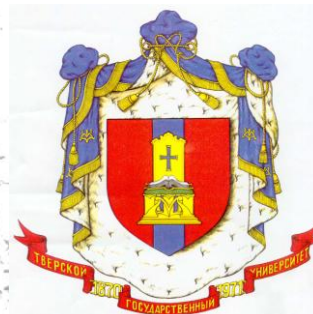




ФОНД СОДЕЙСТВИЯ РАЗВИТИЮ

малых форм предприятий в научно-технической сфере



XVIII РЕГИОНАЛЬНЫЕ КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ

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

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

ТВЕРЬ 2011

Министерство образования и науки Российской Федерации
Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Тверской государственный университет»

XVIII РЕГИОНАЛЬНЫЕ КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ

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

24 марта 2011 года

г. Тверь

Тезисы докладов

ТВЕРЬ 2011

Ответственные за выпуск:

доктор химических наук П. М. Пахомов,

кандидат химических наук С. Д. Хижняк.

XVIII Региональные Каргинские чтения: Тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2011. – 104 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 «У.М.Н.И.К». В сборнике представлены доклады студентов, аспирантов, молодых учёных тверских вузов, а также вузов других городов. Рассмотрены современные проблемы физики, химии и новых технологий.

Настоящий сборник издан на средства РФФИ (грант № 10-03-06085Г).

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

© Тверской государственный университет, 2011

© Авторы статей, 2011

УДК: 543/545:616.361-003.7.

К. А. Азатын, Л. В. Варданян, А. А. Грехан, Л. Г. Плиева, Альраванех Хамза
Мохаммад Мусаллам, Гуллам Наби Гулам Седик

АНАЛИЗ ЖЕЛЧНЫХ КАМНЕЙ

Руководители: Т. И. Смирнова, Л. Я.
Дьячкова, А. А. Голубев

Тверская государственная медицинская академия
Кафедра общей и биорганической химии, кафедра биологической химии,
кафедра госпитальной хирургии

Желчные камни или желчные конкременты, холелиты – плотные образования, обнаруживаемые в желчном пузыре и желчных протоках приблизительно у 10% населения земного шара. К основным причинам возникновения желчных камней относят нарушение обмена веществ, застой желчи в желчном пузыре, перенесенные инфекционные заболевания, воспалительные процессы. Определенную роль играет также характер питания.

Поскольку в подавляющем большинстве случаев диагностирования желчнокаменной болезни назначается оперативное лечение и конкременты, изъятые из желчного пузыря, становятся доступными для исследования лишь по прошествии операции, их химическому анализу практически не уделяется внимания. В то же время их состав мог бы служить дополнительным диагностическим тестом при определении характера нарушения обмена веществ и определения постоперативного лечения прооперированных пациентов.

В качестве первого этапа исследования в этом направлении авторами работы были проанализированы желчные камни 30 пациентов, прооперированных на кафедре госпитальной хирургии ТГМА в октябре 2010 г. Традиционными аналитическими методами гравиметрии, комплексонометрии и фотометрии определили зольность, содержание кальция, магния, стронция и железа.

Из числа проанализированных 2 образца с нулевой зольностью – чисто холестериновые камни; 15 образцов (50%) с зольностью < 1% также можно считать преимущественно холестериновыми. Только 1 образец с зольностью 47,04% можно отнести к типу известковых камней. Все остальные – камни смешанного типа.

Все 28 образцов с зольностью > 0, кроме кальция, содержали в несколько меньшем количестве магний. В зольном остатке 2 образцов обнаружено железо, еще в 2 образцов – стронций, а в зольном остатке одного – железо и стронций.

Анализ особенностей нарушения обмена веществ, повлиявших на состав желчных камней, – предмет отдельного большого исследования.

ПОЛУЧЕНИЕ НОВЫХ АНТИМИКРОБНЫХ ПРЕПАРАТОВ
НА ОСНОВЕ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ
ОКСАЦИЛЛИНА

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

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Продолжено исследование новой нетривиальной гелеобразующей системы оксациллин–серебро(I) [1; 2]. ИК спектроскопические исследования показали, что происходит образование связей оксациллина с серебром(I) ковалентного характера. Обнаружено, что для получения гелей могут быть использованы растворы компонентов как в воде, так и в смеси воды с диметилсульфоксидом (ДМСО) – эффективным растворителем, применяемым также и в медицине для растворения лекарственных веществ с целью улучшения их способности проникать через кожу. Гелеобразование происходит в растворах, содержащих до 50 об. % ДМСО. Исследована совместимость оксациллин-серебряного гидрогеля с другими бета-лактамами антибиотиками. Введение в систему ампициллина, цефазолина, цефтриаксона и цефотаксима в количестве, эквимолярном количеству оксациллина, препятствует образованию геля. Молекулы этих антибиотиков содержат аминогруппы, или ароматические гетероциклы, способные координироваться с ионом серебра, что очевидно и происходит, и препятствует образованию полимерных комплексов, образующих молекулярную сетку геля. Введение бензилпенициллина в количестве до 4 моль на 1 моль оксациллина не только не препятствует образованию геля, но и улучшает его стабильность во времени. Оксациллин-серебряные гели перспективны для применения в медицине как весьма удобная комбинированная лекарственная форма антибиотиков и серебра, обладающая антимикробным и ранозаживляющим действием.

Работа выполнена при финансовой поддержке АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы (2009–2011 годы)», проект № 2.1.1/10767.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алексеева Е.П. // XVII Региональные Каргинские чтения: тезисы докладов. Тверь: Твер. гос. ун-т, 2010. С. 3.
2. Алексеева Е.П., Алексеев В.Г., Пахомов П.М. // Межвузовский сб. науч. трудов VII Всероссийской конф. «Современные проблемы теоретической и экспериментальной химии». Саратов, 2010. С. 9–11.

УДК 541.49:581.1

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

ВЛИЯНИЕ ЭТИЛЕНДИАМИНДИСУКЦИНАТА ЦИНКА
НА СОДЕРЖАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ
В ОДУВАНЧИКЕ ЛЕКАРСТВЕННОМ

Руководители: Т.И. Смирнова, Н.М. Кудрявых

Тверская государственная медицинская академия
Кафедра общей и биоорганической химии

Благотворное действие комплексонов различных микроэлементов на культурные растения в последнее время достаточно хорошо исследовано. Однако мало известно, как влияют комплексоны на полезные дикорастущие, в т.ч. лекарственные растения. Одним из таких растений является повсеместно распространенный одуванчик лекарственный. Важная особенность одуванчика – его запасные вещества: инулин и инулоиды. Увеличение их содержания улучшает качество лекарственного сырья. С целью выяснения влияния обработки растений этилендиаминдисулфонатом цинка (Zn-ЭДДЯК) на уровень содержания инулоидов в лекарственном сырье был поставлен полевой опыт. Участки естественного биоценоза (луг) с одуванчиком лекарственным в качестве доминирующего растения в течение лета 2010 г. трехкратно обрабатывали 0,001М растворами: 1-й – ZnSO₄, 2-й – ЭДДЯК, 3-й – Zn – ЭДДЯК, 4-й (контрольный) – H₂O dest.

Спирто-водные экстракты сырых корней одуванчика, заготовленных в 3-й декаде сентября, проанализировали на содержание инулина спектрофотометрическим методом (фотометр КФК-3-01«30МЗ»). Перед заготовкой корней в образцах листьев также спектрофотометрически определили уровень содержания хлорофилла. Результаты анализов приведены в таблице.

№	Состав раствора для обработки	Хлорофилл («а» + «в») мг на 100г сырой массы листьев	Массовая доля инулина (%)
1	ZnSO ₄	260±12	16,6±1,5
2	ЭДДЯК	249±8	15,0±2,3
3	Zn-ЭДДЯК	272±10	18,9±2,2
4	H ₂ O dest	208±15	14,3±1,6

Как видно из таблицы, обработка растений раствором Zn-ЭДДЯК вызывает даже в условиях засушливого лета увеличение содержания как зеленых фотосинтетических пигментов, так и инулина, по сравнению с контролем, что подтверждает биостимулирующее действие этилендиаминдисулфоната цинка на этот вид дикорастущих сложноцветных.

СОВРЕМЕННЫЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КАЧЕСТВА КРАСНЫХ ВИНОГРАДНЫХ ВИН

Руководитель Г.П. Лапина

Тверской государственной университет

Кафедра физико-химической экспертизы биоорганических соединений

Красное виноградное вино – алкогольный напиток, полученный полным или частичным сбраживанием сока с мезгой или без нее, из которой потом отжимают сок. Содержание спирта в вине колеблется от 9 до 20%.

В розничной торговле имеется широкий ассортимент виноградных вин и среди них обнаружено большое количество фальсификата. Это обстоятельство делает необходимым проведение экспертизы качества вина.

Целью работы является экспертиза качества виноградных вин на основе изучения ряда физико-химических показателей, влияющих на качество продукта.

Объектами исследования выбраны 5 образцов красных полусладких виноградных вин, производителей: Жозеф Вердье С.А. 49260 Монтрэй-Бельэй, Франция, «Чебурино Вальсанджакомо, С.А», Карретера Честе-Годеллета, км, 1 46370 Чива, Валенсия, Испания, Вильянуева де Алькардетте, Толедо, Испания.

Для достижения поставленной цели решены следующие задачи, а именно определены:

- полнота налива по ГОСТ 23943;
- объемная доля этилового спирта по ГОСТ 51653;

а также массовая концентрация:

- титруемых кислот по ГОСТ Р 51621;
- сахаров по ГОСТ 13192;
- общего диоксида серы по ГОСТ Р 51655.

Полученные экспериментальные результаты обобщены, сопоставлены с нормативами ГОСТ и сделаны выводы о соответствии изученных образцов вина требованиям общепринятых нормативных документов. Выявлены фальсифицированные образцы, составлены соответствующие акты. Экспертные заключения по изученным образцам вин переданы в Роспотребнадзор.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГИДРИРОВАНИЯ НА МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЯХ R_2Fe_{17} ($R=Y, Er$)

Руководитель К.П. Скоков

Тверской государственной университет

Кафедра магнетизма

В качестве объектов исследования в данной работе были выбраны монокристаллические образцы интерметаллического соединения R_2Fe_{17} . Гидрировались образцы в Институте высоких магнитных полей им. Макса Планка в городе Дрезден (Германия). Измерения магнитокалорического эффекта (МКЭ) проводились прямым методом в полях до $H = 18,5$ кЭ.

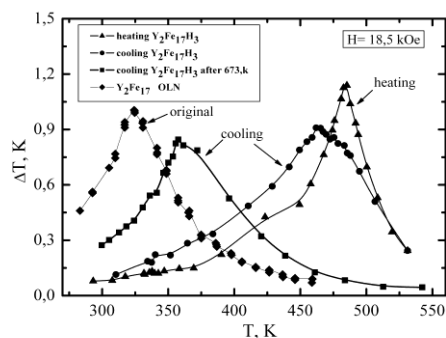


Рис. 1. Температурные зависимости магнитокалорического эффекта для монокристалла Y_2Fe_{17} вдоль легкой оси и $Y_2Fe_{17}H_3$ в поле 18,5 кЭ

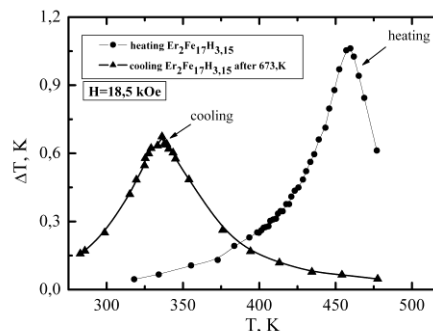


Рис. 2. Температурные зависимости магнитокалорического эффекта для $Er_2Fe_{17}H_{3,15}$ в поле 18,5 кЭ

Как видно из графиков (рис. 1,2), внедрение атомов водорода в кристаллическую структуру соединений Y_2Fe_{17} и Er_2Fe_{17} привело к увеличению величины МКЭ ($\sim 30\%$) и значительному возрастанию температуры Кюри.

Причиной увеличения МКЭ явилось возрастание величины намагниченности в результате изменений параметров кристаллической решетки и вследствие внедрения атомов водорода в кристаллическую структуру монокристаллов*.

* Tereshina I.S. et. al., Magnetocrystalline anisotropy of $R_2Fe_{17}H_x$ ($x=0,3$) single crystals// J. Magn. Magn. Mat. 2003. V.350. P.264–270.

М. В. Бабенко

ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ СВИНОГО НАВОЗА В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ТЕХНОЛОГИЙ ЕГО УДАЛЕНИЯ СО СВИНОКОМПЛЕКСА

Руководитель И. Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

По данным Минсельхоза поголовье свиней в стране за последние годы возрастает. Начавшийся несколько лет назад массовый ввод индустриальных мощностей к 2015 г. увеличит их численность до 25,4 млн голов. Это приведет к резкому увеличению отходов в виде органического сырья до 65 млн куб. м в год. Одновременно встает проблема утилизации такого объема навоза, чтобы не допустить загрязнения окружающей среды. Удаление навоза и его транспортирование за пределы животноводческих помещений производится механическими и гидравлическими способами, а также комбинированными системами.

Бесподстилочный навоз – важное звено в круговороте питательных веществ в земледелии, так как в него переходят из кормов в среднем 50–80% азота, 60–80% фосфора, 80–95% калия, до 90% кальция, 60% органического вещества, есть микроэлементы. Отношение C:N колеблется от 5:1 до 10:1.

На свинокомплексе «Заволжский», поступающий от животных навоз разделяется на фракции – твердую и жидкую. Ниже представлены показатели по составу таких фракций:

Показатели	Твердая фракция	Жидкая фракция
Общая масса	100.3 кг (10%)	899.7 кг (90%)
Содержание воды	7.6 кг (7%)	853.8 кг (93%)
Сухие вещества	32.7 кг (42%)	45.9 кг (58%)
NH ₄ - N	0.15 кг (8%)	1.65 кг (92%)
Ni	0.61 кг (17%)	2.99 кг (83%)
P	0.18 кг (22%)	0.62 кг (78%)
K	0.30 кг (10%)	2.70 кг (90%)
C	15.32 кг (49%)	16.80 кг (51%)
C/N	25.1	5.4

Твердая фракция применяется как обычный подстилочный навоз или перегной, является высокоценным удобрением со стабильной структурой и воздействием на улучшение плодородия почвы. Жидкая фракция применяется разбрызгиванием из цистерн, непосредственным инъецированием в почву с помощью шланговых насадок совместно с соломой. Содержание азота в ней примерно такое же, как и в сыром навозе, хотя расходы на применение снижаются.

О. А. Баранова

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ L-ЦИСТЕИНА И НИТРАТА СЕРЕБРА

Руководитель П.М. Пахомов

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

В настоящей работе подобран наиболее информативный режим для исследования реологических свойств гидрогелей на основе L-цистеина, нитрата серебра и электролита (сульфат натрия). Установлены закономерности гелеобразования в цистеин-серебряных растворах (ЦСР) реологическими методами (температурная и концентрационная зависимости).

Подтверждена гипотеза о том, что при выдерживании ЦСР в различных температурных условиях формируются кластеры разного размера, что, в свою очередь, приводит к получению гелей с разными прочностными свойствами. При 30°C и выше смесь ЦСР с электролитом ведет себя как жидкость, что выражается в стационарном течении образца сразу после воздействия на него деформирующей силы, гель при этом не образуется.

Установлено, что при более низкой концентрации электролита получают гели с более воспроизводимыми прочностными и вязкоупругими характеристиками даже без предварительного термостатирования ЦСР. Это объясняется тем, что сдвиговая предыстория образца при его нанесении на измерительную поверхность меньше сказывается на гелях с менее сформированной гелевой сеткой (с меньшим содержанием электролита).

Можно заключить, что в ходе выполненных исследований удалось установить температурно-временные диапазоны образования систем на основе L-цистеина и нитрата серебра с высокими вязкоупругими свойствами. Это, в свою очередь, позволяет получать гидрогели с оптимальными заданными свойствами.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы»(2009–2011 годы) №2.1.1/10767.

О. А. Баранова

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И СТРУКТУРА ЦИСТЕИН–СЕРЕБРЯНОГО РАСТВОРА КАК БАЗОВОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ

Руководитель П.М. Пахомов

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

В работе исследованы оптические свойства (светорассеяние и светопропускание) цистеин-серебряных растворов как базовой системы для формирования гидрогелей на их основе. Установлены структурные особенности этих объектов в зависимости от соотношения компонентов системы и их суммарной концентрации.

Актуальность установления структуры исследуемых объектов заключается в интересе к ним как объектам фундаментальной науки. Действительно, дисперсная фаза в гидрогелях составляет не более 0,1%, что крайне мало с точки зрения формирования тел, обладающих достаточной прочностью, к которым относятся гели. Вместе с тем, знание структуры позволяет более обоснованно подходить к получению гидрогелей на основе цистеина и нитрата серебра с заданными свойствами. Это, в свою очередь, необходимо знать при практическом применении гидрогеля, например, в медицинской практике в качестве антибактериального препарата*.

В ходе работы установлена зависимость размера и количества кластеров (частиц) меркаптида серебра от соотношения $\text{AgNO}_3/\text{L-цистеин}$. С ростом этого соотношения количество частиц и их размер уменьшаются. Также установлена зависимость численной концентрации частиц в созревшем ЦСР от массовой концентрации дисперсной фазы. Установлено, что размер частиц в созревшем ЦСР не зависит от массовой концентрации.

Кроме того, выдвинута гипотеза о необходимости формирования двух групп кластеров для гелеобразования в ЦСР.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы»(2009–2011 годы) №2.1.1/10767.

* Спиридонова В.М., Савельева В.С., Червинец В.М., Червинец Л.Ф., Пахомов П.М. // Физико-химия полимеров. Тверь, 2009. Вып.15. С.99

Я. В. Боднарчук, В. В. Боднарчук, С. Р. Усманов

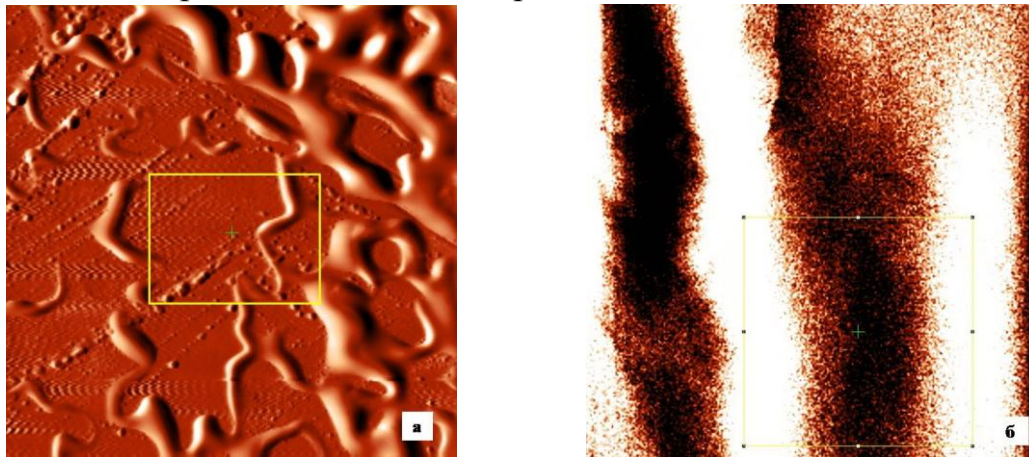
ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ ДОМЕНОВ И ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ В РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ $R(\text{Co},\text{M})_5$

Руководитель О.Б. Дёгтева

Тверской государственный университет
Кафедра магнетизма

Хорошо известно влияние тонких особенностей структуры сплавов $R(\text{Co},\text{M})_5$ на процессы их перемагничивания путем задержки смещения доменных границ*. Поэтому особый интерес при исследовании доменной структуры интерметаллидов $R(\text{Co},\text{M})_5$ заключается в изучении переходной области между доменами с помощью магнитно-силовой микроскопии.

На рисунке 1 (а) приведено МСМ-изображение ДС на базисной плоскости монокристалла $\text{SmCo}_{3,0}\text{Ni}_{2,0}$, полученное на Solver NT-MDT. Далее в пределах отмеченной области был выбран прямолинейный участок доменной границы. В пределах этого участка при последовательном возрастании увеличения была выявлена субдоменная структура (рисунок 1б), которая представлена системой параллельных полос шириной $d \sim 100\text{--}150$ нм с четко различающейся контрастностью.



МСМ-изображение ДС базисной плоскости образца $\text{SmCo}_{3,0}\text{Ni}_{2,0}$ при размере кадра а) $25 \times 25 \mu\text{m}$, б) $0,5 \times 0,5 \mu\text{m}$ и $z = 100$ нм

Предложена модель смешанной доменной границы в высокоанизотропных одноосных магнетиках, в которой сосуществуют блоховские и неелевские участки. В рамках этой модели проведены расчеты плотности граничной энергии при комнатной температуре для монокристаллов сплавов $\text{Sm}(\text{Co}, \text{Ni})_5$.

Работа выполнена при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы»

* Лукин А.А., Супонев Н.П., Первухин К.И. // Физика магнитных материалов. Калинин, 1975. Вып. 3. С.113–117.

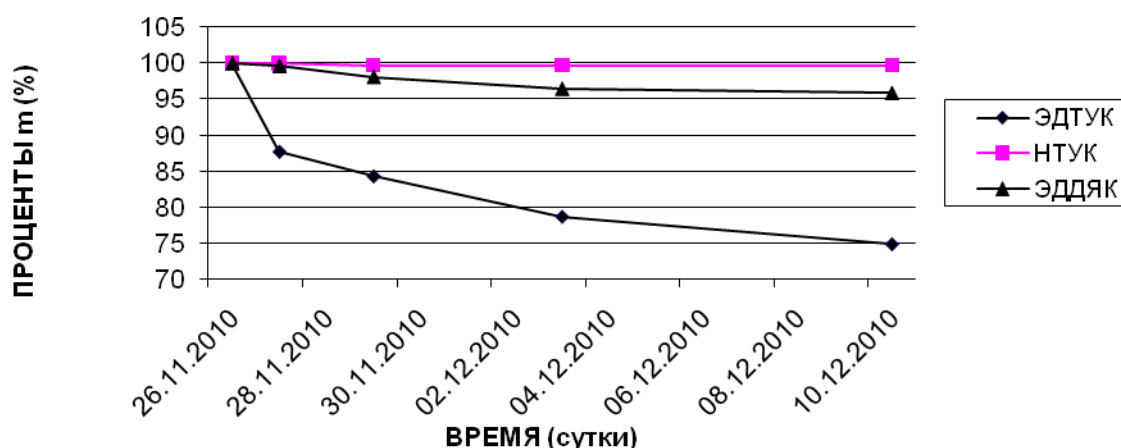
Д. А.Бордин, Н. А.Журавлёв, А. А.Мартirosов

КОМПЛЕКСОНЫ РАЗРУШАЮТ ЗУБЫ

Руководитель Т.И. Смирнова

Тверская государственная медицинская академия
Кафедра общей и биорганической химии

Вещества, обладающие хелатирующей способностью – комплексоны в настоящее время они широко применяются в пищевой и фармацевтической промышленности в качестве добавок к пищевым продуктам, БАДам, лекарственным препаратам, характеризующихся антиоксидантным и консервирующим действием. Например, соль этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТУК) трилон Б входит в состав жидкостей для ухода за полостью рта. Авторы поставили задачу сравнить уровень безопасности для зубов «классических» комплексонов ЭДТУК и нитрилотриуксусной кислоты (НТУК), а также комплексона с более низким уровнем токсичности, но пока не используемого в пищевой, фармацевтической промышленности и медицине – этилендиаминдидантарной кислоты (ЭДДЯК). Здоровые и внешне однотипные зубы (резцы), удалённые у пациентов при протезировании, обеззараживали этанолом и помещали на 2 недели в 0,01М растворы ЭДТУК, НТУК и ЭДДЯК объёмом 200 мл, предварительно подщелоченные NaOH до pH = 6,5. Затем четырежды определяли массу каждого зуба. Среднее по 3 повторностям изменение массы зуба представлено на рисунке:



Как и следовало предполагать, наибольшей агрессивностью по отношению к зубной эмали, на $\frac{3}{4}$ состоящей из гидроксипатита, обладает ЭДТУК. Растворяющая способность НТУК и ЭДДЯК различается весьма незначительно. Учитывая низкую токсичность и экологическую безопасность ЭДДЯК, можно было бы рекомендовать этот комплексон во многих случаях в качестве заменителя ЭДТУК.

М. В. Боронихин

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ СОБСТВЕННОГО ПОЛЯ
РАЗМАГНИЧИВАНИЯ ОТ НАМАГНИЧЕННОСТИ ПРИ ПОЛУЧЕНИИ
ИНФОРМАЦИИ О ФЕРРОМАГНИТНЫХ ОБЪЕКТАХ
БАЛЛИСТИЧЕСКИМ И МАГНИТОМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДАМИ

Руководитель А.Г. Пастушенков

Тверской государственный университет
Кафедра магнетизма

В данной работе рассмотрен круг вопросов, связанных с изучением гистерезиса собственного поля размагничивания при получении измерительной информации баллистическим (измерительная катушка находится в нейтральном сечении образца) и магнитометрическим (в выработке измерительного сигнала участвует поле рассеяния всего объекта исследования) методами. Это позволило установить как разницу в виде зависимостей собственного поля размагничивания от намагниченности полученных в различных методических группах, так и неизменность их вида внутри отдельных методических групп.

В качестве объектов исследования были выбраны кремнистое железо и никель, в форме полос (для баллистического метода), пластинок, призм и сфер (для магнитометрического).

Зная собственное поле H_0 и коэффициент размагничивания N , можно найти связь между характеристиками материала и конкретного образца конечной формы.

Возможность перестройки гистерезисных кривых осложняется тем, что сам коэффициент размагничивания обладает гистерезисом, т. е. имеет разные значения при изменении намагниченности по гистерезисному циклу.

Использование коэффициента размагничивания $N = \text{const}$ при перестройке гистерезисных кривых может привести к большим ошибкам (до 20% и более).

Полученные закономерности в зависимости собственного поля размагничивания от намагниченности могут быть полезны при использовании разомкнутой магнитной цепи для получения информации о магнитных свойствах ферромагнитных материалов.

М. В. Брославский

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЕГНЕТОКЕРАМИКИ СИСТЕМЫ ЦТС

Руководитель Н. Н. Большакова

Тверской государственный университет

badmax77@gmail.com

В настоящее время титанат-цирконат свинца с различными добавками является основным пьезоэлектрическим керамическим материалом. Настоящая работа поставлена с целью получения информации о диэлектрических свойствах и процессах переключения пьезоэлементов, изготовленных из керамики системы ЦТС, применяемой в магнитоэлектрических преобразователях.

Электроёмкость и тангенс угла диэлектрических потерь образцов измерены с помощью универсального измерителя Е7-7 на частоте 1кГц. Процессы переключения образцов исследованы методом эффекта Баркгаузена. Пьезокерамические элементы ЦТС в форме дисков изготовлены в ОАО «ЭЛПА» г. Зеленограда.

В таблице приведены результаты исследований электрофизических характеристик пьезокерамики ЦТС при комнатной температуре:

№	d,мм	ϵ	$\text{tg}\delta$	$d_{31}, 10^{-10}$ Кл/Н
1	1.52	870	0.19	1.9
2	1.52	800	0.2	1.8
3	1.52	920	0.18	2.1
4	1.52	860	0.18	1.9
5	1.52	800	0.2	1.8

Установлено, что температурная зависимость диэлектрической проницаемости, полученная для пьезоэлемента ЦТС, проходит через максимум при температуре порядка 320 °С. Приложение к пьезоэлементам ЦТС внешнего постоянного электрического поля вызывает процессы их поляризации. В интервале полей от 10 до 180 В·см⁻¹ при ступенчатом изменении внешнего приложенного к пьезоэлементу поля число импульсов линейно возрастает. Дифференциальные кривые распределения числа скачков переключения по полю, полученные для пьезоэлементов ЦТС, имеют максимум в интервале полей от 30 до 50 В·см⁻¹.

Ю. Б. Варакина

СОПОЛИМЕРИЗАЦИЯ МОНОМЕРОВ ФРАКЦИИ C₉ ЖИДКИХ
ПРОДУКТОВ ПИРОЛИЗА С ВИНИЛБУТИЛОВЫМ ЭФИРОМ
ПОД ДЕЙСТВИЕМ ТЕТРАХЛОРИДА ТИТАНА

Руководитель Л.И. Бондалетова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Кафедра технологии основного органического синтеза и высокомолекулярных
соединений

Одним из направлений рациональной переработки побочных продуктов пиролиза является получение нефтеполимерных смол (НПС). Фракция C₉ жидких продуктов пиролиза является исходным сырьем для получения НПС и содержит в своем составе до 50 % мономеров (стирол, α-метилстирол, циклопентадиен, дициклопентадиен, инден, винилтолуол и др.). Для получения смол с улучшенными физико-химическими и механическими характеристиками проводят модификацию реакционноспособными соединениями, содержащими кроме ненасыщенных связей другие функциональные группы.

Целью данной работы является получение модифицированных нефтеполимерных смол с полярной группой сополимеризацией мономеров фракции C₉ жидких продуктов пиролиза и винилбутилового эфира (ВБЭ).

Известно, что винилбутиловый эфир активно полимеризуется по катионному механизму. Однако сополимеризация мономеров фракции C₉ с ВБЭ под действием тетрахлорида титана (80 °С, 180 минут, концентрация TiCl₄ 2 %) приводит к получению сополимера с выходом 18 %, что значительно ниже ожидаемого, исходя из выхода продуктов при полимеризации мономеров фракции C₉ (28 %) и ВБЭ (34 %) в этих условиях. Снижение выхода объясняется образованием комплекса ВБЭ с TiCl₄ за счет эфирного атома кислорода и двойной связи эфира. Комплексообразование подтверждено данными ЯМР ¹H-спектроскопии.

С учетом образования комплекса ВБЭ и TiCl₄ состава 2:1 была проведена сополимеризация мономеров фракции C₉ с ВБЭ под действием TiCl₄, что привело к увеличению выхода модифицированных смол до 52 %.

Покрyтия, полученные из растворов модифицированных смол, обладают свойствами, которые по ряду показателей превосходят полученные ранее покрyтия на основе немодифицированных НПС: адгезия, прочность при ударе, эластичность, твердость.

А. С. Васильев

ОПТИМИЗАЦИЯ МИНЕРАЛЬНОГО ПИТАНИЯ – РЕЗЕРВ
СОХРАНЕНИЯ ВЫСОКОЙ ПРОДУКТИВНОСТИ ОВСА
В УСЛОВИЯХ ЗАСУХИ

Руководитель З. И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра общего земледелия и растениеводства

В зерновом поле Верхневолжья по данным Росстата (2009) наибольшую площадь занимает овес как культура, наиболее адаптированная к условиям региона. Однако в последние годы урожайность его редко превышает 15 ц/га. К числу причин низкой продуктивности относятся несбалансированность минерального питания с другими жизненно важными факторами – влагой, светом, приходом ФАР и низкий уровень агротехнологий.

В связи с этим нами проведены комплексные исследования в многофакторном полевом опыте в условиях аномально жаркого вегетационного периода 2010 г., когда запасы влаги в почве опускались до метрового запаса, а среднесуточная температура воздуха была на 5,2 – 9,7 °С выше нормы. В опыте на 2 фонах – без удобрения и Р45К90 (фактор А) изучали два срока подкормки – по всходам и в фазу кущения (фактор В) азотом в дозах N30, N45, N60, N90 (фактор С), контролем служил вариант без удобрения. Объект исследования – новый сорт овса Кречет. Возделывание проводили по высокой технологии.

В результате выявлено, что в засушливых условиях 2010 г. оптимальное сбалансирование в посевах минерального питания с другими жизненно важными факторами обеспечило внесение азота в дозе N90 по вегетирующим растениям в фазу всходов по фосфорно-калийному фону. Это позволило получить максимальную урожайность овса 48,2 ц/га. При этом зерно отличалось наилучшим качеством, оно имело наименьшую пленчатость (19,8%), наибольшую массу (425 г/л) и массу 1000 зерен (35,8 г). На 1 кг д. в. N собрано 24,1 кг зерна. В этом варианте получен максимальный условно-чистый доход – 13,8 тыс. руб./га с уровнем рентабельности 83%. По сравнению с контрольным вариантом прибавка урожая зерна составила 21,7 ц/га, или 67,9%. Такая урожайность накоплена за счет высокой фотосинтетической деятельности растений в посевах. При высоком фотосинтетическом потенциале (2034,2 тыс.м²·сутки/га) чистая продуктивность фотосинтеза в среднем за вегетацию составила 6,38 г/м²·сутки, а урожай сухой фитомассы – 129,7 ц/га.

Таким образом, оптимизация минерального питания при возделывании по высокой технологии в условиях жесточайшей засухи позволяет получать урожаи зерна овса на уровне 80% от потенциала сорта.

А. С. Васильев

ПРИМЕНЕНИЕ НАНОМАТЕРИАЛА И НОВЫХ ВИДОВ УДОБРЕНИЙ В ТЕХНОЛОГИИ ВОЗДЕЛЫВАНИЯ ЗЕРНОВЫХ КУЛЬТУР

Руководитель З. И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра общего земледелия и растениеводства

Широкое использование достижений научно-технического прогресса является основой в решении продовольственной проблемы в современных условиях. К числу таких достижений относятся нанотехнологии и наноматериалы, новые виды удобрений, которые более экономичны и экологичны за счет низких норм применения. Роль их в повышении урожайности зерновых культур в условиях Верхневолжья и России в целом изучена недостаточно.

В связи с этим в условиях засушливого 2010 г. нами проведены комплексные исследования в двух трехфакторных полевых опытах на окультуренной дерново-среднеподзолистой супесчаной почве, осушенной закрытым дренажом, с одной из самой распространенной в регионе зерновой культурой – овсом. Объектами исследований были: наноматериал, новые виды удобрений – МАКС-Супергумат, Азотофосфин, Аквадон-Микро, сорта овса Кречет и Буг. Сорт Кречет выращивали по высокой, а сорт Буг по нормальной технологиям.

В результате выявлено, что обработка вегетирующих растений овса всеми изучаемыми препаратами обеспечила получение в разных вариантах достоверных прибавок урожая зерна, а именно: наноматериала по сорту Буг от 3,6 до 5,2 ц/га (23,4 – 25,3%); гуминового удобрения «МАКС-Супергумат» по сорту Кречет от 6,6 до 17,2 ц/га (26,5 – 68,5%), по сорту Буг от 3,8 до 5,9 ц/га (24,7 – 26,2%); комплексного микроэлементного удобрения «Аквадон-Микро» по сорту Буг от 3,2 до 5,4 ц/га (20,8 – 24,0%); бактериального удобрения «Азотофосфин» по сорту Буг от 3,1 до 5,1 ц/га (20,1 – 22,7%).

Применение наноматериала в технологии возделывания сорта Буг увеличило чистый доход с гектара в сравнении с контролем в 1,2 – 1,5 раза, Азотофосфина – в 1,5 – 2,7 раза, Аквадон-Микро – в 2,6 – 2,8, МАКС-Супергумата в 1,6 – 3,2 раза, причем в большей степени на неудобренном фоне. Максимальный условно-чистый доход (8,87 тыс. руб./га) обеспечило применение МАКС-Супергумата для некорневой подкормки овса сорта Кречет в фазу всходов, в сравнении с контролем он увеличился в 3,4 раза. Рост урожайности овса от изучаемых препаратов и удобрений происходит за счет повышения фотосинтетической деятельности растений и их устойчивости к болезням. Исследования продолжаются.

Д. В. Васильева, А. С. Конькова

ВЛИЯНИЕ ОКИСЛИТЕЛЕЙ И ВОССТАНОВИТЕЛЕЙ НА СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛИАНИЛИНА

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Известно, что степень окисленности полианилина (ПАНИ) существенным образом влияет на спектр поглощения в видимой и ультрафиолетовой областях. Степени окисленности ПАНИ определяются соотношением фенилендиаминовых и иминохиноидных групп. Можно ожидать, что изменение соотношения указанных выше групп может отразиться на спектрах поглощения, поэтому целью настоящей работы являлось изучение влияния окислителей и восстановителей на спектральные характеристики ПАНИ. В качестве окислителей мы использовали пероксид водорода, хлорид железа (III), бихромат калия, в качестве восстановителей – тиосульфат натрия, сульфат железа (II).

ПАНИ, используемый в наших экспериментах, был синтезирован по традиционной методике путем окисления анилина персульфатом аммония в кислой среде. В итоге был получен ПАНИ в форме эмеральдина. В процессе синтеза в реакционную массу мы помещали стеклянные заготовки, на которые осаждался равномерный слой ПАНИ в виде пленки. Экспозиция составляла около 5 минут. Эти заготовки мы использовали для снятия спектров поглощения в видимой области на приборе СФ-2000.

Обработка окислителями и восстановителями заготовок осуществлялась путем погружения их в соответствующий раствор на несколько минут. При этом было выяснено, что воздействие окислителей и восстановителей существенным образом изменяет спектр поглощения пленки ПАНИ. Наибольшие изменения зафиксированы в области 600-750 нм. Именно эта область спектра определяется соотношением фенилендиаминовых и иминохиноидных групп. Необходимо отметить, что после извлечения заготовок из раствора с заданным значением окислительно-восстановительного потенциала спектральные характеристики пленки ПАНИ остаются неизменными, т. е. налицо так называемый «эффект памяти». Обнаруженный эффект может быть использован для создания окислительно-восстановительного сенсора фотометрического типа с «эффектом памяти». Учитывая, что пленка ПАНИ сравнительно устойчива к воздействию окружающей среды и индифферентна к биологическим объектам, данный сенсор может использоваться для исследования технологических и биологических систем.

И.С. Вахнина

ЭКСПЕРТИЗА КАЧЕСТВА ПОВАРЕННОЙ СОЛИ

Руководитель Лапина Г.П.

Тверской государственный университет
Кафедра физико-химической экспертизы биоорганических соединений

Цель работы состоит в проведении сравнительной характеристики физико-химических показателей качества поваренной соли, реализуемой в торговых сетях г. Твери.

Для достижения поставленной цели решены следующие задачи по возможному выявлению фальсификата, а именно определены:

- количество влаги согласно ГОСТ 13685-84 (п. 2.2) путем высушивания навески поваренной соли при температуре 150⁰С до постоянной сухой массы и определение потери массы по отношению к навеске*;

- массовая доля нерастворимого в воде остатка согласно ГОСТ 13685-84 (п. 2.3). Данный метод основан на растворении заданного количества пробы соли в воде, фильтровании полученного раствора, сушки и взвешивании нерастворимого в воде остатка.

Объектами исследований выбраны 4 образца выварочной поваренной соли сорта «Экстра» производителей: ЗАО «Предприятие МС»; ОАО «Мозырьсоль»; ООО «Соль Брянска»; ЗАО «Славянская соледобывающая компания».

В завершении работы планируем провести следующие испытания:

- определить массовую долю магний-иона согласно ГОСТ 13685-84 (п. 2.6). Данный метод заключается в титровании суммы кальция и магния раствором трилона Б в присутствии кислотного хрома темно-синего в качестве индикатора и последующего пересчета на содержание иона магния;

- определить рН раствора электрометрическим методом согласно ГОСТ 13685-84 (п. 2.18). Компенсационный метод основан на сравнении э.д.с. с другой известной и постоянной э.д.с., которые являются определяющими для выявления качества поваренной соли.

Выявлены и обсуждены факты фальсификации этого продукта.

* Герасимова В.А., Белокурова Е.С., Вытовтов А.А. Товароведение и экспертиза вкусовых товаров. СПб.: Питер, 2005.

С. А. Голосова, Е. И. Шиманская, О. В. Харламова

СИНТЕЗ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ ИЗ ПРОИЗВОДНЫХ НАФТАЛИНА С ПРИМЕНЕНИЕМ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Руководитель Э.М. Сульман

Тверской государственной технической университет

Целью данного исследования является поиск эффективной каталитической системы для процесса окисления нафталина, 2-мелилнафталина с получением предшественников фармакологически активных веществ:

1) 1,2-нафтохинона важного промежуточного вещества в синтезе 6-бромнафтохинона-1,2 (бонафтон – противовирусный препарат). Активен в отношении вируса простого герпеса, опоясывающего герпеса и некоторых штаммов аденовирусов. Облегчает течение инфекционного процесса, при местном применении обуславливает быстрое исчезновение признаков воспаления, уменьшает гиперемиию конъюнктивы, улучшает эпителизацию язв с последующей нормализацией структуры роговицы;

2) 2-метил-1,4-нафтохинона (менадион) – предшественника витамина К₃. Витамины группы К, или антигеморрагические витамины, необходимы для нормального свертывания крови. Их применяют при сильных кровотечениях, геморрагических диатезах и в некоторых случаях расстройства функции печени. В зарубежных публикациях также описаны способы применения витамина К в лечении ряда онкологических заболеваний, при лечении болезни Альцгеймера, при потере костной массы и в некоторых косметических операциях. Витамин К₃ (менадион) является синтетическим аналогом природного витамина К, но не уступает ему в активности.

Промышленный синтез данных препаратов характеризуется крайне низким выходом целевого продукта, что делает актуальным исследование возможности оптимизации данных процессов.

В данной работе приводится исследование синтеза 1,2 нафтохинона и менадиона с использованием каталитических систем на основе органических и неорганических носителей импрегнированных наночастицами переходных металлов, что позволит существенно повысить выход и селективность процесса.

М. В. Голубева, Е. П. Алексеева

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДЫХ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА(III) С БЕТА-ЛАКТАМНЫМИ АНТИБИОТИКАМИ

Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Выделены в твердом состоянии и исследованы комплексные соединения железа(III) с типичными бета-лактамными антибиотиками: бензилпенициллином, оксациллином, ампициллином, цефазолином, цефотаксимом и цефтриаксоном. Комплексы синтезированы в водном растворе при взаимодействии натриевых солей антибиотиков и хлорида железа(III) в мольном соотношении 5:1. Проведен элементный анализ полученных соединений методами титриметрии и гравиметрии. Записаны ИК спектры комплексов на Фурье ИК спектрофотометре Equinox 55 (Bruker) в диапазоне 4000–400 см⁻¹ для образцов в виде таблеток с КВг. В ИК спектрах комплексов наблюдается изменение частоты и интенсивности полос поглощения по сравнению с натриевыми солями антибиотиков. Смещение полос поглощения функциональных групп антибиотиков – карбоксилатной, бета-лактамной, амидной – свидетельствует об образовании прочных координационных связей ковалентного характера анионов антибиотиков с железом. При этом координация лигандов происходит через атомы кислорода.

Полученные комплексные соединения перспективны для применения в качестве антимикробных препаратов в медицине и электродноактивных веществ химических сенсоров в химическом анализе.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы», проект НК-595П-6.

УДК: (633.1:631.559 + 631.811) 470.331

М. В. Гуляев

РОЛЬ МИНЕРАЛЬНОГО ПИТАНИЯ И ГУСТОТЫ СТОЯНИЯ В ПОЛУЧЕНИИ ЗАПРОГРАММИРОВАННЫХ УРОЖАЕВ ЯРОВЫХ ЗЕРНОВЫХ КУЛЬТУР

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра растениеводства

Изучение сравнительной продуктивности новых сортов разных видов яровых зерновых культур при их программированном выращивании их по экологически безопасным технологиям является актуальным. В связи с этим нами в 2009–2010 гг. проведены комплексные исследования в полевом опыте на окультуренной дерново-среднеподзолистой супесчаной почве. В опыте изучали факторы: А – культуры: яровая пшеница, яровая тритикале, ячмень, овес; В – фоны минерального питания, рассчитанные на урожайность: 1 – 25ц/га (урожайность в производстве, УП); 2 – 35 ц/га (ДВУ по биогидротермическому потенциалу продуктивности); 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 2009г. был овес, 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-м 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. В условиях засухи 2010г. овес также сформировал урожайность на 1-м фоне – 26,2 ц/га, на 2-м – 28,8 ц/га; наименее урожайной была тритикале: на 1-м фоне – 18,0, на 2-м – 21,1 ц/га. По яровой пшенице получено на 1-м фоне – 21,5, на 2-м – 24,6 ц зерна с 1 га, по ячменю соответственно 20,1 и 24,4 ц/га.

На получение запрограммированных урожаев большое влияние оказали погодные условия и нормы высева. При повышенном увлажнении в 2009г. пшеница, тритикале и овес на обоих фонах сформировали урожайность выше запрограммированного уровня. В условиях засухи только пшеница и овес достигли такого уровня в более загущенных посевах (норма высева 7 млн/га). Оптимальной нормой высева при повышенном увлажнении была 6 млн., в засушливых условиях – 7 млн всхожих семян на гектар. Таким образом, наиболее адаптированной культурой к условиям Верхневолжья является овес. Тритикале более продуктивна при повышенном увлажнении, пшеница – в условиях засухи. Ячмень в среднем за 2 года сформировал урожайность на 5,5-12,8 ц/га меньше, чем другие культуры.

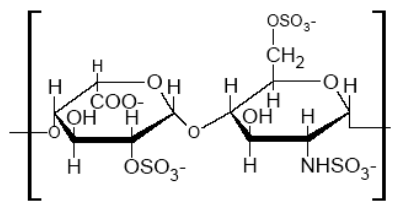
А. В. Гуманюк, Т. В. Трофимова

ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ ГЕПАРИНА С ИОНАМИ НЕКОТОРЫХ МИКРОЭЛЕМЕНТОВ МЕТОДАМИ рН-МЕТРИЧЕСКОГО ТИТРОВАНИЯ И МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Гепарин – полисахарид, структуру которого составляют повторяющиеся дисахаридные звенья, включающие сульфатированные фрагменты α -L-идурановой кислоты и α -D-глюкозамина:



В данной работе методом рН-метрического титрования и математического моделирования в широком интервале рН (2.30 – 10.50) исследовано комплексообразование в системах, содержащих высокомолекулярный гепарин (Na_4hep) и катионы биометаллов-микроэлементов: Cu^{2+} , Zn^{2+} , Mn^{2+} , Ni^{2+} , Fe^{3+} , Co^{2+} .

Рабочие растворы, содержащие гепарин, переведенный в форму кислоты и хлорид соответствующего металла, титровали раствором NaOH точной концентрации на фоне 0.15M NaCl при 37.0°C . При титровании систем, содержащих двукратный избыток ионов металла по отношению к лиганду, наблюдали выпадение гидроокисей. Для предотвращения окисления Co^{2+} и Mn^{2+} производили наддув ячейки аргоном высокой чистоты. Определение значимых комплексных форм гепарина с ионами биометаллов и вычисление соответствующих констант образования проводились по алгоритму автоматизированного построения модели, реализованному в программе AUTOEQUIL.

Для подтверждения корректности результатов проведены синтез и выделение в твердом виде некоторых гепаринатов микроэлементов, в результате чего были определены брутто-формулы выделенных комплексов.

Были построены диаграммы распределения комплексных форм, образующихся в системах $\text{M}^{n+} - \text{Na}_4\text{hep}$. По результатам исследования можно заключить, что мономерное звено гепарина ведет себя как четырехдентатный лиганд, а катионы биометаллов при образовании комплексов реализуют координационное число, равное шести.

Работа выполнена в рамках федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009 – 2013 гг.». Номер конкурса НК-595(2)

УДК 662.756.3+544.478

А. В. Густова, У. Р. Ахметзянова, А. А. Степачева

КАТАЛИТИЧЕСКОЕ ДЕОКСИГЕНИРОВАНИЕ ЖИРНЫХ КИСЛОТ В ПРОИЗВОДСТВЕ БИОДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА

Руководители: В.Г. Матвеева, Л.Ж. Никошвили

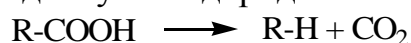
Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии и химии

Каталитическое деоксигенирование жирных кислот, полученных в результате гидролиза триглицеридов, и их алкиловых эфиров – новый метод получения биодизеля в форме углеводородов дизельного топлива. Топливо, полученное подобным путем, называют биодизелем второго поколения, или «Green» дизелем.

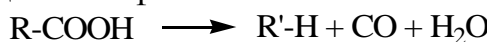
Суть деоксигенирования состоит в удалении кислорода карбоксильной группы жирных кислот с получением предельных или непредельных углеводородов [1].

Существует несколько возможных механизмов деоксигенирования жирных кислот для производства биодизеля второго поколения.

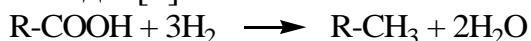
Первый путь осуществляется путем прямого декарбоксилирования с получением диоксида углерода и углеводородов:



Второй способ заключается в декарбонилировании с получением монооксида углерода, воды и олефинов:



Третий механизм – гидрирование, заключающееся в связывании кислорода с образованием воды [2]:



Деоксигенирование жирных кислот и их эфиров выполняют при постоянной температуре (250 – 300 °С) и постоянном давлении (400 – 600 кПа), используя различные катализаторы на основе благородных металлов.

Деоксигенирование модельной смеси жирных кислот проводилось в реакторе для проведения процесса гидрирования под давлением PARR – 4307 (USA) при температуре 300 °С, давлении водорода 600 кПа, с использованием катализатора Pd/C.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kubickova I. Hydrocarbons for diesel fuel via decarboxylation of vegetable oils // *Catalysis Today*. 2005. № 106. С.197–200.
2. Snare M. Heterogeneous catalytic deoxygenation of stearic acid for production of biodiesel // *Ind. Eng. Chem. Res.* 2006. № 16. С.5708–5719.

А.М. Дожделев

СТРУКТУРА БЫСТРОРЕЖУЩЕЙ СТАЛИ С ПОВЫШЕННЫМ СОДЕРЖАНИЕМ СЕРЫ

Руководитель С.Е. Ильяшенко

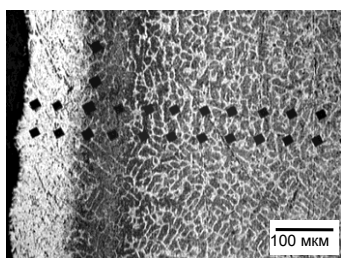
Тверской государственной технической университет

Кафедра технологии металлов и материаловедения

Наплавка режущих кромок инструмента быстрорежущими сталями и сплавами является одним из способов экономии дорогостоящего материала, которая может достигать 90%.

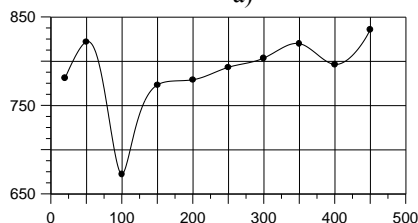
На обрабатываемость и износостойкость инструмента из быстрорежущей стали оказывают влияние микродобавки некоторых поверхностно-активных элементов, например серы, обуславливающих эффект самосмазывания. В литературе имеются противоречивые данные о таком влиянии, поэтому целью данной работы было исследование 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 Vysprint 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. Микротвердость измеряли на приборе ПМТ-3.



а)

Макроструктура наплавленной быстрорежущей стали Р9М4К8 в зоне лазерного воздействия (а) и микротвердость различных участков наплавленного металла (б)



б)

В результате исследования получены фотографии различных зон металла с повышенным содержанием серы после газолазерной резки, а также измерена микротвердость этих зон. Выявлено, что наибольшей микротвердостью обладает металл в зоне оплавления (830 HV), а наименьшей – в зоне термического влияния (670 HV).

Работа выполнена при поддержке гранта Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере по программе «Участник молодежного научно-инновационного конкурса» («У.М.Н.И.К.»).

Т.А. Дудкина, Е.Ю. Прошина, М.С. Тарасов

ИЗМЕНЕНИЕ УРОВНЯ СОДЕРЖАНИЯ РАСТИТЕЛЬНЫХ ПИГМЕНТОВ В КАЛАНХОЭ ПОД ДЕЙСТВИЕМ СОЕДИНЕНИЙ БОРА

Руководители: Т. И. Смирнова, П. В. Ромась

Тверская государственная медицинская академия
Кафедра общей и биорганической химии.

Каланхоэ перистое – ценное лекарственное растение, не произрастающее в диком виде на территории нашей страны, его выращивание которого возможно лишь в теплицах. При этом всегда возникает проблема увеличения биомассы полученного лекарственного сырья.

Одним из факторов, существенно влияющих на рост культивируемых растений, являются соединения бора. С целью исследования характера воздействия бора в составе различных соединений на каланхоэ авторами был поставлен лабораторный опыт.

Укорененные черенки каланхоэ, полученные от одного и того же растения, трехкратно с интервалом в четыре недели, обрабатывали 0,001 М растворами H_3BO_3 , H_3BO_3 + ЭДДЯК (этилендиаминдиантарной кислоты) и ЭДДЯК, взятыми в объеме 20 мл. Контролем служили растения, обработанные одновременно с опытными дистиллированной водой.

Затем определили общую площадь листовой поверхности опытных и контрольных растений и содержание в них растительных пигментов.

Результаты определения приведены в таблице:

№	Состав раствора для обработки	Растительные пигменты, мг на 100г сырой массы листьев				Площадь листовой поверхности, см (% от контроля)
		хлорофилл «а»	хлорофилл «в»	хлорофилл «а» + «в»	каротиноиды	
1	H_2O dest	33,0±2,0	34,2±1,5	67,2±2,0	4,8±1,5	100
2	H_3BO_3	28,8±3,2	23,7±1,8	52,5±3,2	6,9±1,0	118
3	H_3BO_3 + ЭДДЯК	29,8±2,1	27,7±2,0	57,5±2,1	7,3±1,8	258
4	ЭДДЯК	35,8±2,2	34,3±1,9	70,1±2,2	12,3±2,1	145

Судя по результатам опыта, можно сделать вывод о том, что ЭДДЯК координирует бор из борат-анионов и в такой форме микроэлемент становится более доступным для растений.

Оба борсодержащих вещества несколько уменьшают относительное содержание зеленых пигментов, но увеличивают общую площадь листовой поверхности, следовательно, и биомассу каланхоэ. Все виды обработки, и ЭДДЯК особенно, увеличивают содержание каротиноидов, повышая лекарственную ценность сырья.

Жданова О.В.

АНАЛИЗ КРИВЫХ НАМАГНИЧИВАНИЯ ОРТОРОМБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ

Руководитель Ю. Г. Пастушенков

Тверской государственной университет
Кафедра магнетизма

Проведено теоретическое рассмотрение кривых намагничивания $I_H(H)$ орторомбических кристаллов в рамках фаз Нееля. В ходе анализа было установлено, что для орторомбических магнетиков характерны линейные кривые намагничивания. Рассмотрены частные случаи кривых намагничивания орторомбических кристаллов (рис.1).

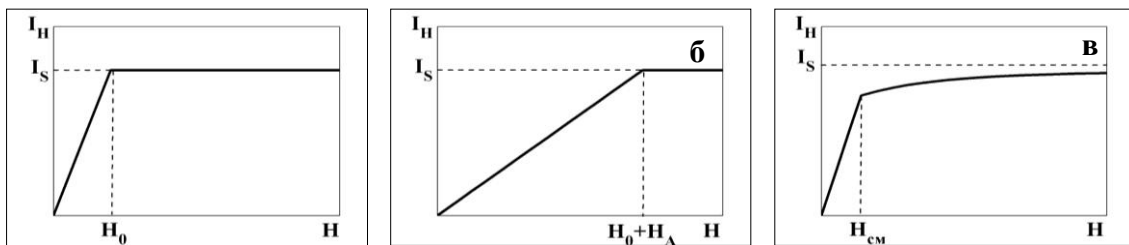


Рис.1. а – теоретическая кривая намагничивания орторомбического кристалла вдоль оси легкого намагничивания (ОЛН); б – теоретическая кривая намагничивания орторомбического кристалла перпендикулярно ОЛН; в – теоретическая кривая намагничивания орторомбического кристалла под произвольным углом к ОЛН

Также было проведено сравнение теоретических и экспериментальных кривых намагничивания монокристаллов орторомбического соединения FeV (рис. 2). Хорошее совпадение теоретических и экспериментальных кривых, позволяет точно определить поля насыщения монокристалла FeV в различных направлениях .

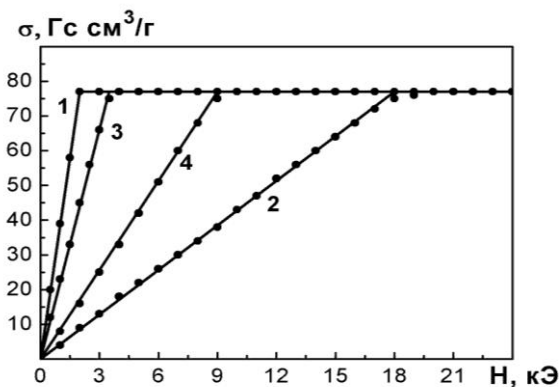


Рис. 2. Экспериментальные (точки) и теоретические (линии) кривые намагничивания монокристалла FeV вдоль ОЛН (1), оси трудного намагничивания (ОТН) (2) в плоскости, перпендикулярной к ОЛН под углом $\varphi = 90^\circ$ (3) и 45° (4) к ОТН

Е. В. Журавлев, А. А. Шрайнер

КОРРЕЛЯЦИИ СТРУКТУРА – СВОЙСТВО АЛКАНОВ С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИНДЕКСОВ И
АДДИТИВНЫХ СХЕМ

Руководитель В. М. Смоляков

Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

Для изучения корреляционных зависимостей «структура – свойство алкана» в работе использованы аддитивные схемы Бенсона и Татевского

$$P_{C_nH_{2n+2}} = \sum_i^4 k_i p_i, \quad (1) \quad P_{C_nH_{2n+2}} = \sum_{i,j=1;i \leq j}^4 n_{ij} p_{ij}, \quad (2)$$

где в (1) p_i – парциальный вклад фрагментов $-C_i-$, охватывающих атомы С и их ближайшее окружение, p_{ij} в (2) – вклады фрагментов, охватывающих связи $-C_i-C_j-$ и их ближайшее окружение, а k_i, n_{ij} – число таких фрагментов соответственно. Однако по схеме Бенсона из 18 молекул октанов C_8H_{18} 10 уже неразличимы (т.е. свойства P этих соединений следует считать одинаковыми). Поэтому для аппроксимации характеристик $\Delta_f H^0_{298 \text{ К, газ}}$, $S^0_{298 \text{ К, газ}}$, $\Delta_f G^0_{298 \text{ К, газ}}$ в уравнения (1) и (2) нами введены топологические индексы – инварианты молекулярных графов (МГ) алканов

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

$${}^2\chi = \sum_{j=2}^4 \sum_{i,m=1;j \leq m}^4 (v_i v_j v_m)^{\frac{1}{2}}, \quad (4); \quad {}^3\chi = \sum_{j,m=2}^4 \sum_{i,k=1;j \leq k}^4 (v_i v_j v_m v_k)^{\frac{1}{2}}, \quad (5)$$

где $v_i \cdot v_j$ – произведение степеней вершин, инцидентных данному ребру в МГ алкана; $v_i \cdot v \cdot v_m$ – произведение степеней вершин, имеющих общим концом вершину v_i в МГ; $v_i \cdot v \cdot v_m v_k$ – произведение степеней вершин, имеющих общим концом ребро e_{jm} в молекулярном графе алкана. С использованием (1) – (5) проведены численные расчеты $\Delta_f H^0_{298 \text{ К, газ}}$, $S^0_{298 \text{ К, газ}}$, $\Delta_f G^0_{298 \text{ К, газ}}$.

Параметры этих уравнений найдены методом наименьших квадратов по опытным данным для свойства P алкана*.

* Яковлева Т.Ю., Нилов Д.Ю., Сахарова А.А. // Тез. докл. IV науч. конф. аспирантов и студентов химического факультета. Тверского гос. ун-та. Тверь: ТвГУ, 2005. С. 51.

О. Е. Журавлев

ВЗАИМОСВЯЗЬ СТРУКТУРА – СВОЙСТВА В НОВЫХ ПАРАМАГНИТНЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЯХ

Руководители: Л. И. Ворончихина, Р. М. Гречишкин
Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

В последние годы значительно возрос интерес к такому классу соединений, как ионные жидкости (ИЖ). Ионные жидкости – это соли жидкие при комнатной или близкой к ней температуре. В состав ионных жидкостей входит объемный органический катион: 1,3-диалкилимидазолий, алкиламмоний, алкилфосфоний, N-алкилпиридиний и др. и неорганический или органический анион. Главные характеристики ИЖ – это высокая термическая стабильность, низкое давление паров, хорошая растворяющая способность, нетоксичность, негорючесть.

Нами были синтезированы четвертичные соли пиридиния, имидазолия и аммония, различающиеся структурой органического катиона, и на их основе получены парамагнитные ионные жидкости с анионом $[\text{FeCl}_4]^-$. Впервые комплексом взаимодополняющих физических методов (ИК, ЯМР-, Раман-спектроскопия, спектроскопия в видимой области и РСА) охарактеризована структура новых соединений; методом РСА установлены основные структурные характеристики и типы супрамолекулярной организации в кристаллах изученных тетрагидроферратов N-аллилпиридиния и тетрабутиламмония. Впервые показано, что структура и природа органического катиона в парамагнитных ИЖ оказывают существенное влияние на структурную организацию в кристалле, что приводит к изменению их физико-химических свойств.

Полученные результаты расширяют и углубляют знания о взаимосвязи структурных и физико-химических свойств парамагнитных ИЖ для использования их в конкретных целях. Показано, что полученные новые парамагнитные ионные жидкости могут быть использованы в качестве сред для левитации и манипулирования различными диамагнитными макро- и микрообъектами. Обладая высокой термической стабильностью (350–400⁰С), они могут быть использованы как каталитические среды в довольно широком интервале температур. Новые парамагнитные ИЖ могут быть источником наноразмерных парамагнитных частиц при получении нанокомпозитов. Полученные результаты и установленные закономерности влияния структуры парамагнитных ИЖ на их свойства могут служить основой для направленного регулирования свойств ИЖ и использования их в новых химических нанотехнологиях.

М. В. Журавлева

ВЛИЯНИЕ ФРАКЦИЙ УДОБРЕНИЙ НА СОДЕРЖАНИЕ И СОСТАВ ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА ДЕРНОВО-ПОДЗОЛИСТОЙ ПОЧВЫ

Руководитель О. В. Смирнова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Характерной особенностью дерново-подзолистых почв является невысокое количество в них органического вещества, поэтому для поддержания его оптимального содержания традиционно применяются различные виды и дозы органических удобрений, а также разные способы внесения их в почву.

В условиях микрополевого опыта нами изучено удобрительное действие различных фракций соломистого навоза, компоста многоцелевого назначения (КМН) и органического сапропеля на содержание, групповой и фракционный состав органического вещества дерново-подзолистой легкосуглинистой почвы.

Использование различных фракций органических удобрений привело к возрастанию перегноя в пахотном слое почвы. В первый год действия удобрений наибольшим содержанием С органического вещества (3,35%) отличались варианты с внесением крупных фракций соломистого навоза, а наименьшим – с использованием мелких фракций органического сапропеля (2,5%). Во второй год исследований произошло увеличение количества органического вещества в почве с крупными фракциями всех видов удобрений (на 2–8%), а небольшое снижение наблюдалось на фоне вариантов с их мелкими фракциями.

На протяжении двух лет проведения опыта все органические удобрения изменяли состав органического вещества почвы. В результате увеличивалось количество гуминовых кислот (ГК) с одновременным снижением фульвокислот (ФК). Это привело к расширению отношения ГК:ФК уже в первый год трансформации удобрений, особенно на варианте с крупными фракциями соломистого навоза и КМН (до 0,92 и 0,90 соответственно).

В год последствия удобрений самое высокое соотношение ГК:ФК установлено на фоне крупных фракций соломистого навоза (0,92), а самое низкое – в почве с мелкими фракциями компоста многоцелевого назначения (0,86).

Таким образом, в течение 2009–2010 гг. максимальное содержание С органического вещества и наиболее широкое отношение ГК:ФК наблюдались в варианте с крупными фракциями соломистого навоза.

Э. В. Золотухин

СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ МЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ

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

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

В последнее время во всем мире отдают предпочтение лекарственным препаратам, проявляющим высокую эффективность при минимальном количестве побочных действий. Не так давно был открыт низкоконцентрированный гидрогель на основе водных растворов аминокислоты L-цистеина и нитрата серебра. Данный гидрогель представляет собой самоорганизованную супрамолекулярную сетку, которая затрудняет или полностью блокирует транспорт биоферментов к бактериям. Следовательно, можно говорить об антибактериальных свойствах данного гидрогеля. Целью нашей работы являлось изучение гелеобразующих свойств системы на основе водных растворов аминокислоты L-цистеина и нитрата серебра с добавлением лекарственных препаратов.

В данном исследовании использовался гидрогель на основе водных растворов L-цистеина и нитрата серебра, в который вводился лекарственный препарат «Анаферон». Указанный препарат обладает иммуномодулирующими свойствами и противовирусной активностью, наряду с минимальным количеством противопоказаний. В состав «Анаферона» входят: активные компоненты – антитела к гамма интерферону человека и вспомогательные вещества – лактоза, целлюлоза и стеарат магния. Для получения большей концентрации активных компонентов и снижения массовой доли вспомогательных веществ препарата таблетку «Анаферона» предварительно растворяли в дистиллированной воде с последующей фильтрацией. Полученный раствор повторно отфильтровывали и вводили в гидрогель. При проведении эксперимента готовили разведения образцов гидрогеля от 1:10 до 1:500. Способность к гелеобразованию оценивали визуально по 5-балльной шкале.

В ходе эксперимента удалось получить гидрогель, набравший 2–3 балла по 5-балльной шкале устойчивости геля. В настоящее время проводится работа по увеличению концентрации активных компонентов «Анаферона» в растворе за счет увеличения количества растворенного препарата в неизменном объеме дистиллированной воды. В дальнейшем планируется провести ряд экспериментов с введением в систему незаменимых аминокислот и последующим изучением антибактериальных свойств полученного гидрогеля.

С. И. Золотухина, А. А. Котова, А. М. Супрун

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ ГЕПАРИНА С АСПАРАГИНОМ И АСПАРАГИНОВОЙ КИСЛОТОЙ И ИХ АНТИКОАГУЛЯНТНЫЕ СВОЙСТВА

Руководители: А.Н. Семенов, Л.С. Николаева

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Аспарагиновая кислота играет важную роль в обмене азотистых веществ, участвует в образовании пиримидиновых оснований, синтезе мочевины, присутствует в организме в составе белков и в свободном виде. Аспарагиновая кислота и аспарагин являются критически важными для роста и размножения лейкозных клеток при некоторых видах лимфолейкоза.

Гепарин – серосодержащий мукополисахарид, состоящий из глюкозамина, глюкуроновой кислоты и связанных с ними остатков серной кислоты; биополимер, мономерное звено которого образовано связанными в α -(1 \rightarrow 4) положении остатками L-идурановой кислоты (IdoA) и D-гликозамина (D-GlcN) – 4L-IdoA2S- α -4-D-GlcNS,6S- α -1.

С помощью методов рН-метрического титрования и математического моделирования нами было исследовано комплексообразование гепарина с аспарагиновой кислотой и аспарагином (амид аспарагиновой кислоты). Установлено, что высокомолекулярный гепарин в зависимости от величины рН раствора и соотношения компонентов может образовывать молекулярные комплексы с аспарагиновой кислотой и аспарагином различного состава и устойчивости. Антикоагулянтная активность идентифицированных молекулярных комплексов оценивали на основании данных о снижении равновесной концентрации ионов Ca^{2+} в системах вида $\text{Na}_4\text{Hep} - \text{L} - \text{Ca}^{2+} - \text{H}_2\text{O} - \text{NaCl}$ (L: Asn, Asp). Установлено, что в случае аспарагина и аспарагиновой кислоты образование смешаннолигандных комплексов осуществляется по единому механизму.

По своей антикоагулянтной активности молекулярные комплексы высокомолекулярного гепарина с аспарагином и аспарагиновой кислотой превосходят чистый гепарин в 1,7 и 3,5 раза соответственно. Это создает предпосылки для использования указанных комплексов в качестве перспективных антикоагулянтных средств.

Работа выполнена в рамках Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 гг. Номер конкурса НК-476П. Номер госконтракта П301.

П. О. Зоренко

НАНОСТРУКТУРИРОВАНИЕ БЫСТРОРЕЖУЩЕЙ СТАЛИ ПРИ ЛАЗЕРНОЙ ЗАКАЛКЕ С ОПЛАВЛЕНИЕМ ПОВЕРХНОСТИ

Руководитель Л.Е. Афанасьева

Тверской государственный технический университет
Кафедра технологии металлов и материаловедения

Недостатком высоколегированных инструментальных сталей является наличие первичных карбидов, снижающих стойкость режущих кромок инструмента и вызывающих преждевременный выход его из эксплуатации. Современными металлургическими технологиями не представляется возможным исключить образование первичных карбидов в сталях. Максимально возможного повышения эксплуатационных свойств быстрорежущих сталей можно добиться применением нанотехнологий. Лазерная закалка с оплавлением поверхности за счет высокоскоростной кристаллизации и наноструктурирования позволяет повысить эксплуатационные характеристики инструмента из быстрорежущих сталей.

Цель настоящей работы изучить строение зоны лазерного воздействия (ЗЛВ) быстрорежущей стали марки Р6М5.

Для проведения исследований и разработки технологии упрочнения инструмента из заготовки быстрорежущей стали марки Р6М5 вырезали образцы с использованием лазерного комплекса BySprint 3015 компании «Bystronic». Резку выполняли с продувкой азотом. Параметры резки подбирали экспериментально. Исследование микроструктуры стали проводилось с помощью оптического микроскопа МИМ-8 с цифровой видеокамерой. Микротвердость измеряли с помощью прибора ПМТ-3 согласно ГОСТ 2999-75. Морфологию поверхности реза и шероховатость изучали с помощью цифрового портативного измерителя шероховатости (профилометра) TR-200 и атомно-силового микроскопа Solver P47H.

В результате проведенных исследований изучено строение ЗЛВ. Она состоит из области закалки из жидкой фазы, закалки из твердой фазы, области отпуска. В оплавленной зоне из-за высоких температурных и концентрационных градиентов возникает высокая степень неравновесности жидкой фазы. Это обеспечивает диспергирование растущих кристаллитов. Показано, что быстрорежущая сталь приобретает уникальную структуру и повышенную твердость на глубину до 300 мкм.

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

Н. В. Ильяшенко, Ю. Г. Оленева

ИЗУЧЕНИЕ ФЕНОЛЬНОГО СОСТАВА ЗВЕРОБОЯ
ПРОДЫРЯВЛЕННОГО СПЕКТРАЛЬНЫМИ МЕТОДАМИ

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

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

В настоящее время становится актуальным использование средств из натурального растительного сырья. Зверобой продырявленный (*Hypericum perforatum* L.) широко используется в лечении заболеваний легких, а также при ревматизме, артритах, радикулите. Для исследования были взяты 5 образцов из участков с признаками антропогенного загрязнения г. Твери и готовая аптечная форма, выпускаемая ОАО «Красногорсклекарства», Московская обл. Фенольные соединения являются доминирующими в изучаемом сырье, на их долю приходится основной медицинский эффект. Существенный вклад в фармакологическую активность препаратов зверобоя вносят флавоноиды (в пересчете на рутин 2–5 %). Поэтому целью работы является определение содержания фенольных соединений в зависимости от места сбора растений, т.е. от влияния антропогенных факторов. В работе были использованы методы Фурье-ИК и УФ спектроскопии.

С помощью качественных реакций было подтверждено наличие в составе зверобоя продырявленного флавоноидов, катехинов, сапонинов, дубильных веществ. ИК спектральный анализ доказал зависимость химического состава образцов зверобоя от места произрастания. Регистрация спектров проведена на спектрометре «Equinox 55» фирмы «Bruker». Установлено, что основные различия в ИК спектрах образцов находятся в структурно-чувствительной области деформационных колебаний ($400\text{--}1750\text{ см}^{-1}$): $\nu\text{C=O}$, Амид I (C=O), Амид II, ($\delta\text{-NH}$), $\delta\text{-CH}_2\text{-}$, νSO_2 и связаны с разным содержанием веществ.

В УФ-спектрах спиртовых (70%) экстрактов зверобоя присутствуют две полосы поглощения с максимумами $\lambda_{\text{max}} = 270$ и 358 нм, характерные для соединений фенольного ряда. Выбор рутина в качестве рабочего стандарта обусловлен наличием в УФ спектре максимумов поглощения $\lambda_{\text{max}} = 257$ и 358 нм, т.е. его доминированием в количественном отношении в экстракте. Данные ИК и УФ спектроскопии дополняют друг друга при изучении влияния антропогенных факторов на химический состав зверобоя, что имеет значение для разработки методики количественного определения фенольных соединений.

Работа выполнена при поддержке гранта Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере по программе «Участник молодежного научно-инновационного конкурса» («У.М.Н.И.К.») № проекта 140.08.

Н. В. Ильяшенко, И. П. Шевчук, Г. С. Куликов

СПЕКТРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ИЗУЧЕНИИ ИЗМЕНЕНИЙ
ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА *VIDENS TRIPARTITA* L.
ПОД ДЕЙСТВИЕМ АНТРОПОГЕННЫХ ФАКТОРОВ

Руководитель П.М.Пахомов

Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

Оценка степени антропогенного воздействия на биологические системы, в том числе и на растения, имеет важное прикладное значение в области медицины и фармакологии. На территории Тверской области произрастают более 100 видов высших растений, используемых для приготовления лекарственных препаратов. Одним из таких растений является *Bidens tripartita* L. (череда трехраздельная), обладающая рядом свойств: седативными, желчегонными, антигистаминными и ранозаживляющими. В качестве объектов исследования были выбраны 4 образца из узлов экологической напряженности г. Твери (участки с признаками антропогенного загрязнения) и 1 образец готовой аптечной формы «Череды трава», выпускаемой ЗАО Фирма «Здоровье», г. Москва. Через корневую систему в растение поступают различные вещества из окружающей среды, которые они способны аккумулировать в своих тканях. Поэтому лекарственное сырье на фармацевтическом производстве проходит контроль. В работе был проведен качественный анализ с помощью соответствующих реакций на фенольные соединения, ИК и УФ спектральные исследования растительного сырья. Для исследования состава и определения количества фенольных соединений в растениях использовали комплексные методы, включающие экстракцию, комплексообразование с $AlCl_3$, спектральный анализ стандартных образцов фенольных соединений (кофеин, кверцетин, арбутин, рутин, галловая кислота, гидрохинон, резорцин, пирогаллол, пирокатехин, танин). С помощью качественных реакций и спектральных данных было подтверждено наличие в составе череды флавоноидов, катехинов, сапонинов, дубильных веществ.

Работа выполнена при поддержке гранта Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере по программе «Участник Молодежного Научно-инновационного Конкурса» («У.М.Н.И.К.»).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Жукова О.Л., Абрамов А.А., Даргаева Т.Д., Маркарян А.А. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2006. Т.47, №5. С. 342–345.
2. Ильяшенко Н.В., Ильяшенко В.Д., Дементьева С.М., Хижняк С.Д., Пахомов П.М. // Вестн. ТвГУ. Сер. Биология и экология. 2009. Вып. 13. С. 211 – 221.

О. С. Ионина, Р. А. Кондратьев

ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РЕАКТОРА-ФИБРИДАТОРА В ПРОЦЕССЕ СИНТЕЗА ПОЛИАМИДА-6И

Руководители: В.А. Никифоров, Е.И. Лагусева

Тверской государственной технический университет
Кафедра технологии полимерных материалов

Отличительная особенность метода газожидкостной поликонденсации (ГЖПК) – совмещение химического процесса полиамидирования и физического процесса формования полиамидов различной морфологии в одном аппарате – реакторе-фибридаторе, который имеет высокую производительность и компактен.

Одной из актуальных задач разработки технологии полиамидов методом ГЖПК является оптимизация определяющих размеров реактора-фибридатора. Известно, что процесс ГЖПК протекает в интенсивном пенном режиме, который определяется параметром «линейная скорость газовой фазы» (W_2). Однако этот параметр неприменим как критерий проектирования реакторных устройств, имеющих разные диаметры и конструкцию ввода газовой фазы. Установлено, что критериями оптимизации могут служить критерии Рейнольдса (Re) и Фруда (Fr).

Ранее* были выявлены зависимости выхода полигексаметилентерефталата (ϵ_{XA}), приведённой вязкости ($\eta_{прив}$) и степени помола от критериев Re и Fr в реакторах-фибридаторах различного диаметра и конструкции.

При синтезе полигексаметиленизофталата в двухступенчатых конфузorno-диффузорных реакторах-фибридаторах диаметром 16 и 50 мм при разном мольном соотношении мономеров жидкой и газовой фаз, полученные зависимости ϵ_{XA} , $\eta_{прив} = f(Re_2)$ и ϵ_{XA} , $\eta_{прив} = f(Fr_2)$ $n_{ДА}/n_{XA}$ имеют вид параболы. Области оптимальных значений зависят как от диаметра реактора-фибридатора d , так и от мольного соотношения мономеров: при $n_{ДА}/n_{XA} = 1,76-1,80$ и $d = 16$ мм $Re = 7000-8000$, $Fr = 13000-17000$; при $n_{ДА}/n_{XA} = 1,15-1,50$ и $d = 50$ мм $Re = 13000-18000$, $Fr = 7000-11000$.

Показано, что найденные критериальные зависимости позволяют моделировать процессы газожидкостной поликонденсации при синтезе полиамида-6И, протекающего в интенсивном пенном режиме, и по заданному диаметру аппарата с учётом его конструктивных особенностей определять оптимальную линейную скорость и производительность установки в целом.

* Никифоров В.А., Маркова В.А.// Физико-химия полимеров. Тверь, 1997. Вып. 3. С.72–76.

Е. В. Козлова

ТЕРМОХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ Ni(II)
И Ag(I) С АНТИБИОТИКАМИ ПЕНИЦИЛЛИНОВОГО РЯДА В
РАСТВОРЕ

Руководитель Т.Б.Хоченкова

Ивановский государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Антибиотики пенициллинового ряда (ампициллин, амоксициллин и др.) широко применяются при лечении многих инфекционных заболеваний, вызванных грамотрицательными микроорганизмами. Они относительно недороги и малотоксичны. Однако координационная химия пенициллинов изучена недостаточно подробно, а термодинамические параметры процессов комплексообразования с их участием остаются практически неизученными. Целью исследования является определение термодинамических характеристик реакций комплексообразования ампициллина и амоксициллина с катионами переходных металлов в растворе.

Было проведено компьютерное моделирование систем Amx^- , $\text{Amp}^- - \text{H}^+$ и Ni^{2+} , $\text{Ag}^+ - \text{Amp}^-$, $\text{Amx}^- - \text{H}^+$ по программе RRSU, которое позволило подобрать методики калориметрических измерений тепловых эффектов кислотной диссоциации антибиотиков и комплексообразования.

В ходе работы были измерены тепловые эффекты смешения водных растворов нитратов Ni(II) и Ag(I) с щелочными растворами ампициллина и амоксициллина при 25°C и ионной силе 0,1 (KNO_3). Измерения тепловых эффектов проводили на ампульном калориметре смешения с изотермической оболочкой и термистерным датчиком температуры. Также были измерены теплоты смешения раствора азотной кислоты, точную навеску которой помещали в стеклянные ампулы, с растворами натриевых солей ампициллина и амоксициллина. Тепловые эффекты реакций рассчитывались по программе HEAT [1]. Значения констант устойчивости моно- и бис-комплексов, определенные в тех же условиях, были взяты по данным [2]. Были рассчитаны полные термодинамические характеристики реакций образования комплексов состава MAmp_i , $i = 1, 2$ ($\text{M} = \text{Ni}^{2+}, \text{Ag}^+$). Сравнительный анализ термодинамических характеристик изученных и ряда модельных процессов позволяет предположить, что координация катиона Ni^{2+} осуществляется с участием аминогруппы ампициллина, а в координации катиона Ag^+ наряду с $-\text{NH}_2$ группой принимает участие и донорный атом S тиазолидиновой группы. В дальнейшем планируется изучение термодинамики комплексообразования с участием антибиотиков цефалоспоринового ряда.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бородин В.А., Васильев В.П., Козловский Е.В. Математические задачи химической термодинамики. Новосибирск; 1985. С.219.
2. Алексеев В.Г. // Дис. ... д-ра. хим. наук. Тверь: ТГУ, 2009. С. 225

Э. Р. Козолетов

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ПОКАЗАТЕЛЕЙ КАЧЕСТВА СЛИВОЧНОГО МАСЛА «КРЕСТЬЯНСКОЕ»

Руководитель М.Н. Брославская

Тверской государственной университет
Кафедра физико-химической экспертизы биоорганических соединений

Спрос на сливочное масло способствует росту фальсификации и возникает необходимость проверки его качества.

Цель работы – изучение сравнительных характеристик показателей качества сливочного масла, реализуемого в торговых сетях г. Твери.

Объект исследования – масло сливочное «Крестьянское» пяти разных производителей: ЗАО «Озерецкий молочный комбинат», ОАО «Красагромол», ФГУП «Учебно-опытный молочный завод», ОАО «Вим-Биль-Данн», ООО «Дмитрогорский молочный завод».

Для достижения поставленной цели решены следующие задачи:

- определена массовая доля влаги по ГОСТ 3626-73, 73 высушиванием навески масла при нагревании его в алюминиевом стакане до конечного испарения воды и определением потери массы по отношению к навеске;
- определена титруемая кислотность молочной плазмы и жировой фазы сливочного масла по ГОСТ 3624-92.

Физико-химические показатели качества в испытываемых образцах

Физико-химические показатели	Значения по ГОСТ Р 52969-2008	ЗАО «Озерецкий молочный комбинат»	ОАО «Красагромол»	ФГУП «Учебно-опытный молочный завод»	ОАО «Вим-Биль-Данн»	ООО «Дмитрогорский молочный завод»
Массовая доля влаги, %	≤ 25 %	35,14	22,05	24,21	24,43	21,05
Титр. кис-ть жировой фазы, °К	≤ 4,0 °К	1,8	2,0	2,4	1,0	2,2
Титруемая кис-ть мол. плазмы, °Т	≤ 26 °Т	12	25	15	15	26

Выявлены факты фальсификации: получены данные, свидетельствующие о том, что образец масла производителя ЗАО «Озерецкий молочный комбинат» не соответствует требованиям ГОСТ Р 52969-2008 «Масло сливочное. Технические условия».

В. Н. Колобков

ТЕХНОЛОГИЯ ВОЗДЕЛЫВАНИЯ СОРТОВЫХ СМЕСЕЙ ЯРОВОЙ ПШЕНИЦЫ В УСЛОВИЯХ ВЕРХНЕВОЛЖЬЯ

Руководитель: З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра общего земледелия и растениеводства

Эффективность хозяйствования на земле в условиях рынка требует применения в растениеводстве наиболее адаптированных к агроэкологическим условиям региона видов и сортов полевых культур, технологий их возделывании. Для Верхневолжья одной из таких культур является яровая пшеница. В повышении рентабельности её производства и продовольственной ценности большой интерес представляет возделывание в сортосмешанных посевах (блендах).

В связи с этим нами в 2009 и 2010 гг. проведены комплексные исследования в многофакторном полевом опыте на дерново-среднеподзолистой остаточной карбонатной глееватой почве на морене, супесчаной по гранулометрическому составу. Фактор А – фоны минерального питания, рассчитанные на урожайность: 1 – 25ц/га (урожайность в производстве, УП); 2 – 35 ц/га (ДВУ по биогидротермическому потенциалу продуктивности). Фактор В – чистый посев одного сорта; 2 – чистый посев другого сорта; 3 – смесь сортов (в %): 50+50; 4 - 25+75; 5 - 75+25. Объекты исследований, сорта – яровой пшеницы – Курская и Иволга.

В результате выявлено, что более урожайным был сорт Иволга, прибавка урожая зерна к сорту Курская в среднем по фонам составила 4,4 ц/га (19,9%). Смешанные посевы сортов (бленды) сформировали более высокую урожайность, чем чистые. На фоне 1 лучшим соотношением сортов является 75% Курская + 25% Иволга, где получена прибавка урожая зерна к чистому посеву сорта Курская – 8,4 ц/га (46,7%), сорта Иволга – 2,7 ц/га (11,4%). На фоне 2 более продуктивным оказался смешанный посев в соотношении 25% Курская + 75% Иволга, где урожайность составила 34,8 ц/га, а прибавка к сорту Курская – 8,7 ц/га (32,2%), к сорту Иволга – 5,4 ц/га (18,4%).

Выявлено, что посев смеси сортов улучшает качество зерна пшеницы, а именно повышает содержание сырой клейковины и ее качество. Более высокий процент клейковины на обоих фонах получен в смеси сортов 50% Курская + 50% Иволга, соответственно 24,1 и 29,4%. Качество клейковины относилось к I группе по ИДК.

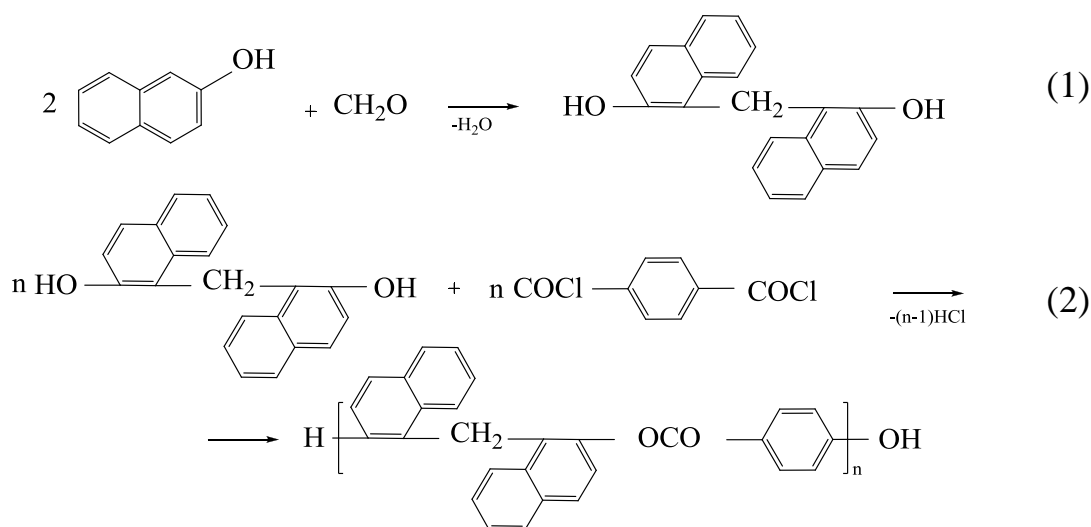
Таким образом, в технологии производства зерна яровой пшеницы наиболее выгодно выращивать её в блендах, которые обеспечивают получение дополнительно до 8,7 ц/га; увеличивают условно-чистый доход в лучшем варианте в 2 раза, а уровень рентабельности – на 30,8%.

АРОМАТИЧЕСКИЕ ПОЛИЭФИРЫ НА ОСНОВЕ БИСНАФТОЛА-β

Руководитель Б.К. Крупцов

Тверской государственный технический университет
Кафедра технологии полимерных материалов

Проведены исследования по получению полиэфиров (полиарилатов) на основе биснафтола-β (продукт конденсации β-нафтола с формальдегидом, реакция 1) и дихлорангирида терефталевой кислоты (ДХАТФК) по реакции 2:



Цель работы – возможность получения полимеров с повышенными термическими характеристиками и повышенной растворимостью за счёт введения в макромолекулу крупных ароматических (нафталиновых) фрагментов. Методики получения и физико-технических испытаний аналогичны методикам получения и испытаний промышленного полиарилата Д-2 (продукт межфазной поликонденсации дифенилолпропана с ДХАТФК). Предварительные сравнительные испытания показали, что термостойкость полимера на основе биснафтола-β выше на 25–30°C. Заметного эффекта на растворимость полимера не выявлено.

М. Б. Коняева

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ГИДРОФИЛЬНОСТИ МАТРИЦЫ И СПОСОБА
ВОССТАНОВЛЕНИЯ ПРЕКУРСОРА
ПОЛИМЕРСТАБИЛИЗИРОВАННЫХ ПЛАТИНОВЫХ
КАТАЛИЗАТОРОВ ГИДРИРОВАНИЯ АКТИВИРОВАННЫХ КЕТОНОВ
НА ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНОСТЬ ПРОЦЕССА

Руководитель А.В. Быков

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

Процессы энантиоселективного каталитического гидрирования используются в производстве душистых и биологически активных добавок, а также в синтезе лекарственных препаратов и витаминов.

В настоящее время перспективными носителями каталитических систем являются сверхсшитые полимерные сетки.

Сверхсшитые полимеры обладают развитой удельной поверхностью, более $1000 \text{ м}^2/\text{г}$, значительным объемом пор ($0.3\text{--}0.5 \text{ см}^3/\text{г}$) и их малыми размерами ($3\text{--}30 \text{ \AA}$) в связи с этим являются хорошими сорбентами, что определяет основную область применения таких веществ. Узкое распределение пор по размерам, химическая и механическая устойчивость таких полимеров открывают еще одну возможность их использования в качестве структурированных матриц, обеспечивающих контроль за ростом формируемых в порах частиц, что обеспечивает возможность применения сверхсшитых сеток в качестве носителей в катализе.

Настоящая работа посвящена созданию наноструктурированных катализаторов энантиоселективного гидрирования на основе платины, стабилизированной в сверхсшитом полистироле; изучению влияния особенностей полимерной матрицы на свойства получаемых на ее основе каталитических систем, свойства которых исследовались в модельной реакции энантиоселективного гидрирования кетонов на примере этилпирувата.

В ходе исследования показано, что на основе матрицы сверхсшитого полистирола можно получить высокоэнантиоселективные катализаторы, а также установлено, что гидрофильность полимерной матрицы оказывает существенное влияние на энантиоселективность процесса.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (проект П 922).

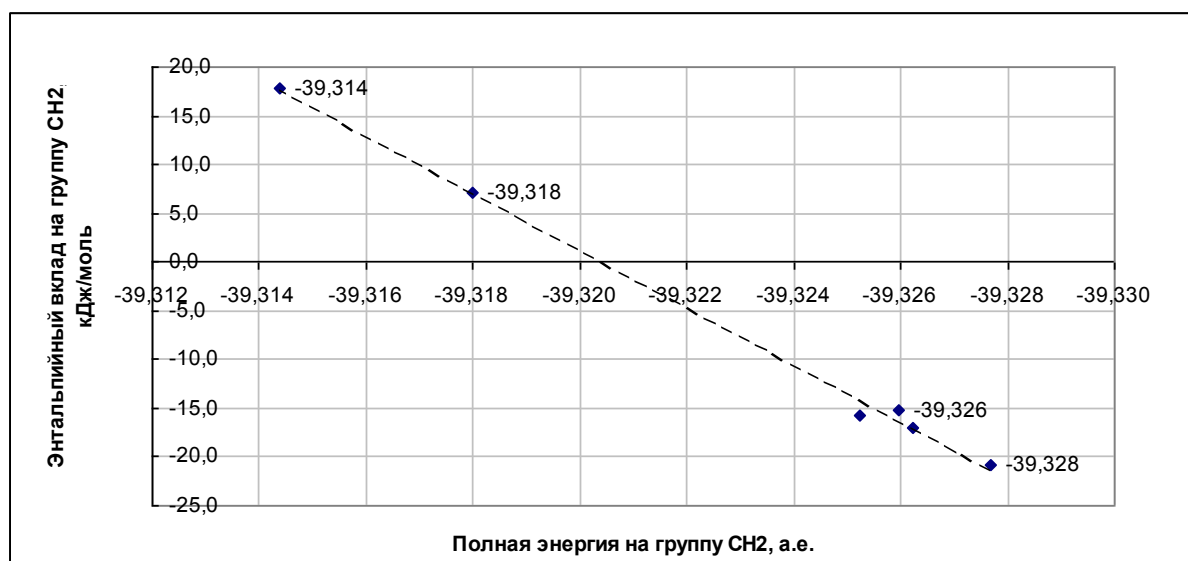
П. А. Коробейников

КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОСВЯЗИ
СТРОЕНИЯ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЦИКЛИЧЕСКИХ
УГЛЕВОДОРОДОВ

Руководитель Ю.Д. Орлов

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

В термодинамике органических соединений большое распространение получили феноменологические методы, и в частности аддитивно-групповые, в которых величина свойства молекулы рассчитывается как сумма парциальных вкладов для отдельных фрагментов. Нашей задачей является нахождение взаимосвязи физических характеристик фрагментов молекулы, рассчитанной в рамках квантовой теории атомов в молекуле (QTAИМ) и парциальных вкладов, использованных в аддитивных полуэмпирических подходах. На начальном этапе для указанного исследования наилучшим образом подходят циклические углеводороды, содержащие с точки зрения полуэмпирики одни и те же группы CH_2 , которые тем не менее заметно различаются по своим энергетическим характеристикам. Это различие в рамках аддитивно-группового подхода называется напряжением цикла и не имеет под собой ясного физического толкования. Нами исследованы корреляции между QTAИМ-энергиями групп CH_2 (E), рассчитанные квантовыми методами, и их парциальными энтальпийными вкладами (H). Результаты приведены на диаграмме, показывающей наличие линейной корреляции. Этот вывод указывает на возможность пересчета энтальпийных вкладов групп по данным квантовомеханических расчетов.



А. А. Котова, А. М. Супрун

ПОИСК ПОДХОДОВ К РАЗРАБОТКЕ МЕТОДОВ ОЦЕНКИ КАЧЕСТВА ТЕРМООБРАБОТАННОГО ПОЛИАКРИЛОНИТРИЛЬНОГО ВОЛОКНА

Руководитель: Пахомов П.М., Семенов А.Н.

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Дальнейшее развитие техники неотъемлемо связано с разработкой и производством новых полимерных композиционных материалов, преимущество которых перед традиционными в ряде случаев неоспоримо. Потребность промышленного производства в сверхпрочных углеродных волокнах крайне высока, следовательно, исследования, направленные на разработку методов получения углеродных монокристаллов, обладающих повышенной прочностью, являются весьма актуальными.

Основной целью исследования являются разработка и применение комплекса методов (помимо традиционных физико-механических) оценки качества полиакрилонитрильных волокон – прекурсоров для получения термоокисленного полиакрилонитрильного волокна, а далее и термоокисленного полиакрилонитрильного волокна.

Весьма заманчиво использование техники ИК спектроскопии для характеристики интенсивности и глубины химических процессов, протекающих в полиакрилонитриле при его нагревании. Имеющиеся на сегодняшний день данные весьма неоднозначны и не позволяют в полной мере трактовать механизм термоокисления. Нами проведена серия модельных экспериментов по отжигу тонких пленок полиакрилонитрила и его сополимера с метилметакрилатом. Построены зависимости, позволяющие оценить динамику химических превращений полиакрилонитрила и его сополимера в зависимости от температурного режима. Предпринята попытка соотнести результаты ИК спектроскопического метода с результатами других физико-химических и физико-механических методов. Кроме того, процесс термоокисления образцов волокон исследовали с помощью методов ДСК, термогравиметрии и масс-спектрометрии (идентификация продуктов термолиза).

Ю. А. Кузьмич

ВЛИЯНИЕ ЩЕЛОЧНОЙ ОБРАБОТКИ УДОБРЕНИЙ НА ИЗМЕНЕНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ПОЧВЫ И ЕЕ ПРОДУКТИВНОСТЬ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Исследовали влияние дисперсности органических субстратов (сапропеля, торфа, КМН) на изменение органического вещества, питательного режима дерново-подзолистой почвы и оказываемое ими влияние на урожайность опытной культуры. Все удобрения заметно отличались по своему химическому составу и реакции. Больше количество органического вещества содержалось в сапропеле молотом (42,3%), калия и фосфора – в КМН.

Удобрительная ценность органических материалов в почве связана как с содержанием в них отдельных элементов питания для растений, так и с интенсивностью их трансформации. Для увеличения скорости разложения органических веществ удобрений мы применяли их щелочную обработку. С этой целью использовали 0,1N раствор NaOH. Вышеназванные три органических субстрата размалывали и просеивали через сито с диаметром отверстий 0,25см. Затем брали фракции их обычного физического состояния, а также просеянные и использовали для закладки мелкоделяночного полевого опыта. Схема опыта для каждого субстрата была следующей:

1-й вариант – контроль; 2-й субстрат – просеянный через сито 0,25 мм; 3-й субстрат – обычный; 4-й субстрат – просеянный через 0,25 мм со щелочью; 5-й субстрат – обычный со щелочью. Повторность в опыте трехкратная, размер делянок 1м², опытная культура – картофель.

В течение вегетационного периода на опыте отбирались почвенные образцы, в которых определяли питательный режим, содержание гумуса и реакцию почвы. На фоне всех удобренных вариантов выявлено увеличение количества гумуса на 0,07–0,24%, при этом его максимальное возрастание наблюдалось в почве делянок с торфом. Щелочная обработка субстратов способствовала возрастанию их минерализации и меньшему накоплению в почве перегноя. Более полный питательный режим выявлен на фоне внесенного КМН, а обработка щелочью обеспечила повышенное содержание подвижных форм элементов на всех вариантах опыта. Более высокая урожайность клубней картофеля получена на вариантах с внесением КМН (3,1–3,9 кг/м²). На втором месте по эффективности оказался торф, урожайность составила 2,3–2,9 кг/м² и на третьем – сапрпель с 2,0–2,4 кг/м².

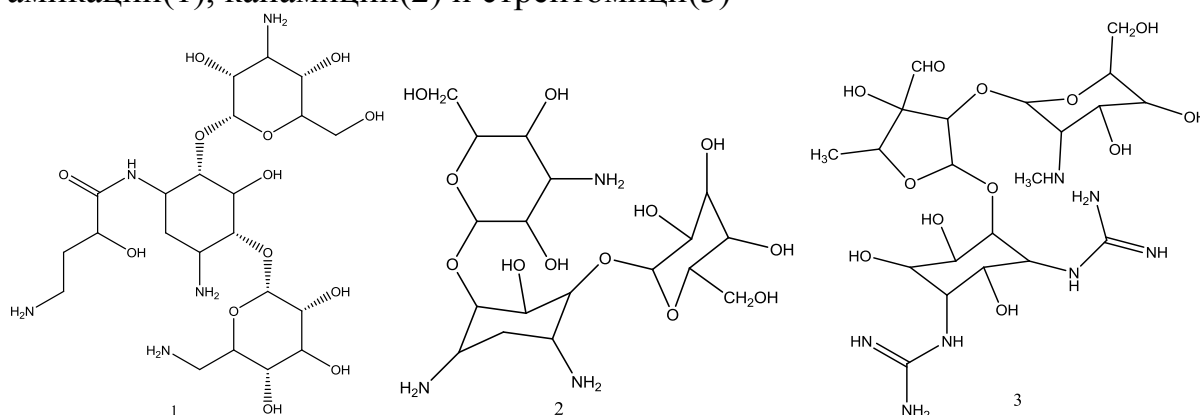
Ю. С. Кулакова, И. С. Цветкова

ИОННЫЕ РАВНОВЕСИЯ В РАСТВОРАХ
НЕКОТОРЫХ АМИНОГЛИКОЗИДОВ

Руководитель С. В. Лапшин

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Постоянно возрастающее число применяемых в медицине антибиотиков делает актуальным изучение их равновесий в растворах. Наиболее применяемыми антибиотиками являются аминогликозиды: амикацин(1), канамицин(2) и стрептомицин(3)



Методом рН-метрического титрования были проведены исследования ионных равновесий амикацина, канамицина, стрептомицина на фоне хлорида и нитрата калия различной концентрации. Для выполнения работы использовали сульфат антибиотика (порошок для инъекций). Титрование проводили растворами NaOH, HNO₃ и HCl точной концентрации.

Математическая обработка рН-метрических данных была проведена с использованием специализированной программы расчета химических равновесий New DALSFEEK (КСМ Soft, 2000 г.). Критерием правильности выбранной модели служила сходимость экспериментальной кривой титрования с кривой, полученной программой в ходе расчета. Получены кривые титрования антибиотиков и их диаграммы распределения. Рассчитаны концентрационные константы диссоциации антибиотиков.

Работа выполнена в рамках Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009 – 2013 гг.». Номер конкурса НК-595(2).

Ю. С. Кулакова

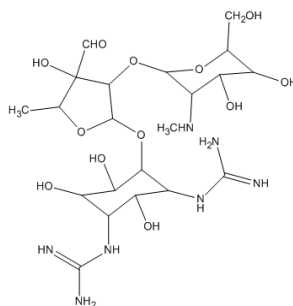
ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКОЕ И СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ НЕКОТОРЫХ ИОНОВ МЕТАЛЛОВ СО СТРЕПТОМИЦИНОМ

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, прежде всего, присутствующих в биологических системах.

Наиболее применяемыми антибиотиками являются аминогликозиды, и в частности стрептомицин:



Методом рН-метрического титрования было проведено исследование комплексообразование ионов Cu^{2+} , Zn^{2+} , Cd^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} , Mn^{2+} , Al^{3+} , Fe^{3+} со стрептомицином на фоне нитрата калия 0,1М при температуре 25,0⁰С. Для выполнения работы использовали сульфат стрептомицина (порошок для инъекций). Титрование проводили раствором NaOH точной концентрации.

Математическая обработка рН-метрических данных была проведена с использованием специализированной программы расчета химических равновесий New DALSFEK (КСМ Soft, 2000 г.). Критерием правильности выбранной модели служила сходимость экспериментальной кривой титрования с кривой, полученной программой в ходе расчета. Рассчитаны константы устойчивости для каждого комплексообразователя.

Также в данной работе для изучения комплексообразования ионов меди(II), никеля(II) и кобальта(II) со стрептомицином были определены спектрофотометрические характеристики. Их взаимодействие со стрептомицином приводит к смещению максимума поглощения в коротковолновую область. Это свидетельствует о том, что стрептомицин – лиганд сильного поля. Определено, что оптимальным соотношением Me:L является 1:2.

Работа выполнена в рамках Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009 – 2013 гг.». Номер конкурса НК-595(2).

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ ТЕТРАХЛОРИДА ТИТАНА С АКРИЛОНИТРИЛОМ В СИНТЕЗЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ НЕФТЕПОЛИМЕРНЫХ СМОЛ

Руководитель Л.И. Бондалетова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Кафедра технологии основного органического синтеза и высокомолекулярных
соединений

Синтетические аналоги некоторых натуральных продуктов – растительных масел или древесных смол – представляют собой углеводородные нефтеполимерные смолы, которые наряду с достоинствами обладают и некоторыми недостатками. С целью улучшения физико-механических свойств нефтеполимерных смол и расширения областей их использования проводят направленную химическую модификацию нефтеполимерных смол α - и β -ненасыщенными карбоновыми кислотами, их эфирами и ангидридами. С этой же целью применяют метод получения смол, модифицированных непосредственно в процессе синтеза.

Ранее была показана возможность радикальной сополимеризации жидких продуктов пиролиза углеводородного сырья с акрилонитрилом (АН). Также известно о получении модифицированных смол сополимеризацией фракции пиролиза с акриловыми мономерами катионной сополимеризацией, при этом сомомеры участвуют в процессе в виде комплекса с тетрахлоридом титана (ТХТ).

Цель работы – исследовать возможность полимеризации мономеров фракции C_9 жидких продуктов пиролиза углеводородного сырья под действием комплексов акрилонитрила с тетрахлоридом титана.

При добавлении к акрилонитрилу тетрахлорида титана происходит образование окрашенных соединений, в ЯМР 1H -спектрах которых наблюдается смещение в слабое поле сигналов олефиновых протонов акрилонитрила, что подтверждает образование комплексов. Смещение сигналов протонов в слабое поле для комплекса АН : ТХТ эквимольного состава более значительно по сравнению с комплексом состава 2 : 1 (мольн.).

Полимеризация мономеров фракции C_9 жидких продуктов пиролиза углеводородного сырья под действием полученных комплексов приводит к получению модифицированных смол, содержащих звенья акрилонитрила, с выходом 50 – 65 % в течение 20 – 25 мин.

А. В. Лебедев, А. А. Репин

АЛГОРИТМ АВТОМАТИЗАЦИИ МЕТОДА МАКРОИКРЕМЕНТИРОВАНИЯ ДЛЯ НЕЦИКЛИЧЕСКИХ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ

Руководитель: Ю.Д. Орлов

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

Развитие химических технологий требует накопления знаний о термодинамических свойствах соединений. Это требует проведения дорогостоящих прецизионных экспериментальных исследований. Для многих классов органических соединений уже накоплен значительный объем термодинамической информации. Для них значения величин термодинамических характеристик новых соединений и верификацию имеющихся количественных данных можно получить на основе метода макро-инкрементирования.

Суть данного метода заключается в следующем: исходная молекула представляется в виде суммы молекул-инкрементов, которые являются фрагментами исходной, и разности молекулы-декремента, включающей избыточные элементы (атомы и связи), имеющиеся в полученной сумме молекул по сравнению с исходной. Таким образом, энтальпия образования исходной молекулы находится как сумма энтальпий образования молекул-инкрементов и разности энтальпии образования молекулы-декремента.

Авторами предлагается алгоритм автоматизации метода макро-инкрементирования для нециклических органических молекул.

1. Создаем список тех связей, которые можно «разорвать», для этого анализируем каждую связь из таблицы связей с условием, что оба ее атома имеют более одной связи.
2. Выбираем связь из этого списка (см. пункт 1).
3. Переходим к 1 атому выбранной связи и удаляем все его остальные связи.
4. Выделяем молекулу-инкремент от 1-го атома с помощью *алгоритма «поиска в ширину»*, свободные валентности дополняем атомами водорода.
5. Переходим ко 2 атому выбранной связи и удаляем все его остальные связи.
6. Ищем молекулу-инкремент от 2-го атома с помощью *алгоритма «поиска в ширину»*, свободные валентности дополняем водородом.
7. Создаем молекулу-декремент для компенсации брутто суммы макро-инкрементов, атомы выбранной связи дополняем водородом.
8. Проверяем наличие молекул инкрементов и декремента и в базе данных, если они существуют, то продолжаем алгоритм, если нет, то возвращаемся к пункту 2.
9. Находим энтальпию образования первоначальной молекулы, суммируя энтальпии образования молекул-инкрементов и вычитая молекулы-декремента.

Алгоритм реализован в среде программирования Qt с использованием базы термодинамических данных*.

*Репин А.А. // Диссертация канд. физ.-мат. наук. Тверь, 2004.

Е. С. Лившиц

ВЛИЯНИЕ СТЕПЕНИ ОКИСЛЕННОСТИ ПОЛИАНИЛИНА НА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ГАЗОВОГО СЕНСОРА НА ЕГО ОСНОВЕ

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Ранее было показано, что полианилин является эффективным веществом для создания резистивного газового сенсора с откликом на аммиак. В то же время известно, что полианилин может иметь различную степень окисленности. Вероятно, этот факт может влиять на чувствительность газового сенсора. Поэтому целью настоящей работы была оценка чувствительности полианилинового газового сенсора с откликом на аммиак при различной степени окисленности последнего.

Для изменения степени окисленности мы помещали изготовленный сенсор в 0,1 М раствор HBr и устанавливали необходимый потенциал палладиевых электродов, на которые нанесена пленка полианилина. Потенциал варьировали от 0 В до 0,6 В. При этом мы визуально наблюдали изменение интенсивности окраски полианилина, что соответствует литературным данным. Для каждой степени окисленности были проведены измерения чувствительности сенсора к аммиаку. При этом было обнаружено, что оптимальная степень получается при потенциале от 0 В до 0,2 В относительно хлорсеребряного электрода. При потенциале больше чем 0,4 В наблюдается дрейф электросопротивления электрода.

Таким образом, можно считать, что наиболее устойчивым в работе полианилиновым газовым сенсором с откликом на аммиак является сенсор, полученный при потенциале 0 – 0,2 В.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Горелов И.П., Рясенский С.С. // Сенсор. 2004. №1. С. 2-14.
2. Тарасевич М.Р., Орлов Ф.Б., Школьников Е.И. Электрохимия полимеров. М.: Наука, 1990.

Л. В. Лисавина

СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА ПОЛИМЕРНОГО КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ ПАБИ С ДОБАВЛЕНИЕМ МАГНИТНОГО ПОРОШКА ФЕРРИТА БАРИЯ

Руководитель П. М. Пахомов

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

В настоящее время все более широкое применение в различных отраслях науки и техники приобретают материалы, обладающие достаточной гибкостью, высокой термостойкостью и магнитными свойствами. В связи с этим возникла идея получить новый композиционный материал на основе матрицы из термостойкого полимера полиамидбензимидазола (ПАБИ) с добавлением в него в качестве наполнителя магнитного порошка феррита бария.

Непосредственная цель настоящей работы заключалась в получении новых термостойких полимерных композитов с высокими магнитными характеристиками и выяснении влияния концентрации наполнителя на строение и свойства материала.

Образцы получали формованием пленок из раствора термостойкого полимера полиамидбензимидазола в диметилацетамиде с добавлением 4% хлорида лития по массе. Порошок феррита бария различных концентраций (по массе) добавляли непосредственно в раствор ПАБИ, тщательно перемешивали и подвергали действию ультразвука для достижения однородного распределения частиц наполнителя в полимерной матрице. Полученные пленки высушивали в сушильном шкафу при температуре 100-150^oС в течение 1 часа.

Строение термостойких композитов изучали методами оптической микроскопии на приборе «Hyperion-1000» и ИК спектроскопии – на Фурье-ИК спектрометре «Equinox 55» фирмы Bruker. На основе спектров рассеяния по методике, разработанной в лаборатории спектроскопии ТвГУ, оценивали степень наполнения образца, средний размер агрегатов из частиц наполнителя и их распределение по размерам. Независимо из оптических микроснимков образцов композитных пленок с помощью программы «Image Pro» также оценивали средний размер агрегатов из частиц наполнителя и их распределение по размерам.

Анализ ИК спектров и оптических микроснимков показал, что с применением ультразвуковой обработки средний размер агрегатов из частиц магнитного наполнителя уменьшается с 3 мкм до 5 микрон, что является важным фактором при создании однородных гибких магнитов.

А. Ю. Лутковская, И. С. Вахнина

ОБ ИЗУЧЕНИИ КАЧЕСТВА ЖИЗНЕННО ВАЖНЫХ ДЛЯ НАСЕЛЕНИЯ ПРОДУКТОВ ПИТАНИЯ

Руководитель Г.П. Лапина

Тверской государственной университет
Кафедра физико-химической экспертизы биоорганических соединений

По заданию политического движения «Единая Россия» были исследованы 11 образцов следующих жизненно важных для населения продуктов питания: Хлеб «Губернский», батон «Подмосковный», батон с отрубями, мармелад «Ударница», соль пищевая каменная, мука хлебопекарная высший сорт, гречневая крупа, рожки рифленые, крекеры луковые, масло сливочное и масло сливочное крестьянское.

Использовались следующие современные физико-химические подходы и методы:

- определение рН раствора электрометрическим методом.
- определение количества белков с использованием метода биуретовой реакции и др.

Обнаружены значительные несоответствия в параметрах маркировки всех изученных образцов продуктов питания, а также физико-химических показателей качества. Составлены соответствующее экспертное заключение и акт проведенной экспертизы, который отправлен в Роспотребнадзор.

А. Ю. Лутковская

НОВЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ РЕГЛАМЕНТ НА КОНДИТЕРСКИЕ ИЗДЕЛИЯ (МАРМЕЛАД) И ЕГО ВЛИЯНИЕ НА КАЧЕСТВО

Руководитель М.Н. Брославская

Тверской государственной университет

Кафедра физико-химической экспертизы биоорганических соединений

Мармелад – кондитерское изделие студнеобразной структуры, изготовленное из фруктово-ягодного пюре или водного раствора желирующих веществ, сахара и других компонентов.

Цель работы – сравнительная характеристика показателей качества фруктово-ягодного мармелада в соответствии с новым техническим регламентом на кондитерские изделия (проект № 469750-4).

Объектами исследования были выбраны фруктово-ягодный пластовый мармелад трех производителей: ООО «Коломчаночка – 2», Московская область, г. Коломна; ОАО «Красный пищевик», Республика Белоруссия, г. Бобруйск; ЗАО «Кондитерский комбинат “Озерский сувенир”», Московская область, г. Озёры.

Результаты исследования фруктово-ягодного мармелада

Производители	Физико-химические показатели (ГОСТ 6442-89)							
	Массовая доля влаги, %		Массовая доля общей сернистой кислоты, %		Кислотность, °Т		Массовая доля редуцирующих веществ, %	
	ГОСТ	Факт	ГОСТ	Факт	ГОСТ	Факт	ГОСТ	Факт
ООО «Коломчаночка – 2»	29,00-33,00	30,61	не более 0,010	0,00 9	4,5-18,0	7,0	не более 40,00	18,36
ОАО «Красный пищевик»		31,20		0,00 5		9,0		20,17
ЗАО «Озерский сувенир»		29,64		0,00 7		6,0		17,24

В результате проведенной товароведной экспертизы установлено, что из представленных образцов кислотность мармелада яблочного ОАО «Красный пищевик» составляет 9,0 °Т, содержание редуцирующих веществ высокое – 20,174. Это способствует снижению степени кристаллизации сахарозы, а следовательно, сохранению в течение более длительного времени свежести продукта.

О.А. Малышева

СРАВНИТЕЛЬНОЕ ВЛИЯНИЕ ФРАКЦИЙ ОРГАНИЧЕСКИХ
УДОБРЕНИЙ НА ПИТАТЕЛЬНЫЙ РЕЖИМ
ДЕРНОВО-ПОДЗОЛИСТОЙ ПОЧВЫ

Руководитель О.В. Смирнова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Резкое снижение вносимых в дерново-подзолистые почвы удобрений за последние десятилетия привело к ухудшению целого ряда их агрофизических, агрохимических и биологических показателей. Это заставляет искать новые, нетрадиционные подходы к проблеме стабилизации и воспроизводства почвенного плодородия.

Мы исследовали влияние разных фракций соломистого навоза, компоста многоцелевого назначения и органического сапропеля на содержание подвижных форм элементов питания в дерново-подзолистой легкосуглинистой почве. Размерность фракций органических удобрений оказывала влияние на количество подвижных форм элементов питания в пахотном слое почвы. Наибольшим содержанием нитратов в первый год проведения опыта отличались варианты с мелкими фракциями соломистого навоза и органического сапропеля, а во второй год – с фракциями навоза размером 2–5 мм. Высокие значения нитратной формы азота на протяжении 2009–2010 гг. установлены и в почве с разными фракциями компоста многоцелевого назначения (КМН), что связано с его высокой микробиологической активностью.

Применение разных фракций сапропеля и навоза, а также крупных фракций КМН заметно отразилось на количестве подвижного фосфора в почве на протяжении двух лет наблюдений. В сравнительном отношении максимальные значения P_2O_5 в течение вегетационных периодов 2009–2010 гг. получены на фоне всех фракций соломистого навоза.

Наибольшее содержание обменного калия в 2009 г. обнаружено в почве с крупными фракциями навоза и сапропеля, а в 2010 г. – в вариантах с фракциями КМН размером 2–5 мм.

Использование крупных фракций органических удобрений привело к снижению кислотности почвенного раствора, выразившегося в повышении рН в среднем на 0,2 – 0,4 по отношению к исходному значению.

Таким образом, наилучшие агрохимические показатели в течение двух лет проведения опыта получены в вариантах с крупными фракциями соломистого навоза и органического сапропеля.

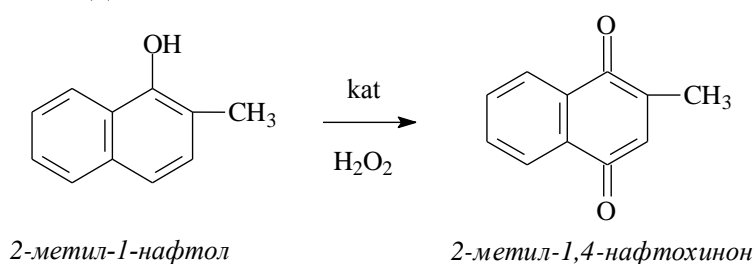
ПОЛУЧЕНИЕ ГЕТЕРОГЕННОГО БИОКАТАЛИЗАТОРА ДЛЯ
ОКИСЛЕНИЯ 2-МЕТИЛ-1-НАФТОЛА

Руководители: В.Ю. Долуда, Н.В. Лакина

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

В настоящее время стехиометрическое окисление является основным способом промышленного получения кислородсодержащих соединений в тонком органическом синтезе. Использование дорогих и токсичных окислителей, таких, как оксиды марганца, бихроматы и др., неизбежно порождает проблему утилизации большого количества отходов. Кроме того, селективность стехиометрического окисления, как правило, невысока и возникает проблема отделения и утилизации побочных продуктов. Классическим примером такого процесса является производство синтетического витамина К₃ (2-метил-1,4-нафтохинона, менадиона).

В данной работе предлагается получение витамина К₃ с помощью биокаталитического окисления 2-метил-1-нафтола. Для этого окисления используется экологически чистый окислитель – пероксид водорода. А также экологически чистый биокатализатор – иммобилизованная пероксидаза корня хрена на неорганическом носителе. Специфичность действия оксидоредуктаз по отношению к пероксиду водорода обуславливает его применение как экологически чистого окислителя для фенолзамещенных соединений:



Применение предлагаемого метода получения менадиона решает комплексно сразу нескольких задач в тонком органическом синтезе полупродуктов фармакологически активных веществ, а именно: 1) структурные особенности строения активного центра фермента оксидоредуктазы исключают стадию вымывания активного металла с поверхности носителя, а это исключает попадание металла в фармпродукт; 2) иммобилизация фермента на поверхность неорганического носителя позволяет повысить активность, селективность и устойчивость его активного центра (апофермента) к воздействию реакционной среды.

М. Н. Маякова¹, Л. Е. Карпухин², Е. П. Алексеева¹ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДЫХ
МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСОВ ЦЕФАЗОЛИНА

Руководитель В.Г. Алексеев

¹ТвГУ, кафедра неорганической и аналитической химии²Всероссийский НИИ синтетического волокна (г. Тверь)

Синтезированы и выделены в твердом состоянии комплексные соединения бета-лактаминового антибиотика цефазолина с Ni(II), Zn(II), Cd(II), Pb(II), Al(III), Fe(III) и Er(III). Комплексы охарактеризованы методами элементного анализа и исследованы методами ИК спектроскопии и ДСК. ИК спектры записаны на Фурье ИК спектрофотометре «Equinox 55» (Bruker) в диапазоне 4000–400 см⁻¹ для образцов в виде таблеток с KBr. Термограммы ДСК записаны в пределах 40–370 °С со скоростью сканирования 10 °С/мин в среде азота на приборе «Diamond DSC» (PerkinElmer). В ИК спектрах наблюдается изменение частоты и интенсивности полос поглощения антибиотиков в комплексах, а на термограммах ДСК – увеличение температуры и энтальпии разложения комплексов по сравнению с натриевой солью цефазолина. Полученные результаты говорят об образовании прочных координационных связей ковалентного характера аниона цефазолина с катионами металлов.

Металлокомплексы цефазолина и других бета-лактаминных антибиотиков перспективны для применения в качестве антимикробных препаратов в медицине (комплексы железа, алюминия, цинка) и в качестве электродноактивных веществ химических сенсоров в химическом анализе.

Комплексо-образователь	Функциональные группы (донорные атомы) аниона цефазолина, участвующие в координации
Ni(II)	Тетразольный цикл (N), амидная (N)
Zn(II), Pb(II)	Тетразольный цикл (N), бета-лактаминная (O)
Cd(II)	Тетразольный цикл (N), бета-лактаминная (O), амидная (N)
Fe(III)	Карбоксилатная (O), бета-лактаминная (O), амидная (O)
Al(III)	Карбоксилатная (O), бета-лактаминная (O)
Er(III)	Карбоксилатная (O)

Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы», проект НК-595П-6.

А.В. Мешков

ВЛИЯНИЕ РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩЕЙ СИСТЕМЫ ОБРАБОТКИ ПОЧВЫ ЧИСТОГО ПАРА НА УРОЖАЙНОСТЬ ОЗИМОЙ РЖИ

Руководитель В.А. Лапыгина

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра общего земледелия и растениеводства

Основными направлениями ресурсосбережения в современном земледелии являются: 1) совмещение нескольких приемов и операций в одном рабочем цикле путем применения комбинированных агрегатов; 2) уменьшение глубины и интенсивности обработки за счет замены вспашки более мелкими обработками; 3) использование современных гербицидов 4-5 поколения.

Одной из важнейших, имеющих комплекс положительных свойств среди зерновых культур, незаслуженно удаленных с полей Верхневолжья, является озимая рожь. Многочисленные исследования и практика передовых хозяйств региона свидетельствуют о получении высоких, стабильных по годам урожаев озимой ржи при размещении ее по чистым парам.

Цель наших исследований – определить эффективность современных гербицидов при обработке и уходе за посевами озимой ржи, возделываемой по чистому пару в 2010 г.

Исследования проводились в 2-факторном полевом опыте на дерново-подзолистой остаточной карбонатной глееватой на морене легкосуглинистой по гранулометрическому составу почве с содержанием гумуса 1,83%, легкогидролизуемого азота – 50, подвижного фосфора – 283, обменного калия – 90 мг/кг почвы, рН – 6,0. Факторы опыта: А (система обработки чистого пара под озимую рожь): 1 – двукратное дискование осенью, вспашка, послонные обработки в период парования, предпосевная обработка; 2 – аналогична первому варианту за исключением вспашки; 3 – дискование, замена послонных обработок внесением гербицида зеро 3 л/га, предпосевная обработка – так называемый химический пар; В (гербициды в посевах озимой ржи): 1 – без гербицидов; 2 – дифезан (200 мл/га) весной; 3 – дифезан (200 мл/га осенью); 4 – линтур (200 г/га) весной; 5 – линтур (200 г/га) осенью; 6 – гранстар (20 г/га) осенью. Объект исследований – сорт озимой ржи Фаленская 4.

В результате проведенных исследований выявлено, что в условиях крайне засушливого вегетационного периода 2010 года наибольшая урожайность озимой ржи получена по химическому пару – 41,4 ц/га, что выше второго и первого варианта на 2,0–5,5 ц/га ($НСР_{05}=1,4$ ц/га). В среднем прибавка урожайности от применяемых гербицидов в посевах озимой ржи составила 7–14%. Не выявлено преимуществ осеннего внесения гербицидов перед весенним, а также между применяемыми видами: по варианту химического пара урожайность озимой ржи по гранстару составила 44,6, линтуру – 44,9, дифезану – 44,0 ц/га ($НСР_{05}=2,0$ ц/га).

И. В. Михайлов

РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ ФОРМИРОВАНИЯ
ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГЕЛЬ-СЕТКИ В ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОМ
РАСТВОРЕ (ЦСР)

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

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Результаты атомистического моделирования ЦСР свидетельствуют, что образование пространственной гель-сетки в этой системе происходит вследствие агрегации кластеров меркаптида серебра (МС) со свободными функциональными группами (ФГ) $-C(O)O^-$ и $-NH_3^+$ на их поверхности. При этом кластерные агрегаты МС образуются за счет координационных связей сера–серебро между соседними частицами МС. Эти выводы позволили нам сформулировать мезоскопическую модель ЦСР. Предполагается, что 1) процесс образования кластеров МС уже завершен, 2) дальнейшая эволюция в системе происходит по пути слияния отдельных кластеров в нитеобразные агрегаты, 3) молекулы растворителя образуют фоновую среду с фиксированной диэлектрической проницаемостью. Это позволяет рассматривать ЦСР как совокупность сферических частиц (СЧ) с разноименно заряженными ФГ на их поверхности. Эта модель в настоящее время используется для изучения процесса формирования гель-сетки методами Монте–Карло и молекулярной динамики в кубической ячейке с ребром 500Å . Учет низкомолекулярных ионов, инициирующих гелеобразование, осуществляется двумя способами: 1) неявно (экранированный кулоновский потенциал); 2) посредством введения в модель дополнительных заряженных СЧ. Главными параметрами модели являются: а) число ФГ, б) особенности распределения ФГ на поверхности СЧ и в) диэлектрическая проницаемость среды.

Работа выполнена при финансовой поддержке АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы (2009 – 2011 годы)», проект № 2.1.1/10767.

В. Р. Михайлова

СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ
АЦЕТИЛАЦЕТОНАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ

Руководитель Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Применение ионных жидкостей как растворителей для синтеза наночастиц металлов привлекает внимание исследователей в последние годы [1]. Среди всех известных ионных жидкостей имидазолиевые соединения наиболее предпочтительны благодаря наличию упорядоченной структуры за счет водородного связывания. В настоящей работе исследована возможность получения наночастиц переходных металлов разложением их ацетилацетонатных комплексов в ионной жидкости в присутствии олеиновой кислоты.

Ацетилацетонаты получены взаимодействием ацетилацетона с солью переходного металла в водно-спиртовой среде



где M: Ni(II), Co(II), Fe(III), Cr(III).

Синтезированные комплексы представляют собой окрашенные кристаллические вещества, не растворимые в воде, но хорошо растворимые в ионных жидкостях [2]. Синтез наночастиц металлов проводили в системе 1-бутил-3-метилимидазолий тетрафторборат и олеиновая кислота, в которую вводили эквимольное количество (по отношению к олеиновой кислоте) ацетилацетонатного комплекса и нагревали смесь при температуре разложения комплекса в течение 1–2 часов. Ионную жидкость отделяли деконтацией, а наночастицы промывали гексаном. Суспензию наночастиц в гексане центрифугировали в течение 10 минут.

Металлические наночастицы в ионной жидкости могут быть использованы самостоятельно как каталитические системы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wang Y., Yang H. // Chem.Eng.Journal. 2009. №147. P.71–78
2. Ягодкин В. М., Минскер К. С., Тавлыкаев Р. Ф. // ЖПХ. 2000. Т.73, вып. 2. С. 287.
3. Чернявская А.А., Логинова Н.В.// Коллоидный журнал. 2006. Т.68, №3. С. 379–383.

Е. Г. Морозов
АНАЛИЗ ВОДЫ В РЕКАХ ГОРОДА ТВЕРИ

Руководитель В.М.Никольский

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Органы санэпиднадзора допускают содержание нитрит-ионов в питьевой воде не более 3,3 мг/л, однако ПДК сбросов промышленных вод в канализацию по нитрит-ионам составляет 0,08 мг/л. В работе по определению содержания нитрит-ионов в реках города Твери (Тьмака, Тверца и Волга) мы использовали методику, допущенную для целей государственного экологического контроля ПНД Ф 14.1:2.3-95. Пробы воды в реках отбирались в трех различных местах. Забор первой пробы воды осуществлялся там, где воздействие антропогенных факторов ещё минимальное (р. Тьмака – р-н Желтикова монастыря, р. Тверца – выше ТЭЦ-3 и р. Волга – р-н Мигалово), а забор третьей пробы воды осуществлялся или в устьях рек (р. Тьмака и р. Тверца) или на выходе из города (р. Волга – р-н Химинститута). Вторая проба воды – промежуточная. Результаты анализа проб воды, взятых из трех рек Твери представлены в таблице:

Номер пробы	Место отбора	C(мг/л)±Δ
	р. Волга	
1.	в р-не Мигалово	0,070±0,01
2.	в р-не к/т «Звезда»	0,076±0,01
3.	в р-не Химинститута	0,078±0,01
	р. Тьмака	
1.	в р-не Желтиково	0,059±0,01
2.	в р-не «Текстильщик»	0,062±0,01
3.	в устье р. Тьмака	0,063±0,01
	р. Тверца	
1.	до ТЭЦ-3	0,056±0,01
2.	ручей от ТЭЦ-3	0,059±0,01
3.	в устье р. Тверца	0,058±0,01

Эти результаты свидетельствуют о том, что наблюдается антропогенное воздействие на содержание нитрит-ионов в реках города Твери. Уровень загрязнения этих рек на сегодня составляет по Тьмаке – 78,8%, по Тверце – 72,5%, и по Волге – 97,5%.

УДК: (633.494+635.24+631.559+631.811)470.331

Д. С. Муравьев

ВЛИЯНИЕ ГУСТОТЫ СТОЯНИЯ И ОБРАБОТКИ КЛУБНЕЙ НАНОМАТЕРИАЛОМ В ПОСАДКАХ ТОПИНАМБУРА НА РАЗНЫХ ФОНАХ МИНЕРАЛЬНОГО ПИТАНИЯ НА ПРОДУКТИВНОСТЬ

Руководитель А.К. Осербаев

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра растениеводства

Топинамбур (земляная груша) – высокопродуктивная экологически пластичная культура, имеет ценный химический состав надземной части и клубней. Биомасса топинамбура может стать дешевым сырьем для выработки биотоплива и биогаза. Увеличение производства топинамбура и продуктов его переработки имеет большое значение в решении проблемы улучшения жизнеобеспечения населения нашей страны.

Исследования проводились в трёхфакторном опыте в севообороте кафедры растениеводства на опытном поле Тверской государственной сельскохозяйственной академии. В опыте изучались три фактора: А – фон минерального питания: 1 – без удобрений; 2 – навоз + NPK В расчете на урожайность 400 ц/га; 3 – NPK в расчете на урожайность 300 ц/га + двукратная некорневая подкормка раствором Макс-Супергумат; В – густота посадки: 1 – 70 × 30 (47,6 тыс. шт/га); 2 – 70 × 40 (35,7 тыс. шт/га). С – предпосадочная обработка клубней: 1 – без обработки; 2 – обработка наноматериалом.

В результате выявлено, что в условиях почвенной и воздушной засухи 2010 г. максимальный урожай надземной части топинамбура 155 ц/га получен в варианте с густотой посадки 47,6 тыс. шт/га с обработкой клубней наноматериалом на фоне минерального питания – навоз + NPK на запрограммированный урожай 400 ц/га. При этом площадь листьев агроценоза увеличилась по сравнению с контролем на 24%, суммарный фотосинтетический потенциал – на 25%, сырая масса надземной части – на 18%.

Максимальная урожайность клубней – 235 ц/га получена на том же фоне минерального питания с густотой посадки 47,6 тыс. шт/га, но без предпосадочной обработки клубней.

Таким образом, чем реже посадки топинамбура на всех фонах с 47,6 тыс. шт/га до 35,7 тыс. шт/га, тем меньше урожай надземной массы на 23–44 ц/га, клубней – 15-21 ц/га. Предпосадочная обработка клубней наноматериалом обеспечивает получение достоверной прибавки урожая надземной части. Исследования продолжаются.

М. С. Мурзанов, Д. С. Кучер

ИССЛЕДОВАНИЕ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ
МОНОКРИСТАЛЛОВ $Dy(FeTi)_{12}$ ПОСЛЕ МЕХАНИЧЕСКОЙ
ОБРАБОТКИ ПОВЕРХНОСТИ.

Руководитель Е.М.Семенова

Тверской государственный университет
Кафедра магнетизма

Соединения $R(Fe,Ti)_{12}$ характеризуются высокой магнитокристаллической анизотропией и температурой магнитного упорядочения и поэтому рассматриваются специалистами как перспективные материалы для постоянных магнитов. Помимо практической значимости, они являются превосходными модельными объектами для анализа природы фундаментальных магнитных свойств редкоземельных интерметаллидов [1;2].

В данной работе нами были проведены исследования магнитной доменной структуры (ДС) монокристаллических образцов $Dy(FeTi)_{12}$. Наблюдения ДС проводились на металлографическом микроскопе «Neophot 30» методом полярного эффекта Керра и с помощью индикаторной пленки феррита-граната.

Целью работы являлось изучение механического воздействия на поверхность монокристаллов $Dy(FeTi)_{12}$, которое приводит к изменению конфигурации ДС на поверхности образца. В равновесном состоянии на призматической плоскости монокристалла формируется полосовая ДС, в которой границы доменов ориентированы вдоль кристаллографической оси c . Экспериментально показано, что после механической обработки на поверхности формируется полосовая ДС с границами, перпендикулярными границам основных доменов. Поверхностная ДС с течением времени в отсутствие внешнего магнитного поля трансформируется к конфигурации основных доменов. Время релаксации ДС зависит от режимов механической обработки и температуры. В работе обсуждаются физические причины наблюдаемого эффекта.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wojciech Suski. The $ThMn_{12}$ – type compounds of rare earth and actinides: structure, magnetic and related properties // Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earth. 1996. V.22. Pt.149. P.143–294.
2. Никитин С.А., Терешина И.С., Панкратов Н.Ю. Магнитострикция в области спин - переориентационных фазовых переходов в монокристалле $DyFe_{11}Ti$ // ФТТ. 1999. Т.41, вып.9. С.1647–1649.

А. В. Нарышкин

НАПРАВЛЕННЫЙ СИНТЕЗ НОВЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ —
ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ АЛКИЛТРИФЕНИЛФОСФОНИЯ

Руководитель: Л. И. Ворончихина

Тверской государственной университет
Кафедра органической химии

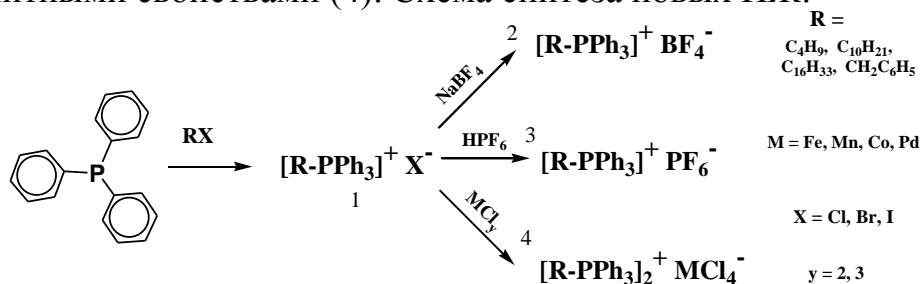
Использование ионных жидкостей в качестве новых реакционных сред может решить проблему эмиссии растворителей и повторного использования дорогостоящих катализаторов.

Термин «ионные жидкости» (ИЖ) означает вещества, которые являются жидкостями при температуре ниже 100⁰С и состоят из органических катионов и неорганических анионов, например N-этилпиридиний хлорид.

Интерес к ИЖ обусловлен наличием у них ряда специфических свойств: электропроводность, хорошая растворяющая способность, каталитическая активность, возможность многократного использования, негорючесть, нетоксичность и огромные возможности синтеза ИЖ с заданными свойствами путем подбора структуры катиона и аниона.

В настоящей работе представлены результаты по направленному синтезу четвертичных солей фосфония с разнообразными анионами, представляющими интерес как новые ионные жидкости.

Галогениды четвертичного фосфония получены алкилированием трифенилфосфина алкилгалогенидами (1). Метатезисом с натрийфтортетраборатом (2) и реакцией с гексафторфосфорной кислотой (3) получены ИЖ, представляющие интерес как инертные растворители для различных реакций. Твердофазным синтезом получена серия ИЖ с пара-магнитными свойствами (4). Схема синтеза новых ИЖ:



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bradaric C.J, Downard A. // Green chem. 2003. Vol.5. P. 143–152.
2. Нарышкин А.В., Ворончихина О.Е.. Синтез и ингибирующая способность четвертичных солей алкилтрифенилфосфония // Вестник ТвГУ. Сер. «Химия». 2008. №32(92). С. 37-41.

П. А. Носков

ИССЛЕДОВАНИЕ ГИСТЕРЕЗИСА СОБСТВЕННОГО ПОЛЯ
РАЗМАГНИЧИВАНИЯ ПРИ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИИ
ФЕРРОМАГНИТНЫХ ОБЪЕКТОВ В ПОСТОЯННЫХ И ПЕРЕМЕННЫХ
МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Руководитель А.Г. Пастушенков

Тверской государственный университет
Кафедра магнетизма

В данной работе было изучено влияние реальных условий намагничивания на ход кривых намагничивания объектов исследования конечной формы: выявление зависимости собственного поля размагничивания от намагниченности исследуемого образца, полученных при намагничивании постоянным и переменным магнитным полем и влияние геометрических размеров тела на ход зависимости величины собственного поля размагничивания от намагниченности исследуемого объекта

В ходе работы были построены зависимости собственного поля размагничивания от намагниченности полосовых образцов кремнистого железа при изменении их длины от 28 до 4,2 см при намагничивании статическим и динамическим полем. Выявлено нарушение линейности зависимости собственного поля размагничивания от намагниченности при приближении к насыщению исследуемых полосовых образцов.

Проведен сравнительный анализ динамической и статической основных кривых намагничивания полосовых образцов трансформаторной стали. Увеличение расхождения кривых намагничивания в области приближения к насыщению может быть объяснено зависимостью проникновения переменного поля вглубь образца от величины магнитной проницаемости.

Показано, что гистерезис собственного поля размагничивания полосовых образцов существует независимо от способа намагничивания (статического или динамического).

М. Ю. Орлов

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ТОРСИОННОГО УРАВНЕНИЯ
ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ
В НИТРОАЛКИЛЬНЫХ РАДИКАЛАХ

Руководитель В.В. Туровцев

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

Внутреннее вращение молекул, т.е. вращение их фрагментов друг относительно друга вокруг соединяющей химической связи, приводит к возникновению различных конформаций, характеризующихся определенными значениями потенциальной энергии. Последняя изменяется периодически при изменении относительного угла поворота φ фрагментов молекулы (волчка и остова) и описывается потенциальной функцией внутреннего вращения $V(\varphi)$. Максимумы потенциальных кривых соответствуют нестабильным конформациям, минимумы – стабильным.

В статической физике расчет термодинамических свойств молекул осуществляется суммированием энергетических вкладов различных степеней свободы, в том числе внутреннего вращения. Поэтому при определении свойств требуется в явном виде (аналитически) задавать вид потенциальной функции внутреннего вращения либо приведенного момента инерции $rI(\varphi)$, либо вращательной постоянной $F(\varphi)$, в зависимости от двугранного угла.

Оптимизация строения нитроалкильных радикалов от $C_3H_6NO_2$ до $C_6H_{12}NO_2$ была проведена с помощью программы GAUSSIAN 03 методом функционала плотности B3LYP в базисе 6-311++G(3df,3pd). Для каждого внутреннего вращения с шагом координаты реакции (двугранного угла) 10 градусов были найдены конформации и вычислены приведённый момент инерции rI и вращательная постоянная F . Также были уточнены положения локальных минимумов и переходных состояний. По результатам табличных данных были получены аналитические аппроксимационные зависимости $F(\varphi)$ (1) и $rI(\varphi)$ (2) в виде рядов Фурье

$$F(\varphi) = F(0) + \sum_{i=1}^n F_i \cos(i\varphi) \quad (1)$$

$$rI(\varphi) = rI(0) + \sum_{i=1}^n rI_i \cos(i\varphi) \quad (2)$$

для числа гармоник $n = 6$ и 12 .

А. В. Передерищека, К. А. Вахлин

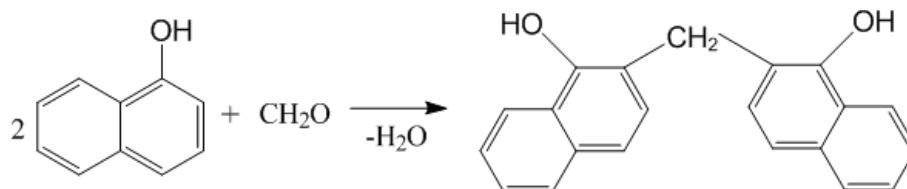
БИСНАФТОЛЫ И ЭПОКСИДНЫЕ СМОЛЫ НА ИХ ОСНОВЕ

Руководитель Б.К. Крупцов

Тверской государственный технический университет
Кафедра технологии полимерных материалов

В продолжение ранее начатых работ* по синтезу диоксидинафтилметана (биснафтол, БН-Ф) и эпоксидных смол на его основе проведены дальнейшие исследования получения эпоксидных сополиконденсатов с дифенилолпропаном. Получены сополиконденсаты различного состава, определены их физико-химические характеристики, условия химического отверждения самих смол и их стеклонаполненных композиций. Выявлено возрастание вязкости при увеличении содержания БН-Ф в эпоксидных сополиконденсатах, а полимер на основе чистого диоксидинафтилметана представляет собой твёрдое вещество с $T_{пл} = 170^\circ\text{C}$. Изначально выбранное мольное соотношение многоатомных фенолов и эпихлоргидрина для каждого сополиконденсата дало примерно равные эпоксидные числа, что согласуется с промышленной технологией получения стандартных эпоксидных смол.

По аналогии с БН-Ф, полученным взаимодействием β -нафтола и формальдегида, проведены работы по получению биснафтола с α -нафтолом.



Однако при этом было выявлено резкое различие в поведении этих изомеров (α - и β -нафтолов) в аналогичных реакциях с формальдегидом. В случае с β -нафтола образование БН-Ф идёт количественно даже при эквимольных соотношениях начальных компонентов, тогда как с α -нафтолом образуется смолообразный продукт даже при многократном избытке (5-6 раз) α -нафтола. Это объясняется различной химической активностью реакционных центров бензольных колец в α - и β -нафтолах. Здесь прослеживается аналогия с фенолом, для которого также требуется 3-4-кратный избыток фенольной компоненты при синтезе дифенилолметана, а также различие активности реакционных центров при реакциях сульфирования α - и β -нафтолов.

* Лебедева А.И., Шилова А.А., Устимов А.В.// Тезисы доклада XVII Н/Т конференции молодых учёных «Физико-химия и новые технологии». Тверь, 2010. С. 50.

Д. А. Пипо

ЭФФЕКТИВНОСТЬ СПОСОБОВ ЗАДЕЛКИ УДОБРЕНИЙ В ПОЧВУ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

В полевом опыте исследовали сравнительное влияние различной глубины заделки в почву биокомпоста (КМН) на ее гумусовый режим и величину формируемой урожайности возделываемых в звене севооборота сельскохозяйственных культур. Одновременно эффективность КМН сравнивали с эквивалентным по содержанию NPK количеством минеральных туков. На опыте последовательно возделывались озимая рожь, ячмень, вико-овсяная смесь на зеленый корм.

За три года проведения исследований удобрения и разная глубина заделки их в почву оказали неодинаковое влияние на содержание органического вещества в перегнойном слое (таблица).

Влияние способов заделки удобрений на содержание и запасы органического вещества в почве, в слое 0–20 см

Вариант опыта	Содержание С органич. вещества, %				Запасы орган. в-ва	
	2008	2009	2010	2010 г. \pm к исход.	2010 г.	2010 г. \pm к исходному
Контроль	1,23	1,22	1,23	-0,01	33,21	-0,27
КМН под вспашку	1,42	1,39	1,40	+0,16	37,80	+4,32
NPK под вспашку	1,28	1,27	1,29	+0,05	34,83	+1,35
КМН под дисковую борону	1,44	1,41	1,41	+0,17	38,07	+4,59
NPK под дисков. борону	1,29	1,27	1,29	+0,05	34,83	+1,35
КМН под зиг-заг	1,39	1,38	1,38	+0,14	37,26	+3,78
NPK под зиг-заг	1,26	1,26	1,27	+0,03	34,29	+0,81

Наибольшее количество как процентного содержания органического вещества, так и его запасов наблюдалось в почве с заделкой удобрений БДТ. Меньше всего эти показатели возрастали при использовании бороны. По-видимому, это связано с тем, что заделка биокомпоста БДТ позволяет достичь более полного (объемного) контакта его с минеральной частью почвы, что оказывает большее влияние на дополнительное формирование в почве органического вещества.

Полученная на всех вариантах с удобрениями среднегодовая урожайность (31,3–45,4 ц/га зерн. ед.) заметно превысила контроль (24,7 ц/га зерн. ед.). Максимальную прибавку биомассы растений обеспечило внесение КМН под дисковую борону, составив 24,7 ц/га, или 83,8% к контролю.

А.В. Питык

ПОЛУЧЕНИЕ ПЛЕНКИ ПОЛИАНИЛИНА С ГРАДИЕНТОМ ОКИСЛЕННОСТИ

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Известно, что полианилин может под воздействием окислителей, восстановителей или в процессе электрохимического окисления – восстановления изменять свою степень окисленности. Под этим термином многие авторы подразумевают соотношение этилендиаминовых и иминохиноидных фрагментов в молекуле ПАНи [1].

Степень окисленности существенным образом влияет на физико-химические свойства ПАНи, поэтому было интересно создать пленку ПАНи с постепенно меняющейся степенью окисленности, т.е. создать градиент окисленности. Для достижения этой цели на платиновую подложку была предварительно нанесена пленка ПАНи методом циклической вольтамперометрии (ЦВА) [2]. При этом циклирование потенциала рабочего электрода осуществлялось в интервале от -0,2 мВ до +0,8 мВ. Процесс циклирования заканчивали при достижении 10 циклов. В качестве электролита использовали раствор, содержащий 0,2 моль/л ПАНи и 0,4 моль/л HCl. В качестве электрода сравнения и вспомогательного электрода использовались хлорсеребряный и графитовый электроды соответственно. Платиновая подложка имела длину 40 мм и площадь 1 мм². Для получения градиента окисленности изготовленная пленка ПАНи была помещена в 0,1М раствор HCl. При этом один конец подложки был катодом, другой – анодом [3]. Противозэлектродом служил графитовый электрод. Время экспозиции – 30с. В результате мы получили слой ПАНи постепенно меняющейся окраски от черной до зеленой и бесцветной. Поскольку цвет ПАНи зависит от степени окисленности, можно сказать, что мы получили пленку ПАНи с градиентом окисленности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Albuquerque J.E., Mattoso L.H.C., Balogh D.T., Faria R.M., Masters J.G., MacDiarmid A.G. // Synt. Met. 2000. V. 113. P. 19.
2. Тарасевич М.Р., Орлов Ф.Б., Школьников Е.И. // Электрохимия полимеров. М., 1990. С. 306.
3. Рясенский С.С. // Вестник ТвГУ. Сер. «Химия». 2007. №5. С.149.

Е. А. Рогова

О СТРОЕНИИ РЕАКТОРНЫХ ПОРОШКОВ
СВЕРХВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛИЭТИЛЕНА,
ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ВЫСОКОПРОЧНЫХ ВОЛОКОН

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

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

При реализации задачи получения волокон из сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ), обладающих высокими механическими показателями, большое значение уделяется свойствам исходного реакторного (насцентного) порошка.

Цель настоящей работы – изучение строения исходных реакторных порошков СВМПЭ методами ИК спектроскопии и дифференциальной сканирующей калориметрии и установление связи между строением порошков и механическими свойствами готового волокна.

Объектом исследования являлись реакторные порошки СВМПЭ, отличающиеся друг от друга по своей способности к получению из них высокопрочных волокон.

Исследования проводили на Фурье-ИК спектрометрах NICOLET FT-IR 6000 (с приставкой НПВО) и EQUINOX 55 фирмы «Bruker». Используя отражательную приставку НПВО, изучали поверхность гранул порошка, а методом получения спектра «на просвет» - вещество в объеме. Эксперименты по дифференциальной сканирующей калориметрии проводили на дифференциальном сканирующем калориметре «Diamond DSC Perkin Elmer».

Методом ИК спектроскопии установлено повышенное содержание аморфной и моноклинной кристаллической фаз на поверхности гранул порошка по сравнению с объемом вещества.

По результатам, полученным методом дифференциальной сканирующей калориметрии, найдены значения энтальпии и степени кристалличности для анализируемых порошков.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пахомов П. М., Хижняк С. Д., Ситникова В. Е., Рогова Е. А., Галицын В. П., Иенихен Д. О полиморфных и фазовых превращениях в сверхвысокомолекулярном полиэтилене // Физико-химия полимеров. Тверь, 2009.
2. Дехант И. и др. Инфракрасная спектроскопия полимеров, 1976.

Е. С. Рула

ВЛИЯНИЕ СПОСОБОВ ОБРАБОТКИ ПОЧВЫ И УХОДА
ЗА ПОСАДКАМИ НА ПРОДУКТИВНОСТЬ ТОПИНАМБУРА
СОРТА СКОРОСПЕЛКА

Руководитель А.К. Осербаев

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра общего земледелия и растениеводства

Топинамбур (земляная груша) является высокопродуктивной культурой многостороннего использования. В экологическом плане представляет большую ценность, так как его выращивание не требует применения химических средств защиты, что позволяет получать биологически чистую продукцию. Благодаря ценному химическому составу клубней и зеленой массы топинамбур становится популярной сырьевой культурой, клубни его с успехом используются в пищу в разных странах, а также для получения ценных продуктов переработки.

В 2010 г. начаты исследования топинамбура сорта Скороспелка в четырехфакторном полевом опыте на выводном поле кафедры растениеводства ТГСХА. Цель исследований – выявить реакцию растений топинамбура на применение различных видов обработки почвы и внесение удобрений, позволяющих получить высокие урожаи хорошего качества и низкой себестоимости.

В опыте изучались 16 вариантов обработки почвы, включая отвальную и безотвальную вспашку совместно с весенней обработкой культиватором КПС-4 и агрегатом РВК-3,6 на неудобренном и удобренном фонах, с одним или двумя окучиваниями в течение вегетации.

В результате выявлено: 1– в условиях засухи 2010 г. урожай зеленой массы (ботвы) колебался по вариантам от 36 до 99 ц/га, клубней – от 91 до 146 ц/га; 2 – наибольшие урожаи ботвы – 99 ц/га и клубней – 146 ц/га получены на фоне – органические + минеральные удобрения при применении безотвальной вспашки, культивации КПС-4 и двукратном окучивании; 3 – внесение удобрение в большей мере увеличивало урожай клубней, чем ботвы, особенно при безотвальной вспашке – на 19 – 49 ц/га (18,0 – 50,0%); 4 – применение РВК-3,6 при предпосевной обработке не способствовало росту урожаев ботвы и клубней, по сравнению с применением КПС-4. Исследования продолжаются.

В. С. Савельева, Я. В. Андрианова, Н. В. Мельников, Г. И. Маркин
ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ДИСПЕРГИРОВАННОГО ВЕЩЕСТВА НА
СВОЙСТВА ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОГО РАСТВОРА

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

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Методом УФ спектроскопии проводились исследования процесса созревания цистеин-серебряного раствора (ЦСР). Целью работы являлось установление минимального концентрационного предела растворенного в воде вещества, при котором возможен процесс гелеобразования в ЦСР.

В результате выполненных исследований было установлено, что ЦСР можно разбавить водой в 6, 10 и даже 20 раз и при этом полосы поглощения при 390 и 310 нм будут наблюдаться. Важно отметить, что рост обеих полос происходил симбатно. Поэтому можно заключить, что природа исследуемых полос, скорее всего, одинакова, т.е. они обе отвечают за образование олигомерных цепочек из молекул меркаптида серебра в ЦСР или процесс созревания раствора. Следует отметить, что полоса 310 нм имеет большую интенсивность, чем полоса 390 нм, что стало особенно отчетливо видно при разбавлении ЦСР в 20 раз. Так, из-за меньшей интенсивности полосы 390 нм ее изменение в разбавленном растворе трудно проследить, в то время как на длине волны 310 нм является возможным зафиксировать образование олигомерных цепочек. Интересно отметить, что хотя в ЦСР при его разбавлении в 20 раз происходит образование олигомерных цепочек, гидрогель при столь низкой концентрации исходных компонентов ($C_{\text{cys}}=1,5 \cdot 10^{-4} \text{M}$, $C_{\text{AgNO}_3}=1,905 \cdot 10^{-4} \text{M}$) получить нельзя. Скорее всего это обусловлено тем, что недостаточно растворенного вещества для формирования сплошной пространственной сетки геля. В то же время при разбавлении ЦСР в 6 раз гидрогель образовывался. В дальнейшем это может служить основой для получения различных матриц на основе ЦСР при изготовлении лекарственных препаратов нового поколения.

Работа выполнена при финансовой поддержке АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы (2009 – 2011 годы)», проект № 2.1.1/10767 и УМНИК.

В. С. Савельева, Я. В. Андрианова, Д. Р. Хальназаров

О КИНЕТИКЕ СОЗРЕВАНИЯ ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОГО РАСТВОРА

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

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Методом УФ спектроскопии исследованы некоторые физико-химические свойства цистеин-серебряного раствора (ЦСР). При этом особое внимание уделяли кинетике процесса созревания ЦСР.

Как было описано ранее, за процесс созревания ЦСР отвечает образование полосы поглощения с максимумом 390 нм. А именно процесс созревания обусловлен образованием олигомерных цепочек из молекул меркаптида серебра во всем объеме раствора. Также было показано, что повышение температуры даже на несколько градусов приводит к увеличению значений оптической плотности полосы 390 нм (D_{390}) и время, необходимое для образования олигомерных цепочек, значительно уменьшается, т. е. скорость созревания с повышением температуры значительно увеличивается.

Расчет энергии активации проводили с помощью уравнения Аррениуса. Первым этапом явилось определение константы скорости реакции созревания ЦСР для каждой температуры как тангенс угла наклона касательной, проведенной из начала координат к кинетической зависимости D_{390} при заданной температуре. Естественно, такую процедуру можно использовать, если кинетические зависимости подчиняются уравнению реакции 1-го порядка, т. е. представляют экспоненциальную зависимость.

В результате выполненных кинетических исследований удалось показать, что процесс созревания ЦСР очень чувствителен к малейшим изменениям температуры окружающей среды. С ростом температуры значительно увеличивается скорость реакции созревания ЦСР. Тем самым можно регулировать процесс созревания ЦСР путем изменения температуры опыта. С ростом температуры максимальное значение D_{390} , свидетельствующее о числе донорно-акцепторных взаимодействий, достигается за более короткий промежуток времени. Рассчитанное значение энергии активации процесса ($E_a \cong (80) \text{ кДж/моль}$) созревания ЦСР свидетельствует об участии межмолекулярных взаимодействий (скорее всего координационных донорно-акцепторных, превалирующих над остальными типами взаимодействий) в процессе созревания ЦСР.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы» (2009 – 2011 годы), №2.1.1/10767 и УМНИК.

Е. Н. Садикова

РОЛЬ НЕИОНОГЕННЫХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ В СТАБИЛИЗАЦИИ СУСПЕНЗИЙ КОЛЛОИДНОГО ГРАФИТА

Руководитель Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

Суспензии, в которых в качестве дисперсной фазы используются различные графиты, находят широкое применение как в качестве антифрикционных материалов, так и при получении экранирующих аэрозольных систем*. Лиофобные дисперсные системы (суспензии) агрегативно неустойчивы; в них происходит самопроизвольный процесс слипания частиц, приводящий к седиментации. Выбор стабилизатора (модификатора частиц), предотвращающего седиментацию для каждой системы, является отдельной экспериментальной задачей.

В настоящей работе исследована седиментационная устойчивость водных, спиртовых, этиленгликолевых суспензий (5% масс.) коллоидных графитов марок С-1 (размер частиц 1-4 мкм) и С-3 (размер частиц 25-30 мкм) в присутствии поверхностно-активных веществ непосредственно в системе либо в условиях предварительной модификации графитов. В качестве стабилизаторов системы исследованы неионогенные поверхностно-активные вещества: синтанол ДС-10 (моноалкиловые эфиры этиленгликоля $C_nH_{2n+1}O(C_2H_4O)_mH$, где $n=10-18$, $m=8-10$), ОП-10 (моноалкилфеноловый эфир полиэтиленгликоля $C_nH_{2n+1}C_6H_4O(C_2H_4O)_mH$, где $n=8-10$, $m=10-12$), твин-80 (сорбиталь О). Седиментационную устойчивость системы оценивали предварительным методом седиментационных объемов, а затем нефилометрически.

Учитывая, что поверхность графита мозаична и гидрофобные полярные поверхностно-активные вещества, катионные и анионные практически не адсорбировались на поверхности графита и не стабилизировали систему. неионогенные ПАВ оказались наиболее оптимальными и суспензии с модифицированным графитом (нанесенным слоем ПАВ за счет адсорбции) оставались устойчивыми в течение 3–6 часов. Наиболее эффективным стабилизатором системы оказался твин-80, по эффективности стабилизирующего действия исследованные ПАВ располагаются в ряд: Твин-80 > ДС-10 > ОП-10. Системы, содержащие графит марки С-1, были более устойчивы, нежели системы с С-3. По результатам работы была рекомендована спиртовая суспензия графита С-1 с модификатором твин-80 ($c=1 \cdot 10^{-3}$ моль/л) для создания экранирующих облаков.

* Белова М.Ю. Материалы в арматуростроении М., 2008. С. 42–49

Е. В. Саклакова

МОРФОЛОГИЯ И СВОЙСТВА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Руководители: А.А. Михалчан, Л.Е. Виноградова

Санкт-Петербургский государственный
университет технологии и дизайна

В настоящее время все больше и больше фирм предлагают на рынке различные углеродные нанотрубки. Вместе с тем компании-производители редко предоставляют полную информацию, характеризующую свойства данных наноматериалов. Кроме того, зачастую оценка свойств проводится различными методами и по несовпадающим друг с другом методикам. В этой связи задачей настоящего исследования была оценка свойств УНТ различных производителей с целью проведения сравнительного анализа. В работе исследованы морфология и основные свойства УНТ нескольких производителей как российских – УНТ-М (Москва), УНТ-Н (Новосибирск), УНТ-Т (Тамбов), так и зарубежных – УНТ-Г (Германия), УНТ-Б (Беларусь).

Морфология оценивалась по данным электронной микроскопии. Для всех нанотрубок можно выделить общее свойство – их агломерация в комки, более рыхлые для одних марок (УНТ-Б,Н,Т,М) и более плотные для других (УНТ-Г).

Объем сорбционного пространства и удельная поверхность оценивались по адсорбции паров толуола. Основные свойства исследованных нанотрубок представлены в таблице.

Свойства углеродных нанотрубок

Характеристика	УНТ-									
	Г	М ₁	М ₂	М ₃	М ₄	Н ₁	Н ₂	Н ₃	Т	Б
рН	5,4	5,3	8,8	8,7	4,4	6,4	6,4	5,6	5,4	7,2
$m_{\text{насыпная}}, \text{кг/м}^3$	138	132	122	100	104	84	64	119	361	106
$V, \text{см}^3/\text{г}$	0,7	0,65	0,24	0,23	0,95	0,28	0,69	1,03	0,37	0,38
$S, \text{м}^2/\text{г}$	300	280	120	120	390	140	270	400	120	120

$m_{\text{насыпная}}$ – насыпная масса, кг/м³; V – объем сорбционного пространства по парам толуола, см³/г; S – удельная поверхность, м²/г

Почти для всех образцов рН вытяжки кислые, это может свидетельствовать о наличии кислотных групп на поверхности трубок. Но рН для УНТ-М₂ и М₃ имеет щелочной характер. Можно предположить, что эти образцы были отмыты от остатков катализатора, что совпадает с данными производителя.

Наибольшими объемом сорбционного пространства и удельной поверхностью обладают УНТ-Н₃ 1,03 см³/г и 400 м²/г; наименьшими УНТ-М₃ – 0,23 см³/г и 120 м²/г соответственно.

П. Ю. Сальникова, Д. А. Житенева

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК, НАПОЛНЕННЫХ ТЕХНИЧЕСКИМ УГЛЕРОДОМ

Руководитель В.А. Лысенко

Санкт-Петербургский государственный
университет технологии и дизайна

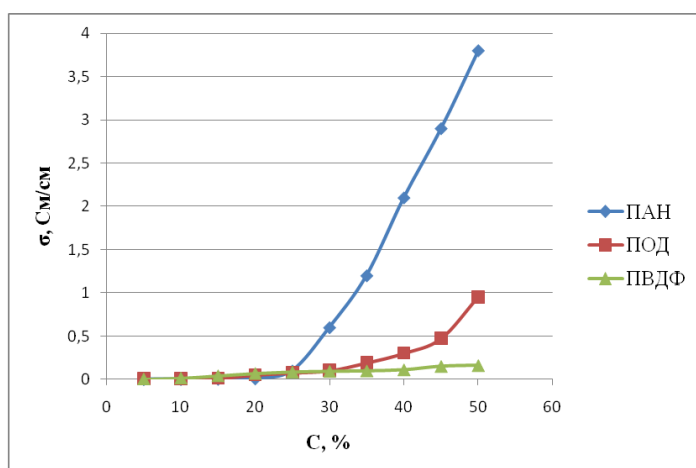
Введение углеродных наполнителей в полимерные материалы позволяет увеличить их электропроводность. В этой связи перспективными являются исследования композиционных материалов, в которых в качестве дисперсного наполнителя используются микро- и наноразмерные частицы технического углерода (ТУ).

Цель работы – исследование влияния содержания технического углерода на электропроводность пленок различных полимеров.

В работе использован технический углерод марки П-805 Э с электропроводностью 11 См / см, определенная по методу Ван дер Пау. В качестве матриц были выбраны полиакрилонитрил (ПАН), полиоксадиазол (ПОД), гидратцеллюлоза (ГЦ) и поливинилиденфторид (ПВДФ). Электропроводность пленок определяли четырехконтактным методом.

Для приготовления пленок использованы компаунды-суспензии ТУ в растворах ПАН и ПВДФ в N,N-диметиформамиде, ПОД в серной кислоте и ГЦ в виде ксантогената целлюлозы.

Полученные зависимости электропроводности полимерных пленок от содержания технического углерода приведены на рисунке.



Зависимость (σ) электропроводности от степени наполнения (С) пленок с различными полимерными матрицами

Для пленок на основе ПАН, ПОД и ПВДФ электропроводность увеличивалась с ростом количества введенного ТУ. Наиболее сильное влияние на электрическую проводимость пленок-

компаундов наблюдалось у пленок ПАН/ТУ. Пленки на основе ГЦ практически не обладают электропроводностью даже при введении в них более 50 % токопроводящих частиц. В работе рассмотрены возможные механизмы увеличения электропроводности композиционных материалов при введении углеродных нанодисперсий.

Д. В. Сафронов

ПРОДУКТИВНОСТЬ СОРТОВ ЯРОВОЙ ПШЕНИЦЫ
ПРИ ПРОГРАММИРОВАННОМ ВЫРАЩИВАНИИ В УСЛОВИЯХ
ВЕРХНЕВОЛЖЬЯ

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра растениеводства

В настоящее время продолжает оставаться актуальным вопрос о влиянии различных уровней минерального питания на продуктивность растений, в том числе зерновых культур. Для условий Верхневолжья недостаточно изученными являются вопросы программирования урожайности при использовании бактериальных удобрений, наноматериалов в технологии возделывания новых сортов яровой пшеницы.

В связи с этим нами проведены комплексные исследования в полевом многофакторном опыте на окультуренной дерново-среднеподзолистой остаточнокarbonатной глееватой почве на морене, супесчаной по гранулометрическому составу с высоким содержанием P_2O_5 , средним K_2O , $pH_{\text{кол}} - 7,36$. В опыте изучали факторы: А — фон минерального питания (1 — на урожай 15ц/га без удобрений, по эффективному плодородию, 2 — на урожай 25ц/га, ДВУ в производстве, 3 — на урожай 35 ц/га, по биогидротермическому потенциалу 4 — на урожай 45ц/га с КПД ФАР 1,5%); В — сорта: 1 — Иволга, 2 — Иргина, 3 — Дарья; С — приемы ухода: 1 — обработка гербицидом, 2 — обработка гербицидом + азотофосфином, 3 — обработка гербицидом + наноматериалом.

В результате выявлено: 1) в условиях резко засушливого и аномально жаркого лета 2010 года из изучаемых сортов более продуктивной оказалась Дарья, урожайность в среднем по фонам и приемам ухода составила 14,6 ц/га, прибавка урожая зерна к сорту Иволга — 4,9 ц/га (50,5%), к сорту Иргина — 1,1 ц/га (8,1%); 2) усиление фона в условиях дефицита влаги по сорту Иволга не способствовало росту урожайности; по сорту Иргина увеличивало её на 2,5; 3,7; 4,6 ц/га, или на 23,1; 34,3 и 42,6%; по сорту Дарья на 1-м и 2-м фонах получена одинаковая урожайность — 13,6 и 13,4 ц/га, на 3-м фоне она возросла на 2,0 ц/га (14,7%), на 4-м — на 2,2 ц/га (16,2%); 3) применение наноматериала в уходе за посевами не обеспечило прибавки урожая; использование Азотофосфина повысило урожайность сортов Иргина и Дарья, по сравнению с опрыскиванием посевов гербицидом «Гранстар», на 1,8 и 2,5 ц/га (на 13,4 и 17,5%); 4) более высокий урожай зерна яровой пшеницы получен у сорта Дарья (18,8 ц/га) на 3-м фоне, у сорта Иргина (18,6 ц/га) на 4-м фоне. Исследования продолжаются.

Ю. О. Семёнова

СИНТЕЗ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСОВ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ГЕПАРИНА

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Металлокомплексы природных полисахаридов в последнее время все чаще находят применение в качестве лекарственных средств и средств местного применения.Metallokompleksy pektinov – эффективные противоанемические средства, хитозан-серебряный комплекс показывает выраженную антимикробную и ранозаживляющую активности, за счет связывания ионов кальция сульфатированные циклодекстрины обладают выраженной антикоагулянтной активностью.

Гепарин – сульфатированный полисахарид, 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. Уникальность гепарина состоит в том, что являясь достаточно сильным антикоагулянтом прямого действия он проявляет выраженную модулирующую и антидотную активность.

Нами были синтезированы металлокомплексы высокомолекулярного гепарина с некоторыми ионами p-элементов: Cu^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} , Mn^{2+} , Fe^{3+} , Zn^{2+} . Проведен термический, элементный и спектроскопический анализ выделенных комплексов. Установлены брутто-формулы соединений, а также обсуждена возможная структура синтезированных металлокомплексов.

Работа выполнена в рамках Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 гг. Номер конкурса НК-476П и НК-595П.

Е. В. Сидорова

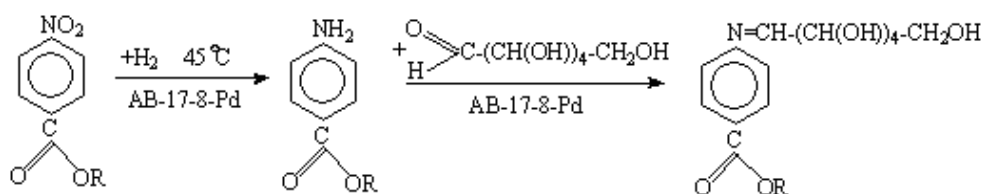
СИНТЕЗ СЛОЖНЫХ ЭФИРОВ
n-(N-ГЛЮКОЗИЛИДЕН)АМИНОБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ
 И ИХ МЕЗОМОРФНЫЕ СВОЙСТВА.

Руководитель Насибулин А.А.

Ивановский государственный университет
 Кафедра органической и биологической химии

Перспективность синтеза сложных эфиров *n*-(N-глюкозилиден)аминобензойной кислоты обусловлена возможностью их применения в косметических препаратах как фотозащитных средств и как анестетики в медицине.

Синтез основан на каталитическом восстановлении соответствующего нитросоединения при температуре 45°C с последующей его конденсацией с углеводом на том же катализаторе (катализатор-АВ-17-8-Pd). Процесс протекает в стеклянном термостатируемом реакторе, снабженном магнитной мешалкой. Выделение и очистку продукта проводили из водно-спиртового раствора. Выход составил 30-40 % от теоретически возможного.



Качество продукта контролировалось методом ТСХ. В итоге чистота составила 96,5% чистого вещества.

Для подтверждения строения полученных соединений и их качества использовали метод ЯМР-спектроскопии.

Методом поляризационной термомикроскопии и контактных препаратов были проверены мезоморфные свойства *n*-бутилового эфира *n*-(N-глюкозилиден)аминобензойной кислоты. Соединение проявило энантиотропный смектический мезоморфизм с сильным эффектом переохлаждения в интервале температур 46–48°C.

Исходя из вышеизложенного, можно предположить, что мезоморфные свойства проявят остальные представители гомологического ряда сложных эфиров *n*-(N-глюкозилиден)аминобензойной кислоты.

Т. В. Синявина

СОПОЛИМЕРИЗАЦИЯ НЕПРЕДЕЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ФРАКЦИИ С₉ ПОД ДЕЙСТВИЕМ КОМПЛЕКСА ТЕТРАХЛОРИДА ТИТАНА И БУТИЛМЕТАКРИЛАТА

Руководитель Л.И. Бондалетова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Кафедра технологии основного органического синтеза и высокомолекулярных
соединений

Особое место среди синтетических заменителей продуктов природного происхождения занимают нефтеполимерные смолы (НПС), основной сырьевой базой которых служат жидкие продукты пиролиза углеводородов.

Свойства НПС не всегда удовлетворяют требованиям заказчика. В связи с этим актуальными становятся работы по получению модифицированных НПС.

Ранее сополимеризацией непредельных компонентов фракции С₉ пиролиза с метилметакрилатом (ММА) под действием каталитической системы четыреххлористый титан (ТХТ) – диэтилалюминийхлорид была получена модифицированная НПС, при этом ММА использовался в сополимеризации в виде комплекса ТХТ – ММА – ТХТ*.

Целью работы является исследование сополимеризации непредельных соединений фракции С₉ жидких продуктов пиролиза под действием комплекса бутилметакрилат – тетрахлорид титана.

При добавлении к бутилметакрилату (БМА) тетрахлорида титана происходит образование окрашенного комплекса, которое подтверждается ЯМР ¹Н-спектроскопией. В спектрах наблюдается смещение в слабое поле сигналов олефиновых протонов, а также сигналов метиленовых протонов БМА в α-положении к кислороду эфирной группы.

Полимеризация непредельных соединений фракции С₉ под действием комплекса БМА – ТХТ состава 1 : 1 или 2 : 1 (мольн.) приводит к получению модифицированных смол с выходом 18...23 %. Участие комплексов в образовании смол, содержащих сложноэфирную группу, подтверждается спектральными исследованиями.

Покрытия на основе полученных НПС обладают улучшенной адгезионной стойкостью.

* Бондалетов О.В., Бондалетова Л.И., Тюменцева И.В.// Ползуновский вестник. 2009. № 3. С. 24–28.

В. Н. Ситников

ИЗУЧЕНИЕ ЛОКАЛИЗАЦИИ СПИНОВОЙ ПЛОТНОСТИ В РАДИКАЛАХ ВИДА $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{C}(\text{O})\text{O}\cdot$

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

Квантово-механическая «теория атомов в молекуле» (QTAIM) Р. Бейдера является наиболее удобным инструментом исследования распределения электронной плотности. Данная теория позволяет разбить молекулу на эффективные «топологические» атомы, границы которых определяются поверхностями нулевого потока вектора градиента электронной плотности. Особый интерес представляет изучение электронного строения свободных радикалов, в которых плотность неспаренного электрона в разной мере принадлежит бассейнам атомов, определяя его локализацию и делокализацию.

В настоящей работе проведен анализ распределения электронной плотности в группе $\text{C}(\text{O})\text{O}\cdot$ радикалов вида $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{C}(\text{O})\text{O}\cdot$, где $n = 0 \div 9$. Равновесное строение изученных веществ найдено с использованием пакета Gaussian 03 методом B3LYP/6-311++G(3df,3pd). Исследуемые характеристики атомов группы $\text{C}(\text{O})\text{O}\cdot$ (заряд, спиновая плотность) получены с помощью программы AIMALL. Распределение электронной плотности свободной валентности на атомах кислорода и на ближайшем атоме углерода приведено в таблице:

n	C	O(H)	O
0	-0,029	0,511	0,511
1	-0,029	0,534	0,486
2	-0,028	0,533	0,485
3	-0,028	0,532	0,486
4	-0,028	0,532	0,486
5	-0,028	0,533	0,485
6	-0,028	0,532	0,486
7	-0,028	0,531	0,487
8	-0,028	0,531	0,487
9	-0,028	0,531	0,487

В соединении $\text{C}(\text{O})\text{O}\cdot$ спиновая плотность распределена между атомами кислорода равномерно. При $n \geq 1$ атомы кислорода перестают быть идентичными. Имеющиеся различия связаны с конформационной асимметрией радикалов.

В.Е. Ситникова, Е.В. Кудряшова

ТЕРМООПТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛИМЕРА

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

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Научный и практический интерес к термотропным ЖК полимерам, возникший в последние два десятилетия, диктуется возможностью создания новых типов конструкционных и функциональных полимерных материалов, удачно сочетающих уникальные свойства низкомолекулярных жидких кристаллов и высокомолекулярных соединений. Для того чтобы можно было прогнозировать поведение полимера в различных ситуациях, необходимо контролировать образование ЖК доменов в объеме полимера. Для этих целей нами был предложен метод оптической спектроскопии и микроскопии.

Целью настоящей работы являлся анализ фазовых переходов в ЖК полимере, концентрации и размеров ЖК доменов, а также их распределения по размерам. Объектом исследования служили пленки термотропного полимера (ТП) поли-3,3'-бифенилен-(субероил-ди-4-оксибензоата), полученные из 1% раствора полимера в хлороформе путем нанесения раствора полимера на предметное стекло и последующей сушки при комнатной температуре до полного испарения растворителя из пленки. ИК спектры пленок записывали на Фурье-ИК спектрометре «Equinox 55», фирмы «Bruker» в диапазоне частот $7000-400 \text{ см}^{-1}$. Спектральные данные анализировали в соответствии с методикой, разработанной и успешно использованной для анализа пористых полимерных материалов и частиц наполнителя в полимерных композитах. Размеры доменов в ЖК полимере также контролировали с помощью оптического микроскопа «Neophot 30».

В результате проделанной работы осуществлен анализ фазовых переходов. Установлено, что рассеяние, которое обнаружено в настоящей работе, происходит не на ЖК доменах, а на отдельных кристаллах, которые образуют этот домен, и которые, как следует из микроскопических снимков, имеют размеры 2-5 мкм.

М. В. Смирнова

ИССЛЕДОВАНИЕ ИНДИКАТОРНОЙ СПОСОБНОСТИ ЭПИФИТНЫХ ЛИШАЙНИКОВ МЕТОДОМ ФУРЬЕ-ИК СПЕКТРОСКОПИИ

Руководитель Мейсурова А.Ф.

Тверской государственный университет

Кафедра ботаники

Основной загрязнитель атмосферы – диоксид азота. Его содержание в воздухе постоянно увеличивается, что обусловлено ростом количества автомобилей. В воздухе при высокой влажности диоксид азота образует аэрозоль азотной кислоты, обуславливая выпадение кислотных осадков. В этой связи актуален поиск методов оценки загрязнения атмосферы данным поллютантом. Хорошие результаты дает Фурье-ИК спектральный анализ эпифитных лишайников. Однако различные виды лишайников обладают разной степенью чувствительности к действию поллютантов. Цель работы – исследовать индикаторную способность некоторых эпифитных лишайников к действию азотной кислоты с помощью Фурье-ИК спектрального анализа.

Объектами исследования выбрали листоватые и кустистые формы лишайников, обычные в большинстве урболихенофлор - *Evernia mesomorpha*, *Hypogymnia physodes*, *Parmelia sulcata*, *Xanthoria parietina*. Лишайники собрали в фоновой зоне. В лабораторных условиях моделировали загрязнение воздуха аэрозолем азотной кислоты. Образцы прикрепили к внутренней поверхности крышки эксикатора (объемом 1 л), на дно которого налили 30 мл 0,05% азотной кислоты. Экспонирование лишайников в аэрозоле кислоты проводили в течение 10 дней при комнатной температуре. ИК спектры образцов лишайников записывали на Фурье-ИК спектрометре «Equinox 55» фирмы Bruker.

Спектральный анализ образцов лишайников, испытавших воздействие аэрозоля кислоты, показал наличие в слоевищах алкилнитратов (R-O-NO₂). Об их присутствии свидетельствуют изменения в спектре образца *H. physodes* при 1381 ν_s (- O-NO₂) и 779 δ (O-N-O), *P. sulcata* – 1386,780, *Ev. mesomorpha* – 1362, 775 и *X. Parietina* – 1385, 760 см^{-1} . Удалось выяснить, что наибольшее содержание алкилнитратов характерно для *Hypogymnia physodes*, наименьшее - *Evernia mesomorpha*. Отмечены морфологические изменения в образцах. У лишайника *H. physodes* обнаружены видимые изменения цвета слоевища, характера поверхности. По степени чувствительности к действию поллютанта можно предложить следующий ряд: *H. physodes* – *P. sulcata* – *Ev. mesomorpha* – *X. parietina*. Таким образом, в практике мониторинга загрязнения атмосферы аэрозолем азотной кислоты целесообразно использовать *Hypogymnia physodes*.

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента РФ № 02.120.11.1385-МК от 28.06.2010.

УДК: (631.8 + 631.4 + 631.559) 470.331

М. А. Смылова

ВЛИЯНИЕ ДИСПЕРСНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ СУБСТРАТОВ НА ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЧВЫ И ЕЕ ПРОДУКТИВНОСТЬ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии, почвоведения и агроэкологии

Изучали влияние дисперсности органических субстратов (сапропеля, торфа, агрогумата) на содержание органического вещества, питательный режим почвы и оказываемое ими влияние на урожайность опытной культуры. Исследуемые субстраты заметно отличались по своему химическому составу и реакции. Больше количество органического вещества содержалось в торфе (44,2%), калия – в агрогумате (6,96%) и фосфора – в сапропеле (0,69%). Более высокую кислотность имел торф ($pH_{\text{сол.}} 3,1$). Исходя из этого, можно было предположить, что данные органические удобрения окажут неодинаковое влияние как на свойства почвы, так и на урожайность опытной культуры. Следует отметить, что удобрительная ценность органических материалов во многом связана со степенью контактирования их с минеральной частью почвы: чем выше такой контакт, тем более заметен удобрительный эффект органических материалов. Поэтому мы провели размол исследуемых субстратов на мельнице с доведением отдельных частиц до 10^{-3} мм. Почва опытного участка имела следующую агрохимическую характеристику: содержание гумуса – 1,30%, количество подвижных форм фосфора и калия соответственно 67 и 85 мг/кг почвы, $pH_{\text{сол.}}$ – 5,0–5,1.

Исследовали сравнительное влияние обычного физического состояния удобрений и их размолотого аналога. Обе фракции удобрений вносились в верхний 0–25 см слой почвы, опытной культурой являлся картофель сорта Скарб. В течение вегетационного периода отбирались смешанные почвенные образцы, в которых определяли содержание гумуса, подвижные формы фосфора и калия. Полученные данные свидетельствуют, что все фракции сапропеля, торфа и агрогумата заметно повысили содержание в почве гумуса и оказали определенное влияние на увеличение количества подвижных форм фосфора и калия. В сравнительном отношении мелкие размолотые фракции удобрений оказали более заметное влияние на увеличение количества исследуемых показателей, чем их обычное состояние. Наиболее высокая урожайность получена на фоне внесенного торфа, составив 4,58–4,65 кг/м². На делянках с сапропелем она была на 7,5–9% ниже.

А. Н. Сухарев

МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА
В ОБЛАСТИ МАГНИТОСТРУКТУРНОГО ПЕРЕХОДА

Руководитель Ю.С. Кошкидько

Тверской государственный университет
Кафедра магнетизма

В последнее время появилось множество работ, посвященных исследованию сплавов Гейслера со стехиометрическим составом $Ni_{2+x}Mn_{1-x}Ga$ [1;2]. Причиной этого является то, что в данных соединениях помимо магнитного фазового перехода наблюдается структурный переход. В соединениях со стехиометрией $Ni_{2+x}Mn_{1-x}Ga$ существует область, в которой температура Кюри T_C совпадает с температурой мартенситного превращения T_m (2). Вследствие этого, в соединении $Ni_{2+x}Mn_{1-x}Ga$ ($0,18 \leq x \leq 0,27$), мартенситный и магнитный переходы протекают слитно – как единый магнитоструктурный фазовый переход I-го рода, который может сопровождаться такими явлениями, как гигантский магнитокалорический эффект (МКЭ) и магнитная память формы [1].

В большинстве работ, посвященных исследованию МКЭ в сплавах Гейслера, исследование величины МКЭ проводится косвенными методами, однако наиболее полную информацию о величине МКЭ можно получить лишь прямым измерением величины МКЭ.

На основании этого в данной работе были поставлены следующие задачи: провести прямое измерение величин МКЭ и сопоставить их с литературными данными, полученными косвенными методами.

Работа выполнена в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 годы и при поддержке гранта РФФИ 09-02-01274.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Khovaylo V.V., Skokov K.P., Koshkid'ko Yu. S. et al. // Phys. Rev. 2008. В. 78. Р. 060403-1
2. Khovaylo V.V., Buchelnikov V.D. et al. // Phys. Rev. 2005. В 72. Р. 224408

Н. В. Тепляков

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК
АССОЦИИРОВАННЫХ ФЛЮИДОВ НА ОСНОВЕ МЕТОДА
ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Руководитель В.В. Зубков

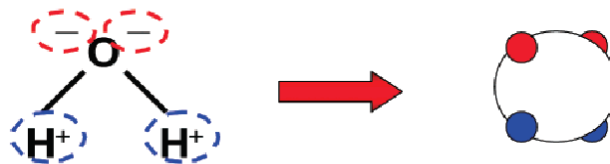
Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

В рамках метода функционала плотности (МФП) была найдена связь параметров потенциала ассоциированных флюидов с его температурой и плотностью в критической точке. Ван-дер-Ваальсовое взаимодействие описывалось с помощью потенциала Леннард–Джонса (с энергетическим параметром ε_{LJ} и характерным масштабом длины σ), в качестве модели химической связи было выбрано короткодействующее сильно анизотропное притяжение (с энергетическим параметром ε_{BH}), описываемое в рамках теории ассоциации Вертхейма [1;2]. В качестве объекта исследования был выбран флюид с водоподобными (water-like) молекулами, моделируемыми твердыми сферами с четырьмя центрами ассоциации. Для однородной фазы было получено следующее выражение для объемной плотности приведенного большого потенциала

$$\left(\omega^* = \frac{\omega}{6kT} \pi d^3 \right):$$

$$\omega^* = \eta(\ln \eta - 1) + \frac{\eta^2(4 - 3\eta)}{(1 - \eta)^2} - \frac{32\sqrt{2}}{3} \frac{\varepsilon_{LJ}}{kT} \left(\frac{\sigma}{d} \right)^3 \eta^2 + 4\eta \left[\ln \chi_A - \frac{\chi_A}{2} + \frac{1}{2} \right] - \mu,$$

где $\eta = \pi d^3/6$ – приведенная плотность, d – диаметр жесткой сферы, χ_A – функция, характеризующая водородную связь. Приведенное выражение позволило построить зависимости плотности ассоциированного флюида от температуры в состоянии равновесия массивных фаз:



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Jackson G., Chapman W. G., Gubbins K. E. // Mol.Phys. 1988. V.65, No. 1. P. 1–31.
2. Yang-Xin Yu, Jianzhong Wu // J.Chem.Phys. 2002. V.116. No. 16. P. 7094–7103.

Р. Д. Тимурзиева

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЛЕВОМИЦЕТИНА В ГЛАЗНЫХ КАПЛЯХ И ТАБЛЕТКАХ

Руководитель: В. М. Никольский

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Левомецетин (хлорамфеникол), приобретенный в аптеках города Твери переводили в раствор с концентрацией 0,25 моль/л с последующим вольтамперометрическим определением действующего препарата путем регистрации катодных пиков антибиотика на индикаторном ртутно-пленочном электроде в дифференциальном режиме съемки вольтамперограмм при потенциалах $-0,67$ В и $-0,60$ В относительно хлорсеребряного электрода на фоне 0,1 моль/л сульфата аммония при подкислении HCl до pH 5,1 при скорости развертки потенциала 25 мВ/с. Концентрацию левомецетина определяли по высоте пика методом добавок аттестованных смесей. Время анализа пробы не превышает 10 минут.

При анализе левомецетина измельчали в ступке 5 таблеток. Взяли навеску пробы 0,09 г, взвешенную с точностью до 0,001 г, внесли в мерную колбу вместимостью 100,0 мл, после растворения этой навески в 5,0 мл этанола и доводили бидистиллированной водой до метки. Затем, 0,2 мл полученного раствора внесли в кварцевый стаканчик вместимостью 25,0 мл и добавили бидистиллированную воду до 6,0 мл. Для анализа взяли аликвоту объемом 0,3 мл, довели фоновым раствором электролита (0,1 моль/л $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$) до 10,0 мл и далее провели вольтамперометрические измерения.

Предложенный способ прост, не требует больших трудозатрат, большого количества реактивов и может быть применен в любой химической лаборатории, особенно в настоящее время, когда налажен выпуск современных компьютеризированных анализаторов. Предложенный способ может быть использован для определения антибиотиков в биосистемах (кровь, моча и др.) при фармакокинетических исследованиях, в токсикологическом и техническом анализе лекарственных средств, в кормах для животных, а также может служить основой для создания диагностической системы метаболизма антибиотика.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Анисимова Л.С., Слипченко В.Ф., Федорчук В.А.// Пат. 2180748 (RU), 2002.
2. Позняковский В. М. Гигиенические основы питания и экспертизы продовольственных товаров. Новосибирск, 1996.

Л. Н. Толкачева

ИК СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ АЛЮМИНИЯ С ИМИНОДИАНТАРНОЙ И ЭТИЛЕНДИАМИН –N – N'- ДИАНТАРНОЙ КИСЛОТАМИ

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Установление взаимосвязи между составом, строением молекул и физико-химическими свойствами комплексов, производных янтарной кислоты, является важной научной проблемой в теоретическом плане для дальнейшего развития химии комплексов. Нами получены комплексоны металлов с комплексонами, производными янтарной кислоты: иминодиантарной и этилендиамин-N - N'-диантарной кислотами, соответственно ИДЯК и ЭДДЯК. Их важнейшим свойством является способность в условиях живой природы распадаться на составляющие, в состав которых входят ионы металлов в усвояемом виде и аминокислоты.

Нами были получены уточненные данные по физико-химическим характеристикам исследуемых комплексонов алюминия. Потенциометрическим методом определена устойчивость полученных комплексов при 25 °С и ионной силе 0.1 (KNO₃).

Комплексоны	рКп	Комплексная форма		
		AlOHL ²⁻	AlL ⁻	AlHL
ЭДДЯК	9.84	21.0 ± 0.2	14.6 ± 0.2	17.9 ± 0.2
ИДЯК	10.02	21,17 ± 0.03	13,98 ± 0.03	18,01 ± 0.04

Были выделены твердые средние комплексы и произведен их ИК спектральный анализ.

Соединение	ν (C=O)	ν_{as} (C-O)	ν_s (C-O)	$\Delta\nu$ (C-O) ($\nu_{as}-\nu_s$)
ИДЯК	1720	1687	1396	291
ЭДДЯК	1734	1633	1392	241
АИДЯК		1633	1398	235
АЭДДЯК		1637	1385	252

Как видно из таблицы, $\Delta\nu$ для комплексов ЭДДЯК больше, чем для ИДЯК, что свидетельствует о большей ковалентности связи М – O_{карб} в комплексах ЭДДЯК по сравнению с комплексами ИДЯК. Такой вывод подтверждается и большей устойчивостью комплексов Al³⁺ с комплексоном с большей потенциальной дентатностью.

А. С. Торозова, И. С. Яковлев

МЕТАЛЛОСОДЕРЖАЩИЕ КАТАЛИЗАТОРЫ В ПРОЦЕССЕ СЕЛЕКТИВНОГО ОКИСЛЕНИЯ L-СОРБОЗЫ

Руководитель Н.В. Лакина

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

В производстве аскорбиновой кислоты (витамина С) одной из важных стадий является окисление L-сорбозы до 2-кето-L-гулоновой кислоты. Актуальность изучения процесса прямого окисления L-сорбозы обусловлена возможностью значительного увеличения селективности реакции. В промышленности используются методы, в которые включены реакционные стадии защиты гидроксильных групп и снятия блокировки после проведения реакции. Данный процесс сопровождается большими потерями целевого продукта. Поэтому большое значение имеют исследования, связанные с прямым окислением кетогексоз при условии достижения высокой селективности процесса.

Проведены исследования новых каталитических систем в селективном окислении L-сорбозы. Были изучены катализаторы на основе комплексов платины, иммобилизованных в органические и неорганические матрицы. Исследованы полимерные матрицы: полистирол-блок-поли-4-винилпиридин, полистирол-блок-полиэтиленоксид, сверхсшитый полистирол, а также каталитические системы на основе оксида алюминия, оксида кремния и углерода. Платина иммобилизовывалась в виде $K[Pt(C_2H_4)Cl_3]$, H_2PtCl_6 . В качестве восстанавливающих агентов (для восстановления платины до металла) использовались боргидрид натрия и супергидрид $LiB(C_2H_5)_3H$, а в некоторых системах платина не восстанавливалась, что оказало положительный эффект на ее каталитические свойства. Используя определенную методику приготовления катализаторов, достигали получение коллоидов платины в полимере с размером наночастиц 3–6 нм. В каталитическом окислении L-сорбозы использовали как гомогенные растворы катализаторов, так и гетерогенные катализаторы, нанесенные на носители.

Проведено детальное изучение кинетики и механизма реакции при варьировании концентрации L-сорбозы, катализатора и подщелачивающего агента, температуры, времени реакции, интенсивности перемешивания, скорости подачи кислорода, а также конструирование кинетической модели процесса. Катализаторы и субстрат охарактеризованы РФЭ-, ИК-Фурье-спектроскопией и ПЭМ.

И. В.Третьякова

ПОЛУЧЕНИЕ И ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ
ПВДФ С ДОБАВЛЕНИЕМ МАГНИТНОГО ПОРОШКА ФЕРРИТА
БАРИЯ

Руководитель П. М. Пахомов

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

В настоящее время все большую популярность в электронике и робототехнике приобретают материалы, обладающие достаточной гибкостью и магнитными свойствами. С этой целью была поставлена задача получить новый композиционный материал на основе полимерной матрицы ПВДФ поливинилиденфторида (ПВДФ) с добавлением в него в качестве наполнителя магнитного порошка – феррита бария. Основным преимуществом полимерных магнитов по сравнению с металлическими являются их гибкость, лёгкая формуемость и сравнительно низкая стоимость.

Конкретная цель работы заключалась в получении новых полимерных композитов с высокими магнитными характеристиками и выяснении влияния концентрации наполнителя на строение и свойства материала.

Образцы получали формованием пленок из раствора ПВДФ в диметилацетамиде. Порошок феррита бария различных концентраций (по массе) добавлялся непосредственно в раствор. Раствор полимера с магнитным порошком тщательно размешивали и подвергали действию ультразвука для достижения однородного распределения частиц наполнителя в полимерной матрице. Полученные пленки высушивались в сушильном шкафу при температуре 100–150^oС в течение 1 часа.

Строение полученных композитов изучали методами оптической микроскопии на приборе «Nurion-1000» и ИК спектроскопии на Фурье-ИК спектрометре «Equinox 55» фирмы Bruker. На основе спектров рассеяния по методике, разработанной в лаборатории спектроскопии ТвГУ, оценивали степень наполнения образца, средний размер агрегатов из частиц наполнителя и их распределение по размерам. Независимо от оптических микроснимков образцов композитных пленок с помощью программы «Image Pro» также оценивали средний размер агрегатов из частиц наполнителя и их распределение по размерам.

Анализ ИК спектров и оптических микроснимков показал, что с применением ультразвуковой обработки средний размер агрегатов из частиц магнитного наполнителя уменьшается с 3 мкм до 5 микрон, что является важным фактором при создании однородных гибких магнитов.

П. О. Третьякова

ИЗУЧЕНИЕ АССОРТИМЕНТА ИЭКСПЕРТИЗА КАЧЕСТВА МАКАРОННЫХ ИЗДЕЛИЙ

Руководитель Г.П. Лапина

Тверской государственной университет
Кафедра физико-химической экспертизы биоорганических соединений

Цель научно-исследовательской работы – проведение сравнительного анализа физико-химических показателей качества макаронных изделий, реализуемых в торговой сети города Тверь, а также оценка их соответствия требованиям ГОСТ Р 51865-2002 «Изделия макаронные. Общие технические условия».

Для проведения испытаний отобраны пять образцов вермишели, изготовленных в соответствии с требованиями ГОСТ Р 51865-2002 группы А высшего сорта пяти производителей: ОАО «Макфа», ОАО «Липецкхлебмакаронпром», ОАО «Макаронно-кондитерское производство», ОАО «Байсад-Кашира», ОАО «Экстра-М». По ГОСТ Р 51865-2002 оценены следующие показатели:

- вкус, запах, цвет, состояние поверхности, излом и форма. Определение проводилось с помощью органолептических методов (ГОСТ Р 52377-2005);

- состояние изделий после варки по ГОСТ Р 52377-2005;

- влажность с использованием метода высушивания до постоянной массы навески образца при температуре 100–105°C. Сущность заключается в высушивании навески изделия, определённой до постоянно сухой массы, и определении потери массы по отношению к навеске (ГОСТ Р 52377-2005);

- кислотность. В основе метода – титрование гидроокисью натрия водной взвеси размолотых макаронных изделий (ГОСТ Р 52377-2005);

- количественное определение белка методом биуретовой реакции (метод основан на свойстве белка образовывать биуретовый комплекс фиолетового цвета с сернокислой медью и едкой щелочью). Интенсивность окраски, количественно определяемая на фотоэлектроколориметре (длина волны $\lambda=540$ нм), пропорциональна концентрации белка.

Результаты проведения органолептической и физико-химической экспертизы пяти отобранных образцов макаронных изделий, реализуемых в торговой сети Твери, позволили установить соответствие измеренных показателей качества макаронных изделий требованиям ГОСТ Р 52377-2005.

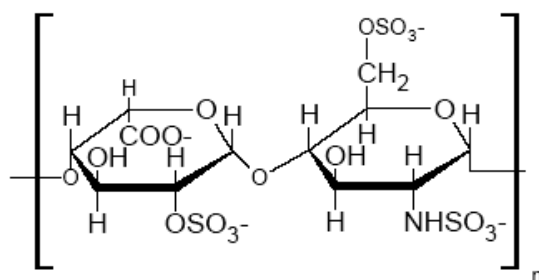
Т. В. Трофимова, А. В. Гуманюк

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ ГЕПАРИНА С КАТИОНАМИ БИОМЕТАЛЛОВ

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Гепарин – полисахарид, структуру которого составляют повторяющиеся дисахаридные звенья, включающие сульфатированные фрагменты α -L-идурановой кислоты и α -D-глюкозамина



со средней массой цепей порядка 12000 Да. В настоящее время препараты на основе гепарина являются основными антикоагулянтными средствами, применяемыми как при профилактике заболеваний, связанных с тромбозом, так и при их лечении.

Для изучения комплексообразования спектрофотометрическим методом в видимой части света ионов Cu^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} , Fe^{3+} с гепарином готовили растворы хлоридов солей соответствующего металла точной концентрации и гепарина той же концентрации, что и хлорид металла. Затем снимали спектр раствора соли металла и спектр раствора, содержащий хлорид металла и гепарин в соотношении 1:1. Растворы фотометрировали в кювете КФК 5 см с помощью спектрофотометра СФ-2000.

Получены зависимости оптической плотности раствора от кислотности среды на оптимальной длине поглощения, установлены интервалы рН существования комплексных форм и состав образующихся комплексов, определены коэффициенты молярного поглощения комплексных частиц.

Работа выполнена в рамках Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009 – 2013 гг.». Номер конкурса НК-595(2).

Р. В. Туровцев

УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ В
НИТРОАЛКАНАХ

Руководитель Ю.Д. Орлов

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

Наличие внутреннего вращения в молекулах влияет на термодинамические и химические свойства веществ. Данное явление обуславливает существование различных конформаций, характеризующихся определенными значениями потенциальной энергии и структурных характеристик – приведенного момента инерции и вращательной постоянной. Потенциальная энергия V и вращательная постоянная F изменяются периодически при изменении двугранного угла φ и описываются потенциальной функцией внутреннего вращения $V(\varphi)$ и структурной функцией $F(\varphi)$.

Решение торсионного уравнения Шредингера (1) при заданном виде $V(\varphi)$ и $F(\varphi)$ позволяет найти набор энергетических уровней (E_i) изучаемого внутреннего вращения, которые в дальнейшем используются при расчете вкладов в термодинамические свойства. Однако для его решения требуется знание функций $V(\varphi)$ и $F(\varphi)$:

$$\int_0^{2\pi} \psi^* \frac{\partial}{\partial \varphi} F(\varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi d\varphi + \int_0^{2\pi} \psi^* V(\varphi) \psi d\varphi = E \int_0^{2\pi} \psi^* \psi d\varphi \quad (1)$$

Вращательная постоянная связана с приведенным моментом инерции rI соотношением $F = \frac{\hbar^2}{2rI}$. Выражение $F(\varphi)$ обычно представляют рядом Фурье

$$F(\varphi) = F_0 + \sum_{i=1}^6 F_i \cos(i\varphi). \quad (2)$$

Нами были рассчитаны функции $rI(\varphi)$ и $F(\varphi)$ (приведенные моменты инерции и вращательные постоянные) для всех внутренних вращений в молекулах n -нитроалканов $C_3H_7NO_2$, $C_5H_{11}NO_2$, $C_6H_{13}NO_2$, $C_8H_{17}NO_2$. Для каждой связи С-С и С-Н было найдено строение конформера с шагом двугранного угла $\Delta\varphi = 10^\circ$ и для всех точек потенциальной функции вычислены rI и F . Аналитические выражения $F(\varphi)$ были получены аппроксимацией расчетных точек рядом (2). Это позволило получить явный вид уравнения Шредингера для внутреннего вращения в нитроалканах.

Ю. В. Францева

СМЕШАНОЛИГАНДНОЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ИОНОВ
НИКЕЛЯ И МЕДИ С ГЕПАРИНОМ И НЕКОТОРЫМИ
АМИНОКИСЛОТАМИ

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Металлокомплексы природных полисахаридов в последнее время все чаще находят применение в качестве лекарственных средств и средств местного применения. Так, например, металлокомплексы пектинов являются эффективными противоанемическими средствами, а хитозан-серебряный комплекс показывает выраженную антимикробную и ранозаживляющую активности.

Гепарин – сульфатированный полисахарид, 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. Уникальность гепарина состоит в том, что, являясь достаточно сильным антикоагулянтом прямого действия, он проявляет выраженную модулирующую и антидотную активность.

Нами начата работа по исследованию смешанолигандных металлокомплексов ионов микроэлементов с высокомолекулярным гепарином и некоторыми аминокислотами.

С помощью методов рН-метрического титрования и математического моделирования химических равновесий были исследованы химические равновесия в системах вида $M^{2+} - Na_4Hep - L$ (M^{2+} : Ni^{2+} , Cu^{2+} ; L – Gly, Arg). Установлена стехиометрия образующихся смешанолигандных комплексных форм и определены десятичные логарифмы констант их устойчивости. Выполнен элементный анализ выделенных комплексов, их термогравиметрическое и спектроскопическое изучение.

Работа выполнена в рамках Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009 – 2013 гг.». Номер конкурса НК-476П(10).

ВЛИЯНИЕ КОМПЛЕКСОНОВ И ИХ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСОВ НА СОДЕРЖАНИЕ РАСТИТЕЛЬНЫХ ПИГМЕНТОВ

Руководитель В.М. Никольский

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

В состав фотосинтетического аппарата высших растений входят два вида зелёных пигментов: хлорофилл «а» и хлорофилл «в». Основная функция хлорофиллов в растении – поглощение световой энергии и преобразование её в химическую. Жёлтые пигменты – каротиноиды (каротины и ксантофиллы) относятся к дополнительным пигментам.

Биометаллы (магний и цинк), соединения которых были использованы в эксперименте, оказывают существенное влияние на синтез растительных пигментов и формирование урожая. Недостаток как магния, так и цинка в почве вызывает различные формы хлороза растений и снижение их урожайности. С целью установления механизма воздействия ЭДДЯК, ИДЯК и их комплексов с магнием и цинком на рост и развитие различных культурных растений был поставлен мелкоделяночный опыт, отражающий влияние предпосевной обработки семян такой зерновой культуры как яровая пшеница (класс однодольные), и зеленой культуры – шпината (класс двудольные) – на ряд физиологических параметров развития этих растений, в частности на содержание растительных пигментов в листьях.

Содержание растительных пигментов в листьях пшеницы определяли в начале стадии колошения путем исследования ацетоновых вытяжек спектрофотометрическим методом с использованием калориметра – спектрофотометра КФК-3.

Опыты показали, что для яровой пшеницы наилучшим стимулятором образования хлорофиллов оказалась смесь (Mg+Zn) – ИДЯК ($\Delta W_{\text{ХЛ}} = 57\%$ по отношению к контролю). На растения шпината наибольшее воздействие, которое стимулирует образование растительных пигментов (как хлорофиллов, так и каротиноидов), оказало замачивание семян в смеси (Mg+Zn)- ЭДДЯК ($\Delta W_{\text{ХЛ}} = 50\%$ и $\Delta W_{\text{КАР}} = 52\%$). Заметное стимулирующее действие на оба вида опытных растений оказывают и свободные ИДЯК и ЭДДЯК. Можно предположить, что продукты их распада в растительном организме не только идут на синтез пептидов, но и используются в других реакциях, например трансаминирования при биосинтезе глутаминовой кислоты, необходимой для образования хлорофиллов.

Таким образом, применительно к ЭДДЯК и ИДЯК экспериментальные данные позволили заключить, что комплексонаты Zn и Mg положительно сказываются на состоянии пигментной системы, инициируя увеличение как хлорофиллов «а» и «в», так и суммы каротиноидов.

УДК: 544.05

И. С. Цветкова

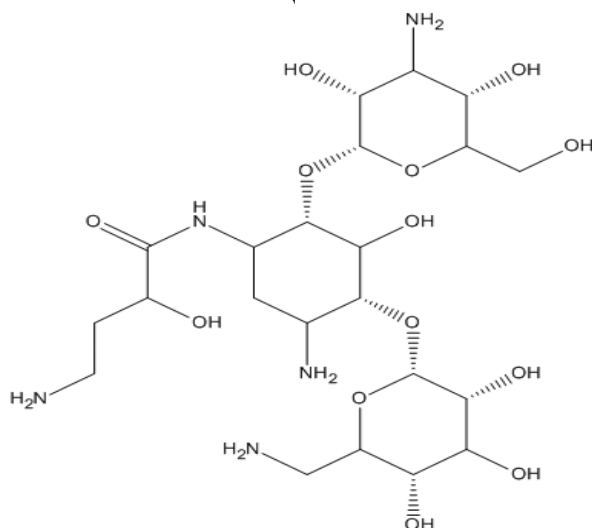
ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ НЕКОТОРЫХ ИОНОВ МЕТАЛЛОВ С АМИКАЦИНОМ

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, прежде всего присутствующих в биологических системах.

Одними из наиболее применяемых антибиотиков являются аминогликозиды, в частности амикацин:



Методом рН-метрического титрования было проведено исследование комплексообразование ионов Cu^{2+} , Zn^{2+} , Cd^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} , Mn^{2+} , Al^{3+} , Fe^{3+} с амикацином на фоне нитрата калия 0,1М при температуре 25,0⁰С. Для выполнения работы использовали сульфат амикацина (порошок для инъекций). Титрование проводили раствором NaOH точной концентрации.

Математическая обработка рН-метрических данных была проведена с использованием специализированной программы расчета химических равновесий New DALSFEK (КСМ Soft, 2000 г.). Критерием правильности выбранной модели служила сходимость экспериментальной кривой титрования с кривой, полученной программой в ходе расчета. Рассчитаны константы устойчивости для каждого комплексообразователя.

Работа выполнена в рамках Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009 – 2013 гг.». Номер конкурса НК-595(2).

Ю. В. Черникова

РАСЧЕТ ХИМИЧЕСКИХ РАВНОВЕСИЙ В СИСТЕМЕ
ФРАКСИПАРИН – Ca^{2+} - NaCl - H_2O

Руководитель: М.А. Феофанова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Фраксипарин (надропарин кальция) – препарат из класса антикоагулянтных средств, низкомолекулярный гепарин со средней массой цепи 4500 Да. В продажу поступает в виде фармакологического раствора в шприц-ампулах. Помимо самого гепарина такой раствор содержит и ионы кальция. Сегодня, помимо традиционного высокомолекулярного гепарина клиницисты все чаще назначают фраксипарин, лишенный недостатков традиционного гепарина. Следует отметить, что металл-ионные равновесия с участием ионов металлов и фраксипарина совершенно не изучены. Целью настоящего исследования является расчет металл-ионных равновесий в системе фраксипарин – Ca^{2+} - NaCl - H_2O . При проведении эксперимента использовали коммерческий препарат фраксипарина производства GlaxoSmithKline (Франция) с концентрацией активного компонента 5700 ЕД в 0,6 мл. Принято считать, что 1 ЕД гепарина соответствует 0,0077 мг вещества. Следовательно, исходный раствор фраксипарина имеет концентрацию 0,12 М. На первом этапе эксперимента с помощью метода комплексонометрического титрования определяли содержание ионов кальция в исходном растворе. Найдено, что содержание ионов кальция в исходном растворе составляет 0,104 М. То есть, соотношения между ионы металла и лиганд содержатся в исходном растворе в эквимольных количествах. Металл-ионные равновесия с участием кальция и фраксипарина исследовали с помощью метода рН-потенциометрии и математического моделирования. В исследуемом растворе в зависимости от величины рН идентифицированы следующие комплексные формы: CaL ($\lg\beta=3,25$), CaHL_2 ($\lg\beta=10,39$) и CaOHL ($\lg\beta=5,49$). Выделен и проанализирован средний комплекс ионов кальция с фраксипарином. Представляется интересным исследовать металл-ионные взаимодействия фраксипарина и с другими ионами биометаллов с целью определения параметров селективности и эффективности фраксипарина.

Д. Н. Чернов

ВЛИЯНИЕ ЛИНЕЙНОГО НАТЯЖЕНИЯ НА СВОЙСТВА
НАНОРАЗМЕРНЫХ ОБЪЕКТОВ

Руководитель доцент А.Р. Новоселов

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

Состояние вещества в окрестности линии пересечения межфазных поверхностей отличается как от состояния в объеме, так и от состояния вблизи протяженной во всех направлениях границы раздела фаз. Влияние этого отличия может быть учтено введением в рассмотрение линейных избытков термодинамических потенциалов. На основе оценок линейной плотности избыточной свободной энергии (линейного натяжения) линии пересечения межфазных поверхностей методом термодинамической теории возмущений в настоящей работе исследовано влияние линейного натяжения на различные термодинамические характеристики различных объектов. Ввиду того, что линейные избытки пропорциональны первой степени характерной длины, а поверхностные – ее квадрату, размеры объектов, при которых линейное натяжение проявляет себя, соответствуют нанометровому диапазону. В данной работе проведенные оценки линейного натяжения ребер кристалла использованы для исследования размерной зависимости среднего поверхностного натяжения $\sigma(r)$. Показано, что характер зависимости $\sigma(r)$ соответствует известной формуле Толмена для зависимости поверхностного натяжения жидкой сферической капли от её радиуса. Также рассмотрено избыточное давление в кристалле, обусловленное поверхностным натяжением граней и линейным натяжением ребер. Эти величины играют определяющую роль при анализе фазовых равновесий с участием кристаллических тел.

Проведенные оценки показывают, что характер размерной зависимости термодинамических характеристик нанокристаллов и нанокпель вполне аналогичен. Это позволяет распространить термодинамические соотношения, описывающие жидкофазные наноразмерные системы, на системы, включающие кристаллические тела.

Раскрытие внутри растянутого твердого тела трещины сопровождается изменением свободной энергии, складывающегося из свободной энергии новой поверхности раздела фаз и из уменьшения энергии упругой деформации. Нами исследовано возможное влияние линейного натяжения периметра трещины на работу ее образования. Показано, что учет линейного натяжения приводит к некоторому уменьшению свободной энергии трещины, однако критический размер трещины, по достижении которого она начинает самопроизвольно расти, остается практически неизменным. Таким образом, можно сделать вывод, что анализ условий появления трещин с размером выше критического не требует учета свободной энергии линии пересечения межфазных поверхностей.

Е. М. Чернова

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ
СВОБОДНЫХ РАДИКАЛАХ СПИРТОВ

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

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

Квантово-механическая «теория атомов в молекулах» (QТАИМ) Бейдера [1] позволяет представить соединение в реальном пространстве в виде совокупности фрагментов, так называемых эффективных «топологических» атомов, и отнести им парциальные свойства. Границы таких атомов определяются из равенства нулю потока вектора градиента электронной плотности. Особый интерес представляет изучение соединений со свободной валентностью – свободные радикалы (R^\bullet) в связи с их высокой реакционной способностью. R^\bullet участвуют в цепных реакциях, протекающих в технологических, биологических и природных процессах.

Нами с использованием пакета программ Gaussian'03 [2] были произведены квантово-механические расчеты равновесного геометрического строения свободных радикалов вида $CH_3(CH_2)_nO^\bullet$ и $C^\bullet H_2(CH_2)_nOH$, $n = 0 \div 9$, методом B3LYP в базисе 311++G(3df,3pd). Характеристики электронной плотности атомов и групп (заряд, энергия и объем) получены с помощью программы AIMALL[3]. Было изучено влияние свободной валентности на углеводородную цепь, определено затухание индуктивного эффекта.

Было найдено, что в соединениях $CH_3(CH_2)_5O^\bullet$ и $C^\bullet H_2(CH_2)_6OH$ перекрывание влияния концевых групп на CH_2 цепь прекращается, т.к. возмущение от O^\bullet и OH распространяется на четыре CH_2 , $C^\bullet H_2$ – на две, а CH_3 – только на соседнюю группу CH_2 . Характеристики для последующих соединений в гомологических рядах свободных радикалов спиртов, можно находить добавлением параметров «стандартной» CH_2 группы. Свойства фрагментов, не испытывающих влияние свободной валентности, совпадают с аналогичными в спиртах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. М.: Мир. 2001.
2. Gaussian 03. Revision E.1./M.J.Frisch et.al./, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2003.
3. AIMALL (version 10.05.04), Todd A.Keith 2010 (aim.tkgristmill.com).

И. В. Шальнов

НАНОМАТЕРИАЛЫ И БИОПРЕПАРАТЫ В ТЕХНОЛОГИИ ВОЗДЕЛЫВАНИЯ КУКУРУЗЫ

Руководитель З.И.Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра общего земледелия и растениеводства

В увеличении производства продукции животноводства большая роль принадлежит созданию надежной кормовой базы. Поэтому выращивание кукурузы на силос с получением початков в молочно-восковой и восковой спелости по «зерновой» технологии является актуальным для Верхневолжья. Неизученными являются вопросы использования в технологии достижений научно-технического прогресса – наноматериалов и биологических препаратов. В связи с этим нами в 2009 и 2010 гг. проведены комплексные исследования на опытном поле ТГСХА на дерново-среднеподзолистой супесчаной почве. Схема опыта включала варианты: 1) контроль-1 (посев сухими семенами); 2) обработка семян биопрепаратом «Альбит»; 3) обработка семян премисом; 4) инкрустация семян зарубежным наноматериалом; 5) инкрустация семян российским наноматериалом; 6) замачивание семян в растворе зарубежного наноматериала; 7) замачивание семян в растворе российского наноматериала; 8) контроль-2 (замачивание семян в воде); 9) замачивание семян в растворе «Макс-Супер гумат»; 10) корневая подкормка «Макс-Супер гуматом».

Результаты двухлетних исследований показали, что применение препаратов для инкрустации семян кукурузы способствует повышению её урожайности. Более высокие прибавки зеленой массы (27,3%) обеспечила обработка наноматериалом зарубежного производства. Прибавки урожая сухой массы были практически одинаковы при применении зарубежного и отечественного наноматериалов (45–49%). Обработка семян биопрепаратом «Альбит», в большей мере чем другими материалами увеличивает сбор сухого вещества с гектара, прибавка к контролю составила 54,2%. Особенно высокие прибавки от «Альбита» наблюдались в засушливом и жарком 2010 г. за счет образования большего числа более спелых початков на растении. Инкрустация семян наноматериалом повышает ростовые процессы, увеличивает параметры растений, стимулирует развитие корневой системы, улучшает ход продукционного процесса, снижает или исключает полностью поражение кукурузы гельминтоспориозом и пузырчатой головней.

Применение в технологии возделывания кукурузы для инкрустации семян наноматериала отечественного производства и его зарубежного аналога позволяет получать с гектара 3,74 – 4,11 тыс. руб. условно-чистого дохода, увеличивает уровень рентабельности в 1,6 – 1,7 раза.

А. А. Яковлев

ВЛИЯНИЕ ИМИНОДИАНТАРНОЙ КИСЛОТЫ НА ГИДРАТАЦИЮ ИЗВЕСТКОВО-ПЕСЧАНОГО И ИЗВЕСТКОВО-ПЕСЧАНО- ЦЕМЕНТНОГО ВЯЖУЩИХ

Руководитель В. М. Никольский

Тверской государственной университет
Кафедра органической химии

Комплексоны – производные дикарбоновых кислот – находят применение в различных отраслях промышленности: например, в рецептурах водосмываемых флюсов при пайке металлов как замедлитель гидратации гипсового вяжущего, в составе антианемического препарата, в качестве ростостимулирующего препарата. Целью работы является изучение возможности использования иминодиантарной кислоты в качестве добавки-замедлителя гидратации известково-песчаного вяжущего (ИПВ) и известково-песчано-цементного вяжущего (ИПЦВ). Результаты исследований представлены в таблице:

Состав	Температура воды затворения, °С	Добавка комплексона, % мас.	Период «торможения», мин	Время достижения температуры 80 °С, с
ИПВ	20	Нет	-	135
ИПВ	20	0,6	60 – 195	390
ИПВ	25	Нет	-	113
ИПВ	25	0,6	45 – 180	315
ИПЦВ	20	Нет	-	405
ИПЦВ	20	0,6	60 – 390	840
ИПЦВ	25	Нет	-	300
ИПЦВ	25	0,6	120 - 345	675

На основе полученных результатов можно сделать вывод о возможном эффективном применении иминодиантарной кислоты в качестве добавки-замедлителя гидратации известково-песчаного и известково-песчано-цементного вяжущих.

А. Ю. Яковлев, А. В. Чередниченко

СИНТЕЗ АМФИФИЛЬНЫХ СОПОЛИМЕРОВ ВБЛИЗИ МЕЖФАЗНОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Руководитель Н.Ю. Старовойтова

Тверской государственный технический университет
Кафедра технологии полимерных материалов

Как известно, в зависимости от способа и условий получения сополимера, распределение звеньев в сополимерной цепи может варьироваться от случайного до регулярного. Статистика распределения звеньев может оказывать значительное влияние на свойства отдельных макромолекул и в конечном итоге полимерного материала.

Несколько лет назад* была предложена идея создания сополимеров через конформационно-зависимый дизайн последовательностей. Полученные таким способом белковоподобные и адсорбционно-настроенные сополимеры проявляют способность восстанавливать первичную конформацию при помещении в условия, в которых они были получены. Кроме того, характеристики таких сополимеров отличаются от характеристик случайных и случайно-блочных аналогов, что позволяет предположить у них наличие особой статистики распределения блоков по цепи.

В данной работе методом компьютерного моделирования проводится изучение сополимеризации вблизи плоской поверхности, протекающей в условиях избирательной адсорбции мономеров.

Для моделирования использовался метод Монте-Карло на решетке. Полимерная цепь представлена моделью флуктуирующих связей. Адсорбционный потенциал задан как $\varepsilon(z)=\varepsilon/z^{1/3}$, где ε – значение адсорбционной энергии при контакте с поверхностью, т.е. на расстоянии $z=1$. Мономеры *A*-типа адсорбируются на поверхности с постоянной энергией адсорбции $\varepsilon = -0.26kT$, при которой в поверхностном слое находится в среднем 95% от всех мономеров *A*-типа (остальная их часть равномерно распределена в растворе). Мономеры *B* не имеют сродства к поверхности, т.е. $\varepsilon=0$. Взаимное притяжение мономеров отсутствует, что моделирует условия термодинамически хорошего растворителя (атермическая система).

Показано, что полимерная цепь, выращенная сополимеризацией вблизи плоской поверхности, при соблюдении некоторых условий демонстрирует наличие дальнедействующих корреляций и обладает специфической градиентной структурой.

* Khokhlov A.R., Khalatur P.G. // Physica A . 1998. Vol.249.P.253.

И. А. Яковлев

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВНЕШНИХ
МАГНИТНЫХ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ НА ПРОЦЕССЫ
ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКИ СТАЛЕЙ

Руководитель Л.Е. Афанасьева

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии металлов и материаловедение

Перспективность магнитных и электрических способов воздействия на параметры лазерной обработки обусловлена их бесконтактным характером и гибкостью управления*. Настоящая работа посвящена экспериментальному исследованию влияния внешних магнитных и электрических полей на процессы лазерной обработки сталей и разработку схем сопряжения источников поля с лазерными технологическими установками.

Результаты исследования показали, что к основным физическим механизмам, определяющим воздействие внешних полей на процессы лазерной обработки, относятся: изменение параметров движения ионов и электронов в частично ионизированной плазме, образующейся в области фокального пятна лазерного излучения. В этой связи изменение параметров плазмы за счёт электрических и магнитных компонент сил Лоренца, действующих на ионы и электроны, может оказывать значительное влияние на процесс обработки в целом. Вторым механизмом может быть возникновение тока термоэлектрического происхождения (эффект Зеебека) в расплаве за счёт больших различий локальных температур металла в зоне плавления и основной холодной части обрабатываемого изделия. Расчётные оценки и прямые измерения с помощью датчиков Холла показали, что термоэлектрический ток может быть весьма значительным (порядка единиц ампер). В дополнение к двум вышеуказанным эффектам усиление влияния магнитного поля на поведение расплава может быть осуществлено с помощью электрического тока (постоянного или переменного), пропускаемого через обрабатываемое изделие от отдельного источника.

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

* Grechishkin R.M., Afanasieva L.E., Pastushenkov Yu.G., Maksimov N.N. // Measurement Science and Technology. Vol. 5. P. 853-860.

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Азатян К.А., Варданян Л.В., Гречан А.А., Плиева Л.Г., Альраванех Хамза Мохаммад Мусаллам, Гуллам Наби Гулам Седик	3
Алексеева Е.П.	4
Алманцева П.А., Кузьмина Е.М., Семендяев В.А., Скульбеда В.А., Судницына Е.А.	5
Анисимов А. Ю.	6
Арефьев А.И.	7
Бабенко М.В.	8
Баранова О.А.	9
Баранова О.А.	10
Боднарчук Я.В., Боднарчук В.В., Усманов С.Р.	11
Бордин Д.А., Журавлёв Н.А., Мартиросов А.А.	12
Боронихин М.В.	13
Брославский М.В.	14
Варакина Ю.Б.	15
Васильев А.С.	16
Васильев А.С.	17
Васильева Д.В., Конькова А.С.	18
Вахнина И.С.	19
Голосова С.А., Шиманская Е.И., Харламова О.В.	20
Голубева М.В., Алексеева Е.П.	21
Гуляев М.В.	22
Гуманюк А.В., Трофимова Т.В., Цветкова И.С.	23
Густова А.В., Ахметзянова У.Р., Степачева А.А.	24
Дожделев А.М.	25
Дудкина Т.А., Прошина Е.Ю., Тарасов М.С.	26
Жданова О.В.	27
Журавлев Е.В., Шрайнер А.А.	28
Журавлев О.Е.	29
Журавлева М.В.	30
Золотухин Э.В.	31
Золотухина С.И., Котова А.А., Супрун А.М.	32
Зоренко П.О.	33
Ильяшенко Н.В., Оленева Ю.Г.	34
Ильяшенко Н.В., Шевчук И. П., Куликов Г.С.	35
Ионина О.С., Кондратьев Р.А.	36
Козлова Е.В.	37
Козолетов Э.Р.	38
Колобков В.Н.	39
Кольцов В.А.	40

Коняева М.Б.	41
Коробейников П.А.	42
Котова А.А., Супрун А.М.	43
Кузьмич Ю.А.	44
Кулакова Ю.С., Цветкова И.С.	45
Кулакова Ю. С.	46
Кустова Е.А.	47
Лебедев А.В., Репин А.А.	48
Лившиц Е.С.	49
Лисавина Л.В.	50
Лутковская А.Ю., Вахнина И.С.	51
Лутковская А.Ю.	52
Мальшева О.А.	53
Матвеева О.В.	54
Маякова М.Н., Карпухин Л.Е., Алексеева Е.П.	55
Мешков А.В.	56
Михайлов И.В.	57
Михайлова В.Р.	58
Морозов Е.Г.	59
Муравьёв Д.С.	60
Мурзанов М.С., Кучер Д.С.	61
Нарышкин А.В.	62
Носков П.А.	63
Орлов М.Ю.	64
Передерищека А.В., Вахлин К.А.	65
Пипо Д.А.	66
Питык А.В.	67
Рогова Е.А.	68
Рула Е.С.	69
Савельева В.С., Андрианова Я. В., Мельников Н.В., Маркин Г.И.	70
Савельева В.С., Андрианова Я.В., Хальназаров Д.Р.	71
Садикова Е.Н.	72
Саклакова Е.В.	73
Сальникова П.Ю., Житинева Д.А.	74
Сафронов Д.В.	75
Семёнова Ю.О.	76
Сидорова Е.В.	77
Синявина Т.В.	78
Ситников В.Н.	79
Ситникова В.Е., Кудряшова Е.В.	80
Смирнова М.В.	81
Смыслова М.А.	82
Сухарев А.Н.	83

Тепляков Н.В.	84
Тимурзиева Р. Д.	85
Толкачева Л.Н.	86
Торозова А.С., Яковлев И.С.	87
Третьякова И.В.	88
Третьякова П.О.	89
Трофимова Т.В., Гуманюк А.В., Новикова В.В.	90
Туровцев Р.В.	91
Францева Ю.В.	92
Цветков А.В.	93
Цветкова И.С.	94
Черникова Ю.В.	95
Чернов Д.Н.	96
Чернова Е.М.	97
Шальнов И.В.	98
Яковлев А.А.	99
Яковлев А.Ю., Чередниченко А.В.	100
Яковлев И.А.	101