изучение процессов в области СПП представляет интерес с фундаментальной точки зрения.

Данное исследование посвящено изучению магнитной доменной структуры этих материалов в области спин-переориентационных переходов. Наблюдения выполнены на оптических металлографических микроскопах «Neophot 30» и «Axiovert 200MAT» (Carl Zeiss) и сканирующем зондовом микроскопе «Solver P47».

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 09-02-01274.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дерягин А.В. // Успехи физических наук. 1976. Т. 120, вып. 3. С. 393–437.
2. Ermolenko A.S. // IEEE Transactions on Magnetics. 1976. November. Vol. MAG-12, № 6. P. 992–996.
3. Кошкидько Ю.С., Скоков К.П., Пастушенков Ю.Г., Иванова Т.И. // Перспективные материалы: Специальный вып. 2008. Март. С. 77–80.

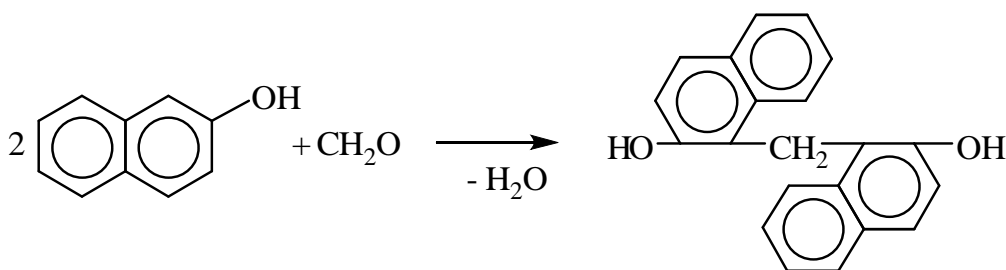
А.И. Лебедева, А.А. Шилова, А.В. Устимов

СИНТЕЗ ДИОКСИДИНАФТИЛМЕТАНА И ПОЛИМЕРОВ НА ЕГО ОСНОВЕ

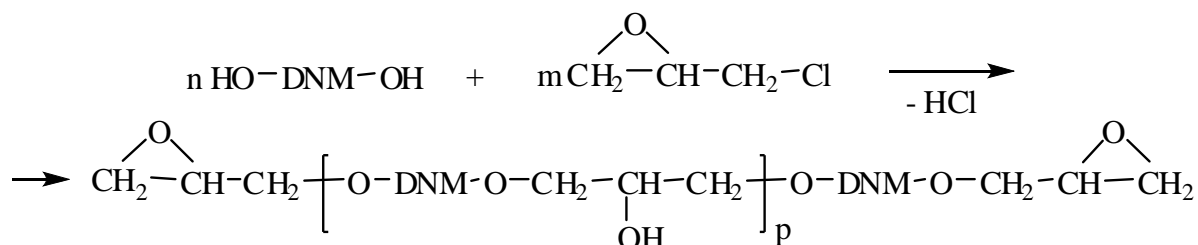
Руководитель Б.К. Крупцов

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии полимерных материалов

С целью расширения ассортимента мономеров – многоатомных фенолов (бисфенолов) для термостойких полимеров и эпоксидных смол – была проведена работа по синтезу и отработке оптимальной методики получения мономера на основе β-нафтола и формальдегида (диоксидинафтилметана, HO-DNM-OH):



с последующим получением эпоксидной смолы его конденсацией с эпихлоргидрином по схеме



Проведены исследования условий и факторов, влияющих на синтез (основность реакционной среды, присутствие растворителей, соотношение исходных компонентов, температура и временные параметры) и предложена простая методика получения с выходом целевого продукта 95 %. Качественными и количественными методами анализа доказана химическая структура продукта, определены его физико-технические характеристики. Мономер испытан на полимеризационную активность получением эпоксидной смолы как на диоксидинафтилметане, так и в его сополиконденсате с дифенилолпропаном (БФ-А), с физико-химической идентификацией полученных смол и испытанием их отверждения полиэтиленполиамином. Найдено, что синтез эпоксидных смол с диоксидинафтилметаном требует применения растворителя (ацетон) и избытка эпихлоргидрина. Чистая смола более хрупкая, чем стандартная на основе БФ-А, в сополиконденсате с БФ-А повышаются твёрдость и теплостойкость последней.

Е.С. Лившиц

ПОЛИТОЛУИДИНОВЫЙ ГАЗОВЫЙ СЕНСОР НА АММИАК

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Мониторинг содержания аммиака в различных газовых средах имеет важное практическое значение. Обычно мониторинг содержания аммиака осуществляют химическим способом, например, с помощью кислотно-основного титрования с предварительным поглощением аммиака специальным раствором. Этот метод позволяет получить надёжные результаты, однако он может быть использован только в условиях химической лаборатории и требует значительного времени.

Для непрерывного мониторинга содержания аммиака в газовой среде необходим соответствующий сенсор. Ранее для такого сенсора был предложен полианилин. Однако низкая адгезия полианилина к керамической подложке не позволяет изготовить надёжный сенсор. Поэтому целью настоящей работы было создание твёрдотельного газового сенсора на основе электропроводного полимера – полтолуидина. Известно, что некоторые электропроводные полимеры могут изменять свое электрическое сопротивление под воздействием аммиака. К сожалению, практически все электропроводные полимеры неплавкие и нерастворимые в большинстве органических растворителей вещества.

Поэтому для изготовления плёнки полтолуидина мы использовали метод электрохимического окисления толуидина на поверхности палладиевой подложки в гальваностатическом режиме. Палладиевая подложка представляла собой гребёнку из параллельных электродов, чётные электроды объединены в один вывод сенсора, а нечётные – в другой. При этом расстояние между электродами составляло 0,078 мм. Чётных и нечётных электродов 23. В процессе электрохимического синтеза плёнка полтолуидина постепенно заполняла промежутки между электродами, замыкая их. В результате был получен резистивный сенсор, имеющий сопротивление 120 Ом. Рабочая площадь сенсора около 8 мм². Эта плёнка имела хорошую адгезию к подложке, что позволило получить надёжный сенсор.

Предварительные испытания показали, что в интервале концентраций аммиака в воздухе $0,5 \cdot 10^{-7}$ – $0,5 \cdot 10^{-6}$ М электрическое сопротивление сенсора имеет линейную зависимость. При этом крутизна отклика изготовленного сенсора – 5 Ом/(моль/мл). Время отклика составляло не более 1 с, время релаксации – несколько минут.

Л.В. Лисавина, И.В. Третьякова, А.Ю. Данилов

ТЕРМОСТОЙКИЙ ПОЛИМЕРНЫЙ КОМПОЗИТ С ВЫСОКИМИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ

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

Разработка новых композиционных материалов, в том числе нанокomпозитов, с высокими эксплуатационными характеристиками является одним из приоритетных направлений науки и техники. При этом особое внимание уделяется полимерным электро- и магнитоактивным композитам («гибкие магниты и пьезоэлектрики»). Такие материалы находят всё более широкое применение в электронике, в средствах защиты и связи.

Нами недавно создан уникальный полимерный пьезоэлектрик с высокими термическими, механическими и диэлектрическими свойствами. Поэтому цель настоящей работы – комплексное изучение строения данного материала методами термического анализа, Фурье–ИК спектроскопии и оценка его диэлектрических свойств.

В работе исследовали плёночный композит на основе матрицы из смеси полимеров – поливинилиденфторида (ПВДФ) и термостойкого полиамидбензимидазола (ПАБИ), в качестве наполнителя использовали порошок пьезокерамики – НЦТС-1. Для приготовления композиционных полимерных плёнок был использован метод формования из раствора. Процентное содержание составляющих компонентов в композите варьировалось с целью определения оптимальной комбинации по комплексу механических, термических и диэлектрических свойств. Плёнки композитов анализировали методами ТГА на дериватографе «Паулик–Паулик–Эрдей Q-1500» (Венгрия) и ИК спектроскопии на Фурье–ИК спектрометре «Equinox 55» и ИК микроскопе «Hyperion-3000» фирмы «Bruker». Для исследования диэлектрических свойств на поверхность плёнок наносили серебряные электроды. При изучении диэлектрического гистерезиса использовали установку на основе схемы Сойлера–Тауэра.

Результаты анализа плёнок композита систематизированы в таблице.

Значения диэлектрической проницаемости ϵ на частоте 1000 Гц и термостойкости (Т) полимерных композитных плёнок с 50 % наполнением пьезокерамикой НЦТС-1

<i>Образец и его свойства</i>	<i>ПВДФ</i>	<i>ПАБИ</i>	<i>ПВДФ + ПАБИ</i>
ϵ	16,50	3,75	72,00
Т, °С	300	350	400

Методом ИК спектроскопии определено распределение частиц наполнителя в полимерной матрице. Продолжаются исследования по оптимизации состава и условий получения термостойкого полимерного композита с высокими диэлектрическими свойствами.

В.С. Лисицын

ВЛИЯНИЕ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЯ
НА ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ SBN

Руководитель О.В. Малышкина

Тверской государственный университет
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Сегнетоэлектрические материалы на основе твёрдых растворов $\text{Sr}_x\text{Ba}_{1-x}\text{Nb}_2\text{O}_6$ (SBN) обладают уникальным набором физических свойств, интересных для фундаментальных исследований и различных применений [1]. В работе исследовались сегнетоэлектрические монокристаллы $\text{Sr}_x\text{Ba}_{1-x}\text{Nb}_2\text{O}_6$ с $x = 0,61$, номинально чистого состава, а также с примесями Eu (2000 ppm) и Rh (2000 ppm).

В работе исследована температурная зависимость пирокоэффициента кристаллов SBN с примесями Eu и Rh в широком диапазоне температур. Показано, что положение максимума пирокоэффициента не зависит от того, какая сторона (соответствующая «+» P или «-» P) нагревалась модулированным тепловым потоком. Для SBN с примесью Eu и Rh значение пирокоэффициента на стороне «-» P на 15 % превосходит его значение со стороны «+» P . В процессе охлаждения из параэлектрической фазы наблюдался пироэлектрический сигнал в 10 раз меньше первоначального. На основании этого делается вывод о том, что в процессе охлаждения из параэлектрической фазы имеет место деполяризация образца. Также исследовано влияние термоциклирования на профиль поляризации этих кристаллов TSW методом [2].

Для безпримесного кристалла SBN исследовано влияние высокотемпературного отжига на профиль пироэлектрического коэффициента. Установлено, что предварительный отжиг кристалла способствует более однородной поляризации по толщине образца во внешнем электрическом поле. Отжиг способствует также возникновению в образце униполярного состояния, что проявляется в восстановлении поляризованного состояния после охлаждения из параэлектрической фазы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кузьминов Ю.С. Сегнетоэлектрические кристаллы для управления лазерным излучением. Л., 1982.
2. Movchikova A., Malyshkina O., Suchaneck G., Gerlach G., Steinhausen R., Theo H. Langhammer, et al. // J. Electroceram. 2008. V. 20. P. 43.

П.С. Лихуша

ВЫЯВЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ ИММОБИЛИЗАЦИИ О-ДФО

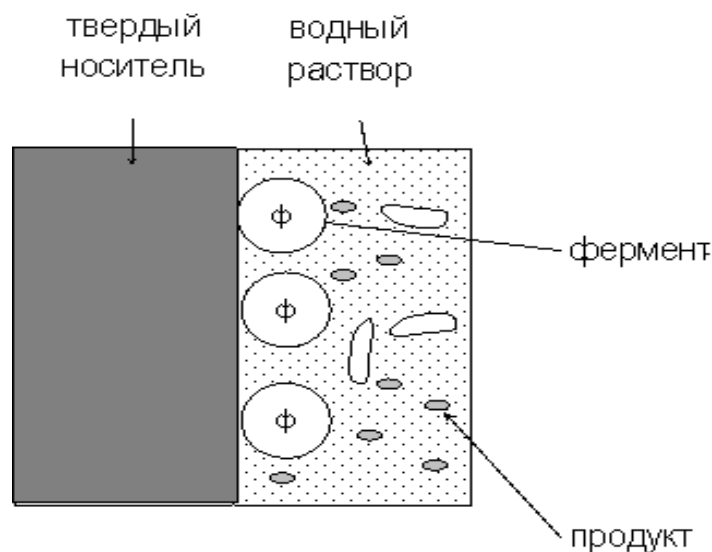
Руководитель Г.П. Лапина

Тверской государственной университет

Кафедра физико-химической экспертизы биоорганических соединений

Процесс окисления водорода, отнятого дегидрогеназами от различных субстратов и вошедшего в состав полифенолов за счёт кислорода воздуха, является основным этапом клеточного дыхания. Важно также помнить, что процесс должен проходить в оптимальных для данной системы условиях. Это, как правило, температура около 25 °С и среда с рН 5–6. Данные показатели являются усреднёнными. В то же время они не являются оптимальными для всех ферментативных систем. Особый интерес представляет фермент о-дифенолоксидаза (о-ДФО) льна в силу практического применения и её малой изученности.

Работа посвящена иммобилизации энзима на твёрдом носителе и подбору оптимальных условий для практического использования полученной системы (рисунок).



Способ иммобилизации ферментов: адсорбция на
нерастворимых носителях

О-дифенолоксидаза была получена в 4 системах с ионными силами (М) 0,1; 0,2; 0,3; 0,4 и при рН 5,3. Твёрдым носителем служили пластинки с силикагелем. Подготовлены иммобилизованные ферментативные системы, включающие о-ДФО, бензидин. В дальнейшем определяли кинетические параметры полученных иммобилизованных биокаталитических систем в градиенте концентраций пероксида водорода. Сделаны выводы об эффективности функционирования разработанных иммобилизованных биокатализаторов.

Л.Ф. Лурье, В.О. Шендер

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТЕЙ
ОПТИМИЗАЦИИ ОТДЕЛЬНЫХ СТАДИЙ ПОЛУЧЕНИЯ
ИНТЕРФЕРОНА- $\alpha 2b$ С ПОМОЩЬЮ РЕКОМБИНАНТНОГО ШТАММА
ESCHERICHIA COLI SGK25/PIF TREN В ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ
УСЛОВИЯХ

Руководитель С.В. Карцова

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

Исследования проводились на базе ООО «Центр инженерной иммунологии», обособленном подразделении ЗАО «Биокад» в отделе масштабирования.

В задачу входило изучение кинетики синтеза интерферона- $\alpha 2b$ при различных условиях аэрации и перемешивания, а также динамики роста культуры *E. coli*. Для определения концентрации интерферона использовали метод электрофореза в ПААГ. О динамике роста популяции клеток судили с помощью спектрофотометрического метода.

Скорость подачи воздуха изменялась от 8 до 20 л/мин. Скорость перемешивания – от 50 до 350 об/мин. Результаты проведения эксперимента показали, что оптимальным для количественного выхода интерферона- $\alpha 2b$ являлась умеренная скорость перемешивания (130 об/мин) при умеренной степени аэрации (10 л/мин).

По окончании стадии культивирования пробу биомассы исследовали на стерильность и сегрегационную устойчивость плазмиды. Микробиологическая чистота клеток проверялась методами прямого посева, а также контролем окрашенных по методу Грама образцов. В результате исследования не было обнаружено каких-либо посторонних микроорганизмов, что свидетельствует о проведении процесса культивирования в стерильных условиях; было выявлено, что клетки на момент окончания роста сохраняют в своей структуре необходимые плазмиды.

Кроме того, был проведён сравнительный анализ физических методов дезинтеграции клеток с использованием ультразвуковой обработки и френч-пресса. Контроль степени разрушения клеток осуществляли методом электрофореза в ПААГ. Было показано, что френч-пресс обладает заметными преимуществами перед ультразвуковым дезинтегратором: высокой производительностью, возможностью регулировки и контроля над давлением в ходе всего процесса, а также удобством загрузки биомассы и приёма обработанной суспензии.

Е.В. Малахова, А.Д. Пяткина, А.Ю. Курочкина

ПОВЕРХНОСТНЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИАМИДОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ГАЗОЖИДКОСТНОЙ ПОЛИКОНДЕНСАЦИЕЙ

Руководитель Т.В. Карасёва

Тверской государственной технической университет

Кафедра технологии полимерных материалов

Полиамидные материалы на основе полигексаметилентерефталамида

(полиамид-6Т) $\left[\text{NH}-(\text{CH}_2)_6-\text{NH}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{C}_6\text{H}_4-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}} \right]_n$ и полигексаметиленизофтал-

амида (полиамид-6И) $\left[\text{NH}-(\text{CH}_2)_6-\text{NH}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{C}_6\text{H}_4-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}} \right]_n$, полученные

реакционным формованием методом газожидкостной поликонденсации, обладают рядом выдающихся физико-химических свойств, на основе которых открываются перспективы их использования в качестве термостойких электроизоляционных, фильтрующих материалов поверхностного и объёмного типов, а также адгезивов.

Изучены поверхностные свойства полиамидов (вязкость, набухание в воде, сорбционная влажность, пористость), проведён сравнительный анализ данных.

Ранее проведённые исследования поверхностных свойств полиамидов-6Т указывали на их способность впитывать влагу, т.е. проявлять гидрофильные свойства и способность к самосвязыванию в массе. Полученные экспериментальные данные подтверждают предположения о том, что полиамид-6Т гидрофилен, а полиамид-6И гидрофобен.

В объёме образца полиамида-6И было большое количество газовых включений, захваченных в реакционной камере в момент, когда вязкость полимерной фазы была сравнительно низка. Это резко повышает пористость возникающих структур и придаёт им плавучесть при сепарации реакционной массы, в то время как образцы полиамида-6Т представляют собой волокнисто-пленочные структуры и пористость определяется пространством между плёнками (волоконками) или пустотностью.

Гидрофильность полиамида-6Т (набухаемость в воде около 70 % от массы полимера) можно использовать при применении его в качестве сорбента. Поэтому возникла необходимость глубже изучить его сорбционные свойства.

О.В. Матвеева, С.В. Щенников

ИЗУЧЕНИЕ ИММОБИЛИЗОВАННОЙ ПЕРОКСИДАЗЫ НА ОКСИДЕ АЛЮМИНИЯ В РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ 2,3,6-ТРИМЕТИЛФЕНОЛА

Руководители: В.Г. Матвеева, Н.В. Лакина

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Исследование неорганических носителей в качестве адсорбентов ферментов для приготовления промышленных гетерогенных биокатализаторов является актуальным направлением, поскольку неорганические носители обладают очевидными преимуществами. Они относительно дешёвы и доступны; имеют высокую механическую прочность и низкое гидродинамическое сопротивление; инертны и устойчивы в водных средах и, что особенно важно, свойства неорганических носителей, их геометрическая форма, текстурные характеристики, химические свойства и морфология поверхности варьируются в очень широком диапазоне.

В связи с важнейшими областями применения витамина Е в настоящее время разработано много схем синтеза этого соединения. Практически во всех схемах синтеза молекула α -токоферола строится из триметилгидрохинона по реакции с изофитолом. Поэтому одной из главных задач является получение триметилгидрохинона.

Данная работа посвящена изучению способа окисления 2,3,6-триметилфенола до триметилгидрохинона с применением биокатализатора – иммобилизованной пероксидазы на оксиде алюминия. Иммобилизация ферментов проводится путём образования новых ковалентных связей и является в настоящее время доминирующим способом получения биокатализаторов пролонгированного действия.

В ходе проведённых экспериментов был изучен способ окисления триметилфенола с использованием в качестве катализатора иммобилизованной пероксидазы (КФ 1.11.1.7) в присутствии перекиси водорода, добавленной в эквимолярном количестве к триметилфенолу. Результатом применения такого катализатора явился высокий выход триметилгидрохинона – 98 %, что является актуальным для дальнейшего изучения кинетики и условий такого способа окисления триметилфенола до триметилгидрохинона.

Е.В. Мирзаева, И.И. Сухова

УТИЛИЗАЦИЯ ОТХОДОВ СТЕКОЛЬНОГО ПРОИЗВОДСТВА

Руководитель Е.И. Лагусева

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии полимерных материалов

В настоящее время ООО «Тверьстекло» выпускает люстры, торшеры, бра, светильники, настольные лампы из хрусталя и цветных стёкол ручной техники обработки и огранки хрусталя. Поиск областей использования технологических отходов (хрусталя и стекла) является целью данной работы.

Проведены лабораторные поисковые исследования по разработке фасадной плитки с использованием наименьшего количества дорогостоящих материалов, но при этом обладающих достаточными прочностными и эстетическими качествами.

Облицовочная фасадная плитка – практичный, безопасный для здоровья материал, использование которого оправдано как для наружной, так и для внутренней отделки.

В качестве наполнителя применяли технологические отходы производства изделий из хрусталя и цветного стекла, предварительно подвергнутые дроблению и рассеву на фракции.

Первоначально предложенный вариант композиции на основе непредельного полиэфира ПН-1 (связующее), нафтената кобальта УНК-2 (ускоритель), перекиси бензоила (инициатор) и наполнителя (дроблёные отходы производства) удовлетворял по прочностным и эстетическим характеристикам. Однако себестоимость готовой плитки высока, что неприемлемо. Кроме того, в качестве отвердителя в промышленную непредельную полиэфирную смолу ПН-1 входит стирол, поэтому необходимо предусмотреть мероприятия по охране окружающей среды и здоровья человека.

С целью удешевления продукции и создания безвредных условий работы предложено использовать неорганические связующие: цемент марки М 500, алебастр (гипс строительный), негашёную известь. Однако плитка, изготовленная на основе цемента, имеет тёмный цвет, исчезает красота разноцветного стекла. Алебастр и гипс имеет светлый цвет, вполне удовлетворяет требованиям. Для повышения прочностных характеристик плитки предложено в композицию вводить акриловую дисперсию Эмульсар, используемую для выполнения наружных работ.

А.А. Михалчан

НАНОМОДИФИЦИРОВАННЫЙ ФТОРОПЛАСТ – СВЯЗУЮЩЕЕ ДЛЯ УГЛЕРОД-ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ

Руководитель А.А. Лысенко

Санкт-Петербургский государственный университет технологии и дизайна
Кафедра наноструктурных, волокнистых и композиционных материалов

В водородных электрохимических источниках тока одним из базовых элементов является газодиффузионная подложка (ГДП). Наиболее разработанная технология ГДП, основанная на получении углерод-углеродных композитов (КМ), многостадийна и энергозатратна. Более прогрессивной является технология ГДП, базирующаяся на получении углерод-полимерных КМ. Недостатком последней является более высокое электрическое сопротивление ГДП, так как полимерные связующие являются диэлектриками. Модификация полимерных связующих путём введения токопроводящих нанодисперсий (технического углерода или углеродных нанотрубок) должна позволить достичь высокой электропроводности ГДП даже при низких степенях наполнения.

Задачи исследований: изучение свойств нанодисперсий углерода и модифицированных ими связующих на основе фторопласта Ф-2М, разработка технологической схемы получения углерод-полимерных ГДП и изучение их свойств.

Показано, что электрическое сопротивление нанодисперсий может быть значительно (в 2–3 раза) снижено путём их высокотемпературной обработки. Установлено, что нанодисперсии углерода способны самопроизвольно окисляться кислородом воздуха при хранении, что увеличивает их электрическое сопротивление. На основании данных рентгенофотоэлектронной спектроскопии, характеризующих изменение химии поверхности углеродных наночастиц, предложено объяснение этих явлений.

Выявлена термическая неустойчивость размеров фторопластовых связующих. Предложен вариант их стабилизации.

Разработана опытная технология получения ГДП в виде углерод-полимерных композитов. С использованием наномодифицированных связующих получены токопроводящие плёнки и ГДП с необходимым низким электрическим сопротивлением и повышенной термомеханической стабильностью.

Е.В. Моргунова

КИНЕТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ПРОЦЕССА
ГИДРОХИМИЧЕСКОГО ОКИСЛЕНИЯ СУЛЬФИДА СВИНЦА В
ПРИСУТСТВИИ ХЛОРИД-ИОНОВ

Руководитель В.И. Луцки

Тверской государственной технической университет
Кафедра химии

Разработка гидрохимических технологий извлечения свинца из сульфидных руд требует изучения кинетики окислительного растворения галенита PbS как одного из основных промышленных свинецсодержащих минералов. Наиболее совершенным методом исследования кинетики процессов растворения является метод вращающегося диска. Сочетание метода вращающегося диска с возможностями математического планирования эксперимента является эффективным при построении кинетических моделей процесса растворения. В данной работе указанный подход использован для изучения кинетики гидрохимического окисления сульфида свинца (II) в присутствии хлорид-ионов в качестве комплексообразователя.

Удельную скорость растворения галенита W оценивали по количеству катионов Pb^{2+} , переходящих в раствор за единицу времени с единицы площади поверхности диска. Концентрацию катионов свинца в растворе определяли методом переменного тока полярографии.

Изучены зависимости удельной скорости растворения PbS W от концентраций окислителя C и хлорид-ионов $[Cl^-]$, температуры T , интенсивности перемешивания ω и продолжительности взаимодействия τ . Методом полного факторного эксперимента получены полиномиальные модели, преобразованные в кинетические уравнения вида

$$W = k \cdot C^a \cdot [Cl^-]^b \cdot \exp(-E_a/RT) \cdot \omega^c \cdot \tau^d.$$

Указанные модели позволяют рассчитывать скорость растворения сульфида свинца (II) при одновременном изменении перечисленных выше параметров. Установлены режимы взаимодействия, определены условия их реализации, выявлены детали механизма взаимодействия. Предложены соответствующие наблюдаемым кинетическим зависимостям термодинамически обоснованные схемы механизма изученного процесса.

Комплексный анализ кинетических закономерностей поведения галенита в процессе окисления позволяет осуществлять оптимизацию существующих и разрабатывать новые гидрохимические технологии извлечения свинца из сульфидных руд и концентратов в присутствии хлорид-ионов как комплексообразователей.

Е.В. Моргунова

ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГАЛЕНИТА С РАСТВОРАМИ
АЗОТНОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель В.И. Луцик

Тверской государственный технический университет

Кафедра химии

Методами вращающегося диска и полного факторного эксперимента изучена кинетика взаимодействия галенита (сульфида свинца) с растворами азотной кислоты. Комплексный анализ полученных кинетических характеристик позволил установить режимы взаимодействия, определить макромеханизм и выявить лимитирующие стадии процесса.

Установлено, что логарифмическая зависимость скорости растворения галенита W от концентрации азотной кислоты C имеет три области: медленного роста W с увеличением C (при $C < 0,5$ моль/дм³), интенсивного роста W (при $C = 0,5 \dots 6,0$ моль/дм³) и снижения W (при $C > 6,0$ моль/дм³).

В результате анализа кинетических моделей процесса, построенных для каждой из указанных областей, найдено, что при $C < 6,0$ моль/дм³ взаимодействие сульфида свинца с азотной кислотой протекает в кинетическом режиме. Наиболее вероятная стадия процесса – химическое взаимодействие PbS и HNO_3 . Отмечено автокаталитическое действие продуктов восстановления кислоты на скорость окисления: увеличение частоты вращения диска вызывает унос каталитически активных продуктов восстановления кислоты от поверхности и приводит к снижению скорости взаимодействия. На основании полученных данных предложен вероятный механизм взаимодействия галенита с азотной кислотой.

В области малых концентраций HNO_3 (при $C < 0,5$ моль/дм³) отмечено появление диффузионных затруднений.

При концентрациях кислоты, больших 6 моль/дм³, реализуется близкий к диффузионному смешанный режим взаимодействия. Показано, что причиной снижения скорости взаимодействия сульфида свинца с концентрированной азотной кислотой является уменьшение растворимости продуктов реакции. Наиболее вероятная стадия процесса – диффузия $Pb(NO_3)_2$ от поверхности диска в объём раствора. Расчёт диффузионного потока нитрата свинца подтвердил это предположение.

Результаты исследования расширяют базу данных по кинетике гидрохимического окисления сульфидов металлов и могут быть использованы для разработки рекомендаций по эффективному комплексному использованию свинцовых руд и концентратов.

И.А. Москалёв

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИХ КАЧЕСТВО ВОДКИ

Руководитель Г.П. Лапина

Тверской государственной университет

Кафедра физико-химической экспертизы биоорганических соединений

Объектом исследования выбрана водка особой марки «Хлебная» следующих производителей: ООО «Родина», ООО «Кашинский ликероводочный завод “Вереск”», ООО ТПТО «Витэкс», ООО «Мытищинский ЛВЗ».

Цель работы – с использованием комплекса физико-химических методов определить качество водок различных производителей, реализуемых в г. Твери. Качество особых водок марки «Хлебная» оценивали с помощью физико-химических методов.

Анализировали:

- полноту налива (ГОСТ Р 51135-98). Метод основан на определении объёма ликероводочных изделий в бутылках с применением мерной лабораторной посуды;
- массовую концентрацию кислот (ГОСТ Р 51135-98). В основе метода – титрование определенного объёма анализируемого изделия раствором гидроокиси натрия до получения нейтральной реакции;
- щёлочность (ГОСТ Р 52472-2005) по установлению объёма раствора соляной кислоты, израсходованной на титрование водки;
- массовую концентрацию сложных эфиров (ГОСТ Р 52472-2005). Метод основан на измерении интенсивности окраски продуктов реакции железа (III) хлорида б-водного с гидроксамовой кислотой;
- крепость изделий ареометром (ГОСТ Р 51135-98). Этот метод основан на измерении содержания этилового спирта с использованием ареометра для спирта в дистилляте.

Полученные экспериментальные результаты обобщены, сопоставлены с нормативами ГОСТов и сделаны выводы о соответствии образцов требованиям общепринятых нормативных документов. Разработаны рекомендации об использовании комплексного подхода для определения подлинности водок.

М.С. Мурзанов

МИКРОМАГНИТНЫЙ АНАЛИЗ МАГНИТНОЙ ДОМЕННОЙ
СТРУКТУРЫ МОНОКРИСТАЛЛОВ $R(\text{Fe},\text{Ti})_{12}$

Руководитель Ю.Г. Пастушенков

Тверской государственный университет
Кафедра магнетизма

Интерметаллиды с большой концентрацией железа, в которых кристаллическая структура стабилизируется добавлением немагнитных элементов с ионным радиусом большим, чем у железа, интересны с точки зрения практических применений и поэтому активно исследуются*. К таким материалам относятся сплавы системы $R(\text{Fe},\text{Ti})_{12}$. Данные соединения характеризуются высокой магнитокристаллической анизотропией и температурой магнитного упорядочения и поэтому рассматриваются специалистами как перспективные материалы для постоянных магнитов. Помимо практической значимости, соединения $R(\text{Fe},\text{Ti})_{12}$ являются превосходными модельными объектами для анализа природы фундаментальных магнитных свойств редкоземельных интерметаллидов.

В данной работе приведены исследования магнитной доменной структуры (ДС), выполненные на образцах $R(\text{Fe},\text{Ti})_{12}$, где $R = \text{Tb}, \text{Dy}$, методами оптической металлографии. Наблюдения ДС проводились на оптических металлографических микроскопах «Neophot 30» и «Axiovert 200MAT» (Carl Zeiss) методами полярного эффекта Керра и магнитного коллоида (Акулова–Биттера).

Определена поверхностная плотность энергии доменных границ для высокоанизотропных соединений $\text{DyFe}_{11}\text{Ti}$ и TbFe_9Ti . Установлено, что механическое воздействие на поверхность моно- и поликристаллов соединений $\text{DyFe}_{11}\text{Ti}$, DyFe_9Ti и TbFe_9Ti приводит к изменению конфигурации доменной структуры на поверхности образца.

Описаны особенности поведения магнитной доменной структуры этих материалов на базисной и призматической плоскостях при механическом воздействии на поверхность. Установлено, что на базисной плоскости контраст между доменами пропадает, в результате чего ДС поверхности методом полярного эффекта Керра не выявляется. На призматической плоскости при приложении напряжений полосовая ДС также трансформируется: границы основных доменов изгибаются.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 09-02-01274.

* Wojciech Suski. // Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earth. 1996. V. 22, pt. 149. P. 143–294.

Е.Н. Мясникова, Е.П. Алексеева

ВЛИЯНИЕ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ АЛЮМИНИЯ (III)
С БЕТА-ЛАКТАМНЫМИ АНТИБИОТИКАМИ НА ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЕ
В ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОМ РАСТВОРЕ

Руководители: В.Г. Алексеев, П.М. Пахомов

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Синтезированы в водном растворе и выделены в твёрдом состоянии комплексные соединения бета-лактамных антибиотиков: бензилпенициллина, ампициллина, оксациллина, цефазолина, цефотаксима и цефтриаксона с катионами Al^{3+} . Состав и структура полученных комплексов охарактеризованы методами элементного анализа и ИК спектроскопии. Исследованы влияние комплексов на гелеобразование в цистеин-серебряном растворе (ЦСР) и их совместимость с цистеин-серебряным гидрогелем. Комплексы вводили в ЦСР в виде 0,05 моль/л раствора, создавая концентрации в диапазоне от $7,4 \cdot 10^{-4}$ до $6,5 \cdot 10^{-3}$ моль/л. Во всём диапазоне концентраций комплексы антибиотиков с Al (III) не препятствуют образованию гидрогеля при добавлении инициатора гелеобразования – раствора Na_2WO_4 . Другие инициаторы – Na_2SO_4 и $MgSO_4$ – в данном случае оказались неэффективными. Важно отметить, что добавление комплекса цефтриаксона с Al (III) к ЦСР приводит к образованию геля без введения инициатора (Na_2WO_4).

Наилучшей стабильностью обладают гели, содержащие комплекс цефтриаксона. Они сохраняются без изменений в течение недели. Гели с комплексами цефотаксима и цефазолина устойчивы в течение двух суток, гели с комплексами бензилпенициллина, ампициллина и оксациллина – в течение суток.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы УМНИК-2009, государственный контракт № 6972р/9585.

Е.А. Наумов

ТОЛЕРАНТНОСТЬ ДЕРНОВО-ПОДЗОЛИСТЫХ ПОЧВ К НАКОПЛЕНИЮ ТЯЖЁЛЫХ МЕТАЛЛОВ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Толерантность дерново-подзолистых почв к накоплению в них тяжёлых металлов (ТМ) выявляли на основе проводимого мониторинга. Особое внимание обращали на соответствие потенциала плодородия их производственному назначению и загрязнению ТМ. Накопление в почве поллютантов вызывается в основном поступлением их с атмосферными осадками, вносимыми удобрениями, оказываемым влиянием промышленных предприятий и транспортных магистралей.

Мы изучали влияние Калининской атомной станции на содержание в почве ТМ. Объекты выбирались на разном расстоянии от реактора станции, в первое кольцо входили почвы, находящиеся в радиусе 25–30 км, а во второе – 30–50 км. Полученные результаты представлены в таблице.

Содержание ТМ в пахотном слое дерново-подзолистых почв на разном расстоянии от реактора АС, мг/кг воздушно-сухой массы

Место отбора почвенных проб	Pb	Cd	Cu	Zn	Fe	Cr
<i>Кольцо радиусом 25–30 км</i>						
Удомельский район, д. Едутово	8,9	0,29	6,8	35,0	10994	11,6
Удомельский район, д. Анкудиниха	9,9	0,30	9,1	23,4	11775	12,3
Удомельский район, д. Стан	8,8	0,22	15,7	36,2	14721	14,8
Удомельский район, д. Мишнево	5,4	0,29	4,7	23,3	11912	7,5
<i>Кольцо радиусом 30–50 км</i>						
Вышневолоцкий район, д. Борисово	7,8	0,14	6,3	21,6	8471	4,1
Лесной район, д. Стройково	8,4	0,22	5,2	27,3	15180	5,4
Максатихинский район, д. Ручки	9,5	0,17	8,7	27,9	10095	7,1
Спировский район, д. Казиха	4,7	0,19	8,3	28,6	12583	7,5
ПДК в почве	32,0	0,50	33,0	55,0	–	6,0

Как видно, ни по одному из исследуемых элементов их количество не превышало ПДК. При этом следует заметить, что никакой разницы в содержании ТМ в почве в зависимости от удалённости от реактора АС также не выявлено. Практика свидетельствует о не совсем обоснованном иногда подходе к самим ТМ в почве, которые считаются токсичными элементами. В то же время токсичных элементов не бывает, а имеются их токсичные концентрации. Из наших исследований вытекает, что работающая в Тверской области АС не приводит к увеличению содержания в почве ТМ до токсичного уровня. Особо следует отметить низкое количество свинца, поскольку он может ингибировать ферментативные реакции растений, вступать в химические реакции с белками, приводя к их осаждению.

В.В. Новикова

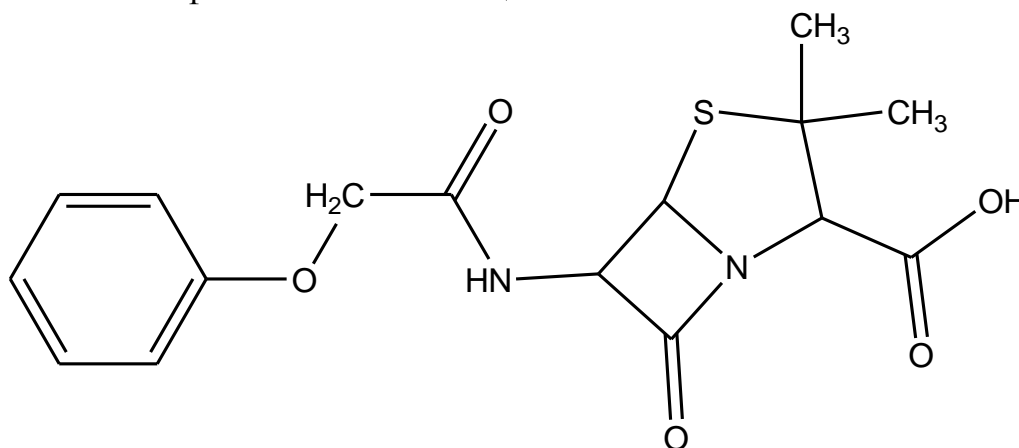
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ КАТИОНОВ МЕТАЛЛОВ
С ФЕНОКСИМЕТИЛПЕНИЦИЛЛИНОМ

Руководитель С.В. Лапшин

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Постоянно возрастающее число применяемых в медицине антибиотиков делает актуальным изучение их взаимодействия с катионами металлов, присутствующих прежде всего в биологических системах. Анализ научной литературы показывает, что антибиотики могут образовывать с катионами металлов комплексные соединения, в результате чего изменяются химические свойства антибиотиков и их биологическая активность.

В данной работе поставлена задача исследовать взаимодействие биологически активных ионов (меди (II), цинка (II), марганца (II), никеля (II), железа (III)) с широко распространённым β -лактамным антибиотиком – феноксиметилпенициллином:



В научной литературе имеются данные по устойчивости и строению комплексов, но они противоречивы и неточны. Так, устойчивость комплекса марганца больше, чем у комплекса меди, а комплекс меди менее устойчив, чем комплекс цинка, что противоречит ряду Ирвинга–Вильямса.

Было проведено рН-метрическое титрование феноксиметилпенициллина в присутствии катионов металлов гидроксидом натрия на фоне 0,1 М раствора KNO_3 . Математическая обработка результатов титрования проведена с помощью универсальной программы «New DALSFЕК». Были сделаны выводы о составе и устойчивости изученных комплексных соединений, которые согласуются с рядом Ирвинга–Вильямса.

М.Ю. Орлов

РАСЧЁТ ПРИВЕДЁННЫХ МОМЕНТОВ ИНЕРЦИИ
И ВРАЩАТЕЛЬНЫХ ПОСТОЯННЫХ АЛКАНОВ
И АЛКИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ

Руководитель В.В. Туровцев

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

Конформационный анализ молекул требует знания параметров внутреннего вращения. Важнейшим из них является приведённый момент инерции (I_r). Определение I_r довольно сложная процедура, поэтому очень часто в публикациях по внутреннему вращению значения I_r отсутствуют. В тех же работах, где приводят величину I_r , полагают $I_r = \text{const}$ и не зависящим от торсионного угла (φ), что вносит существенную погрешность в дальнейшие расчёты.

Нами создана программа RedMoment, позволяющая определять зависимость $I_r(\varphi)$, а также зависимость вращательной постоянной (F) от угла φ . Входными данными программы являются декартовы координаты атомов, представленные в виде двух множеств – остова и волчка. Все входные координаты автоматически приводятся к главным центральным осям с одновременным определением тензора инерции и главных центральных моментов инерции. В итоге получаем моменты инерции остова и волчка относительно оси внутреннего вращения, $I_r(\varphi)$ и $F(\varphi)$.

Нами на основании высокоуровневых квантово-химических расчётов равновесного строения и с использованием программы RedMoment были рассчитаны I_r и F для всех внутренних вращений n -алкильных радикалов от C_2H_5 до C_8H_{17} , а также n -алканов от C_2H_6 до C_8H_{18} . Найденные величины I_r и F соответствуют шагу двугранного угла $\Delta\varphi = 10^\circ$. Кроме того, были дополнительно получены геометрические параметры всех переходных состояний и всех локальных минимумов, для которых также найдены I_r и F . Табличное представление $I_r(\varphi)$ и $F(\varphi)$ было аппроксимировано рядом Фурье. В результате показано, что в n -алкильных радикалах заслонённое положение связей и ядер не всегда является переходным состоянием, а конформация остова при удалении на три и более связей от радикального центра совпадает с таковым в n -алканах. Найденные соотношения в дальнейшем будут использованы при определении микроволновых спектров и термодинамических свойств изученных молекул и радикалов.

Д.Р. Папулова

ЭНЕРГИИ СВЯЗЕЙ ОТДЕЛЬНЫХ ВИДОВ
В ЗАМЕЩЁННЫХ ЭТАНА

Руководитель М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Энергия связи в молекуле (термохимическая энергия связи) ε определяется долей энтальпии атомизации молекулы $\Delta_a H^0$, приходящейся на данную связь в этой молекуле (так, что сумма по всем энергиям связей равна $\Delta_a H^0$). Энтальпии атомизации можно вычислить на основании закона Гесса из энтальпий образования из элементов ($\Delta_f H^0$). Поэтому бытует мнение, что *теоретическая задача определения энергий связей* сводится в конечном итоге к расчёту самих молекул*. Однако следует иметь в виду, что отнесение энтальпий атомизации к отдельным связям (без дополнительных предположений) в общем случае сделать невозможно.

Рассмотрим X-замещённые этана $\text{CH}_{3-l}\text{X}_l\text{-CH}_{3-l'}\text{X}_{l'}$, где $X = \text{D}, \text{T}, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}, \text{CH}_3, \text{NO}_2, \dots$). При учёте ближайшего окружения атомы C распадаются на 4 вида: $\text{C}^0, \text{C}^1, \text{C}^2, \text{C}^3$; значит, связи C–C – на 10 видов: $\text{C}^0\text{-C}^0, \text{C}^0\text{-C}^1, \text{C}^0\text{-C}^2, \text{C}^0\text{-C}^3, \text{C}^1\text{-C}^1, \text{C}^1\text{-C}^2, \text{C}^1\text{-C}^3, \text{C}^2\text{-C}^2, \text{C}^2\text{-C}^3, \text{C}^3\text{-C}^3$; связи C–H – на 3 вида: $\text{C}^0\text{-H}, \text{C}^1\text{-H}, \text{C}^2\text{-H}$; связи C–X – на 3 вида: $\text{C}^1\text{-X}, \text{C}^2\text{-X}, \text{C}^3\text{-X}$. Мы имеем:

$$\Delta_a H^0(\text{CH}_{3-l}\text{X}_l\text{-CH}_{3-l'}\text{X}_{l'}) = \varepsilon(\text{C}^l\text{-C}^{l'}) + (3-l)\varepsilon(\text{C}^l\text{-H}) + (3l')\varepsilon(\text{C}^{l'}\text{-H}) + l\varepsilon(\text{C}^l\text{-X}) + l'\varepsilon(\text{C}^{l'}\text{-X}) \quad (l, l' = 0, 1, 2, 3; l \leq l') \quad (1)$$

Энергии связей ε из (1) нельзя определить, поскольку число уравнений (их 10) меньше числа неизвестных (16). Нужны дополнительные предположения. Можно воспользоваться зависимостью между энергией связи ε и её длиной r^* . При малых изменениях в энергиях связей одного и того же типа эта зависимость должна быть линейной. Мы полагаем:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\text{C}^l\text{-C}^{l'}) &= A + Br(\text{C}^l\text{-C}^{l'}), \quad \varepsilon(\text{C}^l\text{-H}) = a + br(\text{C}^l\text{-H}), \\ \varepsilon(\text{C}^l\text{-X}) &= c + dr(\text{C}^l\text{-X}). \end{aligned} \quad (2)$$

Получаем систему из 10 уравнений с шестью неизвестными A, B, a, b, c, d , которые (если длины связей известны) можно определить (МНК), а по ним согласно (2) найти и энергии связей отдельных видов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 10-03-97500-р 2004 Центр-а).

* Папулов Ю.Г., Смоляков В.М. Физические свойства и химическое строение. Калинин, 1981.

К.Н. Пензов

ИССЛЕДОВАНИЕ ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
ПЬЕЗОКЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ ТВЁРДОГО РАСТВОРА
ТИТАНАТА-СТАННАТА БАРИЯ

Руководитель О.В. Малышкина

Тверской государственной университет
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Варьируя состав монокристаллов или монокристаллических твёрдых растворов, входящих в состав керамики, можно получать материалы с определёнными физическими свойствами, необходимыми для конкретных применений. В последнее время для ряда практических применений начали производить функциональную керамику с градиентом состава [1; 2].

В работе в качестве материала исследований использовалась функциональная керамика $\text{BaTi}_{1-x}\text{Sn}_x\text{O}_3$ (BTS). Исследовались образцы BTS с $x = 0,075$ (BTS 7,5); 0,10 (BTS 10); 0,125 (BTS 12,5) и 0,15 (BTS 15), а также образцы с градиентом олова $0,075 \leq x \leq 0,15$, состоящие из двух (составы BTS 7,5 и BTS 15), трёх (BTS 7,5; BTS 10 и BTS 15) и четырёх (BTS 7,5; BTS 10; BTS 12,5 и BTS 15) слоёв с разной концентрацией олова [2]. Пирокоэффициент измерялся динамическим методом.

Показано, что положение максимума на температурных зависимостях пирокоэффициента зависит от концентрации олова. Обращает на себя внимание дополнительный максимум пирокоэффициента, имеющий место при температуре 44°C у керамик BTS 10 и BTS 7,5. Аналогичные аномалии наблюдаются у этих материалов и на температурной зависимости диэлектрической проницаемости [1]. Наличие такой аномалии объясняется тем, что при этих температурах у керамик BTS имеет место структурный фазовый переход из тетрагональной фазы в ромбическую [1]. Вид температурных зависимостей пирокоэффициента градиентных образцов зависел от того, сторона из какого материала (BTS 7,5 или BTS 15) освещалась модулированным тепловым потоком.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Yasuda N., Ohwa H., Asano S. // Jpn. J. Appl. Phys. 1996. V. 35. P. 5099.
2. Movchikova A., Malyshkina O., Suchanek G., Gerlach G., Steinhausen R., Theo H. Langhammef, Pientschke Ch., Beige H. // J. Electroceram. 2008. V. 20. P. 43.

А.А. Петрова

МИНИАТЮРНЫЙ рН-СЕНСОР НА ОСНОВЕ ПОЛИТОЛУИДИНА

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

При изучении многих реакций необходимо контролировать величину рН. До недавнего времени для этих целей использовали только стеклянный электрод. Ряд его недостатков не позволяет воспользоваться им при проведении некоторых экспериментов, тогда как использование электропроводных полимеров позволяет реализовать рН-сенсор минимальных размеров с высокими метрологическими характеристиками.

Цель настоящей работы – создание миниатюрного рН-сенсора на основе электропроводного полимера – политолуидина.

При создании рН-сенсора необходимо было нанести тонкую плёнку политолуидина на поверхность платиновой подложки. Для этого использовали метод электрохимического окисления методом циклической вольтамперометрии.

Изготовленный электрод имел линейную электродную функцию в интервале рН от 1,68 до 9,18. При этом крутизна электродной функции составила 50 мВ/рН, что достаточно близко к теоретической величине. Важным параметром рН-сенсоров является их устойчивость к действию поляризующего тока, который может протекать через электрод при измерениях. Для подтверждения стабильности работы данного сенсора в условиях поляризации мы воспользовались методом хронопотенциометрии. При всех заданных значениях поляризующего тока дрейфа потенциала сенсора не наблюдается. Кроме того, хронопотенциограммы позволяют оценить величину внутреннего сопротивления. Данный рН-сенсор имеет внутреннее сопротивление 0,58 МОм, что значительно меньше, чем у стеклянного электрода.

Ещё одной положительной способностью данного сенсора является его быстрый отклик на изменение рН. Обычно время отклика составляло не более 20 с.

Таким образом, изготовленный рН-сенсор по основным метрологическим характеристикам практически не уступает традиционному стеклянному электроду. В то же время он имеет ряд преимуществ перед ним.

Е.К. Польщина

ЭЛЕКТРОФОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ БЕЛКОВ МОЧИ ДЛЯ ДИАГНОСТИЧЕСКИХ ЦЕЛЕЙ

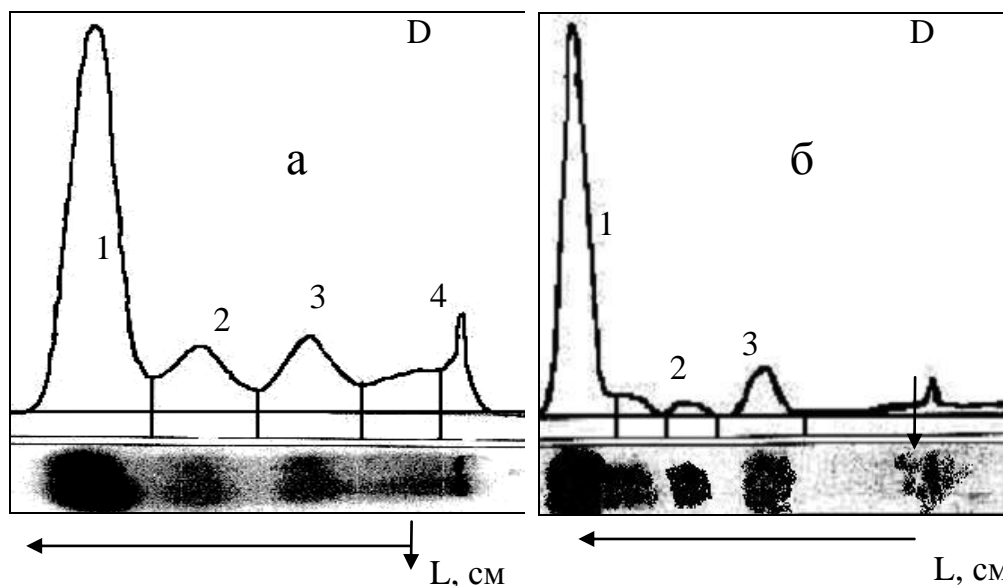
Руководитель А.Н. Панкрушина

Тверской государственный университет
Кафедра биомедицины

Цель данной работы – электрофоретическое исследование фракционного состава белков мочи для дифференциальной диагностики болезней почек.

Адаптированным методом были приготовлены пробы с мочой с концентрацией белка от 3,5 г/л и более, что необходимо при проведении электрофореза с использованием диагностического набора для электрофоретического разделения белков сыворотки крови на агарозе GEL PROTEIN 100. Электрофорез проводили в течение 20 мин при напряжении 100 В, источник питания и камера для электрофореза – производства фирмы «BioSystems BTS-100» (Испания).

Полученные электрофореграммы и денситограммы (рисунок) свидетельствуют о различиях позиций белковых фракций для больных различными типами протеинурии.



Электрофореграмма (денситограмма) белковых фракций мочи: а – при смешанном гломерулярно-тубулярном типе протеинурии; б – при селективном гломерулярном типе протеинурии; 1 – альбумин, 2 – α -1 глобулины, 3 – β -2 глобулины, 4 – γ -глобулины

С помощью метода электрофореза можно качественно и количественно определить фракционный состав белков мочи. Полученные нами результаты позволяют рекомендовать данную методику для дифференциальной диагностики различных типов протеинурии.

С.В. Потифорова

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ВОД ОТКРЫТЫХ ВОДНЫХ ИСТОЧНИКОВ РЕГИОНА ВЕРХНЕЙ ВОЛГИ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

В настоящее время для успешного развития сельскохозяйственных предприятий важно задействовать не только имеющиеся в них земли, но и находящиеся в пределах их землепользования водоёмы в виде озёр и малых рек. Последние являются критериями устойчивости экосистем и обязательной частью окружающей природной среды. Они создают определённую влажность воздуха, поддерживают уровень грунтовых вод, служат местом водопоя для животных, рыборазведения и ловли рыбы для местного потребления. Такие объекты необходимы для водоплавающих птиц, они используются в качестве мест отдыха сельских жителей. В Нечернозёмной зоне насчитывается огромное количество водных объектов местного значения. Только в Тверской области имеется 85 основных озёр, 19 рек длиной более 100 км, 55 – свыше 50 км и 376 – протяжённостью от 10 до 50 км. В частности, озёра постоянно испытывают сильное антропогенное влияние, связанное с возделыванием сельскохозяйственных культур. Мы исследовали ряд озёр, сформированных в различных агроландшафтах, имеющих рыбохозяйственное значение (таблица).

Физико-химические показатели озёр Тверской области

№ п/п	Объект исследования	Наименование показателей										
		pH	Окисляемость перманганатная, г O ₂ /м ³	Жёсткость, мг-экв/л	Диоксид углерода растворённый, г/м ³	Кислород растворённый, г/м ³	Аммоний-ион NH ₄ ⁺ , г N/м ³	Нитрат ион NO ₃ ⁻ , г N/м ³	Нитрит ион NO ₂ ⁻ , г N/м ³	Железо общее, г/м ³	Сульфат-анион, SO ₄ ²⁻ , мг/л	Хлорид-анион Cl ⁻ , мг/л
1	Оз. Бросно	8,25	8,3	3,4	0,0	12,1	н/о	н/о	н/о	0,08	3,2	4,0
2	Оз. Песьво	8,16	9,6	3,4	0,0	17,0	0,04	0,31	0,002	0,55	н/о	13,8
3	Оз. Шейно	7,57	8,5	3,4	6,7	12,3	0,09	0,26	0,002	0,08	н/о	13,5
Норма по НД	ОСТ 155 372-87. карповые хозяйства	6,5–8,5	до 15	–	не более 25	не ниже 5,0	не более 1,0	не более 1,0	не более 2,0	не более 1,8	–	–
	ОСТ 155 372-87. форелевые хозяйства	7,0–8,0	до 10	–	не более 10	не ниже 9,0	не более 0,5	не более 0,5	не более 1,0	не более 0,5	–	–
	ПДК и ОБУВ, приказ № 96 от 28.04.99 г.	6,5–8,5	–	–	–	не ниже 6,0	не более 0,5 мг/л	не более 0,5 мг/л	не более 40 мг/л	0,1	не более 100	не более 300

Н.А. Пугачёв

ЧЁТНОСТЬ И НЕЧЁТНОСТЬ В КРИСТАЛЛОГРАФИИ

Руководитель Ю.М. Смирнов

Тверской государственный университет

Кафедра прикладной физики

На основе категорий тензорных величин чётных и нечётных типов и операций симметрии первого и второго родов исследовано распределение centrosymmetric и noncentrosymmetric кристаллических неорганических и органических веществ.

Все существующие теории фазовых переходов II рода обходят существенную сторону явления – предельная симметричность действующих термодинамических сил P и T вызывает асимметрию результата. Действие скалярных термодинамических сил T и P вызывает реакцию ряда веществ с возникновением полевых величин различных тензорных рангов и видов – P , E (полярные векторы); B , M (аксиальные векторы); T , F (полярные тензоры второго ранга).

В работе [1] понятия чётности и нечётности существенно расширены. Тензорные величины чётного ранга и псевдотензорные величины нечётного ранга названы тензорами чётного типа. А тензоры нечётного ранга и псевдотензоры чётного ранга, при инверсии меняющие знаки компонент на обратные, отнесены к тензорам нечётного типа.

Существует ряд статистических исследований распределения веществ по сингониям. Подробно изучены природные минералы, а среди изученных структур синтетических веществ преобладают неорганические соединения. Видимо, стоит выдвигать на первый план чётность и нечётность классов веществ, объединяя этот вопрос с динамикой решётки, распределением и с учётом энергетике, роли волновых векторов, с сущностью неприводимых представлений кристаллографических точечных и пространственных групп. В качестве примера нами рассмотрены некоторые распределения групп органических веществ по классам симметрии [2].

Обращает на себя внимание существенный сдвиг в сторону centrosymmetric классов при абсолютном преобладании класса $2/m$. При 11 centrosymmetric классах из общего количества 32 в целом 53 % из рассмотренных веществ относятся к centrosymmetric, причём преобладают вещества классов $2/m$ и mmm (всего 41 %). В то же время третье место в распределении занимают noncentrosymmetric классы 2 и 222 (19,6 %). А общее количество noncentrosymmetric веществ высшей категории равно лишь 1,73 %.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сиротин Ю.И. Основы кристаллофизики. М., 1979.
2. Семёнов Е.И. Минералогические таблицы. М., 1981.

И.П. Санников

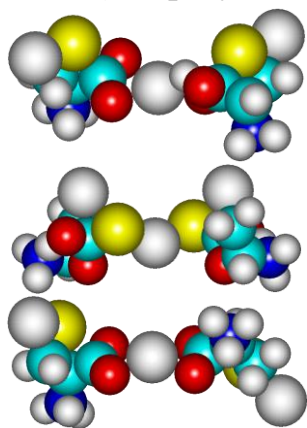
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ ИОНОВ СЕРЕБРА С МОЛЕКУЛАМИ МЕРКАПТИДА СЕРЕБРА

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

Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

В 2001 г. было обнаружено, что в водном растворе L-цистеина и нитрата серебра может образовываться тиксотропный физический гель при нормальных условиях даже при относительно низких концентрациях компонентов (0,01 %)*. Данная система представляет большой практический интерес, поскольку её компоненты обладают биологически активными и противомикробными свойствами, что увеличивает спектр её возможных применений в медицине. Предположительно на начальной стадии гелеобразования в растворе образуются металлические комплексы молекул меркаптида серебра с избыточными ионами серебра, которые затем связываются низкомолекулярными анионами (Cl^- , MoO_4^{2-} , WO_4^{2-} , SO_4^{2-}), введёнными в раствор.

Главной целью данной работы является изучение структуры супрамолекулярных металлических комплексов, образующихся благодаря взаимодействию между избыточными ионами серебра и молекулами меркаптида серебра. Компьютерное моделирование водного раствора было выполнено в рамках метода Ланжевеновской динамики. Модель включала в себя молекулы меркаптида серебра (в формах $\text{AgS-CH}_2\text{-CH(NH}_2\text{)-COO}^-$, $\text{AgS-CH}_2\text{-CH(NH}_3^+\text{)-COO}^-$, $\text{AgS-CH}_2\text{-CH(NH}_3^+\text{)-COOH}$), ионы NO_3^- , Ag^+ и H_3O^+ (как результат диссоциации $-\text{SH}$ и $-\text{COOH}$).



Для расчёта электронных спектров полученных комплексов был использован полуэмпирический квантово-механический метод ZINDO/1, адаптированный для проведения расчётов молекул, включающих атомы переходных элементов, таких, как серебро. Критерием отбора служило сравнение с экспериментальными данными, согласно которым в УФ спектре геля присутствуют две характерные полосы поглощения (в диапазонах 340–360 и 380–395 нм).

В результате работы показано, что характерные полосы поглощения проявляются в различных типах комплексов, примеры которых приведены на рисунке. В качестве продолжения работы нами предполагается исследование возможных причин формирования пространственной сетки из выявленных агрегатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке АВЦП (грант Минобрнауки РФ «Развитие научного потенциала высшей школы» № 2.1.1./6867).

* Пахомов П.М., Овчинников М.М., Хижняк С.Д., Лавриенко М.В., Nierling W., Lechner M.D. // Коллоидный журнал. 2004. Т. 66. С. 73.

УДК 54.058 + 544.032.732

Е.В. Селиванова, Е.А. Прутенская

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ПРОВЕДЕНИЯ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ПРЕДОБРАБОТКИ НЕФТЕШЛАМА

Руководитель М.Г. Сульман

Тверской государственный технический университет

Кафедра биотехнологии и химии

Обезвреживание нефтешламов сегодня актуально, так как Российская Федерация относится к крупным нефтедобытчикам. Нефтедержащие отходы – это в основном токсичные и умеренно опасные производственные отходы II и III класса опасности. Нефтяные шламы по составу чрезвычайно разнообразны и представляют собой сложные системы, состоящие из нефтепродуктов, воды и минеральной части (песок, глина и т.д.), соотношение которых колеблется в очень широких пределах.

Всё чаще применяется в нашей стране и особенно за рубежом для очистки грунта от нефтепродуктов ультразвук. Наибольшего эффекта в процессах ультразвуковой очистки можно достичь при сочетании кавитационного воздействия с химическим.

В связи с этим необходимо подбирать экстрагент, который бы избирательно растворял соответствующие загрязнения, а также обладал физико-химическими параметрами, обуславливающими достижение наибольшей интенсивности ударных волн.

В данном исследовании использовалась ультразвуковая установка «Ikasonic U 50 control», работающая в диапазоне интенсивностей от $12,5 \text{ Вт/см}^2$ до 460 Вт/см^2 . В качестве экстрагентов для проведения опытов были выбраны следующие растворители: бензол, гексан, толуол, хлороформ.

Были подобраны оптимальные условия для ультразвуковой предобработки нефтешлама. Анализ результатов показал, что максимальная степень извлечения нефти из нефтешлама достигает 75,98 % при использовании в качестве экстрагента хлороформа при длительности ультразвукового воздействия 10 мин (414 Вт/см^2). Таким образом, установлено, что наилучшим растворителем из представленного для ультразвуковой предобработки нефтешлама является хлороформ.

А.Н. Семёнов

КОМПЛЕКСЫ ГЕПАРИНА С ИОНАМИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ
ЭЛЕМЕНТОВ – ИССЛЕДОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ
И ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

На протяжении ряда лет на кафедре неорганической и аналитической химии ТвГУ исследовалось комплексообразование высокомолекулярного гепарина (биополимер, гликозамингликан, мономерное звено которого образовано связанными в α -(1 \rightarrow 4) положении остатками L-идуроновой кислоты (IdoA) и D-гликозамина (D-GlcN) – 4-L-IdoA2S- α -4-D-GlcNS, 6S- α -1) с ионами редкоземельных элементов (РЗЭ) [1]. Предполагалось, что полученные комплексные соединения ионов ряда РЗЭ с этим биополимером, обладающим антикоагулянтной активностью (АКА), будут обладать повышенной АКА по сравнению с соединениями-предшественниками. С этой целью был произведён синтез и физико-химическое исследование гепарината тербия (установлен элементный состав, стехиометрия, на основании данных ИК спектров обсуждена структура). Комплекс ионов тербия с высокомолекулярным гепарином обладает максимальной устойчивостью, вместе с тем величина рН осаждения гидроксида тербия достоверно превышает величину физиологически значимого интервала рН плазмы ($6,8 \leq \text{pH} \leq 7,4$).

Исследования в условиях *in vivo* проведены на базе биологического факультета Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского при содействии к.б.н. А.В. Дерюгиной.

Анализ экспериментальных данных позволяет сделать следующие выводы: ион тербия эффективно взаимодействует с гепарином, угнетая его АКА; введение комплекса тербий-гепарин в кровотоки в дозировках, согласующихся с ПДК для растворимых солей РЗЭ ($\approx 10^{-4}$ – 10^{-5} моль/л), не сопровождается заметным увеличением времени свёртывания, АКА комплекса достигается при существенном увеличении дозировки и, очевидно, связана с угнетением активности свёртывающих факторов, а не со снижением равновесной концентрации ионов кальция в плазме. По всем остальным параметрам преимуществами обладают молекулярные комплексы гепарина с низкомолекулярными эндогенными лигандами плазмы – аминокислотами и аденозинтрифосфорной кислотой [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Семёнов А.Н., Феофанова М.А. // Вестник Твер. гос. ун-та. Сер. «Химия». Тверь, 2005. № 8. С. 174–176.
2. Николаева Л.С., Семёнов А.Н. и др. // Химический факультет МГУ. Выставка инновационных проектов: Сб. тез. М., 2009. С. 41–42.

Ю.О. Семёнова

АНАЛИЗ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Проблема фальсифицированных лекарственных средств в нашей стране представляет большую угрозу здоровью граждан. Часто подлинность того или иного препарата можно установить без применения сложной аппаратуры, особенно если это индивидуальное вещество, по такому строго индивидуальному физическому параметру, как температура плавления. Всемирная организация здравоохранения (ВОЗ) рекомендует в качестве основных методов экспресс-анализа твёрдых форм фармацевтических препаратов наравне с исследованием внешнего вида осуществлять определение температуры плавления [1].

В своей работе по применению метода определения температуры плавления для анализа твёрдых форм лекарственных средств мы руководствовались рекомендациями Государственной фармакопеи XI издания (ГФ XI) [2]. Исследованию подвергался лекарственный препарат аспирин (ацетилсалициловая кислота) производства ОАО «Тюменский химико-фармацевтический завод» (Тюмень, ул. Береговая, 24) и ЗАО «Медисорб» (Пермь, ул. Гальперина, 6), приобретённый в разных аптеках г. Твери.

Определение температуры плавления проводили капиллярным методом. Исходная температура прибора устанавливалась за 10 °С от ожидаемого начала плавления. Скорость нагревания 5 °С/мин. Исследуемый образец помещался в капилляр диаметром 1 мм и толщиной стенки 0,15 мм, запаянный с одного конца. Высота слоя в капилляре составляла 3–5 мм. В результате проведённого анализа установлено, что аспирин производства ОАО «Тюменский химико-фармацевтический завод» плавился в интервале 125–127 °С, а аспирин ЗАО «Медисорб» плавился в интервале 130–133 °С. Из сравнения со справочными данными (133–135 °С) следует, что препарат ЗАО «Медисорб» более качественный, чем препарат ОАО «Тюменского химико-фармацевтического завода».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Basic Tests for Drugs. WHO. Geneva, 1998.
2. Государственная фармакопея СССР XI. М., 1998. Вып. 1–2.

В.И. Синекон, Н.И. Куртанов

НАБЛЮДЕНИЕ МАГНИТНОЙ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ
В НАНОСТРУКТУРИРОВАННОМ ГЕТЕРОГЕННОМ СПЛАВЕ

Руководитель Е.М. Семёнова

Тверской государственный университет
Кафедра магнетизма

Многокомпонентные сплавы системы R–Zr–Co–Cu–Fe относятся к классу магнитотвёрдых магнитных материалов, которые характеризуются не только экстремально высокими магнитными свойствами (в частности, коэрцитивной силой ($H_C > 40$ кЭ)), но и высокой температурной стабильностью [1]. Коэрцитивная сила является структурно-чувствительной величиной и реализуется в материалах с оптимальной микроструктурой. Рассматриваемые сплавы являются гетерогенными и включают три основных структурных составляющих, условно обозначенных как *A*, *B* и *C*: *A* – имеет состав по стехиометрии близкий к 1 : 5 (R(Co,Cu)₅); *B* – 2 : 17 (R₂(Co,Fe)₁₇); *C* – обогащена цирконием. Если подвергнуть сплав серии изотермических отжигов, то в составляющих *A* и *B* формируется упорядоченная наноструктура, следствием которой и являются высокая H_C и температурная стабильность данных материалов. То есть для реализации в материале высококоэрцитивного состояния не нужно дробить сплав на микрочастицы и затем спекать, как это делается при создании постоянных магнитов. Высокую H_C можно получить на литом образце путём изотермических отжигов.

Однако, многие вопросы о роли микро- и наноструктуры сплава в формировании его магнитных свойств остаются открытыми и широко обсуждаются в научной печати [2].

Наша работа посвящена изучению магнитной доменной структуры (ДС) составляющих *A* и *B* сплавов R–Zr–Co–Cu–Fe с учётом их наноструктуры. Наблюдения выполнены на оптическом металлографическом микроскопе «Neophot 30» (Carl Zeiss) и сканирующем зондовом микроскопе «Solver P47».

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 09-02-01274.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Liu J.F., Zhang Y., Ding Y., Dimitrov D., Hadjipanayis G.C. // Proc. fifteenth Intern. Workshop on Rare-Earth Magnets and Their Applications. Dresden, 1998. P. 607–622.
2. Gutfleisch O., Müller K.-H., Khlopkov K., Wolf M., Yan A., Schäfer R., Gemming T., Schultz L. // Acta Materialia. 2006. V. 54. P. 997–1008.

В.Е. Ситникова, Е. Рогова

ПОЛИМОРФНЫЕ И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СВЕРХВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОМ ПОЛИЭТИЛЕНЕ

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

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

В настоящее время прочностные показатели полимерных материалов (волокон и плёнок), получаемых из сверхвысокомолекулярного полиэтилена методом гель-технологии, не превышают 10 % от теоретического предела, а значит, проблема дальнейшего упрочнения всё ещё актуальна.

Цель настоящей работы – изучение с помощью методов рентгеноструктурного анализа и ИК спектроскопии фазового состояния СВМПЭ на различных этапах гель-формования – от исходного реакторного порошка до конечного высокопрочного волокна.

Объектами исследования являлись реакторные порошки СВМПЭ $M_w = 1,7 \cdot 10^6$ производства ОАО «Томскнефтехим», ксерогели и волокна СВМПЭ с различной кратностью вытягивания, получаемые методом гель-формования из 3 % прядильного раствора полимера в вазелиновом масле на опытной установке ВНИИСВ г. Твери. При ИК спектроскопических исследованиях для сравнения также использовали неориентированные плёнки полиэтилена высокого давления (ПЭВД) с $M_w = 50 \cdot 10^3$.

Эксперименты по большеугловой рентгеновской дифракции осуществляли на дифрактометре «Р4» фирмы «Simens AG», а по малоугловой рентгеновской дифракции – на дифрактометре собственной конструкции Института полимерных исследований г. Дрездена с диаметром главной щели 100 мкм и вращающимся анодом фирмы «Rigaku». ИК спектры реакторных порошков, гелей и волокон СВМПЭ записывали на Фурье–ИК спектрометре «Equinox 55» фирмы «Bruker».

Методами рентгеноструктурного анализа в больших углах и ИК спектроскопии установлено, что в ходе гель-формования и ориентационного вытягивания волокон СВМПЭ наблюдаются значительные полиморфные и фазовые перестройки в полимере. На поверхности СВМПЭ (реакторный порошок, гель, волокно) всегда присутствует повышенное содержание моноклинной фазы и коротких транс-сегментов в аморфной фазе по сравнению с объёмом. Подтверждён переход моноклинной фазы в орторомбическую при высокотемпературной ($T \geq 125$ °С) ориентационной вытяжке. Отмечено, что сами полиморфные перестройки не оказывают заметного влияния на прочностные показатели волокна.

Работа выполнена при поддержке гранта Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере (контракт № 6972p/9585) (УМНИК).

Е.С. Смолина

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ КАЧЕСТВО КОНФЕТ

Руководитель Ю.В. Козловская

Тверской государственный университет

Кафедра физико-химической экспертизы биоорганических соединений

Конфеты для многих людей являются неотъемлемой частью питания.

Целью работы является освоение комплекса физико-химических методов, определяющих качество конфет. Объектами исследования были выбраны конфеты «Театральная помадка» производителей: ОАО «Волжский пекарь», ООО «Тверской кондитер», ООО «Орехово-Зуевская» производственная фирма «Весна», ЗАО «Коломчаночка».

Массовая доля влаги определялась высушиванием по ГОСТ 5900-73. Массовая доля редуцирующих веществ определялась по ГОСТ 5903-89 феррицианидным методом. Зола, нерастворимая в растворе соляной кислоты с массовой долей 10 %, определялась по ГОСТ 5901-87.

Количество штук изделий в 1 кг продукции определяют по ГОСТ 5897-90 подсчётом изделий во взвешенной объединённой пробе с последующим пересчётом на 1 кг. Результаты представлены в таблице. Все образцы соответствуют требованиям ГОСТа.

<i>Производитель</i>	<i>Массовая доля влаги, %</i>	<i>Массовая доля редуцирующих веществ, %</i>	<i>Массовая доля золы, не растворимой в растворе 10 % соляной кислоты, не более, %</i>	<i>Количество штук изделий в 1 кг</i>
ООО «Тверской кондитер»	8,4	9,9	0,1	71
ОАО «Волжский пекарь»	8,2	9,9	0,1	67
ООО «Весна»	11	9,9	0,1	36
ЗАО «Коломчаночка»	8,6	10,0	0,1	56

Большой спрос на конфеты способствует появлению различных фальсификаций. В связи с этим возникает вопрос о проверке качества конфет. Комплекс предлагаемых в работе физико-химических методов и подходов позволяет грамотно оценить качество изучаемых продуктов питания.

Д.Н. Соколов, С.В. Репчак

ИЗУЧЕНИЕ ГИСТЕРЕЗИСА ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НАНОЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ

Руководители: Н.Ю. Сдобняков, П.В. Комаров

Тверской государственный университет

Кафедра теоретической физики

Исследование гистерезиса плавления и кристаллизации металлических наночастиц актуально как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. В работе [1] на основе термодинамического подхода исследуется связь между температурами плавления и кристаллизации наночастиц металлов. На примере наночастиц алюминия, олова и меди произведены расчёты размерной зависимости температуры плавления с учётом соответствующих размерных зависимостей поверхностного натяжения твёрдой и жидкой фаз, а также межфазного натяжения. Анализ полученных размерных зависимостей для температуры кристаллизации наночастиц металлов на примере алюминия, меди и олова показывает: если придерживаться мнения В.П. Скрипова и В.П. Коверды [2] о том, что размерные зависимости температуры кристаллизации наночастиц в основном обусловлены кинетическими эффектами, то можно сделать вывод о наличии скин-слоя («шубы») толщиной в пределах 1–2 нм. Теоретические результаты для размерных зависимостей температуры плавления и температуры кристаллизации имеют тенденции к слиянию как при малых размерах наночастиц, так и при переходе к макроскопическим размерам.

Кроме того, в целях уточнения теоретического подхода, нами был применён метод Монте–Карло для исследования гистерезиса процесса плавления и кристаллизации нанокластеров золота с использованием многочастичного потенциала Гупта [3]. На основе метода поверхностных фаз Гиббса получена размерная зависимость эффективной удельной полной поверхностной энергии нанокластеров золота.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 10-03-00129-а, 10-03-97502-р_центр_а и гранты Президента РФ № МК-649.2010.3).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Валов П.М. и др. // Физ. и хим. стекла. 1997. Т. 23, вып. 2. С. 187.
2. Скрипов В.П., Коверда В.П. Спонтанная кристаллизация переохлаждённых жидкостей. М., 1984. С. 98.
3. Gupta R.P. // Phys. Rev. B. 1981. V. 23, №. 12. P. 6265.

М.Н. Соловьёва

ПРИМЕНЕНИЕ КОМПЛЕКСА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ДЛЯ УСТАНОВЛЕНИЯ КАЧЕСТВА НАТУРАЛЬНОГО РАСТВОРИМОГО КОФЕ

Руководитель Г.П. Лапина

Тверской государственной университет

Кафедра физико-химической экспертизы биорганических соединений

Цель работы – исследование комплекса физико-химических показателей для установления качества натурального растворимого кофе.

Объектом исследования были выбраны пять образцов натурального растворимого порошкообразного кофе, расфасованного в жестяные банки: «Grand» (1), «Jockey» (2), «MacCoffee» (3), «Maxwell House» (4), «Кофе Московский» (5).

Определена и рассчитана массовая доля влаги с использованием метода высушивания до постоянной массы по ГОСТ Р 15113.4-77. Метод основан на способности исследуемого продукта отдавать гигроскопическую влагу при температуре 100–105 °С.

Значение рН определяли по ГОСТ Р 51881-2002. Метод основан на измерении разности потенциалов между двумя электродами, погруженными в исследуемую среду. Наряду с этими показателями была определена полная растворимость натурального растворимого кофе в соответствии с ГОСТ Р 51881-2002. Метод состоит в определении продолжительности растворения навески кофе в горячей и холодной воде.

Результаты физико-химической экспертизы пяти образцов порошкообразного растворимого кофе разных торговых марок соответствуют требованиям Государственного стандарта. Даны рекомендации по использованию физико-химических показателей для установления качества натурального растворимого кофе.

В.М. Спиридонова, В.С. Савельева

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ
НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ
L-ЦИСТЕИНА И НИТРАТА СЕРЕБРА

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

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Методом ИК спектроскопии исследованы низкоконцентрированные гидрогели на основе цистеина и нитрата серебра. При этом особое внимание уделяли вопросам совместимости данной системы с различными веществами, такими, как некоторые антибиотики, водорастворимые полимеры и нитроксимексидол, с целью повышения их лечебных свойств и создания новых лекарственных препаратов.

Эксперимент осуществляли следующим образом. В созревший цистеин-серебряный раствор ($C(\text{Cys}) = 3 \text{ mM}$, $C(\text{AgNO}_3) = 3,75 \text{ mM}$) добавляли биологически активное вещество в концентрации $C = 0,2 \text{ mM}$. Если разрушение раствора не происходило (не выпадает осадок, раствор не изменяет цвет), то в систему вводили раствор электролита ($C(\text{электрол.}) = 0,2 \text{ mM}$) и наблюдали образование гидрогеля. Затем гидрогель замораживали при -18°C . При дальнейшем размораживании в темноте выпадал осадок, который центрифугировали, высушивали и готовили из него таблетку с КВг. Регистрацию ИК спектров осуществляли с помощью Фурье-ИК спектрометра «Equinox 55» фирмы «Bruker».

В результате проведённых исследований были записаны ИК спектры гидрогелей, совместимых с цефотаксимом, поливиниловым спиртом, поливинилпирролидоном, нитроксимексидолом. Все перечисленные БАВ благотворно влияют на обменные процессы, происходящие в сердечной мышце, суставах, головном мозге. Установлено, что в ИК спектрах высушенных гидрогелей наблюдаются полосы поглощения, характеризующие то или иное вводимое вещество. Так, например, в ИК спектре геля, полученного добавлением цефотаксима, отчётливо проявляются изменения в области $1133\text{--}1037 \text{ см}^{-1}$, вызванные наличием в составе антибиотика кето-группировок, а также на частоте 1766 см^{-1} появляются характерные изменения, соответствующие валентным колебаниям --C=O группировок. Становится очевидным, что данные вещества либо непосредственно включаются в структуру гидрогеля (происходит структурное изменение геля-сетки), либо прочно удерживаются в его ячеистой гелевой сетке за счёт физического взаимодействия, например электромагнитного притяжения.

Работа выполнена при финансовой поддержке АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы» (2009–2010 гг.), проект № 2.1.1/6867.

УДК 662.756.3 + 544.478

А.А. Степачева, М.Б. Коняева, Л.Ж. Никошвили

ПОВЫШЕНИЕ КАЧЕСТВА БИОДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КАТАЛИТИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

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

Тверской государственный технический университет

Кафедра биотехнологии и химии

В настоящее время наблюдается всплеск интереса к альтернативным источникам энергии, в первую очередь получаемым из возобновляемого природного сырья. Биодизель – альтернативное дизельное топливо, получаемое путём переэтерификации масла или жира с моноосновным спиртом, в большинстве случаев метанолом. Переэтерификацию масел и жиров проводят в присутствии щелочей, кислот, ферментов и др. Однако такие продукты, как соевое, таловое, льняное масло, рыбий жир, не смогут служить потенциальными источниками биодизеля, так как имеют высокое йодное число (выше 140 г I₂/100 г), вследствие чего неустойчивы при хранении и легко окисляются. Каталитическое гидрирование позволяет довести характеристики такого биодизеля до указанных в нормативных документах показателей (йодное число ≈ 120 г I₂/100 г).

В данной работе в качестве модельного субстрата для синтеза биодизеля было выбрано подсолнечное масло, так как в его состав входят триглицериды, включающие остатки преимущественно четырёх жирных кислот (пальмитиновой, стеариновой, олеиновой и линолевой) в известном соотношении. Синтез метиловых эфиров жирных кислот (МЭЖК) проводился путём кислотной переэтерификации с метанолом, так как использование кислоты позволяет избежать нежелательной реакции омыления.

Полученные МЭЖК модифицировали путём селективного каталитического гидрирования (селективное гидрирование снижает содержание линолевой кислоты и улучшает стабильность, не приводя к образованию стеариновой кислоты) с использованием гетерогенных Pd-содержащих катализаторов на основе как неорганических, так и полимерных носителей. Использованные катализаторы проявили высокую селективность в процессе гидрирования синтезированного биодизеля (порядка 95 %). Кроме того, были проведены исследования основных показателей качества модифицированного биодизеля, таких, как йодное число, кислотное число, кинематическая вязкость, температура помутнения и температура застывания.

А.Ю. Субекин

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРИРОДЫ НОСИТЕЛЯ
НА АКТИВНОСТЬ ГЕТЕРОГЕННОЙ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ
НА ОСНОВЕ ПЕРОКСИДАЗЫ КОРНЯ ХРЕНА (КФ 1.11.1.7)

Руководитель Н.В. Лакина

Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии и химии

В связи с актуальностью проблемы утилизации фенольных соединений разрабатываются каталитические системы, предлагающие различные варианты деструктивного разложения производных оксибензола. В настоящее время наиболее пристальное внимание уделяется изучению процессов деструкции оксибензола в присутствии гетерогенных катализаторов, активной частью которых являются ферменты, выделенные из растений. Создание и способы применения таких катализаторов основаны на моделировании биохимических процессов, происходящих в растительных клетках.

Существует понятие активного кислорода, образование которого у растений обусловлено различного рода факторами. Одной из форм активного кислорода является пероксид водорода. Он является токсичным для клеток растений, потому они стремятся от него «избавиться». Этому способствует сложная ферментативная система, которая включает в себя ряд ферментов: ксантиноксидаза, пероксидаза, супероксиддисмутаза, глутатионредуктаза и др. В результате действия этой системы ферментов избыток электронов в ряде случаев переносится на «балластное» соединение (в частности, гидрохинон), тем самым происходят разложение пероксида водорода и полимеризация фенольных соединений в растительной клетке.

Данная работа посвящена изучению влияния различного рода неорганических носителей на активность иммобилизованных ферментных систем, выделенных из корня хрена. Катализаторы получались посредством ковалентной пришивки ферментов на модифицированную поверхность носителя. Для изучения активности полученных гетерогенных катализаторов проводилась реакция каталитического окисления пирокатехина пероксидом водорода, смешанных в эквимольных количествах.

Эффективность применения таких катализаторов составила 92–99 % деструкции субстрата.

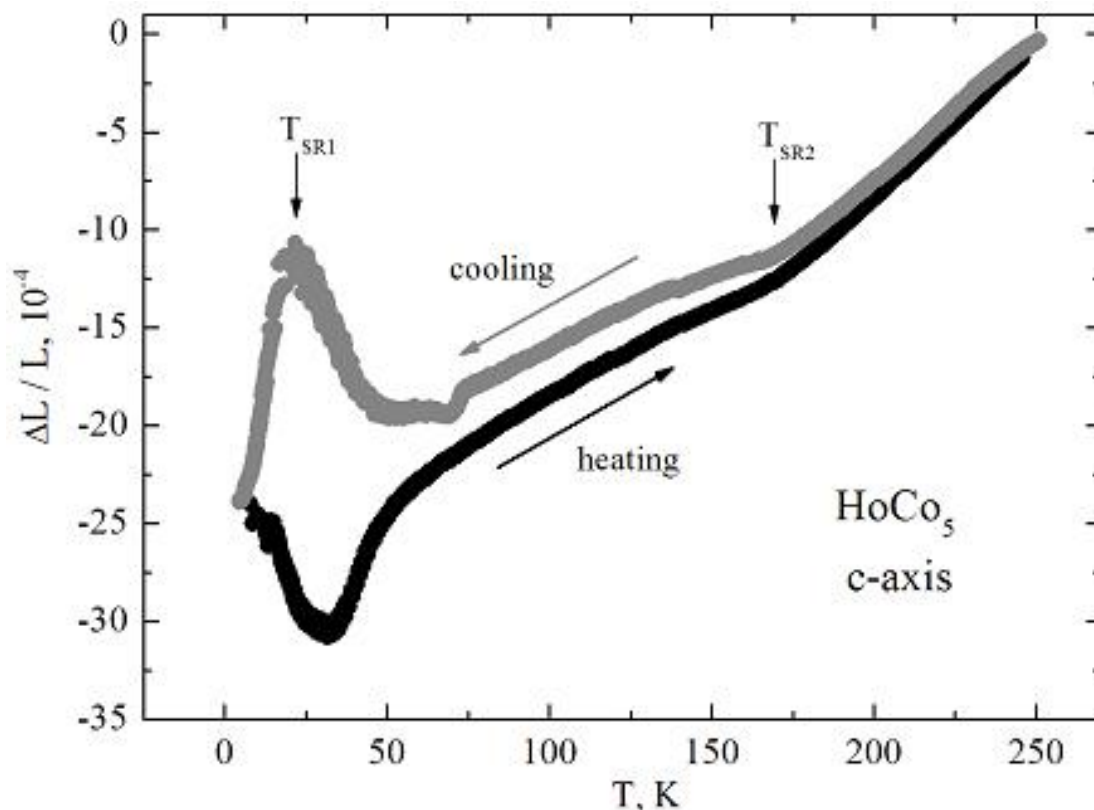
А.С. Сухарев

МАГНИТОСТРИКЦИЯ И ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ
МОКОКРИСТАЛЛОВ RCO_5

Руководитель Ю.С. Кошкидько

Тверской государственный университет
Кафедра магнетизма

Соединения RCO_5 представляют большой интерес, так как в них наблюдаются большое разнообразие магнитных фазовых переходов. Так, в соединении имеются два спин-переориентационных перехода (СПП) при температурах $T_{SR1} = 45 \text{ K}$ и $T_{SR2} = 170 \text{ K}$, точка компенсации $T_K = 71 \text{ K}$ и температура Кюри при $T_C = 1036 \text{ K}$. Данное соединение довольно подробно изучено и имеется множество публикаций. Однако остаётся открытым вопрос о существовании в нем типа анизотропии «лёгкая плоскость» при температурах ниже $T_{SR1} = 45 \text{ K}$, т.е. существования спин-переориентационного (СПП) фазового перехода от типа анизотропии «лёгкая плоскость» к анизотропии «лёгкий конус».



Тепловое расширение при нагревании и охлаждении монокристалла HoCo_5

Проведённые в данной работе измерения на монокристаллических образцах HoCo_5 показали наличие в области T_{SR1} аномалии теплового расширения (рисунок), связанной с изменением магнитной части энтропии редкоземельной подрешётки.

Р.Д. Тимурзиева

ПОКАЗАТЕЛЬ ПРЕЛОМЛЕНИЯ ЖИДКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ
КАК МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИХ ПОДЛИННОСТИ

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

В настоящее время большая часть оборота фармацевтических рынков многих стран приходится на воспроизведённые препараты (дженерики), доля которых в России по объёму продаж составляет около 80 % [1]. Для обеспечения взаимозаменяемости при фармакотерапии дженерики должны быть фармацевтически, биологически и терапевтически эквивалентны оригинальному препарату или препарату сравнения [2]. Фармацевтически эквивалентными считаются лекарственные препараты, содержащие одинаковое количество одной и той же субстанции в одной и той же лекарственной форме, отвечающей одинаковым или сопоставимым стандартам качества, и предназначенные для одного пути введения. Одним из основных тестов, подтверждающих подлинность или фармацевтическую эквивалентность дженериков, может служить показатель преломления жидких лекарственных средств. Подтверждение подлинности или эквивалентности (для дженериков) лекарственных форм (ЛФ) различных производителей основано на сравнительном изучении ЛФ и соотношении полученных результатов со справочными данными по показателю преломления как по физической характеристике индивидуальности жидкого препарата.

В основу рефрактометрических определений положена зависимость между концентрацией раствора какого-нибудь вещества и его показателем преломления.

Этот физический метод определения подлинности или эквивалентности ЛФ нами был использован для исследования сульфацила натрия, выпущенного РУП «Белмедпрепараты» (г. Минск), ОАО «Синтез» (г. Курган), ЗАО «Диафарм» (г. Люберцы) и приобретённого в разных аптеках г. Твери.

Определение показателя преломления осуществляли на рефрактометре марки ИРФ-22. В результате проведённого анализа установлено, что сульфацил натрия белорусского производства соответствует требованиям стандарта, тогда как российские препараты по показателю преломления не выдерживают требований нормативной документации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Герасимов В.Б., Журавлёва М.В., Румянцев // Ведомости НЦЭСМП. 2007. № 1. С. 37–40.
2. Annex 7 Multisource (Generic) Pharmaceutical Products: Guidelines on Registration Requirements to Establish Interchangeability. Who Technical Report Series. 2006. № 937.

Р.В. Туровцев

РАСЧЁТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ
n-АЛКАНОВ И *n*-АЛКИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ

Руководитель Ю.Д. Орлов

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

Оптимизация технологических процессов, создание материалов с заданными свойствами, лекарственных препаратов и биологически активных веществ требуют знания термодинамических свойств используемых соединений. Теоретическое определение таких свойств в рамках статистической физики в большинстве случаев можно свести к суммированию вкладов различных степеней свободы: поступательных, вращательных, колебательных и внутреннего вращения. Наиболее трудоёмкой процедурой является расчёт вклада внутреннего вращения, поэтому зачастую его включают в колебательный вклад, тем самым существенно увеличивая погрешность конечной величины.

Соотношения статистической физики позволяют найти термодинамические свойства веществ посредством расчёта статистической суммы. В силу сложности задача обычно определяется в рамках классического представления. Однако получение значений с «химической точностью» соответствует нахождению статистической суммы внутреннего вращения прямым суммированием энергий термов. Такие исследования крайне редки, потому что в рамках квантовой механики энергии уровней находят при решении уравнения Шрёдингера.

Нами с использованием оригинальной программы был проведён расчёт энергий термов внутреннего вращения *n*-алкильных радикалов от C_2H_5 до C_8H_{17} и *n*-алканов от C_2H_6 до C_8H_{18} в базисе плоских волн. Входными данными являлись зависимости вращательной постоянной F от угла внутреннего вращения $F = f(\varphi)$ и потенциальные функции внутреннего заторможенного вращения $V(\varphi)$. Одновременно были найдены частоты фундаментальных переходов, число энергетических уровней, соответствующих связанному состоянию, и вклады внутреннего вращения в энтальпию, энтропию, свободную энергию Гиббса и теплоёмкость изучаемых молекул и радикалов.

Значения энергий уровней найдены с учётом расщепления и вырождения уровней, что позволяет получить частоты микроволнового спектра молекул, соответствующего основному электронному и колебательному терму, и обертоны в инфракрасной области, относящиеся к колебаниям ядер.

В.С. Федеряева

ОКСИДНЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ СТЕКЛОВОЛОКНИСТЫХ
МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ОЧИСТКИ ГАЗОВЫХ ВЫБРОСОВ
ОТ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Руководитель Р.Ф. Витковская

Санкт-Петербургский государственный университет технологии и дизайна
Кафедра инженерной химии и промышленной экологии

Металлы платиновой группы проявляют высокую каталитическую активность в реакциях глубокого окисления органических веществ, но их широкому применению препятствует высокая стоимость. В связи с этим представляется перспективным использование катализаторов на стекловолокнистой основе, характеризующихся наличием высокоразвитой пространственной структуры, позволяющей работать во внешнедиффузионной области, где скорость реакции не зависит от природы катализатора, малым гидравлическим сопротивлением, высокой температуро- и кислотоустойчивостью.

Цель данной работы – определение оптимальных режимов обработки стеклоткани для получения материала с заданными каталитическими свойствами. Объектами исследования служили нити и стеклоткань из бесщелочного алюмосиликатного стекла (марки КТ-11). Метод нанесения каталитического слоя включал такую последовательность действий: предварительная термообработка; пропитка ткани растворами солей нитратов ($\text{Co}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ и смесью нитратов Co , Ni , Cu , Fe) с концентрацией в диапазоне 2,5–10 % (в пересчёте на металл); сушка и термообработка ($t = 100\text{--}700\text{ }^\circ\text{C}$, $\tau = 30$ мин). Определяющим критерием активности катализаторов являлась степень превращения оксида углерода или метана в газо-воздушных смесях с расходом $800\text{--}80000\text{ ч}^{-1}$, содержащих 1 % оксида углерода или метана в зависимости от выбранной системы и модуля загрузки катализатора в реактор $73\text{--}1093\text{ кг/м}^3$.

В результате экспериментов по изучению влияния температуры предварительной термообработки выявлено: для полного удаления замасливателя, очистки поверхности и связанной с этим каталитической активности образцов необходима предварительная термообработка при температуре $400\text{--}700\text{ }^\circ\text{C}$. Показано влияние температуры предварительной термообработки на прочность нитей, а следовательно, и всего изделия. При изучении влияния концентрации пропиточных растворов выявлено: оптимальной является концентрация пропиточного раствора 5 % (в пересчёте на металл). В ходе экспериментов по изучению влияния вида оксида металла катализатора в процессах окисления выявлена их селективность по отношению к окисляемому компоненту.

Ю.В. Францева, А.В. Гуманюк, Т.В. Трофимова

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ГЕПАРИНА С ИОНАМИ НЕКОТОРЫХ
d-ЭЛЕМЕНТОВ (Ni^{2+} , Co^{2+} , Mn^{2+} , Fe^{3+})

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Плазма крови представляет собой чрезвычайно сложную многокомпонентную систему, в которой протекают сотни реакций с участием компонентов органической (белки, аминокислоты и т.д.) и неорганической природы (прежде всего, неорганические катионы и анионы). Следует отметить, что математическая модель плазмы крови, созданная сотрудниками лаборатории химической термодинамики МГУ им. М.В. Ломоносова насчитывала в своем банке данных более чем 800 металл-ионных равновесий [1]. И это далеко не предел! Таким образом, полученная информация о характеристиках металл-ионных равновесий (стехиометрия комплекса, а также величина логарифма константы устойчивости), протекающих в плазме, необходима для пополнения уже существующего банка равновесий.

Целью настоящей работы явилось исследование взаимодействий ионов Ni^{2+} , Co^{2+} , Mn^{2+} и Fe^{3+} с высокомолекулярным гепарином – гликозамингликаном, мономерное звено которого образовано связанными в α -(1→4) положении остатками L-идуроновой кислоты (IdoA) и D-гликозамина (D-GlcN) – 4-L-IdoA2S- α -4-D-GlcNS,6S- α -1 [2].

Установлено, что указанные ионы образуют с гепарином ряд комплексных форм различного состава и устойчивости: в слабокислой, нейтральной и слабощелочной областях доминируют средние монолигандные комплексы состава Mhep^{2-} , по мере защелачивания процессы гидролиза усиливаются, происходит постепенное замещение координированных молекул воды во внутренних координационных сферах ионов с образованием смешаннолигандных гидроксокомплексов: MOHhep^{3-} и $\text{M(OH)}_2\text{hep}^{4-}$. Следует отметить, что комплексы ионов Co^{2+} с гепарином характеризуются большей устойчивостью, чем комплексы ионов Ni^{2+} , уступая, однако, по устойчивости аналогичным комплексным формам, образованных ионами меди (II) [3]. Наибольшей устойчивостью характеризуются комплексы гепарина с ионами трёхвалентного железа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Николаева Л.С., Чирков В.В. и др. // Химико-фармацевтический журнал. 2005. Т. 39, № 2. С. 3–9.
2. Rabenstein D.L. // Nat. Prod. Rep. 2002. V. 19. P. 312–331.
3. Семёнов А.Н., Францева Ю.В., Феофанова М.А. // Физико-химия полимеров. Тверь, 2009. Вып. 15. С. 116–122.

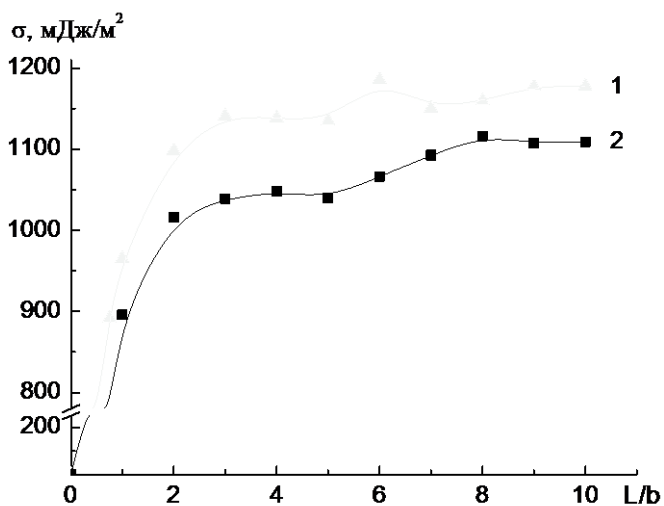
Ю.В. Хохлова, Т.А. Ванюшева

ПОВЕДЕНИЕ РАЗМЕРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ НАНОКРИСТАЛЛОВ ПРИ НАЛИЧИИ ДЕФЕКТОВ

Руководитель Н.Ю. Сдобняков

Тверской государственный университет
Кафедра теоретической физики

Проблема нахождения размерной зависимости поверхностного натяжения твёрдых наночастиц тесно связана с проблемой их термодинамической стабильности, в том числе механической стабильности наночастиц [1]. В наших предыдущих расчётах мы пренебрегали наличием объёмных дефектов. Однако, как отмечается в монографии [2], в компактированных нанокристаллических материалах могут содержаться три типа дефектов: отдельные вакансии, вакансионные агломераты, нанопоры. Для нанокристаллов алюминия произведены расчёты размерной



зависимости поверхностного натяжения при наличии объёмных дефектов. Установлено, что даже при малой доле объёмных вакансий (менее 10 %) наблюдается существенное уменьшение макроскопического значения σ_{∞} (рисунок), при этом с увеличением доли дефектов размерная зависимость нарушается.

Размерная зависимость поверхностного натяжения для нанокристаллов алюминия при наличии объёмных дефектов с различной долей атомов в кристаллической решётке (кривая 1 – 94 %, кривая 2 – 88 %), b – период решётки

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 10-03-00129-а, 10-03-97502-р_центр_а и гранты Президента РФ № МК-649.2010.3).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Samsonov V.M., Sdobnyakov N. Yu. // Central European Journal of Physics. 2003. V. 1. P. 344.
2. Гусев А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. М., 2005.

И.С. Цветкова

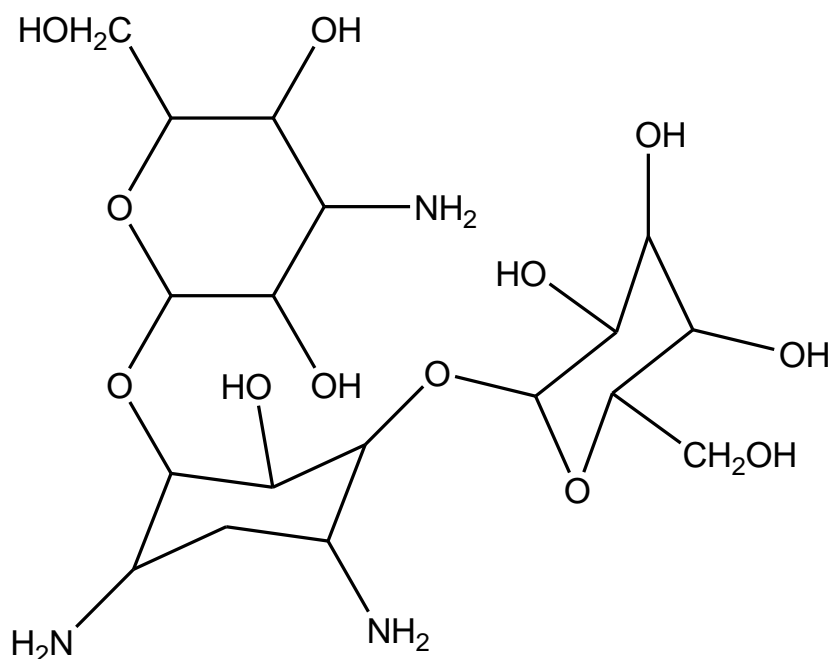
ИССЛЕДОВАНИЕ КИСЛОТНО-ОСНОВНЫХ СВОЙСТВ
КАНАМИЦИНА

Руководитель С.В. Лапшин

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Антибиотики группы аминогликозидов широко применяются в медицинской практике для лечения различных инфекционных заболеваний. Исследованию химии этих веществ посвящены многочисленные работы. Как показал анализ литературы, кислотно-основные равновесия такого антибиотика, как канамицин, который относится к аминогликозидам первого поколения, не изучены. В то же время есть основания предполагать, что детальное исследование ионных равновесий канамицина может представлять как научный, так и практический интерес.

В данной работе методом рН-метрического титрования исследованы кислотно-основные свойства канамицина:



Для выполнения работы использовали лекарственный препарат сульфата канамицина (порошок во флаконах). Проводили рН-метрическое титрование раствора сульфата канамицина растворами HCl концентрации 0,487 М и HNO₃ 0,005 М на фоне 0,1 М, 0,4 М, 0,6 М и 0,8 М растворов KCl и KNO₃ соответственно. Математическая обработка рН-метрических данных была проведена с использованием специализированной программы расчёта химических равновесий «New DALSFЕК» (KCM Soft, 2000 г.). Рассчитаны константы диссоциации в каждом случае.

Д.Н. Чернов

РАЗМЕРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ КРАЕВОГО УГЛА
МИКРОПУЗЫРЬКОВ НА ТВЁРДОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Руководитель А.Р. Новосёлов

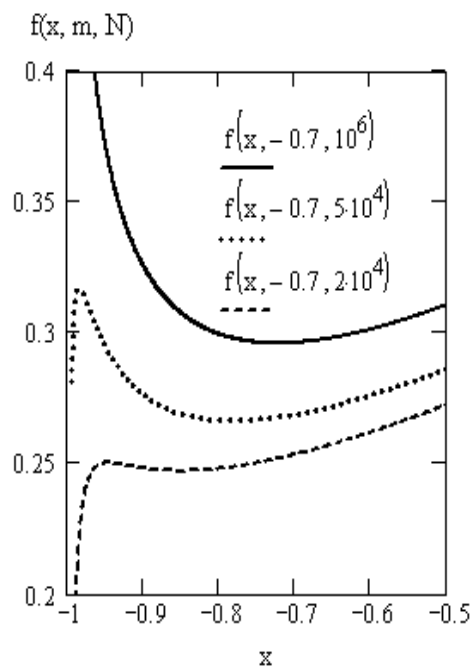
Тверской государственной университет

Целью данной работы является теоретическое исследование влияния линейного натяжения на краевой угол микропузырьков в жидкости у твёрдой поверхности*.

Представим избыточную свободную энергию рассматриваемой системы в безразмерном виде:

$$f(x, m, N) = [(1+x)^2 (2-x)]^{\frac{2}{3}} (1+x) \left[1 + \frac{1-x}{2} m \right] + (9\pi)^{\frac{1}{3}} \alpha(N) [(1+x)^2 (2-x)]^{\frac{1}{3}} \left[(1+m)x - (1+x) \sqrt{\frac{1+x}{2}} \right],$$

где $x = \cos \theta$, $m = \cos \theta_{\infty}$, N – число «вытесненных» пузырьком молекул жидкости.



Зависимость свободной энергии пузырька от краевого угла ($x = \cos \theta$)

Исследование функции $f(x, m, N)$ на минимум по x позволяет определить равновесный краевой угол и исследовать его размерную зависимость.

На рисунке приведён график зависимости $f(x)$ при $m = -0,7$, что соответствует $\theta_{\infty} \approx 135^{\circ}$, для нескольких значений числа «вытесненных» пузырьком молекул жидкости N . Аналогичный вид указанная зависимость имеет и при других значениях m .

Из графика видно, что при уменьшении размера пузырька минимум на кривой $f(x)$ смещается влево от $x = m = \cos \theta_{\infty}$, что соответствует увеличению краевого угла. Максимум при этом смещается в сторону меньших углов, становясь менее выраженным. Критические размеры N пузырьков в зависимости от $\cos \theta_{\infty}$: при $\cos \theta_{\infty} = -0,9$ $N = 57000$, $\cos \theta_{\infty} = -0,7$ $N = 16700$, $\cos \theta_{\infty} = 0,0$ $N = 3350$.

Проведённые в настоящей работе теоретические исследования показывают, что линейное натяжение может существенно влиять на величину равновесного краевого угла микропузырьков, от которого, в свою очередь, зависит площадь и прочность контакта пузырька с твёрдой поверхностью.

* Новиков И.Е., Новосёлов А.Р. // Механика и физика фрикционного контакта: Сб. научн. тр. Тверь, 2003. С. 55–61.

Е.М. Чернова

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АТОМА КИСЛОРОДА НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ ПРОСТЫХ СПИРТОВ

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

Тверской государственный университет

Кафедра общей физики

Квантово-механическая «теория атомов в молекулах (QTAIM)» Р. Бейдера [1] является одним из наиболее точных и удобных способов количественного описания взаимовлияния функциональных групп в химических соединениях. В рамках этой теории даётся теоретическое обоснование аддитивно-группового подхода и устанавливаются границы его применения. QTAIM позволяет найти распределение электронной плотности в молекуле, отнести долю электронной плотности к отдельному атому и функциональной группе, а также определить изменение электронных характеристик группы под действием окружения.

Нами с использованием пакета программ «Gaussian 98» [2] были произведены квантово-механические расчёты равновесного геометрического строения соединений вида $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{OH}$, $n = 0 \div 6$, методом B3LYP в базисе 311++G (3df, 3pd). Характеристики электронной плотности атомов и групп (заряд, энергия и объём) получены с помощью программы AIMALL. Было изучено влияние атома кислорода и группы OH на CH_2 и CH_3 , и определено затухание индуктивного эффекта вдоль углеводородной цепи. Проведено сравнение результатов, полученных для рассмотренного ряда простых спиртов, с углеводородами нормального строения. Определены стандартные группы. Выявлены переносимые группы (а также парциальные свойства групп) между молекулами гомологических рядов $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{OH}$ и $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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

Н.С. Черных

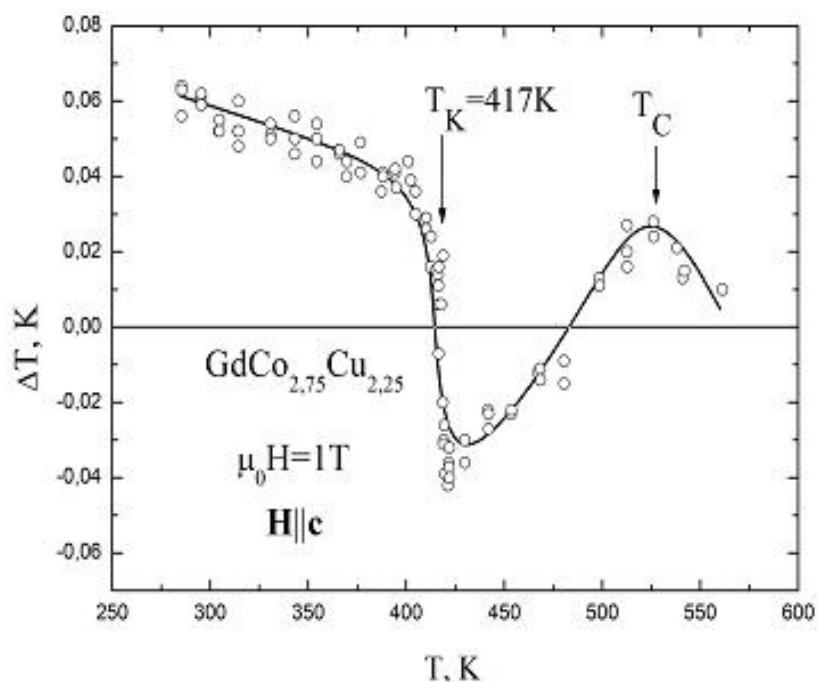
МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ МОНОКРИСТАЛЛОВ
 $\text{Gd}(\text{Co}_{1-x}\text{Cu}_x)_5$ ВБЛИЗИ ТЕМПЕРАТУРЫ КЮРИ И ТОЧКИ
 МАГНИТНОЙ КОМПЕНСАЦИИ

Руководитель Ю.С. Кошкидько

Тверской государственной университет
 Кафедра магнетизма

Одним из актуальных вопросов сегодня является изучение магнитокалорического эффекта (МКЭ) с целью создания магнитных холодильников на основе магнитных материалов с высокими значениями МКЭ. Известно, что МКЭ достигает экстремальных значений вблизи магнитных переходов первого рода.

В работе К. Белова* было показано, что точка компенсации ферромагнетиков во внешнем магнитном поле представляет собой фазовый переход первого рода. Данный переход относится к типу магнитных фазовых переходов «порядок–порядок». По этой причине представляет большой интерес изучение МКЭ вблизи точки магнитной компенсации.



Температурная зависимость МКЭ монокристалла $\text{GdCo}_{2,75}\text{Cu}_{2,25}$

Как видно из графика, МКЭ в точке компенсации имеет невысокие значения, однако его величина сопоставима с величиной МКЭ при температуре Кюри данного соединения, что представляет интерес для исследования других соединений с другим стехиометрическим составом.

* Белов К.П., Никитин С.А. // ЖЭТФ. 1970. Т. 58. С. 937.

М.В. Шилов

ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКИЙ И ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТЫ
В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПЛЁНОЧНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ
ПЛЁНОК PZT

Руководители: А.А. Богомолов, А.В. Солнышкин

Тверской государственной университет
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Тонкие сегнетоэлектрические плёнки являются перспективными материалами в качестве функциональных элементов современной микроэлектроники и сенсорной техники. Практическая потребность их использования в качестве приемников электромагнитного излучения (сенсоров, датчиков излучения и температуры, тепловизоров и т.п.), энергонезависимых элементов памяти и др. требует детального изучения особенностей поведения плёночных полярных структур при различных внешних воздействиях.

В данной работе представлены результаты исследований фото- и пироэлектрических откликов плёнок PZT. В качестве верхних электродов использовались полупрозрачное покрытие NiCr и Pt, что позволяло одновременно исследовать фото- и пироэлектрические свойства плёнок. Изучение фотовольтаического и пироэлектрического эффектов в плёнках PZT проводилось динамическим методом с применением модуляции лазерного излучения ($\lambda = 6328 \text{ \AA}$) импульсами прямоугольной формы. Также были выполнены исследования стационарного фотовольтаического отклика в условиях постоянного воздействия лазерного излучения.

Установлено, что в отсутствие внешних электрических полей при освещении модулированным лазерным излучением плёнок PZT наблюдается отклик, свидетельствующий о наличии как пироэлектрической, так и фотовольтаической составляющих. Анализ наблюдаемого отклика показывает, что направления пироотклика и фотовольтаического тока совпадают.

Изучено влияние внешних электрических полей на поведение пиро-фотоэлектрического и фотовольтаического откликов. Обнаружено, что зависимость фототока от напряжённости внешнего поля напоминает вольтамперную характеристику диода. Это свидетельствует о наличии запирающего слоя в исследуемой тонкоплёночной структуре.

Анализ фото- и пироэлектрических откликов может внести существенный вклад в выяснение причин возникновения самополяризации в тонких сегнетоэлектрических плёнках.

Г.К. Шмелёв

ДИСПЕРСИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ КЕРАМИКИ ЦТС И НИКЕЛЬ (МАГНАНЕЦ)–ЦИНКОВЫХ ФЕРРИТОВ

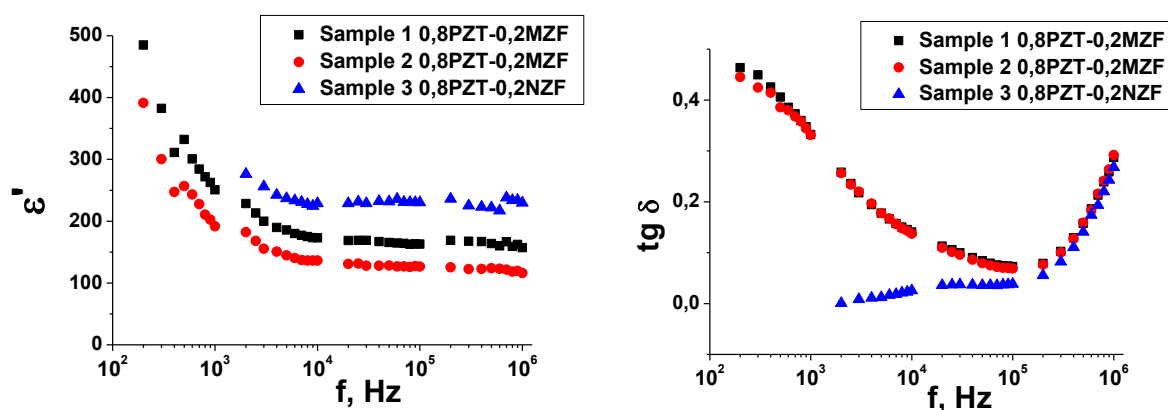
Руководители: А.А. Богомолов, А.В. Солнышкин

Тверской государственной университет
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

В настоящее время актуальным является направление по изучению материалов, обладающих одновременно свойствами сегнетоэлектриков и ферромагнетиков. Примерами таких соединений могут служить композитные материалы, состоящие из сегнетоэлектрика, например титаната-цирконата свинца (ЦТС), с включением марганец-цинкового (МZF) или никель-цинкового ферритов (NZF).

Цель настоящей работы – исследования диэлектрических характеристик композитов, состоящих на 80 % из керамики ЦТС с добавлением 20 % ферритов MZF или NZF в диапазоне частот от 200 Гц до 1 МГц. Исследуемые образцы изготовлены в ГОУВПО «Воронежский государственный технический университет».

Частотные зависимости вещественной и мнимой компонент диэлектрической проницаемости для композитов 0,8 ЦТС – 0,2 MZF и 0,8 ЦТС – 0,2 NZF представлены на графике.



В ходе исследований установлено, что в интервале низких частот присутствует заметная дисперсия вещественной и мнимой компоненты диэлектрической проницаемости и тангенса угла диэлектрических потерь, что, возможно, является следствием Максвелл–Вагнеровской поляризации либо поверхностного слоя с особыми диэлектрическими свойствами*.

* Sayer M., Mansingh A., Arora A.K., Lo A. // Integrated Ferroelectrics. 1992. V. 1. P. 129.

Г.К. Шмелёв

ДИСПЕРСИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТОВ
НА ОСНОВЕ ПЛЁНОК P(VDF–TRFE) С РАЗЛИЧНЫМ ПРОЦЕНТНЫМ
СОДЕРЖАНИЕМ КЕРАМИКИ ЦТБС-3

Руководители: А.А. Богомолов, А.В. Солнышкин

Тверской государственной университет
Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Полярные материалы, обладающие пьезоэлектрическими, пирозлектрическими и сегнетоэлектрическими свойствами, широко используются в качестве функциональных элементов различных электротехнических устройств в современной электронике.

В последнее время наиболее актуально направление по получению материалов, обладающих свойствами полимеров и классических сегнетоэлектриков. Такими объектами являются композиционные плёнки на основе полимерных материалов с добавлением сегнетоэлектриков, например титаната–цирконата бария–стронция (ЦТБС).

Цель настоящей работы – исследования диэлектрических характеристик плёнок сополимера поли(винилиденфторида–трифторэтилена) P(VDF–TrFE) и композитных плёнок на его основе с различным процентным содержанием керамического сегнетоэлектрика ЦТБС-3.

Образцы с микровключениями керамики изготавливались методом кристаллизации из раствора при добавлении в него перемолотой в шаровой мельнице керамики ЦТБС-3. Этим методом были получены образцы, содержащие от 10 до 50 % керамических включений ЦТБС-3, а также образцы без примесей.

Установлено, что наличие керамических включений в полимерной матрице приводит к росту вещественной и мнимой частей диэлектрической проницаемости системы P(VDF–TrFE) + nТБС-3. Экспериментально получена линейная зависимость величины диэлектрической проницаемости от процентного содержания керамики ЦТБС-3 в полимерной матрице P(VDF–TrFE). Показано, что имеет место заметное расхождение теоретически рассчитанной по формуле Пунша–Шина зависимости диэлектрической проницаемости и экспериментально наблюдаемой в интервале концентраций от 30 до 50 % керамики ЦТБС-3*.

* Poon Y.M., Shin F.G. // J. Mat. Sci. 2004. V. 39. P. 1277–1281.

С.В. Щенников

РАЗРАБОТКА ЭФФЕКТИВНОЙ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ
ГЛУБОКОГО ОКИСЛЕНИЯ ТОКСИЧНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ
СОЕДИНЕНИЙ

Руководитель Э.М. Сульман

Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии и химии

Непрерывный рост и развитие химической, нефтехимической, целлюлозно-бумажной, химико-фармацевтической промышленности приводят к постоянному увеличению загрязнения окружающей среды опасными органическими соединениями, причём всё большее количество высокотоксичных соединений попадает в акватории водных бассейнов.

Применение современных каталитических систем позволяет достичь глубокой конверсии токсичных органических соединений вплоть до углекислого газа и воды. В зависимости от условий проведения процесса возможны: 1) полная минерализация фенольных соединений с образованием CO_2 и H_2O ; 2) формирование полимеров, которые могут быть легко отделены от водной среды при помощи фильтрования, коагуляции или флотации и 3) формирование легко биodeградируемых соединений, таких, как карбоновые кислоты.

В качестве субстрата использовался фенол марки чда (Sigma 99,9 %) как один из наиболее часто встречающихся в составе сточных вод и трудно окисляемых соединений. Для изменения рН среды были использованы следующие реактивы: HCl – х.ч., NaOH – х.ч., KHPO_4 – ч.д.а, K_2HPO_4 – ч.д.а, CH_3COOH – х.ч. Для приготовления платиносодержащего катализаторов были использованы: сверхсшитый полистирол (СПС)-MN-270 (Purolite inc.), активированный уголь (АУ), TiO_2 , кислота 98 % х.ч., тетрагидрофуран – 98 % х.ч. Для проведения процесса окисления использован кислород – 99,9 % х.ч. Хроматографический анализ катализата проводился методом высокоэффективной жидкостной хроматографии. Общее содержание органических соединений определялось по значению химического потребления кислорода (ХПК) реакционной смеси.

Наиболее оптимальным из представленной серии катализаторов стала система СПС–Pt (0,1 % Pt) и TiO_2 (0,1 % Pt). Селективность по углекислому газу составила более 99 % при конверсии субстрата 90 %.

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Алексеева Е.П.	4
Алманцева П.А., Кузьмина Е.М., Семендяев В.А., Скульбеда В.А., Судницына Е.А.	5
Андрианова Я.В.	6
Анискина Е.С., Мухина Е.М.	7
Антонова Е.И.	8
Арефьев А.И.	9
Асташкина С.П., Иванова О.В., Коськов О.О., Манукян А.М.	10
Барабанова И.А.	11
Боднарчук Я.В., Боднарчук В.В.	12
Бойкова А.А., Медведева Е.К.	13
Бурцев А.В., Юпатов А.Н.	14
Быховец А.А.	15
Вагунин Д.А.	16
Васильев А.С.	17
Виноградов А.В.	18
Воробьева К.О., Ситникова В.Е.	19
Гребешков В.В.	20
Гринев И.В.	21
Гриц Н.В.	22
Груздев И.А.	23
Гуляев М.В.	24
Гусев П.В., Чалова Д.А., Азатян К.А.	25
Дмитриев Д.А., Тимофеев Д.А.	26
Дожделев А.М.	27
Дожделев А.М.	28
Дубкова О.И.	29
Жданова О.В.	30
Журавлёв О.Е.	31
Загумённова А.В.	32
Заонегина И.В., Питык А.В.	33
Зелинский А.В.	34
Золотарёва Н.В.	35
Зыков Т.Ю., Антонов А.С., Ким Д.А.	36
Иванов А.Е.	37
Ильяшенко Н.В.	38
Каменщиков М.В.	39
Канарейкин А.Г.	40
Карпенков Д.Ю., Карпенков А.Ю.	41
Карпушкин С.А.	42
Кизилин В.А.	43

Кириллова Д.Н.	44
Козловская Ю.В.	45
Колобков В.Н.	46
Константинов Д.Ю.	47
Кошкидько Ю.С.	48
Кудрин В.В.	49
Кучер Д.С.	50
Лебедева А.И., Шилова А.А., Устимов А.В.	51
Лившиц Е.С.	52
Лисавина Л.В., Третьякова И.В., Данилов А.Ю.	53
Лисицын В.С.	54
Лихуша П.С.	55
Лурье Л.Ф., Шендер В.О.	56
Малахова Е.В., Пяткина А.Д., Курочкина А.Ю.	57
Матвеева О.В., Щенников С.В.	58
Мирзаева Е.В., Сухова И.И.	59
Михалчан А.А.	60
Моргунова Е.В.	61
Моргунова Е.В.	62
Москалёв И.А.	63
Мурзанов М.С.	64
Мясникова Е.Н., Алексеева Е.П.	65
Наумов Е.А.	66
Новикова В.В.	67
Орлов М.Ю.	68
Папулова Д.Р.	69
Пензов К.Н.	70
Петрова А.А.	71
Польщина Е.К.	72
Потифорова С.В.	73
Пугачёв Н.А.	74
Санников И.П.	75
Селиванова Е.В., Прутенская Е.А.	76
Семёнов А.Н.	77
Семёнова Ю.О.	78
Синекоп В.И., Куртанов Н.И.	79
Ситникова В.Е., Рогова Е.	80
Смолина Е.С.	81
Соколов Д.Н., Репчак С.В.	82
Соловьёва М.Н.	83
Спиридонова В.М., Савельева В.С.	84
Степачева А.А., Коняева М.Б., Никошвили Л.Ж.	85
Субекин А.Ю.	86

Сухарев А.С.	87
Тимурзиева Р.Д.	88
Туровцев Р.В.	89
Федеряева В.С.	90
Францева Ю.В., Гуманюк А.В., Трофимова Т.В.	91
Хохлова Ю.В., Ванюшева Т.А.	92
Цветкова И.С.	93
Чернов Д.Н.	94
Чернова Е.М.	95
Черных Н.С.	96
Шилов М.В.	97
Шмелёв Г.К.	98
Шмелёв Г.К.	99
Щенников С.В.	100