

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Тверской государственный университет»

XXXI КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ

**Ежегодная всероссийская научно-техническая
конференция студентов и молодых учёных
«Физика, химия и новые технологии»,**

27–29 марта 2025 года, г. Тверь

Тезисы докладов

ТВЕРЬ 2025

УДК 902.722
ББК 53.3(2Р) – 4ТВ
К21

Ответственные за выпуск:

доктор химических наук П.М. Пахомов
кандидат химических наук Н.П. Русакова

К21

XXXI Каргинские чтения: тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2024. – 233 с.

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

Статьи поступили в редакцию 16 мая 2025 года.

Подписаны в печать 20 июня 2025 года.

ISBN 978-5-7609-2044-7

© Тверской государственный
университет, 2025
© Авторы статей, 2025

Оглавление

<i>Агошкова Анжелика Александровна</i>	
Монохромный белый сад как элемент декоративного озеленения	20
<i>Акинчиц Мария Викторовна</i>	
Получение гидроуглей из древесных опилок	21
<i>Андреев Алексей Алексеевич, Бессуднова Александра Романовна, Румянцев Виталий Анатольевич, Блинова Алиса Владимировна, Заболева Екатерина Валерьевна</i>	
Способ профилактики рецидива кариеса зубов, пульпита и устройство для его реализации	22
<i>Белова Виктория Валерьевна</i>	
Термодинамические параметры смесей анизол-н-гексан-пропанол-2 в до-, суб- и сверхкритической области	23
<i>Богданова Анна Михайловна, Егорова Екатерина Максимовна</i>	
Исследование каталитической активности комплексов Cu(I) в синтезе вторичных аминов.....	24
<i>Волков Александр Олегович</i>	
Разработка технологии очистки меланиновых веществ от сопутствующих примесей.....	25
<i>Воробьева Анна Дмитриевна, Шуманова Галина Алексеевна</i>	
Сравнение процесса деоксигенации стеариновой кислоты в классическом и сверхкритическом растворителе	26
<i>Вострикова Наталья Валерьевна</i>	
Обеспечение качества изделий из пластмасс, изготовленных методом литья под давлением.....	27
<i>Гультяева Анна Сергеевна</i>	
Исследование совместимости поливинилхлорида с ненасыщенной полиэфирной смолой для создания гибридного полимерного связующего	28
<i>Дмитриева Анастасия Алексеевна</i>	
Кинетика каталитической деоксигенации анизола в сверхкритических условиях	29
<i>Дудиловская Александра Валерьевна</i>	
Применение ионной жидкости в сканирующей электронной и атомно-силовой микроскопии	30
<i>Ершова Екатерина Андреевна</i>	
Исследование процесса ожигения сельскохозяйственных отходов	31

<i>Жамлин Александр Васильевич</i>	
Исследование термодеструкции сополимера этилена с октенем	32
<i>Зимин Руслан Владимирович</i>	
Разработка оптического датчика на основе данных OTDR.....	33
<i>Зиновьев Николай Алексеевич</i>	
Подбор марок филамента АБС-пластика, пригодных для FDM-печати..	34
<i>Зув Иван Александрович, Никутин Данил Андреевич, Хеззиева Алтынай</i>	
Технология синтеза жирноароматических полиамидов реакционным формованием	35
<i>Колобков Владимир Владимирович</i>	
Технология переработки отходов производства капролактама	36
<i>Колпакова Варвара Михайловна</i>	
Создание монохромного голубого цветника на приусадебном участке как элемент ландшафтного дизайна	37
<i>Кочерова Влада Аркадьевна</i>	
Изменение продуктивности овощных культур при использовании боратного комплекса.....	38
<i>Кочерова Влада Аркадьевна</i>	
Исследование хелатов селена при возделывании картофеля	39
<i>Крылов Даниил Олегович, Емельянова Софья Денисовна</i>	
Катализатор селективного гидрирования карбоксильных соединений ...	40
<i>Кудласевич Иван Алексеевич</i>	
Измельчитель сыпучего растительного сырья.....	41
<i>Кудласевич Иван Алексеевич</i>	
Технологические аспекты применения азотных удобрений в посевах овса	42
<i>Кузмин Артём Анатольевич</i>	
Влияние комплексонов микроэлементов на содержание пигментов в листьях полевых культур	43
<i>Кузмин Артем Анатольевич</i>	
Древесно-кустарниковые культуры для устойчивого декоративного озеленения в Тверском регионе.....	44
<i>Кузмин Артем Анатольевич</i>	
Влияние удобрений на урожайность картофеля сорта Ривьера.....	45
<i>Кузьмина Ольга Евгеньевна</i>	
Влияние систем удобрения на урожайность сортов картофеля.....	46

<i>Кузьмина Ольга Евгеньевна</i>	
Зависимость биохимического состава кочанов капусты белокочанной от комплексонов молибдена.....	47
<i>Кулагина Полина Владимировна</i>	
Применение селена при микроклональном размножении антоцианосодержащих сортов картофеля	48
<i>Кулешова Анна Юрьевна, Бакаева Мария Андреевна</i>	
Термохромные полимерные метки в профессиональной одежде.....	49
<i>Лисица Михаил Алексеевич</i>	
Сравнительное изучение содержания беталаинов спектрофотометрическим методом.....	50
<i>Литвинов Игорь Сергеевич</i>	
Использование цветочных растений для создания ароматического сада	51
<i>Ловягина Мария Романовна</i>	
Изучение паро-жидкостного равновесия системы н-гексан-стеариновая кислота в сверхкритической области.....	52
<i>Майфат Денис Александрович</i>	
Разработка испытательного стенда для верификации алгоритмов цифровой обработки сигналов на ПЛИС.....	53
<i>Майфат Денис Александрович</i>	
Разработка программного обеспечения для формирования и отправки сигналов с ПК на ПЛИС по Ethernet	54
<i>Макарова Эмилия Викторовна</i>	
Использование мха в декоре помещений	55
<i>Монжаренко Маргарита Александровна</i>	
Палладийсодержащие катализаторы гидрирования жирных кислот	56
<i>Некрасова Анна Владимировна</i>	
Определение содержания антоцианов в плодах черники, жимолости и черноплодной рябины.....	57
<i>Носаева Валентина Сергеевна</i>	
Изучение кинетики получения вератола в присутствии цеолитного катализатора.....	58
<i>Павлов Артем Сергеевич</i>	
Пиролиз отходов производства кофе в присутствии редкоземельных и амфотерных оксидов.....	59

Петрова Арина Игоревна

Синтез и анализ комплексов метионина с кальцием и железом 60

Рябчицова Алина Валериевна

Исследование антиоксидантной активности водных экстрактов,
полученных из шрота *Mentha piperita* 61

Савицкая Юлия Александровна

Влияние объёмного расхода на размерную точность изделий на основе
полимерных композиционных материалов, полученных методом
FDM/FFF-печати 62

Смирнова Мария Павловна, Кудрявцева Екатерина Викторовна

Биохимический метод получения композитов хитозан-наночастицы
серебра..... 63

Соколов Иван Владимирович

Термодинамические параметры смеси н-гексан-пропанол-2 в диапазоне
температур 30-300 °С..... 64

Соколова Елена Сергеевна, Пащенко Мария Павловна

Платиносодержащие каталитические системы, стабилизированные в
реакции N-алкилирования ароматических аминов-интермедиатов синтеза
фармацевтических субстанций..... 65

Солодкова Софья Дмитриевна

Изучение влияния гуминовых удобрений на качество и рост семян
пшеницы..... 66

Спиридонов Семён Сергеевич

Изучение липазной активности личинок восковой моли 67

Тарасова Анастасия Алексеевна

Исследование процесса ожигения древесной коры 68

Терешина Екатерина Денисовна

Конверсия продуктов деполимеризации лигнина 69

Ткаченко Сергей Васильевич

Изменение биохимического состава корнеплодов моркови при
использовании калийных удобрений 70

Ткаченко Сергей Васильевич

Эффективность применения опоки как сорбента микроэлементов при
выращивании овощных культур..... 71

Федоренко Ольга Григорьевна

Стилизация дачного участка под китайский сад в Тверской области..... 72

Цветков Дмитрий Юрьевич

Синтез и анализ комплексов метионина с марганцем и медью 73

Матвей Максимович Цыганков

Перспективы получения высокопрочного трикотажа на основе кулирных переплетений нитей сверхвысокомолекулярного полиэтилена..... 74

Черепанова Маргарита Валерьевна

Квантово-химическое исследование комплексов на основе диацетилмоноксима 75

Чистов Николай Дмитриевич

Использование корнестимулятора Корневина для черенкования йошты 76

Чистов Николай Денисович

Влияние соединений молибдена на формирование урожая гороха посевного..... 77

Чистов Николай Денисович

Зависимость продуктивности столовых сортов моркови от видов калийных удобрений..... 78

Шапошников Василий Юрьевич

Получение биоугля торрефикацией и исследование его адсорбционных свойств..... 79

Шарапова Анна Андреевна, Кудрявцева Екатерина Викторовна

Синтез стабильных коллоидных растворов наночастиц оксида меди (I) и исследование их фотокаталитических свойств..... 80

Шашуев Андрей Алексеевич

Получение и исследование биоугля гидротермальной карбонизацией древесной коры..... 81

Щихорская Елизавета Дмитриевна

Изучение эффективных методов экстракции биофлавоноидов..... 82

Яковлев Борис Алексеевич

Исследование кинетики каталитического пиролиза сшитого полиэтилена 83

Яковлева Агата Анатольевна

Биоактивация семян конопли (*Cannabis sativa* L.) и льна (*Linum usitatissimum* L.) методом кратковременного проращивания..... 84

Ясиновенко Мария Андреевна

Жидкофазное карбонилирование бромбензола в синтезе эфиров бензойной кислоты..... 85

<i>Александров Евгений Васильевич</i>	
Влияние включений кристаллического сегнетоэлектрика на диэлектрические характеристики композита P(VDF-TRFE) + ДТГС	86
<i>Александрова Дарья Дмитриевна</i>	
Влияние примеси церия на процессы переключения в кристаллах ниобата бария стронция.....	87
<i>Анофриев Виталий Александрович</i>	
Исследование фрактального рельефа тонких плёнок молибдена.....	88
<i>Бериллов Владислав Васильевич</i>	
Применение халькогенидных стёкол в инфракрасной оптике.....	89
<i>Вересов Сергей Александрович, Серов Сергей Викторович</i>	
Влияние скорости охлаждения на структуру четырёхкомпонентных наночастиц	90
<i>Галкин Иван Константинович</i>	
Процессы переключения медьсодержащих кристаллов триглицинсульфата	91
<i>Глинский Дмитрий Романович</i>	
Модифицированная керамика ниобата калия натрия оксидом циркония	92
<i>Гурьева Светлана Анатольевна, Борисов Артем Константинович</i>	
Кинетика полиморфных превращений трикозана при нагревании	93
<i>Гусева Анна Марковна, Сметанникова Софья Дмитриевна</i>	
Применение методов МСМ для выявления доменов соединений $RFe_{11}Ti$	94
<i>Егорова Карина Автандиновна</i>	
Влияние знакопеременного магнитного поля на микротвёрдость монокристаллов германия и кремния	95
<i>Зварич Мария Сергеевна</i>	
Пироэлектрические свойства монокристаллов ниобата бария стронция, легированных ионами тулия и гольмия.....	96
<i>Зорин Данила Романович, Веселов Алексей Дмитриевич</i>	
О формировании луковичной структуры в бинарных наночастицах Ti-V	97
<i>Каракеян Игорь Владимирович</i>	
Икосаэдрические нанокластеры как структуры, предшествующие плавлению металлических наночастиц	98

<i>Карапетян Альберт Арамович, Кожорина Ксения Андреевна</i>	
Релаксационные процессы при перемагничивании гетерогенных сплавов SmCo_3Cu_2	99
<i>Качановская Светлана Витальевна</i>	
Расчёт колебательных спектров суматриптана сукцината	100
<i>Козенкова Марина Владимировна, Ракунов Павел Андреевич</i>	
Обратимое изменение коэрцитивной силы сплава $\text{Gd}(\text{Zr}, \text{Co}, \text{Cu}, \text{Fe})_{6,2}$ после повреждающей и восстановительной температурной обработки	101
<i>Бирюкова Софья Сергеевна, Кондратьев Сергей Евгеньевич</i>	
Сравнительный анализ структуры поверхности пьезоэлектрической керамики ЦТС -26, 43, 51 и НЦТС, используемых в пьезоэлектронном приборостроении.....	102
<i>Кравченко Дарья Алексеевна</i>	
О формировании структуры тернарного сплава CoCrMo	103
<i>Кудрян Александр Вячеславович</i>	
Аналитический метод определения коэффициента отражения просветляющего покрытия.....	104
<i>Кузьмин Николай Борисович</i>	
Применение фрактального анализа для исследования структуры биметаллического нанослоя Cu-Ag	105
<i>Ломоносов Георгий Денисович, Савельев Ярослав Павлович</i>	
О структурной сегрегации в бинарных наночастицах Pd-Pt	106
<i>Лузик Дмитрий Игоревич</i>	
Механика сплошных сред с учётом запаздывания взаимодействия	107
<i>Макаев Владислав Викторович</i>	
Применение машинного обучения для автоматизированного анализа СЭМ-изображений металлических поверхностей.....	108
<i>Макулин Андрей Алексеевич</i>	
Влияние технологии на электрофизические свойства легированной керамики ниобата натрия калия	109
<i>Мамаев Павел Владимирович</i>	
Влияние дислокаций на теплоперенос в германии	110
<i>Михалева Наталия Олеговна</i>	
Диэлектрические и переполяризационные свойства дейтерированных кристаллов триглицинсульфата.....	111

Мушин Олег Алексеевич

Диэлектрическая дисперсия в кристаллах PZN-PT 112

Ненша Никута Игоревич

Влияние термической обработки на поверхностную энергию
наночастицы $\text{Co}_{8,5}\text{Cr}_{6,1}\text{Cu}_{25,2}\text{Fe}_{25,8}\text{Ni}_{34,4}$ 113

Огнев Даниил Дмитриевич

Подбор оптимального режима на установке плазмохимического
травления для процесса травления подзатворной области канала
полевого транзистора на гетероструктуре..... 114

Озеров Владислав Алексеевич

Электрофизические свойства керамики $(1-x)\text{K}_{0,5}\text{Na}_{0,5}\text{NbO}_3 - x\text{CaTiO}_3$.. 115

Оспельников Никута Михайлович

Сравнительное исследование электрофизических свойств керамики при
изменении температуры синтеза для состава $\text{Na}(\text{Fe}_{0,5}\text{Bi}_{0,5})_{0,1}\text{Nb}_{0,9}\text{O}_{3-\delta}$. 116

Павлов Дмитрий Алексеевич

Диэлектрический гистерезис в ниобийсодержащих кристаллах титаната
бария 117

Патренков Иван Константинович

Построение мезомасштабной модели наночастицы состаренного
микрoplastика 118

Полев Олег Валерьевич

О температуре коллапса структуры моно- и бинарных металлических
наноклеток 119

Пуйтов Владимир Владимирович

Молекулярно-динамическое моделирование спекания полиэдрических
наночастиц, представленных различными металлами..... 120

Радаева Александра Антоновна

Микроструктура и фазовый состав сплавов $\text{Y}_2(\text{Fe},\text{Co})_{14}\text{B}$ 121

Рихмайер Артем Михайлович, Рихмайер Мария Андреевна

Изучение влияния положения заместителя (-) на полупроводниковые и
интегральные характеристики моноклорантрацена 122

Родин Сергей Владимирович

Ёмкостный датчик линейного перемещения 123

Савельев Ярослав Павлович, Ломоносов Георгий Денисович

О влиянии выбора потенциала на процесс структурообразования
бинарных наночастиц Pd-Pt 124

<i>Савельев Ярослав Павлович, Савина Ксения Геннадьевна</i>	
Описание закономерностей структурной сегрегации с использованием различных методов атомистического моделирования	125
<i>Тригорьев Роман Евгеньевич, Савина Ксения Геннадьевна</i>	
Об отдельных аспектах процесса избирательной коррозии в биметаллических наночастицах	126
<i>Серов Сергей Викторович, Вересов Сергей Александрович</i>	
О влиянии начальных конфигураций четырёхкомпонентных наночастиц на их структуру в процессе охлаждения.....	127
<i>Сметанникова Софья Дмитриевна</i>	
Алгоритм обработки данных магнитно-силовой микроскопии, полученных на образцах объёмных одноосных ферромагнетиков	128
<i>Сукнев Владислав Александрович</i>	
Влияние воздействия лазерного излучения на поверхность оптических монокристаллов.....	129
<i>Тимофеев Александр Михайлович</i>	
Исследование фотолитографических процессов в технологии МИС на GaAs.....	130
<i>Шокарёв Григорий Геннадьевич</i>	
Процессы переключения медь- и хромсодержащих кристаллов триглицинсульфата	131
<i>Чичельницкий Никита Максимович</i>	
Разработка блока управления для генератора магнитных импульсов ...	132
<i>Ятманов Михаил Иванович</i>	
Применение Flash-модели для изучения латеральных сил взаимодействия зонда и образца.....	133
<i>Абрамова Елена Сергеевна</i>	
Тетрамеры целлюлозы, хитина и хитозана и их способность к растворению в ионных жидкостях	134
<i>Абрамова Елена Сергеевна</i>	
Численные методы для выявления распределения электронной плотности и строения природных полимеров	135
<i>Андреев Кирилл Игоревич</i>	
Анализ экологического состояния родников, речной и водопроводной воды Тверской области.....	136

<i>Аразгелдиева Шасенем</i>	
Разделение витаминов группы В методом тонкослойной хроматографии	137
<i>Арефьев Александр Алексеевич</i>	
Синтез квантовых точек сульфида кадмия с использованием N-додецилпиридиний тетрафторбората.....	138
<i>Артамонова Анастасия Александровна</i>	
Химический анализ ключевой воды из источников пригородной зоны города Тверь	139
<i>Афанасьева Татьяна Максимовна</i>	
Анализ стабильности наночастиц серебра, синтезированных в водных экстрактах листьев и коры ивы.....	140
<i>Бадаева Марьям Аптиевна</i>	
Изучение процессов самоорганизации и гелеобразования в цистеин-серебряном растворе под действием альгината натрия	141
<i>Балакшина Дарья Вадимовна</i>	
Магнитоотделяемые неорганические носители в иммобилизации глюкозооксидазы.....	142
<i>Баранник Александр Андреевич</i>	
Супрамолекулярная самосборка в водных растворах на основе L-цистеина и нитрата серебра в присутствии ПАВ	143
<i>Беляков Александр Андреевич</i>	
Исследование механизма взаимодействия глутатиона и нитрата серебра	144
<i>Бикбаева Вера Рафаэлевна</i>	
Новые подходы к золь-гель синтезу кристаллических титаносиликатов TS-1 для окисления циклогексена	145
<i>Бровина Валентина Сергеевна</i>	
Исследование влияния pH на структуру дисперсий (био)полиэлектролитного комплекса на основе хитозана и карбоксиметилкрахмала маниоки	146
<i>Бурлаков Егор Сергеевич</i>	
Исследование влияния катионов металлов на процесс самосборки в системе L-цистеин/AgNO ₃	147
<i>Васильева Ксения Денисовна</i>	
Теоретическое и экспериментальное исследование кислотно-основных свойств меропенема	148

Викторова Дарья Дмитриевна

Каталитическое гидрирование фурфурола до фурфурилового спирта в присутствии рутениевых катализаторов на модифицированном цеолите ZSM-5 149

Гаврилова Евгения Павловна

Сульфированный свёрхшитый полистирол как твёрдый кислотный катализатор для синтеза левулиновой кислоты 150

Гапоненко Оксана Васильевна

Получение производных бетулина и исследование их свойств..... 151

Горбань Анастасия Павловна

Влияние сезонного колебания химического состава листьев ольхи и боярышника на характеристики наночастиц серебра, полученных зелёным синтезом..... 152

Горбунова Дарья Валерьевна

Изучение электропроводности имидазолиевых ионных жидкостей гексафторфосфатов и тетрафторборатов 1-децил-3-алкилимидазолия в растворе ацетонитрила 153

Горячева Евгения Алексеевна

Экспериментальное и теоретическое исследование электронных спектров дитизона 154

Гуляева Ксения Александровна

Определение примесей в образце стали 155

Гусева Дарья Дмитриевна

Определение свойств различных замасливателей методами аналитической химии 156

Джабраилова Аминат Гамидовна

Теоретическое и экспериментальное исследование кислотно-основных свойств цефиксима..... 157

Дроздова Лариса Владимировна, Кузнецов Александра Юрьевна

Адсорбция ионов свинца из модельных растворов полистиролом 158

Дроздова Лариса Владимировна, Кузнецова Александра Юрьевна

Адсорбция ионов меди из модельных растворов полистиролом..... 159

Дю Мария Андраниковна

Получение имидазолиевых ионных жидкостей с гексафторфосфат-анионом 160

Дядько Анастасия Юрьевна

Анализ содержания нефтепродуктов в природных водах 161

Егорова Ксения Вячеславовна

Фотометрическое определение кофеина, парацетамола,
ацетилсалициловой кислоты в лекарственном препарате Цитрамон П. 162

Егоров Андрей Алексеевич

Влияние двумерных наночастиц на микрофазное расслоение
асимметричного диблок-сополимера: мезомасштабное моделирование
..... 163

Ершов Никита Алексеевич

Способность к геле- и плёнкообразованию в цистеин-серебряном
растворе при добавлении каррагинана 164

Жихарева Валерия Евгеньевна

Синтез грамина и его четвертичной соли..... 165

Зайцева Анастасия Евгеньевна

Защита от коррозии стали-3 в кислой среде солями N-алкилпиперидиния
..... 166

Замурьева Екатерина Эдуардовна

Определение антоцианов и органических кислот в плодах рябины
обыкновенной..... 167

Зверева Алёна Александровна

Квантовохимический расчёт электронных орбиталей олигомерных
фрагментов полианилина 168

Зеников Герман Романович

Композитные материалы на основе хитозана и соединений серебра 169

Иванов Павел Евгеньевич

Синтез сорбентов на основе сшитого хитозана для очистки сточных вод
от красителей и неорганических ионов 170

Иванюта Ярослава Викторовна

Определение дифенгидрамина гидрохлорида в препарате Антигриппин-
АНВИ спектрофотометрическим методом..... 171

Ипатов Ольга Алексеевна

Получение хлоридов N-алкоксикарбонилметилпиперидиния..... 172

Исаев Иван Денисович

Гелеобразование в системах цефтриаксон – Co(II) и цефтриаксон – Ni(II)
..... 173

Кафтанов Арсений Дмитриевич

Синтез и физико-химические свойства бромтрихлорферратов 1-
алкилпиперидиния 174

<i>Ким Ольга Тимуровна</i>	
Синтез эфиров молочной кислоты	175
<i>Клименко Анна Анатольевна</i>	
Синтез бис-четвертичных солей аммония.....	176
<i>Комарова Валерия Дмитриевна</i>	
Определение состава и подлинности эфирного масла апельсина сладкого	177
<i>Копин Владислав Александрович</i>	
Некоторые аспекты синтеза и выделения N-карбоксиметиласпаргиновой кислоты.....	178
<i>Крылова Анна Вадимовна</i>	
Исследование взаимодействия комплексона, производного валерьяновой кислоты, с ионом Ni ²⁺	179
<i>Кунарёва Анастасия Андреевна</i>	
Влияние различных параметров на протекание реакции селективного гидрирования алкинолов в присутствии палладиевых полимерных катализаторов	180
<i>Куц Ангелина Дмитриевна</i>	
Синтез четвертичных солей аммония, содержащих азотометиновую группировку	181
<i>Лебедев Владимир Викторович</i>	
Влияние природы основания на протекание реакции Сузуки для последующего применения в тандемных процессах кросс-сочетания-гидрирования	182
<i>Лукиев Иван Васильевич^{1,2}</i>	
Влияние качества растворителя на взаимодействие полимерных щёток	183
<i>Лукиев Иван Васильевич^{1,2}</i>	
Исследование конформационных свойств полимерных щёток из гребнеобразных макромолекул в условиях сильного растяжения	184
<i>Малинина Алина Александровна</i>	
Анализ химического состава листьев подорожника большого с использованием метода ИК-спектроскопии.....	185
<i>Маранджян Елена Саргисовна</i>	
Мембраны на основе крахмала, полученные ковалентной сшивкой эпихлоргидрином с добавлением пластификатора	186

<i>Мартынюк Анжелика Валерьевна</i>	
Количественное определение ибупрофена разных производителей.....	187
<i>Метлин Фёдор Алексеевич</i>	
Получение и свойства гидрогелей на основе L-цистеин/AgNO ₃ золя и метиленового синего.....	188
<i>Механников Илья Алексеевич</i>	
Процессы структурирования в коллоидных растворах на основе аминокислоты L-цистеин и нитрата серебра под влиянием галогенид-анионов.....	189
<i>Миронова Софья Валерьевна</i>	
Квантово-химическое моделирование комплекса цефуроксима с алюминием.....	190
<i>Миронова Александра Петровна</i>	
Иммобилизация пероксидазы на полимерных носителях растительного происхождения.....	191
<i>Митрица Карина Викторовна</i>	
Нитритометрическое исследование сульфаниламидных препаратов	192
<i>Мочалов Владислав Владимирович</i>	
Радикальная полимеризация акрилонитрила в ионных жидкостях.....	193
<i>Найман Екатерина Викторовна</i>	
Анализ косметических кремов на содержание витамина Е.....	194
<i>Неелова Алина Викторовна, Полякова Елизавета Эдуардовна</i>	
Влияние галогенид-ионов на свойства цистеин-серебряных гидрозолей.....	195
<i>Немцова Алина Евгеньевна</i>	
Анализ микроэлементов в препарате «Кальцемин Адванс».....	196
<i>Немытышева Ирина Андреевна</i>	
Сравнительный анализ материалов для изготовления контактных линз.....	197
<i>Никитин Сергей Александрович</i>	
Количественное определение индометацина в лекарственных препаратах.....	198
<i>Новожилова Алина Сергеевна</i>	
Корреляции структура-энтальпия образования простых эфиров.....	199
<i>Павлов Иван Евгеньевич</i>	
Динамика загрязнённости водоёмов-охладителей Калининской АЭС..	200

<i>Павлова Кристина Игоревна</i>	
Исследование взаимодействия ДНК с ионами меди (II) и катехином методом УФ-спектрофотометрии.....	201
<i>Перепелица Ольга Валерьевна</i>	
Загрязнённость верхней Волги нитритным азотом	202
<i>Полякова Елизавета Эдуардовна</i>	
Гидрогель с фотоувствительной активностью на основе L-цистеина, нитрата серебра и иодат-анионов	203
<i>Прокорьева Дарья Александровна</i>	
Сравнительный анализ образцов минеральной воды на содержание ионов натрия, калия, магния и кальция	204
<i>Пуртиев Руслан Надирович</i>	
Компьютерное моделирование гелеобразующей системы на основе цистеин-серебряного раствора и поливинилового спирта	205
<i>Рязанова Анастасия Юрьевна</i>	
Модификация поливинилового спирта при получении эмульсии кремнийорганической смолы.....	206
<i>Савенко Анастасия Олеговна</i>	
Спектральный анализ морфологии эмульсий, стабилизированных ПАВ	207
<i>Сальников Денис Вадимович</i>	
Моделирование водных растворов нитрата серебра с серосодержащими соединениями	208
<i>Самыловская Светлана Алексеевна</i>	
Получение и исследование свойств связующего на основе ненасыщенной полиэфирной смолы и стеклянных микросфер.....	209
<i>Саркисян Вазген Кароевич</i>	
Цистеин-серебряные золи: особенности поведения при различных рН	210
<i>Сидорова Милена Парасовна</i>	
Термическая стабильность гексафторфосфатов алкил-(2-гидроксиэтил)диэтиламмония	211
<i>Смирнова Ксения Александровна</i>	
Влияние температуры и УФ облучения на формирование наночастиц серебра в глицин-серебряном растворе	212
<i>Соловьёва Анастасия Юрьевна</i>	
Синтез и физико-химические свойства аммониевых ионных жидкостей	213

Соловьёв Кирилл Эдуардович

Влияние температуры и давления водорода на процесс гидрирования фруктозы при использовании рутениевого катализатора..... 214

Спиридонова Юлия Викторовна

Влияние температуры на координацию кластеров металлов с ароматическими звеньями стирол-дивинилбензольных сополимеров в отсутствии растворителя 215

Тищенко Анастасия Александровна

Определение качества вина по минеральному составу 216

Тищенко Виктория Сергеевна

Сравнение производных эфиров фторангидрида метилфосфоновой кислоты..... 217

Труханов Илья Денисович

Исследование химической стабильности пористых аморфных нерегулярных ароматических полимеров, полученных одностадийным синтезом 218

Удовенко Вероника Павловна

Исследование комплексообразования в системе этилендиамин-N-N'-диянтарная кислота – скандий (III) 219

Ущеповский Валентин Игоревич

Физико-химические свойства меланина оболочек семян технической конопли..... 220

Федорова Валерия Сергеевна

Качественное и количественное исследование лекарственных форм дротаверина хлорида..... 221

Филатова Елизавета Алексеевна

Анализ монет Госбанка России 222

Харкунова Мария Константиновна

Исследование условий протекания реакции алкоксилирования..... 223

Хлопов Степан Алексеевич, Шумилина Василиса Николаевна

Создание омнифобных покрытий с перестраиваемыми полимерными матрицами 224

Хомякова Карина Николаевна^{1,2}

Оценка химического состава клубней антоциансодержащих сортов картофеля 225

Чернов Ярослав Александрович

Электронное строение нонадиена-1,8 в рамках QTAIM 226

Шараева Яна Александровна

Электропроводность тетрафенилборатов N-алкилпиридиния..... 227

Шатская Ярослава Николаевна

Компьютерное моделирование самоорганизации сополимеров на основе N-винилкапролактама и N-винилимидазола в селективном растворителе 228

Шелков Георгий Андреевич

Антиоксидантная активность водных растворов шрота лекарственных трав..... 229

Юлмасов Глеб Сергеевич

Термодинамика ионной ассоциации N-алкилпиридиниевых металлсодержащих ионных жидкостей в растворах ацетонитрила 230

Яковлева Анна Алексеевна

Мультиферментные системы на основе глюкозооксидазы и пероксидазы корня хрена 231

УДК 635.92

Агошкова Анжелика Александровна

Монохромный белый сад как элемент декоративного озеленения

Руководитель: С.Н. Кузнецова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра растениеводства и технологий переработки льна

В садовой палитре особенное внимание уделяется растениям, которые обладают благородными, нежными оттенками белого цвета. При создании монохромного белого сада особое внимание уделяется выбору растений, которые должны соответствовать принципу однотонности для исключения излишней яркости и разнообразия в цветовой палитре сада. Главным принципом, который нужно учесть при создании такого сада, является устойчивость цвета растений на протяжении всего сезона. Такая цветовая гамма неизменно впечатляет независимо от погоды. Пасмурное небо выделяет белый цвет, придавая ему особую яркость и воздушность. В свою очередь, ясное небо позволяет растениям переливаться и освещаться белоснежными лучами солнца, создавая блестящий эффект. Для создания элегантных и гармоничных "белых" цветников предлагается использовать разнообразные растения, отличающиеся своими формами, размерами и фактурами. Цвета белый, серый и серебряный — это нейтральные оттенки, которые относятся к холодной гамме, однако всегда привлекают внимание.

Использование растений в данной цветовой гамме имеет достаточно большой выбор. Одними из самых красивых представителей данной цветовой категории являются следующие виды и сорта цветочных культур. *Агератум* (лат. *Ageratum houstonianum*) — это представитель семейства астровые. «Долгоцветка» радуется своей яркой красотой с мая до глубокой осени. Культура не очень высока. Цветы вырастают максимум до 50 см. *Бархатцы* (*Tagetes erecta Kilimanjaro*) прямостоячие могут культивироваться как однолетние, высотой 40-60 см. *Георгины Мигнон белая* (*Sylvan White Dice*) — один из самых популярных сортов. Эти цветы являются однолетними и отличаются своей компактностью. Куст является низкорослым, его высота составляет 40-60 см. Георгины этого сорта имеют различные оттенки — розовые, белые, желтые, красные и сиреневые. *Дельфиниум* (*Delphinium grandiflorum Delfix White*) — цветы группируются в стоячие метелки. Декоративный куст, отличающийся пушистостью, может вытянуться до 2 м в высоту. Дельфиниум цветет повторно. *Зайцехвост* (*лагурус*) (лат. *Lagurus*) является травянистым однолетником. Такое эффектное растение выделяется не очень большими соцветиями, имеющими яйцевидную форму и белый окрас. Если кусты высадить в хорошо освещенном месте, то их высота будет варьироваться от 25 до 30 сантиметров.

УДК 66.092.097

Акинчиц Мария Викторовна

Получение гидроуглей из древесных опилок

Руководитель: А.А. Степачёва

Тверской государственный технический университет, г. Тверь

Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации

Биоуголь – это углеродсодержащий продукт, получаемый из биомассы. Биоуголь широко используется в качестве источника энергии, сорбентов, носителей для катализаторов, в электрокатализе и т.д. Состав и свойства биоугля сильно зависят от состава и происхождения сырья, а также методов, используемых для получения угля. Среди современных способов получения биоугля можно выделить пиролиз, торрефикацию и гидротермальную карбонизацию [1].

Процесс гидротермальной карбонизации, также известный как влажная торрефикация, обычно выполняется в среде воды в диапазоне температур 180-250 °С при соответствующем давлении. Гидроуголь – это материал, полученный в результате процесса карбонизации, и он напоминает бурый уголь по своему элементному составу и теплотворной способности. Высокое содержание влаги в биомассе особенно благоприятно для этого процесса, так как нет необходимости в предварительном процессе сушки. Кроме того, уголь, полученный с использованием процесса карбонизации, имеет пониженное содержание золы [2].

В данной работе исследовался состав и свойства гидроугля, полученного методом гидротермальной карбонизации при варьировании условий (температуры, соотношения биомасса-вода, время процесса). В качестве сырья использовались древесные опилки хвойных и лиственных пород. Полученные гидроугли исследованы методами элементного (CHNS) анализа, низкотемпературной адсорбции азота. Определены оптимальные параметры гидротермальной карбонизации, позволяющие получать высокий выход гидроугля.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 22-79-10096).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Uday V., Harikrishnan P.S., Deoli K., Zitouni F., Mahlkecht J., Kumar M. // *Bioresource Technology*. – 2022. – Vol. 359. – P. 127467.
2. Ghanim B.M., Kwapinski W., Leahy J.J. // *Bioresource Technology*. – 2017. – Vol. 238. – P. 78–85.

УДК 616.314-002-08

Андреев Алексей Алексеевич, Бессуднова Александра Романовна,
Румянцев Виталий Анатольевич, Блинова Алиса Владимировна, Заболева
Екатерина Валерьевна

Способ профилактики рецидива кариеса зубов, пульпита и устройство для его реализации

Руководитель: В.А. Румянцев

ФГБОУ ВО Тверской ГМУ Минздрава России,
Кафедры Май стоматологии и пародонтологии, Тверь

Уникальность разработанного нами способа профилактики рецидива кариеса зубов, пульпита и устройства для его реализации заключается в следующем. Во время первого посещения проводят механическую обработку кариозной полости зуба. Далее *ex tempore* готовят комплексный противомикробный нанопрепарат. Для этого на бумажном блоке пластиковым шпателем смешивают в соотношении 1:1 пасту гидроксокупрата кальция (например, «Купрал[®]») и гидрозоль наночастиц серебра («НанАргол») с концентрацией наночастиц 3 мг/л (все препараты разрешены к применению в клинической практике). С помощью гладилки комплексный препарат вносят в сформированную полость и равномерно распределяют по дну и стенкам. Сверху позиционируют стерильную алюминиевую фольгу толщиной 0,05 – 0,1 мм, которую скручивают в спираль 3 – 4 завитка (устройство для реализации способа) и накладывают на слой комплексного препарата на дне полости. Полость закрывают временной повязкой из стеклоиномерного цемента, оставляя торец спирали из фольги незакрытым пломбирочным материалом для создания гальванического потенциала (гальванической пары) между алюминием фольги и медью, содержащейся в препарате гидроксокупрата кальция, а также для оттока выделяющейся в процессе лечения десневой жидкости и экссудата с детритом.

Установлено, что за одни сутки удаётся добиться равномерной импрегнации дентина антисептическим препаратом на глубину не менее 15 мкм [1]. В дентинных канальцах образуются обтурирующие их «пробки» из сульфида меди. Наночастицы меди и серебра оказывают длительное (годы) противомикробное действие, предотвращая развитие вторичного кариеса и пульпита. После суточной экспозиции удаляют временную пломбу, препарат вымывают из кариозной полости и зуб восстанавливают по показаниям.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бессуднова А.Р., Заболева Е.В., Андреев А.А. Экспериментальная оценка эффективности нового способа профилактики рецидивирующего кариеса зубов и пульпита методом гальванофоретической наноимпрегнации // Российская стоматология. — 2024 — Т. 17, № 1 — С. 28-30.

УДК: 544.015

Белова Виктория Валерьевна

Термодинамические параметры смесей анизол-н-гексан-пропанол-2 в до-, суб- и сверхкритической области

Руководитель: А.А. Степачёва

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Знание данных по фазовому равновесию реакционных смесей важно как для понимания процессов, имеющих место в ходе протекания химических реакций, так и для последующего расчета тепловых балансов при проектировании оборудования и масштабировании процесса.

Ранее были проведены исследования по деоксигенации анизол в сверхкритических условиях в системе растворителей н-гексан-пропанол-2. Несмотря на то, что процесс деоксигенации проводился при температурах и давлениях, превышающих параметры критической точки растворителей, исследование фазового равновесия в процессе нагрева реакционной смеси представляет большой интерес. В данной работе проведено экспериментальное исследование зависимости давления насыщенного пара реакционной смеси н-гексан-пропанол-2-анизол в зависимости от температуры и содержания компонентов. Рассмотрены диапазоны температур 30-100 °С (вблизи температур кипения компонентов), 100-150 °С (докритическая область), 150-230 °С (субкритическая область) и 230-270 °С (около- и сверхкритическая область).

Для изучения фазового равновесия реакционной смеси проводили эксперименты по регистрации давления внутри реактора при увеличении температуры в диапазоне 30-270 °С с регистрацией давления в реакторе с шагом 10 °С. Были получены кривые P-T для смесей, состоящих из н-гексана, пропанола-2 (в объемном соотношении 1:2) и анизол с различным содержанием последнего компонента. На основании полученных данных были рассчитаны термодинамические параметры парожидкостного равновесия (энтальпия, энтропия и изменение энергии Гиббса смешения, а также термодинамические коэффициенты активности) для смесей с различным содержанием компонентов.

По рассчитанным параметрам было найдено, что для эффективного перехода реакционной смеси в сверхкритическую область содержание анизол не должно превышать 4,5 мол. %.

УДК 544.47

Богданова Анна Михайловна, Егорова Екатерина Максимовна
**Исследование каталитической активности комплексов Cu(I) в синтезе
вторичных аминов**

Руководитель: А.В. Быков

Тверской государственный технический университет, г. Тверь
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Катализируемое медью аминирование арилгалогенидов играет важную роль в химической промышленности, это связано с экономической эффективностью использования меди в качестве катализатора для синтеза аминов. Амины, как универсальные базовые химические вещества, широко используются в качестве сырья для промышленного синтеза фармацевтических препаратов и тонкой химии [1]. За прошедшее столетие коммерческое производство аминов постоянно росло и в настоящее время превышает 6 миллионов тонн в год [2].

Целью исследования был выбор оптимальных условий протекания реакции аминирования, катализируемой комплексом меди(I) и фенантролина. Продуктом реакции является дифениламин. Состав катализата реакции определялся с применением метода газовой хроматомасс-спектрометрии.

В ходе работы тестировалась каталитическая активность медного комплекса при различных условиях. Установлено, что на активность комплекса влияет соотношение - катализатор (CuBr):лиганд (фенантролин). Выбор соотношения катализатора и лиганда зависит от конкретных условий реакции и может оказывать разное воздействие на её ход. Кроме того, показано, что растворитель влияет на каталитическую активность в зависимости от своей природы и характера взаимодействия с каталитическим комплексом, кроме того, некоторые растворители в присутствии катализатора взаимодействуют с субстратом. Также на активность влияет температура. В температурном диапазоне 100-125°C удаётся получить целевой продукт реакции с высоким выходом.

В результате исследования было показано, что при температуре 125°C с использованием медного комплекса при соотношении CuBr:фенантролин, равном 1:3,0 и конверсии субстрата 21,13% максимальная достигнутая селективность по бромбензолу может достигать 90,94%.

Была также отмечена устойчивость медного комплекса меди(I) к окислению на воздухе при комнатной температуре.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Yahya M. Albkuri, Ambar B. RanguMagarl, Andrew Brandt, Hunter A. Wayland // Catalysts.-2019. - С. 2-4;
2. Chern-Hooi Lim, Max Kudisch, Bin Liu, Garret M. Miyake // Journal of the American Chemical Society. - 2020. - С.7667-7672.

УДК: 54.05

Волков Александр Олегович

**Разработка технологии очистки меланиновых веществ от
сопутствующих примесей**

Руководитель: Е.А. Прутенская

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Меланины представляют собой природные биополимеры, обладающие уникальными физико-химическими и биологическими свойствами. Эти высокомолекулярные пигменты образуются в живых организмах и выполняют важные защитные функции. Они характеризуются высокой устойчивостью к окислительным процессам, способностью поглощать и рассеивать ультрафиолетовое излучение, а также обладают выраженными антиоксидантными и сорбционными свойствами. Благодаря своей полимерной структуре меланины могут взаимодействовать с различными биологически активными соединениями и металлами, что делает их перспективными для использования в различных отраслях науки и техники. Широкий спектр применения меланинов охватывает медицину, косметологию, биотехнологии и электронику. Метод получения меланина оказывает значительное влияние на его состав, размер молекул и биологическую активность, поскольку в процессе экстракции могут сохраняться различные сопутствующие вещества. Например, меланины, выделенные из березовой чаги, обладают выраженными антиоксидантными свойствами, однако после удаления липидной фракции их антиоксидантная активность снижается. Исследователи связывают это с уменьшением активности парамагнитных центров меланиновых частиц [1].

В данной работе изучены различные методы очистки меланиновых веществ, выделяемых из продуктов жизнедеятельности пчелиной моли. Используемые химические методы основаны на реакционной способности веществ и их растворимости в различных средах. Сначала осуществляли экстракцию органическими растворителями исходного сырья, что позволяет снизить содержание липидных примесей. В дальнейшем извлекали меланиновые вещества и удаляли примеси либо осаждением, либо способностью растворятся в органических растворителях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сысоева М.А. Влияние гидрофобной компоненты меланина чаги на его структуру и антиоксидантную активность / Сысоева М.А., Иванова Г.А., Захарова Л.Я. // Вестник Казанского технологического университета. 2010. С. 595–600.
2. Маневич Д.Б. // Пищевая промышленность. 2022. Т. № 3. С. 43

УДК 544.4

Воробьева Анна Дмитриевна, Туманова Галина Алексеевна

**Сравнение процесса деоксигенации стеариновой кислоты в
классическом и сверхкритическом растворителе**

Руководитель: А.А. Степачёва

Тверской государственный технический университет, г. Тверь

Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации

Производство жидкого топлива из альтернативных источников имеет большое значение с точки зрения устойчивого развития. Среди существующих видов топлива из биомассы биодизельное топливо считается наиболее перспективным, поскольку его состав и свойства близки к дизельному топливу, получаемому из ископаемых источников. Производство биодизельного топлива обычно осуществляется при относительно высоких температурах (250-450°C) при давлении водорода 0,5-5,0 МПа. Этот процесс называют деоксигенацией или гидродеоксигенацией. При деоксигенации протекают различные реакции: декарбонилирование, декарбоксилирование, гидрирование, гидрогенолиз и крекинг. Эффективность производства биодизельного топлива зависит от катализатора, наличия/отсутствия растворителя и газовой фазы. Использование растворителя предпочтительнее, чтобы избежать ограничений массообмена из-за высокой вязкости триглицеридов. Среди растворителей часто применяются высококипящие углеводороды, такие как декан, додекан, и тетрадекан. В последние годы возрос интерес к растворителям в суб- и сверхкритическом состоянии для производства биодизельного топлива. Например, в качестве сверхкритических растворителей используют воду, легкие алканы (пропан, пентан, гексан) и спирты (этанол, пропанол).

В данной работе проведено сравнение процессов каталитической гидродеоксигенации стеариновой кислоты в классическом (додекане) и сверхкритическом (гексане) растворителе. В качестве катализатора использовали никель, нанесенный на шунгит методом осаждения в субкритической воде. Процесс оценивался по приведенной скорости и селективности к гептадекану. Использование сверхкритического растворителя значительно увеличивает скорость конверсии стеариновой кислоты по сравнению с классической деоксигенацией. Однако в сверхкритическом растворителе дополнительно протекают процессы крекинга, приводящие к получению углеводородов C₉-C₁₆, а, следовательно, к снижению селективности к гептадекану.

УДК 678

Вострикова Наталья Валерьевна

**Обеспечение качества изделий из пластмасс, изготовленных методом
литья под давлением**

Руководитель Е.И. Лагусева

Тверской государственный технический университет, г. Тверь

Кафедра химии и технологии полимеров

Литье под давлением – метод формования изделий из полимерных материалов. Термопластичный материал нагревается до вязкотекучекого состояния, впрыскивается в пресс-форму и, приобретая конфигурацию ее внутренней полости, затвердевает. Для литья под давлением применяют специальные литьевые машины – термопластавтоматы, на которых устанавливаются литьевые формы.

Этим методом получают большинство изделий из пластмасс. Применение технологии литья под давлением позволяет организовать крупносерийный выпуск продукции с минимальной себестоимостью.

Литье пластмасс под давлением – сложный технологический процесс, требующий предусмотреть множество факторов, непосредственно влияющих на последующую функциональность и эстетичность изделия. В результате нарушений режима литья, отклонений в конструкции пресс-формы, неправильно подобранном материале на готовом изделии могут возникать различные дефекты литья.

Возможные виды брака при изготовлении изделий методом литья под давлением: спаи, серебристые полосы, волнистая поверхность, облой, пригары, плохой съём изделий, недоливы, коробление, пустоты, дырки и др.

Многие дефекты литья проявляются на конкретных этапах процесса литья, и есть возможность их минимизировать.

Влияние на качество отливки оказывают: температура расплава в зоне перед шнеком; температура стенки формы; скорость впрыска, давление в форме, деформация и герметичность формы. Все они легко поддаются измерению. Стабилизировать их можно двумя способами: поддержанием постоянства вторичных параметров, оказывающих на них влияние, и непосредственным регулированием.

Устранение брака позволит не только сократить издержки на производство, но и увеличить скорость работы и межремонтный интервал для литьевой оснастки.

Проверка продукции перед отправкой с завода-производителя обязательна, поскольку репутация бренда зависит от мер по контролю качества, которые предъявляются к продукции предприятия.

УДК: 691.175.5/.8; 678.743.22; 678.744.4

Гультияева Анна Сергеевна

**Исследование совместимости поливинилхлорида с ненасыщенной
полиэфирной смолой для создания гибридного полимерного
связующего**

Руководитель: Н.Ю. Старовойтова

Тверской государственный технический университет

Кафедра химии и технологии полимеров

Одним из методов модификации способных к отверждению связующих на основе терморективных смол является внесение в его состав термопластичного полимера. Введение поливинилхлорида в структуру ненасыщенного полиэфирного связующего позволяет получить новые уникальные композитные материалы, сочетающие в себе свойства термопластичных и терморективных полимеров, а также устранить недостатки полиэфирной матрицы.

Целью данной работы является исследование совместимости различных марок поливинилхлорида (ПВХ) с ненасыщенной полиэфирной смолой (НПС), а также разработка гибридного полимерного связующего. Такое связующее представляет собой многокомпонентную систему, содержащую два различных по структуре и свойствам полимера. В этой системе ПВС может служить матрицей, в которой распределена дисперсная фаза ПВХ.

Для получения такого распределения необходим определенный баланс совместимости компонентов (не должно быть ни полной совместимости, приводящей к растворению, ни полной несовместимости, приводящей к расслоению). Поэтому важной частью исследования был подбор совместимых марок полиэфирной смолы и поливинилхлорида.

По результатам тестовых испытаний для работы была выбрана полиэфирная смола марки СПЭФ-SV-01. В качестве поливинилхлоридной составляющей использовались суспензионные, микросуспензионные, эмульсионные смолы ПВХ гранулированные ПВХ-пластикаты и пластизоли. ПВХ смешивали с НПС в соотношениях 5:50, 10:50, 15:50, 20:50 и наблюдали за образцами в течение 1 месяца. Результаты показали, что в зависимости от размера частиц и разновидности ПВХ, а также от соотношения ПВХ:НПС, возможно расслоение системы из-за частичного или полного осаждения ПВХ. Наилучшей совместимостью с НПС обладает эмульсионный ПВХ - смесь получается практически однородной без расслоения. Гранулированный ПВХ не растворяется в НПС, а в случае с пластизолом, суспензионным и микросуспензионным ПВХ, наблюдается расслоение систем.

УДК 544.4

Дмитриева Анастасия Алексеевна

Кинетика каталитической деоксигенации анизола в сверхкритических условиях

Руководитель: А.А. Степачёва

Тверской государственный технический университет, г. Тверь

Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации

Лигнин является одним из основных компонентов клеточной стенки растений. Этот биополимер является одним из многотоннажных отходов, использование которого как вторичного ресурса составляет не более 15%. Типично, лигнин подвергается либо сжиганию, либо захоронению. Однако он является перспективным и дешевым сырьем для получения ароматических и фенольных соединений. Это оправдывает необходимость разработки процессов, позволяющих эффективно и выгодно с экономической точки зрения использовать лигнин для производства энергии и химических реагентов. Лигнин представляет собой фенилпропановый полимер, состоящий из п-кумарилового, кониферилового и синапилового спиртов, связанных сложноэфирными связями. Конверсия лигнина в жидкую фракцию путем быстрого пиролиза с последующим каталитическим облагораживанием является перспективным подходом к получению ароматических углеводородов, таких как бензол, толуол и ксилол (БТК), которые можно использовать в качестве добавок к транспортному топливу. В жидком продукте, полученном в результате быстрого пиролиза лигнина, в большом количестве присутствуют метоксисоединения (анизол, гваякол, сирнгол, эвгенол и др.). Каталитическая деоксигенация является предпочтительным способом их конверсии для получения ароматических углеводородов БТК. Анизол является модельным соединением для исследования реакционной способности соединений на основе метоксильной группы, полученных из лигнина.

В данной работе исследуется кинетика процесса деоксигенации анизола в комплексном сверхкритическом растворителе, содержащем н-гексан и пропанол-2. Исследования проводили в диапазоне температур 240-300 °С, при варьировании состава газовой атмосферы (смесь азот-водород с различным содержанием водорода) и начального давления газа (от 0,5 до 2,0 МПа). Оценено влияние условий на процесс деоксигенации анизола и выход целевых продуктов (бензола и толуола). По полученным данным определены частные порядки и энергия активации процесса.

УДК 53.086

Дудиловская Александра Валерьевна

Применение ионной жидкости в сканирующей электронной и атомно-силовой микроскопии

Руководитель: А.И. Иванова

Тверской государственный университет

Кафедра прикладной физики

Исследования непроводящих (диэлектрических) образцов в сканирующем электронном и атомно-силовом микроскопах сопровождаются образованием сильных поверхностных электрических полей и потенциалов, которые могут приводить к искажениям контраста изображений и дефокусировке. Решением данной проблемы является создание проводящего слоя на поверхности диэлектрика, как правило, это напыление тонкого слоя металла, хорошо противостоящего окислению (платина, золото, серебро) [1].

Цель настоящей работы – экспериментальные испытания нового электропроводящего покрытия для диэлектрических образцов в электронной и атомно-силовой микроскопии. В ходе исследований электропроводной ионной жидкости получены результаты для непроводящих образцов различного происхождения, а также негидратированных биологических образцов.

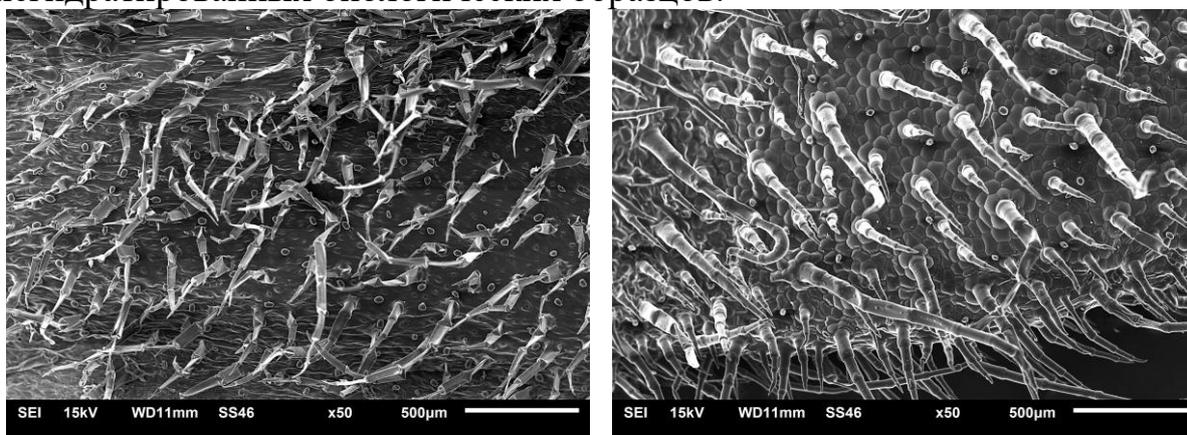


Рис. 1. СЭМ-изображение лепестка фиалки с напылением Pt (а) и с ионной жидкостью (б).

Работа выполнена с использованием ресурсов Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.

1. Иванова А. И., Дудиловская А. В., Журавлев О. Е., Кафтанов А. Д. Применение ионных жидкостей в исследованиях микроструктуры диэлектриков методом сканирующей электронной микроскопии // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2024. – № 16. – С. 154-163.

УДК 66.092.097

Ершова Екатерина Андреевна

Исследование процесса ожижения сельскохозяйственных отходов

Руководитель: А.А. Степачёва

Тверской государственный технический университет, г. Тверь

Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации

Исторически сложилось так, что большая часть образующихся сельскохозяйственных отходов во всем мире либо сжигается, либо перерабатывается в силос и удобрения. Однако эта биомасса обладает огромным потенциалом для производства энергии. Использование сельскохозяйственных отходов в качестве биовозобновляемого и углеродно-нейтрального источника энергии считается как экономически, так и экологически выгодной процедурой обращения с отходами. В последние годы были разработаны различные технологии переработки биомассы для получения ценных продуктов, используемых в качестве топлива и химикатов.

Гидротермальное сжижение (ГТО) – это технология термохимической переработки биомассы отходов в присутствии воды, близкой к критическому состоянию. Процесс ГТО обычно проводится при температуре от 250 до 350 °С и давлении от 4 до 16 МПа. Целевым продуктом процесса является высоковязкая гидрофобная бионефть – смесь углеводородов, а также кислород- и азотсодержащих соединений, получаемых при деполимеризации биополимеров (целлюлозы, гемицеллюлозы и лигнина) и различных превращениях (дегидратация, гидрирование, деоксигенация, деазотирование, конденсация) мономеров.

В данной работе исследовался процесс ожижения костры льна – многотоннажного отхода. Ожижение проводилось в водной среде в присутствии никельсодержащего катализатора, нанесенного на шунгит. Процесс проводили в диапазоне температур 200-270 °С при давлении водорода 0,5-1,5 МПа. Анализ жидкой фазы проводили методом газовой хроматомасс-спектрометрии. Были определены оптимальные параметры процесса, обеспечивающие максимальную конверсию сырья в жидкость, а также проанализирован состав полученного жидкого продукта.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 22-79-10096).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rajput V., Kumar V., Vlaskin M.S. [et al.]. // Agriculture Waste Management and Bioresource: The Circular Economy Perspective. – 2023. – P. 238-250.
2. Picone A., Volpe M., Codignole Luz F., Messineo A. // Chemical Engineering Transactions. – 2022. – Vol. 92. – P. 145-150.

УДК: 661.17:665.6/.7

Жамлин Александр Васильевич

Исследование термодеструкции сополимера этилена с октенем

Руководитель: К. В. Чалов

Тверской государственный технический университет

Кафедра химия и технология полимеров

Изделия из полиэтилена марки PE-RT находят широкое применение в строительстве, сантехнике и других отраслях благодаря своим выдающимся характеристикам, таким как прочность, гибкость и устойчивость к воздействию химических веществ. Данный полимер представляет сополимер этилена с 1-октенем, и его отходы трудно перерабатывать методами для термопластов.

Исследование процесса термодеструкции полиэтилена марки PERT, является актуальной темой в области утилизации пластиковых отходов. Процесс термодеструкции происходит при высоких температурах, что вызывает разложение полимерной структуры. Исследование продуктов термического разложения, включая низкомолекулярные углеводороды, дает возможность изучить механизмы процесса. В процессе пиролиза полимерных отходов образуются газообразные и жидкие продукты, который можно использовать в качестве сырья для дальнейшей переработки или как топливо. Изучение различных параметров процесса (температура, время нагрева и состав исходных материалов) термодеструкции полиэтилена помогает понять их влияние на выход и качество конечных продуктов. Таким образом, исследования в области термодеструкции пространственного полиэтилена и полиэтилена PERT открывают новые горизонты для разработки более эффективных и экологически чистых методов переработки, что делает их важным направлением в области устойчивого развития и утилизации пластиковых материалов. [1]

В данной работе изучено влияние температуры процесса пиролиза сополимера этилена марки PE-RT на выход и состав продуктов. Исследование проводилось на лабораторной установке, включающей стальной реактор со стационарным слоем. Процесс проводился в диапазоне температур 450-600 °С в инертной среде азота. Анализ газообразных продуктов проводился на газовых хроматографах Газохром 2000 и Кристаллюкс 4000М, оснащенных детекторам по теплопроводности и пламенно-ионизационным детектором соответственно.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Samy Yousef, Justas Eimontas, Nerijus Striugas, Mohammed Ali Abdelnaby. Influence of carbon black filler on pyrolysis kinetic behaviour and TGFTIR-GCeMS analysis of glass fibre reinforced polymer composites. Journal Energy 226. - 2021. P. 14.

УДК 681.586.5

Зимин Руслан Владимирович

Разработка оптического датчика на основе данных OTDR

Руководитель: В.В. Макаров

Тверской государственный университет

Кафедра общей физики

Совершенствование производственных процессов и повышение энергоэффективности требуют внедрения новых технологических подходов для улучшения контроля, диагностики состояния оборудования и оптимизации энергопотребления. Датчики на основе технологии оптической рефлектометрии представляют собой современное решение для мониторинга параметров среды. OTDR широко используется для измерения характеристик оптических волокон, таких как затухание, локализация повреждений и оценка качества соединений. Однако, помимо диагностики, технология OTDR может быть адаптирована для создания высокоточных оптических датчиков, способных измерять различные физические параметры, такие как температура, давление, деформация и вибрация. Целью настоящей работы является создание устройства на основе оптического волокна, которое можно применить для регистрации внешнего воздействия. Датчик реализован с помощью оптического волокна, где оно само становится чувствительным элементом, реагирующим на изменения внешних условий. При механической деформации волокна изменяется затухание оптического сигнала, что приводит к изменению вида оптической рефлектограммы. Анализируя эти изменения, с помощью программы, можно определить изменения внешних условий. На Рис. 1. изображена общая схема комплекса для проведения измерений, которая включает в себя компьютер со специальной программой, оптический рефлектометр(OTDR), оптическое волокно(OB), датчик.

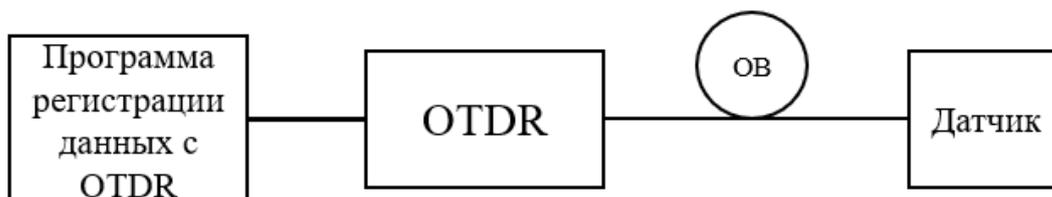


Рис. 1. Аппаратно-программный комплекс для проведения измерения.

УДК 678.0

Зиновьев Николай Алексеевич

Подбор марок филамента АБС-пластика, пригодных для FDM-печати

Руководитель Е.И. Лагусева

Тверской государственной технической университет, г. Тверь

Кафедра химии и технологии полимеров

В настоящее время аддитивные технологии все чаще применяются, как при проектировании изделий, так и для изготовления без особых затрат небольших серий специфических изделий.

Расширение ассортимента филаментов, подходящих для FDM-печати, является важной задачей для развития данного метода моделирования.

На температурно-скоростные параметры печати методом FDM оказывают влияние вязкостные характеристики применяемых марок АБС-пластика. Марки с низкой эффективной вязкостью могут перерабатываться при более низких температурах и меньших усилиях протяжки.

Из исследованных марок меньшую вязкость при 250°C имели марки АБС Polylac PA 757 и АБС 1525-31. Однако вязкостные характеристики экструдированного материала не являются однозначным критерием качества печати. Применение АБС-пластика с повышенной текучестью расплава (ПТР 15–20 г/10 мин.) не всегда приведет к положительному результату, если полимер проявляет высокие эластические свойства в расплаве, обусловленные его структурой и составом.

Вязкоупругие свойства расплава, оцениваемые по коэффициенту разбухания экструдированной нити, являются не менее важным информативным показателем пригодности марок АБС для такого способа печати.

Применение капилляров с малым диаметром и длиной может приводить к неустойчивому течению расплава, связанному с проявлением вязкоупругих характеристик расплава.

Критерием подбора марок АБС-пластика для принятых температурно-скоростных условий печати является комплекс вязкостных и вязкоупругих характеристик расплавов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Коваленко Р.В. Современные полимерные материалы и технологии 3D печати. Вестник технологического университета. 2015, т.18, в.1, с.263–266.

2. Симакова Е.А., Селякова К.И., Кравченко Д. Применение 3D-печати в строительстве // Инженерные исследования. 2021. № 1 (1). С. 3-11.

3. Зиновьев Н.А. Определение оптимальных условий послойного наплавления филамента для деталей с низкой изотропностью механических свойств // XXX Каргинские чтения: тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2024. – С. 91.

Работа выполнена на оборудовании кафедры химии и технологии полимеров ТвГТУ.

УДК 66.095.261.2

Зуев Иван Александрович, Никитин Данил Андреевич, Хеззиева Алтынай
**Технология синтеза жирноароматических полиамидов реакционным
формованием**

Руководитель Е.И. Лагусева

Тверской государственный технический университет, г. Тверь
Кафедра химии и технологии полимеров

Способом газожидкостной поликонденсации получено более двух десятков полимеров класса полиамидов, из которых наибольший интерес представляют гомо- и сополиамиды с ароматическими ядрами в цепи.

Концентрации мономеров в контактирующих фазах в процессе синтеза являются одним из факторов, определяющих производительность установки и тепловыделения в реакторе-фибридаторе, оказывают влияние на структуру образующейся реакционной массы и её текучесть.

Зависимость выхода, молекулярной массы и других показателей синтезируемых полимеров в непрерывном пенном режиме от концентрации, изучена в реакторных устройствах различных конструкций.

Изменение концентрации терефталойлхлорида (ХАТК) в синтезе полигексаметилентерефталамида (ПА-6Т) в газовой фазе лежит в пределах от 0,05 до 3,8 моль/м³ носителя (воздуха). Наибольшие значения молекулярной массы и выхода полимера соответствуют интервалу концентрации ХАТК 0,7–2 моль/м³. При концентрации ниже 0,1 моль/м³ снижает выход и молекулярную массу до пределов, неприемлемых для практики. Повышенные концентрации ХАТК монотонно уменьшают молекулярную массу, сохраняя её на уровне, отвечающем техническим требованиям, но выход при этом падает до 80-60%.

Максимальные значения молекулярной массы и выхода полимера соответствуют интервалу концентрации изофталойлхлорида (ХАИК) 0,8-1,5 моль/м³ в синтезе полигексаметиленизофталамида (ПА-6И). Дальнейшее повышение концентрации ХАИК приводит к снижению приведенной вязкости и выходу полимера. Абсолютные значения приведенной вязкости остаются на уровне, отвечающем техническим требованиям. Однако выход ПА-6И падает до 50%, что для практических целей неприемлемо.

Таким образом, концентрации ХАТК и ХАИК в газовой фазе процессе синтеза жирноароматических полиамидов 6Т и 6И газожидкостной поликонденсацией служат фактором, определяющим основные показатели процесса.

Данная работа выполнена на оборудовании кафедры химии и технологии полимеров ТвГТУ.

УДК 678, 67.08

Колобков Владимир Владимирович

Технология переработки отходов производства капролактама

Руководитель Е.И. Лагусева

Тверской государственный технический университет, г. Тверь

Кафедра химии и технологии полимеров

Один из эффективных путей к экономии материальных ресурсов – создание безотходных и малоотходных производств, особенно по крупнотоннажным материалам.

Вывод предприятий производства капролактама по окислительной схеме на полную мощность выявил актуальную задачу – утилизацию ныне нереализуемых отходов производства, так называемого масла ПОД, полифункциональность которого позволяет предположить возможность его использования в качестве сырьевого компонента для получения полимерных смол.

Цель работы – поиск путей использования отходов производства капролактама, позволяющих сделать шаг к малоотходной технологии.

По фракционному составу масло ПОД можно условно разделить на две части: летучую и олигомерную.

Летучая часть в масле ПОД является преобладающей и может колебаться до 70 % масс. Исследованиями летучей фракции установлено, что масло «ПОД» содержит более 20 компонентов, основными среди них являются: циклогексан, циклогексен, бензол, гептанон-2, амиловый спирт, циклогексанон, циклогексанол, циклогексенол, циклогексенон, цикло-гександиол-1,2. Основную массу масла ПОД составляет дианон – ненасыщенный димер циклогексанона, представляющий собой смесь двух изомеров (2-циклогексиленициклогексанона и 2-циклогексилиденциклогексанона) количество которого может достигать в отдельных случаях до 50%.

Олигомерная фракция масла ПОД изучена недостаточно, в ней по данным спектроскопии содержатся те же функциональные группы, что и в летучей части. Она имеет среднечисловую молекулярную массу в интервале 480-580.

В работе определён состав исходного масла ПОД, получены смолы на основе отходов производства капролактама, отработаны технологические режимы синтеза, предложена технология переработки масла ПОД для коммерческой реализации полученных смол в полимерной и лакокрасочной промышленности с целью экономии дефицитного сырья.

Работа выполнена на оборудовании кафедр «Химия и технология полимеров» и «Биотехнология, химия и стандартизация» ТвГТУ.

УДК 635.92

Колпакова Варвара Михайловна

Создание монохромного голубого цветника на приусадебном участке как элемент ландшафтного дизайна

Руководитель: С.Н. Кузнецова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра растениеводства и технологий переработки льна

Монохромные сады в ландшафтном дизайне появились не так давно, но успели приобрести широкую популярность. С их помощью можно создавать выразительные и неповторимые по своей красоте композиции. Они могут занимать весь сад или какую-то одну его часть. Создавая цветник в холодной синей гамме, важно учесть, что при слабом освещении синий цвет становится невыразительным, зато при ярком свете особо выделяется своей насыщенностью, поэтому стараются выбирать для такого цветника хорошо освещенные места.

На частном участке был создан цветник в голубых тонах. Клумба небольшая по размеру (примерно 3 м²), тем более что голубой цвет создает зрительную иллюзию увеличения пространства. Важно соблюдать общие принципы ландшафтного дизайна. Голубой цветник выглядит естественным элементом сада, и смотреться в нем гармонично (Рис. 1).

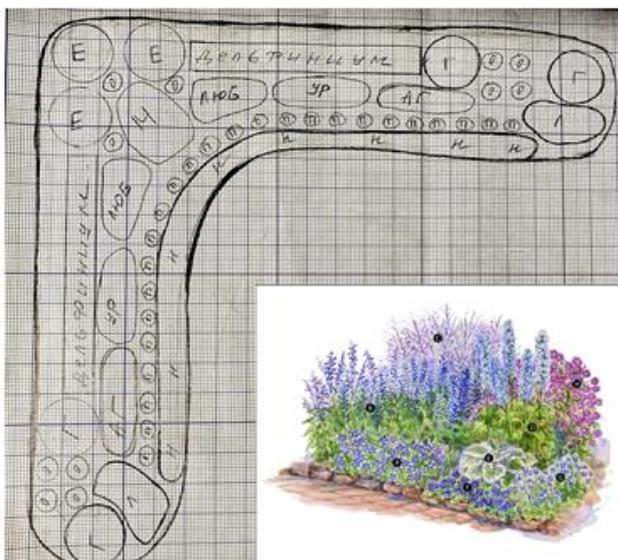


Рис. 1. План цветника на личном участке:

Е - гортензия крупнолистная Лунный свет, Г - гортензия крупнолистная Голубая лагуна, Д - дельфиниум Голубое кружево, О - овсяница сизая голубая, Л - лаванда узколистная, Н - незабудка синяя, П - гелиотроп Одиссей, АГ - агератум голубой, УР - агератум Голубое небо, Люб - любелия Октябрина небесно-голубая, М - можжевельник кавказский Голубой Дунай.

Обязательное условие любого цветника – цветочные культуры должны сочетаться между собой. Размещают их в цветнике таким образом, чтобы создавался эффект глубины (посадка растения по высоте). Создать цветник, радующий глаз на протяжении длительного времени, добившись оптимального сочетания растений, – задача непростая, но выполнимая.

УДК 581.1:541.49

Кочерова Влада Аркадьевна

Изменение продуктивности овощных культур при использовании боратного комплекса

Руководитель: О.В. Шилова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь
Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Почвы Тверской области характеризуются низким содержанием необходимых растениям микроэлементов (в том числе бора). Бор поглощается растениями в форме борат-анионов, которые могут образовывать хелатные комплексы с некоторыми хелатантами. К числу таких лигандов относится этилендиаминдиантарная кислота (ЭДДЯК). Свойства и биологическая активность борат-этилендиаминдисукцинатного комплекса (В-ЭДДЯК), мало исследованы. Поэтому целью эксперимента было изучение действия комплексонатов бора в качестве микроудобрений на урожайность сортов моркови и биохимический состав корнеплодов.

На кафедре агрохимии, земледелия и лесопользования Тверской ГСХА доцентом Смирновой Т.И. синтезированы комплексонаты ряда металлов и неметаллов с экологически чистыми комплексонами (ЭДДЯК и ИДЯК). Схемы опытов включали варианты: контроль (без опрыскивания растений); варианты с обработкой растений растворами борной кислоты (H_3BO_3), комплексона (ЭДДЯК) и боратным комплексом (В-ЭДДЯК). ЭДДЯК (этилендиаминдиантарная кислота) и боратный комплекс (В-ЭДДЯК). На их основе были приготовлены растворы с концентрацией $1,5 \cdot 10^{-3}$ моль/л. Объем растворов (в среднем) – 100 мл/м².

Комплексонаты бора применялись в виде растворов с разными концентрациями путем опрыскивания вегетирующих растений. В качестве опытных культур возделывали овощные культуры.

Результаты опытов показали, что при некорневой обработке вегетирующих растений растворами хелатированного бора увеличивается урожайность овощных культур в среднем на 15 – 50% по сравнению с растворами неорганических борных аналогов (H_3BO_3) и свободных комплексонов (ЭДДЯК). Применение комплексоната бора (В-ЭДДЯК) способствовало изменению питательной ценности растениеводческой продукции: в корнеплодах столовой свеклы разных сортов увеличивалось количество бора (в среднем на 9 – 11%), бетаина (в среднем на 8 – 12%) и моно- и дисахаридов (в среднем на 5 – 9%); в клубнях картофеля разных сортов – содержание крахмала (в среднем на 1,5 – 2,5%) и количество витамина С (в среднем на 4,5 – 6,5%); в корнеплодах разных сортов столовой моркови – количество бора (в среднем на 7 – 10%), каротина (в среднем на 2,5 – 3,5%), моно- и дисахаридов (в среднем на 4,2 – 5,6%).

УДК 581.1:541.49

Кочерова Влада Аркадьевна

Исследование хелатов селена при возделывании картофеля

Руководитель: О.В. Шилова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Обогащение сельскохозяйственной продукции селеном за счет использования экологически безопасных биологических соединений имеет перспективы практического применения, поскольку Se является важным микроэлементом для организмов ввиду его способности предохранять от воздействия факторов окружающей среды различного происхождения. В связи с этим целью исследований стало изучение эффективности применения селеносодержащих соединений в посадках картофеля.

Схема опыта включала контроль; варианты с опрыскиванием растений селеносодержащими растворами на разных фонах питания растений. Из минеральных удобрений использовали азофоску в дозе 350 кг/га и хлористый калий в дозе 59 кг/га. Селеносодержащий комплекс (Se-ИДЯК) на основе иминодиянтарной кислоты (ИДЯК) были синтезированы к.х.н., доцентом Смирновой Т.И. Концентрация растворов – $1,27 \cdot 10^{-5}$ моль/л. Для сравнения в опытах применялся раствор микроэлементного удобрения – селенита натрия (Na_2SeO_3) такой же концентрации. В течение вегетации растения картофеля обрабатывали растворами гербицида «Сойл» и фунгицидов «Рапид Голд», «Инфинито» и «Ганос».

Значения контрольного варианта по урожайности уступали всем вариантам опыта (в среднем по сортам на 13 – 26 ц/га). Опрыскивание растений раствором Na_2SeO_3 на минеральном фоне привело к увеличению урожайности картофеля обоих сортов на 17 ц/га (у сорта Венета) и на 20 ц/га (у сорта Гала) по отношению к контролю, а при обработке раствором Se-ИДЯК – на 23 ц/га и 26 ц/га соответственно. Наибольшая урожайность клубней обоих сортов при использовании селеносодержащих соединений по сравнению с контролем получена на варианте с применением Se-ИДЯК на минеральном фоне (221 ц/га – у сорта Венета и 235 ц/га – у сорта Гала). Кроме того, Se-ИДЯК на минеральном фоне по сравнению с Na_2SeO_3 способствовал увеличению крахмала в клубнях обоих сортов картофеля на 0,5% и на 1,0% и 1,1% по отношению к варианту без применения растворов (у сорта Гала и у сорта Венета соответственно). Клубни, выращенные на варианте с обработкой Se-ИДЯК отличались наибольшим содержанием витамина С – 10,9 – 11,3 мг/100 г сырого вещества (в зависимости от сорта картофеля), что на 2,7 – 3,0 мг/100 г сырого вещества больше по сравнению с контрольными значениями.

УДК 544.4

Крылов Даниил Олегович, Емельянова София Денисовна

Катализатор селективного гидрирования карбоксильных соединений

Руководитель: В.Г. Матвеева

Тверской государственный технический университет, г. Тверь

Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации

При разработке химико-технологических процессов (в частности, процессов гидрирования) остается вопрос в возможности контроля селективности к определенным продуктам. Такой контроль возможен путем создания эффективных катализаторов. Рациональный дизайн катализаторов для различных процессов является актуальной задачей и привлекает все большее внимание ученых.

Каталитическое гидрирование является широко используемым процессом в фармацевтической и химической промышленности. Более 90% процессов химического производства включают по крайней мере одну стадию гидрирования. В качестве катализаторов гидрирования часто используются различные металлы и их соединения, нанесенные на углеродные носители. Активность и селективность применяемых в гидрировании катализаторов являются наиболее важными факторами для достижения высокоэффективного процесса промышленного производства.

Природные углеродные материалы, такие как антрацит и шунгит обладают теми же свойствами, что и синтетические углеродные материалы (активированные угли, углеродные нанотрубки, фуллерены и т.д.), но в силу натурального происхождения могут включать минеральные компоненты (в основном, оксиды металлов), которые придают этим материалам дополнительные свойства и могут оказывать влияние на активность полученных катализаторов.

В данной работе проведено исследование никельсодержащих наночастиц, нанесенных на шунгит методом гидротермального осаждения и методом пропитки по влагоемкости. Исследование полученных каталитически активных материалов показало, что образец, синтезированный методом гидротермального осаждения, показал втрое большую удельную поверхность по сравнению с катализатором, синтезированным с помощью пропитки. Активная фаза, нанесенная гидротермальным способом, была более равномерно распределена по поверхности носителя. Размер частиц активной фазы в этом случае оказался почти в три раза меньше (около 4,5 нм) по сравнению с образцом, полученным методом пропитки. Также было проведено тестирование полученных систем в селективном гидрировании непредельных и ароматических кислот.

УДК 621.927

Кудласевич Иван Алексеевич

Измельчитель сыпучего растительного сырья

Руководитель: А.С. Васильев

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агробиотехнологий, перерабатывающих производств и семеноводства

Процесс измельчения – один из важнейших процессов, который нашел широкое применение во многих областях промышленности. Получение порошковидных фракций из растительного материала обусловлено развитием функционального и безотходного направления в пищевой промышленности. Наиболее простым способом переработки, как первичного так и вторичного сырья является измельчение материалов до порошковидного состояния, в котором они становятся пригодными для введения в рецептуры различных пищевых продуктов (хлебобулочные изделия, полуфабрикаты, сыры и т.д.). На практике для этих целей часто используют мукомольное оборудование (мельницы, мукомолки, дезинтеграторы и т.д.). Многие из данных машин являются громоздкими и энергозатратными, что требует разработки новых конструкций измельчителей.

В рамках исследований по созданию нового измельчающего устройства был разработан экспериментальный измельчитель сухих ягодных выжимок (Рис. 1), содержащий камеру измельчения цилиндрической формы, сообщающуюся в верхней части с загрузочным бункером и разгрузочной полостью готового продукта в нижней ее части, при этом камера измельчения снабжена классификатором, а внутри цилиндрического ее корпуса по оси симметрии установлен вертикальный вал, соединенный с приводом и снабженный соосно установленными ножами. Проведенные исследования подтвердили рациональные параметры элементов конструкции заявленного измельчителя и доказали, что предложенная конструкция является работоспособной, причем отличается высокими эксплуатационной надежностью и производительностью. Разработанный измельчитель сухих ягодных выжимок можно рекомендовать предприятиям перерабатывающей промышленности.

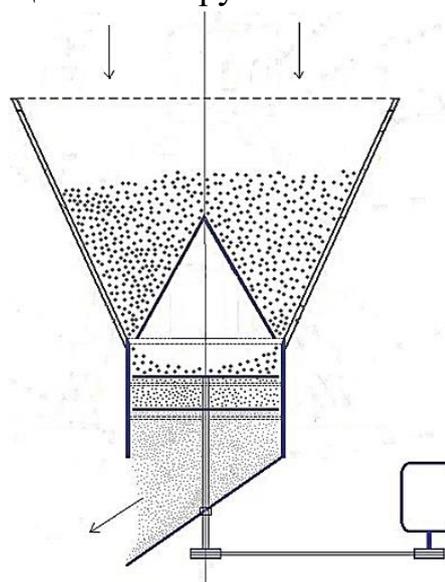


Рис. 1. Экспериментальный
измельчитель

УДК 631.8:633.13

Кудласевич Иван Алексеевич

**Технологические аспекты применения азотных удобрений
в посевах овса**

Руководитель: А.С. Васильев

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агробиотехнологий, перерабатывающих производств и семеноводства

В настоящее время, высокая стоимость минеральных удобрений обуславливает необходимость поиска путей их наиболее эффективного использования, в частности сроков внесения. Результаты исследований показали, что в посевах овса азотные удобрения лучше применять в период вегетации для подкормки растений, а не в предпосевную обработку почвы. Подкормку лучше проводить в ранние фазы развития растений, совпадающие с III – IV этапами органогенеза, когда происходит дифференциация зачаточного соцветия, формируются элементы продуктивности – длина метелки, число колосков в соцветии. Прибавки урожая при этих сроках азотных подкормок составляли 0,47 – 0,52 т/га (17,3 – 19,1%) на фоне естественного плодородия, 0,38 – 0,66 т/га (13,8 – 23,9%) на фоне 1/2N+PK ($N_{45}P_0K_0$). Это подтверждает имеющиеся выводы, что раннее азотное голодание овса приводит к резкому сокращению количества колосков в метелке. Внесение полной дозы азота (N_{90}) в подкормку оказывало положительное действие на величину урожайности, главным образом, при осуществлении ее в период всходов и в течение 6 дней после них (начало кущения), в то время как, дробное внесение азота удлиняло период его эффективного использования – от всходов и до 12 дней после них (полное кущение). Максимальная урожайность овса 3,24 т/га, была получена при внесении полной дозы азота (N_{90}) через 6 дней после всходов, а при дробном внесении ($N_{45}+N_{45}$) до всходов и через 12 дней после всходов – 3,42 и 3,33 т/га. Параметры структуры урожая в указанных вариантах характеризовались следующими значениями: число продуктивных стеблей – 427 – 492 шт./м², число зерен в соцветии – 25,7 – 29,0 шт., масса зерна с соцветия – 0,846 – 0,942 г, масса 1000 зерен – 33,52 – 33,86 г. Внесение азота в вышеуказанные сроки способствовало повышению качества зерна. Более высоким содержанием белка и жира отличалось зерно овса, полученное при внесении полной дозы азотных удобрений в период от всходов до 12 дней после них. Таким образом, наиболее эффективным является внесение всей дозы азотных удобрений в период от всходов до начала кущения. Это обеспечивает наиболее оптимальную урожайность зерна овса – на уровне 3,2 т/га с высокими показателями питательной ценности зерна.

УДК 541.49:581.1:577.115(470.331)

Кузмин Артём Анатольевич

Влияние комплексонов микроэлементов на содержание пигментов в листьях полевых культур

Руководитель: О.В. Шилова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Из числа эффективных хелатирующих веществ экологической безопасностью отличаются комплексоны, производные янтарной кислоты: иминодиянтарная кислота (ИДЯК) и этилендиаминдиянтарная кислота (ЭДДЯК). Эти комплексоны, а также комплексоны на их основе в природных условиях могут успешно подвергаться физико-химической и биологической деструкции, поэтому представляют большой интерес в плане практического использования (особенно для увеличения продуктивности возделываемых культур и улучшения качества получаемой продукции). Необходимым условием для накопления органических веществ является активное протекание фотосинтетического процесса при наличии оптимального содержания растительных пигментов (в первую очередь, хлорофиллов). В связи с этим, целью исследований стало изучение эффективности комплексонов микроэлементов в качестве микроудобрений на количество пигментов в листьях растений. В опытах были использованы растворы с разными концентрациями комплексонов и эквимольные растворы комплексонов: ИДЯК и ЭДДЯК.

В полевых экспериментах на опытном поле Тверской ГСХА в качестве опытных растений были взяты: горох посевной (сорт Рокет), кабачок цукини (сорт Мавр), капуста белокочанная (сорт Зимовка), картофель (сорт Гала), свекла столовая (сорт Красный шар), томат (гибрид F1 Слот). Листья растений для анализа отбирали через 10 – 12 дней после некорневой обработки. Содержание хлорофилла в листьях проростков и вегетирующих растений определяли спектрофотометрическим методом в ацетоновых экстрактах (спектрофотометр СФ-52).

Опрыскивание растений растворами ЭДДЯК в зависимости от содержания комплексона в растворе может оказывать различное действие: с концентрацией $\leq 1,5 \cdot 10^{-3}$ моль/л – способствуют накоплению хлорофиллов, а растворы, содержащие $\geq 2,0 \cdot 10^{-3}$ моль/л ЭДДЯК – вызывают понижение уровня фотосинтетических пигментов в листьях. Комплексон ИДЯК вызывал увеличение содержания хлорофиллов в листьях. В пределах концентраций растворенного вещества (ЭДДЯК и ИДЯК) от $1,27 \cdot 10^{-5}$ моль/л до $1,5 \cdot 10^{-3}$ моль/л оказывают действие, стимулирующее содержание хлорофиллов, возрастающее с уменьшением концентрации растворенного вещества.

УДК 635.92

Кузмин Артем Анатольевич

Древесно-кустарниковые культуры для устойчивого декоративного озеленения в Тверском регионе

Руководитель: С.Н. Кузнецова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра растениеводства и технологий переработки льна

Тверская область характеризуется не стабильными температурными условиями в зимний период. Поэтому важно для декоративного озеленения подбирать самые холодостойкие древесные культуры. Таких растений в нашем регионе не мало.

Самым морозостойким деревом считается *береза пушистая*, которую высаживают ранней весной, обеспечивая в первое время достаточный полив. *Ель обыкновенная* – выдерживает самые сильные морозы; требуется в первое время влажное и прохладное место. *Лиственница сибирская* – светолюбивый и морозостойчивый вид, устойчива к засухе, ветру, нетребовательна к влажности. *Можжевельник обыкновенный* – лучше высаживать в солнечном месте, хорошо переносит как высокие, так и низкие температуры, не боится засухи и не требовательно к плодородности почвы. *Боярышник кроваво-красный, или сибирский* – неприхотливый и морозостойкий кустарник; размещают на свету. *Бузина красная* – обладает пышной кроной и большой зимостойкостью, высаживают как на солнце, так и в тени. *Ива белая* – дерево неприхотливо, может расти как на солнце, так и в полутени, обладает морозостойкостью и ветроустойчивостью. *Липа мелколистная* – отличается повышенной теневыносливостью, требует дренированную почву. *Рябина обыкновенная* – декоративное морозостойчивое растение не выносит засоленных и сильнощелочных земель. *Сирень обыкновенная* – не требует особого ухода, она отличается зимостойкостью и нетребовательна к поливу и почве. *Жимолость татарская* – требует особого внимания в первый год после посадки, необходимо поливать во время засухи; в более взрослом состоянии не требовательна к условиям произрастания. *Спиреи* — неприхотливые растения, нетребовательны к почве, светолюбивы и морозостойчивы. *Шиповник* – неприхотливый кустарник, который не требует особого ухода; отцветшие цветки удалять не нужно, а осенью шиповник своими яркими ягодами привлекает в сад птиц.

Как видим, ассортимент подбора деревьев и кустарников для декоративного оформления любых по площади и стилям земельных участков обширен. Главное, подобрать их по сочетанию между собой и условиям выращивания.

УДК 635.21:631.86

Кузмин Артем Анатольевич

Влияние удобрений на урожайность картофеля сорта Ривьера

Руководитель: Ю.С. Королёва

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра растениеводства и технологий переработки льна

Удобрения оказывают непосредственное влияние на рост и развитие растений, обеспечивая необходимыми питательными элементами, такими как азот, фосфор и калий, а также микроэлементами, играющими критическую роль в формировании качественного и обильного урожая. Рациональное использование удобрений способствует повышению устойчивости растений к неблагоприятным климатическим условиям и различным заболеваниям. Успешное получение высоких урожаев картофеля напрямую связано с правильным и сбалансированным питанием растений.

Поэтому целью исследований явилось изучить влияние удобрений на формирование урожайности картофеля сорта Ривьера.

Схема опыта включала варианты: 1 – без удобрений (контроль), 2 – Диатомит в дозе 2 т/га, 3 - Сапропель в дозе 100 т/га. Площадь делянки порядка – 14 м². При возделывании картофеля использовался комплекс сельскохозяйственных машин, необходимых для возделывания картофеля с междурядьями 70 см. Предшественник – вико-овес. В опыте соблюдали все рекомендованные НИИ элементы технологии возделывания.

Наибольшее количество клубней отмечено при внесении Диатомита - 15 штук с 1 куста. При этом, количество крупной и средней фракции было выше, чем на контроле и внесении сапропеля. При применении сапропеля сформировалось много мелкой фракции, а общее количество клубней составило 13 штук. Масса клубней с куста и средняя масса клубня картофеля сорта Ривьера увеличивалась от применения удобрений. Диатомит способствовал увеличению на 46% массы клубней по сравнению с контролем и на 14% с сапропелем. Низкая масса клубней с растения отмечена на контроле 562,5 г, при средней массе клубня 51,1 г. Однако, наибольшая средняя масса клубня получена при внесении сапропеля 55,4 г.

За счет образования наибольшего количество клубней с куста при внесении Диатомита в этом варианте получена высокая урожайность 39,5 т/га, прибавка к контролю составила 12,5 т/га. Сапропель незначительно уступил в формировании урожая, прибавка к контролю составила 7,6 т/га. Минимальная урожайность отмечена на контроле 27,0 т/га.

Таким образом, в условиях вегетационного периода 2024 года применение удобрений способствовало формированию урожая картофеля сорта Ривьера на уровне 39,5 т/га.

УДК 631.8

Кузьмина Ольга Евгеньевна

Влияние систем удобрения на урожайность сортов картофеля

Руководитель: О.В. Шилова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

В современных условиях ведения сельскохозяйственного производства необходимы разработка и исследование новых видов субстратов, альтернативных традиционным формам удобрений. В связи с этим целью исследований стало изучение действия компоста в сравнении с органоминеральными удобрениями на свойства дерново-подзолистой почвы и урожайность среднеспелых сортов картофеля.

Схема двухфакторного опыта: Фактор А (сорт картофеля): 1 – Варяг; 2 – Евпатий; Фактор В (система удобрений): 1. Контроль (без удобрений); 2. Компост в дозе 18 т/га; 3. Компост в дозе 18 т/га и $P_{60}K_{60}$; 4. ОМУ; 5. ОМУ и компост в дозе 18 т/га; 6. ОМУ, компост в дозе 18 т/га и $P_{60}K_{60}$.

ОМУ (органоминеральное удобрение) картофельное (марка 16) – комплексное удобрение, включающее макро- и микроэлементы, торф, гуматы, микробиологическую добавку. Из минеральных удобрений в опыте применялись суперфосфат двойной (45%) и хлористый калий (60%). Компост, применяемый в опыте, получен путем компостирования в бурте органических субстратов. Норма посадки клубней – 43 тыс. клубней на га. Перед посадкой клубни картофеля обоих сортов обрабатывали протравлителем «Эместо Квантум» в концентрации 250 мл на 10 л воды.

На протяжении всех сроков исследований на вариантах совместного использования компоста, ОМУ и минеральных удобрений установлено максимальное количество нитратного азота (в среднем 35–42 мг/кг почвы); аммиачной формы азота (в среднем на 10–17 мг/кг почвы больше по сравнению с другими вариантами и контролем); высокое содержание подвижного фосфора (в среднем на 14–16 мг/кг почвы больше по сравнению с остальными вариантами и контролем) и обменного калия (в среднем на 12 – 15 мг/кг почвы больше по отношению к другим удобренным вариантам и контролю). Поэтому урожайность обоих сортов на контроле оказалась меньше, чем на остальных вариантах (в среднем по сортам на 132,3 – 162,5 ц/га). По сравнению с контролем использование компоста позволило увеличить продуктивность в среднем на 20,8 – 27,2 ц/га (в зависимости от сорта), а совместное применение с $P_{60}K_{60}$ – на 65,1 ц/га (по сорту Варяг) и на 105,4 ц/га (по сорту Евпатий). Максимальной продуктивностью клубней отличался вариант с ОМУ, компостом и $P_{60}K_{60}$: 332,4 ц/га (по сорту Варяг) и 414,7 ц/га (по сорту Евпатий).

УДК 581.1:541.49

Кузьмина Ольга Евгеньевна

**Зависимость биохимического состава кочанов капусты белокочанной
от комплексонатов молибдена**

Руководитель: О.В. Шилова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Для обеспечения растений микроэлементами в органическом ведении сельскохозяйственного производства вместо минеральных удобрений целесообразнее применять эффективные, экологически безопасные комплексоны и комплексонаты металлов или неметаллов, использование которых повышает выход растительной продукции при одновременном снижении техногенной нагрузки на окружающую среду. Среди предлагаемых комплексонов следует выделить ЭДДЯК (этилендиаминдиянтарную кислоту), ИДЯК (иминодиянтарную кислоту) и другие. В связи с этим целью исследований стало изучение действия удобрений и молибденсодержащих соединений на продуктивность и биохимический состав кочанов капусты.

Схема опыта включала варианты: контроль (без удобрений и без опрыскивания растений); опрыскивание растений исследуемыми растворами: молибдата аммония, комплексона, комплексоната молибдена на разных фонах. Комплексон ЭДДЯК и комплексонат молибдена (Мо-ЭДДЯК) были синтезированы доцентом Смирновой Т.И. На опыте возделывалась капуста белокочанная сорта Зимовка рассадным способом. Растения капусты дважды опрыскивали исследуемыми растворами с концентрацией 2 мМ из расчета 100 мл/м².

Результаты опыта показали, что на неудобренном фоне опрыскивание растений раствором (NH₄)₂MoO₄ привело к увеличению продуктивности капусты на 0,38 кг/м² или на 9,6%, а при обработке раствором Мо-ЭДДЯК – на 0,65 кг/м² или 16,4% по отношению к контролю. Наибольшая урожайность капусты получена на варианте с применением Мо-ЭДДЯК на минеральном фоне (5,8 кг/м²).

Совместное применение удобрений и молибдата аммония привело к увеличению содержания сахаров в кочанах на 1,2%, а хелатированного молибдена – на 1,5%.

При обработке растений испытуемыми растворами на разных фонах увеличилось количество аскорбиновой кислоты в кочанах всех вариантов по отношению к контролю (в среднем на 4,2 – 10,8%). В частности, на 14 мг/100 г – при использовании (NH₄)₂MoO₄ и на 18 мг/100 г – при обработке Мо-ЭДДЯК на минеральном фоне питания растений.

УДК: 635. 21: 631.811

Кулагина Полина Владимировна

Применение селена при микроклональном размножении антоциансодержащих сортов картофеля

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

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Цель исследований – изучить влияние различных соединений селена на биометрические характеристики эксплантов при клональном микроразмножении антоциансодержащих сортов картофеля Сюрприз и Северное сияние. Опыт выполнен в условиях *in vitro* в 2024 г. путем микрочеренкования по схеме: фактор А – сорт: А₁ – Сюрприз (среднеранний), А₂ – Северное сияние (среднеспелый); Фактор В - Варианты модернизации стандартной питательной среды Мурасиге-Скуга (МС): В₁ – Контроль – стандартная среда МС; В₂ - Na₂SeO₃; В₃ - Se-ЭДДЯК (этилендиаминдигидратная кислота). Выявлено, что при добавлении соединений селена экспланты изучаемых сортов картофеля неодинаково варьировали по биометрическим показателям в разные пассажи (таблица).

Таблица.

Влияние соединений селена на биометрические показатели микрорастений сортов картофеля

Сорт (А)	Вариант питательной среды (В)	I-й пассаж			II-й пассаж		
		Длина стебля, мм	Число междоузлий, шт.	Масса растений, мг	Длина стебля, мм	Число междоузлий, шт.	Масса растений, мг
Сюрприз	Контроль (без Se)	62,0	8,20	911,7	94,8	9,10	781,3
	Na ₂ SeO ₃	70,5	9,45	953,7	110,0	11,75	942,3
	Se-ЭДДЯК	71,1	9,75	965,0	117,3	11,35	936,0
	среднее по сорту	67,9	9,1	943,5	107,4	10,7	886,5
Северное сияние	Контроль (без Se)	54,3	8,38	592,7	79,9	11,25	732,0
	Na ₂ SeO ₃	46,7	8,13	433,7	78,4	12,30	709,0
	Se-ЭДДЯК	49,9	8,15	526,3	82,0	13,00	836,0
	среднее по сорту	50,3	8,2	517,6	80,1	12,2	759,0
НСР ₀₅ по сорту		2,7	0,65	82,0	9,4	1,22	114,0
НСР ₀₅ по питательной среде		1,4	0,32	*	4,7	0,61	57,0

* - различия незначимы ($F_{\text{факт.}} < F_{05}$)

Использование селена более эффективно в форме Se-ЭДДЯК, которое повышало: у сорта Сюрприз - длину стеблей на 9,1 – 22,5 мм, количество междоузлий на 1,6 – 2,3 шт., во второй пассаж - массу растений - на 155 мг, у сорта Северное сияние во второй пассаж - количество междоузлий на 1,8 шт., биомассу растения на 104 мг. Большая эффективность Se-ЭДДЯК вероятно связана с лучшей доступностью селена в составе хелатных комплексов. Все изученные модификации питательной можно использовать для клонального микроразмножения антоциансодержащих сортов картофеля Сюрприз и Северное сияние.

Исследования выполнены при финансовой поддержке гранта РФФИ № 23-76- 01058.

УДК 677.467

Кулешова Анна Юрьевна, Бакаева Мария Андреевна

Термохромные полимерные метки в профессиональной одежде

Руководитель: Е.С. Сашина

Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и
дизайна, Санкт-Петербург

Кафедра дизайна текстиля, кафедра химических технологий

Термохромные красители способны изменять цвет полимерных материалов и изделий в зависимости от изменения температуры внешней среды. Термохромные метки в одежде, технической аппаратуре, строительных материалах служат индикатором достижения заданной или критической температуры в процессе нагрева или охлаждения. Профессиональная одежда пожарных с термохромной меткой подскажет о повышении температуры до критической и позволит спасти жизнь, одежда спортсмена продемонстрирует участки перегрева тела, полярнику укажет опасность обморожения, медикам сигнализирует о повышении температуры больного и др. [1]. Микрокапсулированный краситель добавляется в состав полимерного раствора или расплава на стадии формирования волокон или пленок [2].

На основе результатов пилотных исследований предлагается новый нетоксичный проявитель термохромной композиции [3] на основе кристаллического фиолетового лактона, который улучшит колористические свойства и характеристики функции обратимости цвета в процессе эксплуатации полимерного материала или изделия с термохромной меткой. Анализ закономерностей изменения колористических свойств в зависимости от состава композиции позволит создать термохромные материалы, изделия и метки спецодежды пожарных, температурные датчики в материалах военного и медицинского назначения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сашина Е.С., Михайловская А.П., Бакаева М.А., Кулешова А.Ю. Термохромные полимеры, волокна и материалы – 2023. – № 5 (407). – С. 20-29.
2. Sashina E.S., Yakovleva O.I., Vakulenko S.A. Mass dyeing of polyacrylonitrile by thermochromic dyes // Fibre Chemistry. – 2024. – 56(1). – Pp 1-5.
3. Мызников Л.В., Волкова Д.Д., Сашина Е.С. Термохромная композиция. Патент RU 2813709 C1, 15.02.2024.

УДК 543.421.424

Лисица Михаил Алексеевич

**Сравнительное изучение содержания беталаинов
спектрофотометрическим методом**

Руководитель: О.В. Шилова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Бетацианины – вещества с красной окраской, вещества с желтой окраской – бетаксантины, которые в сумме обозначаются как беталаины. Эти растительные пигменты необходимы для инактивации активных форм кислорода и свободных радикалов; для устранения последствий окислительного стресса; для коррекции метаболических нарушений и т.д. [1]. Поэтому, учитывая несомненную значимость беталаинов, необходимо введение в рацион питания продуктов, содержащих указанные вещества.

Среди полевых культур, обогащенных бетацианинами, следует выделить столовую свеклу. Поэтому целью проводимых исследований стало определение количества беталаинов в корнеплодах столовой свеклы. Анализ проведен в корнеплодах среднеспелых сортов: Мулатка; Смуглянка; Креолка; и раннеспелых сортов: Хуторянка и Египетская плоская.

Количественное определение беталаиновых пигментов проводили в муравьинокислом экстракте спектрофотометрированием на СФ-56. Суммарное содержание бетацианинов определяли в пересчете на бетанин, а бетаксантинов – на вульгаксантин I [2].

В результате проведенных анализов было установлено, что наибольшее количество бетацианинов (в пересчете на бетанин) обнаружено в корнеплодах сорта «Смуглянка» (170 мг/100 г), а наименьшее – в корнеплодах сорта «Египетская плоская» (76 мг/100 г).

Максимальное содержание бетаксантинов (в пересчете на вульгаксантин I) выявлено в корнеплодах сорта «Креолка» (50 мг/100 г), а минимальное – в корнеплодах сорта «Хуторянка» (15 мг/100 г).

Таким образом, при сравнении ранних и среднеспелых сортов столовой свеклы наибольшим содержанием беталаинов отличались среднеспелые сорта по сравнению с раннеспелыми.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Колдаев В.М. Беталаины в практической медицине/ В.М. Колдаев, А.В. Кропотов А.В., О.Н. Ли. – Тихоокеанский государственный медицинский университет, Владивосток, Россия – ТМЖ, 2023. № 2. С. 20 – 24
2. Саенко И.И. Бетацианины корнеплодов красной столовой свеклы / И.И. Саенко, О.В. Тарасенко, В.И. Дейнека, Л.А. Дейнека / Научные ведомости. Серия Естественные науки. 2012. № 3 9122. Выпуск 18. С.194–199

УДК 635.92

Литвинов Игорь Сергеевич

Использование цветочных растений для создания ароматического сада

Руководитель: Кузнецова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра растениеводства и технологий переработки льна

Ароматический сад – оригинальная идея ландшафтного дизайна. Обычно он принимает форму нескольких клумб, которые источают сладкие или освежающие запахи.

Для создания ароматического сада на личном подсобном участке в условиях Тверской области были предложены ароматные и не прихотливые многолетние цветочные культуры для оформления цветника (Рис. 1., табл. 1). Цветник запланирован у зоны отдыха (зона беседки). Будут использованы растения, которые не только обладают выраженным запахом, но и декоративны длительное время.

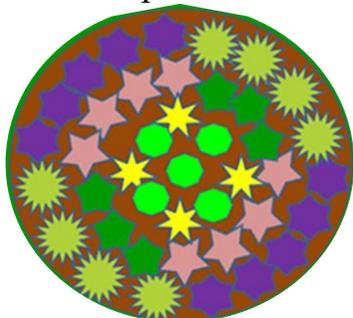


Рис. 1. Схема цветника

Чабрец обладает выраженным запахом, отлично разрастается, а в июне-июле зацветает лиловыми цветами. *Шалфей дубравный* – яркий и контрастный, долго цветет. *Мята перечная* – широко используется в качестве пряной культуры и как элемент дизайна. Весной и в самом начале лета *розмарин лекарственный* покрывается нежными цветочками голубой окраски.

Таблица 1 – Колористика цветника по месяцам

Наименование растения	май	июнь	июль	авг.	сент.
★ Тимьян обыкновенный (чабрец) (<i>Thymus vulgaris</i>)	+	+	+	+	+
◆ Шалфей дубравный (<i>Salvia nemorosa</i>)	+	+	+	+	+
☀ Мята перечная (холодная, английская) (<i>Mentha piperita</i>).	+	+	+	+	+
★ Розмарин лекарственный (<i>Rosmarinus officinalis</i>)	+	+	+	+	+
● Иссоп лекарственный (<i>Hyssopus officinalis</i>).	+	+	+	+	+
★ Душица обыкновенная (орегано) (<i>Origanum vulgare</i>).	+	+	+	+	+

В июле – августе *иссоп лекарственный* покрывается цветами, которые очень любят пчелы за обильный нектар. *Душица обыкновенная* культивируется в качестве медоноса и источника эфира, и как прекрасное декоративное растение. В течение всего вегетационного периода будет ощущаться аромат душистых растений в зоне отдыха на дачном участке.

УДК: 544.015

Ловягина Мария Романовна

**Изучение паро-жидкостного равновесия системы н-гексан-
стеариновая кислота в сверхкритической области**

Руководитель: А.А. Степачёва

Тверской государственный технический университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Разработка новых химико-технологических процессов требует всестороннего исследования не только с точки зрения кинетики и механизма реакции, но и со стороны термодинамики. Термодинамические данные важны для расчетов тепловых балансов и проектирования оборудования [1]. В последнее время получение топлива из биомассы становится все более популярным. Большой интерес ученых вызывают процессы деоксигенации кислородсодержащих соединений биомассы (фенольных соединений, жирных кислот). Эта реакция используется для производства биотоплива второго поколения. Недавние исследования направлены на использование сверхкритических флюидов (воды, спиртов, легких углеводородов) в процессах деоксигенации [2]. Исследования фазовых равновесий индивидуальных веществ в сверхкритическом состоянии ведутся давно. Однако добавление других компонентов к растворителям может влиять на переход системы в сверхкритическую область. Поэтому при разработке новых процессов (в частности, деоксигенации жирных кислот) с использованием сверхкритических флюидов необходимо исследование фазовых равновесий для реакционных систем.

В данной работе изучено парожидкостное равновесие систем н-гексан-стеариновая кислота с различным содержанием последнего компонента. Для изучения фазового равновесия реакционной смеси проводили эксперименты по регистрации давления внутри реактора при увеличении температуры в диапазоне 30-270 °С с регистрацией давления в реакторе с шагом 10 °С. На основании полученных данных были рассчитаны термодинамические параметры парожидкостного равновесия (энтальпия, энтропия и изменение энергии Гиббса смешения, а также термодинамические коэффициенты активности) для смесей с различным содержанием компонентов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Simeski F., Ihme M. // Nature Communications. – 2023. – Vol. 14. – P. 1996.
2. Stepacheva A.A., Markova M.E., Bykov A.V. et al. // Reac. Kinet. Mech. Cat. – 2018. – Vol. 125. – P. 213.

УДК 621.3.049.77

Майфат Денис Александрович

Разработка испытательного стенда для верификации алгоритмов цифровой обработки сигналов на ПЛИС

Руководитель: В. В. Зубков

Тверской государственный университет

Кафедра общей физики

Программируемые логические интегральные схемы (ПЛИС) представляют собой мощный инструмент для реализации алгоритмов цифровой обработки сигналов (ЦОС) благодаря своей гибкости и высокой производительности [1, 2]. Однако, с увеличением сложности алгоритмов возрастает необходимость в разработке специализированных средств для их тестирования и верификации. В этой связи создание испытательного стенда для верификации алгоритмов ЦОС на ПЛИС становится важной задачей. Работа посвящена разработке испытательного стенда (см. Рис. 1) для комплексной верификации алгоритмов ЦОС, реализованных на ПЛИС. Стенд будет включать в себя как аппаратные компоненты, так и программное обеспечение для управления процессом тестирования.

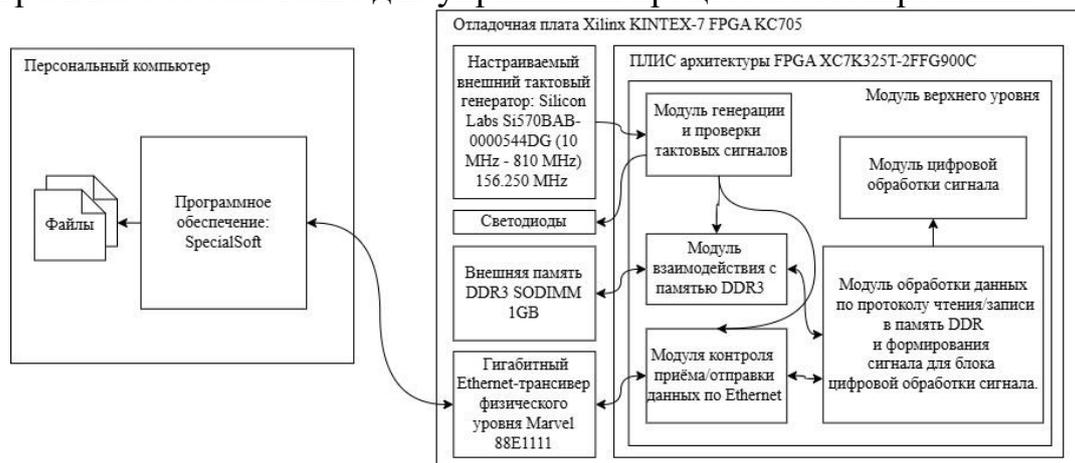


Рис. 1. Структура стенда взаимодействия ПЛИС (FPGA) с ПК и внутренняя архитектура проекта на ПЛИС.

Работа выполнена на обЖиорудовании научного производственного объединения развитие инновационных технологий (АО НПО РИТ)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тарасов И.Е. ПЛИС Xilinx. Языки описания аппаратуры VHDL и Verilog, САПР, приемы проектирования. // М.: Горячая линия - Телеком, 2022. 538 с.
2. Соловьев В.В. Архитектуры ПЛИС фирмы Xilinx: CPLD и FPGA 7-й серии. // М.: Горячая линия - Телеком, 2016. 392 с.

УДК 681.3

Майфат Денис Александрович
Разработка программного обеспечения для формирования и отправки сигналов с ПК на ПЛИС по Ethernet

Руководитель: В. В. Зубков
Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

В рамках данной работы разработано программное обеспечение (ПО) на языке Python, позволяющая формировать и отправлять сигналы в виде UDP-пакетов по интерфейсу Ethernet с персонального компьютера (ПК) на программируемую логическую интегральную микросхему ПЛИС (Xilinx KINTEX-7 FPGA KC705 [1]). ПО реализует собственный протокол на базе UDP, для передачи сигналов, а также для отправки команд на чтение записанного сигнала из ПЛИС.

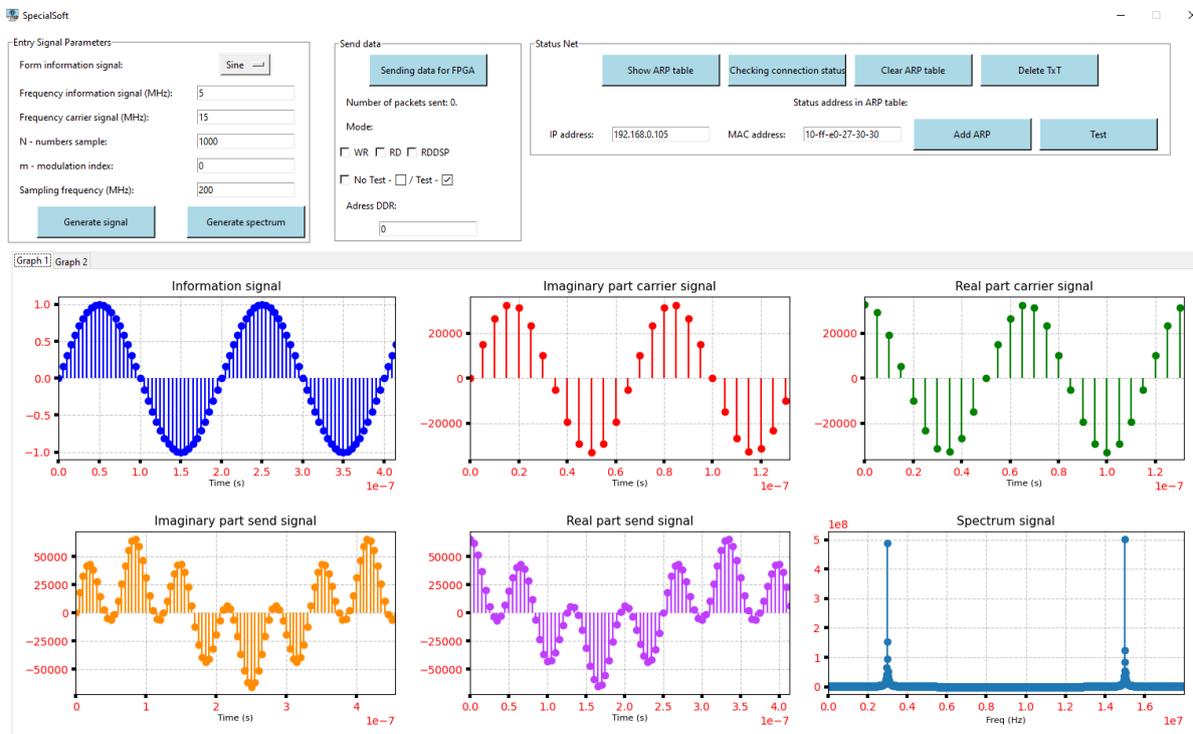


Рис. 1.. Интерфейс основного окна приложения.

*Работа выполнена на оборудовании научного производственного объединения
развитие инновационных технологий (АО НПО РИТ)*

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Соловьев В.В. Архитектуры ПЛИС фирмы Xilinx: CPLD и FPGA 7-й серии. // М.: Горячая линия - Телеком, 2016. 392 с.

УДК 635.92

Макарова Эмилия Викторовна

Использование мха в декоре помещений

Руководитель: С.Н. Кузнецова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра растениеводства и технологий переработки льна

Отдел Мохообразные или Bryophyta включает свыше 25 тысяч видов растений, которые можно встретить по всей планете. Мхам отводится важная роль в природе и человеческой жизнедеятельности. Использование разных видов мха в ландшафтном дизайне: садовые скульптуры и другие декоративные элементы, покрытые мхом; мох в промежутках между мощением садовых дорожек; покрытие крыши погреба или навеса; газоны и лужайки; при оформлении сада в японском или ретро стиле; при оформлении береговой линии водоема, ручья, болотца; садовое граффити; садовые композиции; подвесные кашпо; фитостены; клумба из мха; оформление прикорневой зоны контейнерных растений.

Для выращивания мха требуется лишь немного подготовительной работы, а затем он годами будет прекрасно расти сам по себе. Мох не слишком привередлив, но лучше всего растет во влажных и затенённых условиях при кислотности почвы уровня рН от 5,0 до 6,0.

Стабилизированный мох представляет собой экологически чистый и неприхотливый в уходе материал, который все чаще выбирают для декора помещений различного назначения.

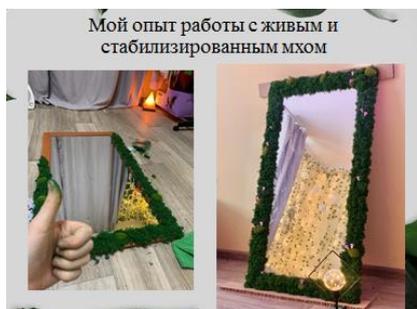


Рис. 1. Пример работы с живым и стабилизированным мхом.

Он позволяет привнести в дом частичку природы, создать невероятно уютную и доброжелательную атмосферу (Рис. 1).

Со *стабилизированным мхом* работать гораздо проще. Он не требует полива, освещения или специального ухода, так как он уже прошел процесс стабилизации, который позволяет ему сохранять свой вид и текстуру на протяжении длительного времени.

Стабилизированный мох также более устойчив к болезням и вредителям, что делает его отличным выбором для декоративных целей.

Таким образом, декоративные и живые мхи – отличный материал для использования в интерьере помещений и на садовых участках. Пробуйте, экспериментируйте, создавайте композиции из различных видов мхов, и результат, несомненно, очень вас порадует.

УДК: 544.47

Монжаренко Маргарита Александровна

Палладийсодержащие катализаторы гидрирования жирных кислот

Руководители: А.А. Степачёва, М.Е. Маркова

Тверской государственный технический университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Высшие алифатические спирты имеют большое значение в химической технологии и тонком синтезе. Эти соединения широко используются в качестве реагентов и полупродуктов для производства поверхностно-активных веществ, смазочных материалов, фармацевтике, парфюмерии и косметике. Обычно жирные спирты синтезируют из нефти путем окисления и эпоксидирования парафинов и олефинов. Однако, современные тенденции в химической технологии ориентированы на использование возобновляемого сырья. Растительные масла и жиры могут быть перспективным сырьем для производства высших алифатических спиртов. Гидрирование карбоксильной группы жирных кислот, получаемых из растительных масел, является альтернативой для получения высших спиртов с 9-20 атомами углерода. Поиск новых эффективных, селективных и стабильных каталитических систем для гидрирования жирных кислот является одной из актуальных исследовательских проблем.

В данной работе проведено исследование магнитоотделяемых палладийсодержащих катализаторов на полимерном носителе (сверхсшитом полистироле), а также изучена возможность их использования для гидрирования стеариновой кислоты с целью получения соответствующего спирта. Процесс гидрирования проводился в н-гексане, используемом в качестве растворителя в диапазоне температур 120-180 °С при давлении водорода 1-4 МПа. Катализаторы были проанализированы методами низкотемпературной адсорбции азота, просвечивающей электронной микроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Магнитоотделяемые катализаторы проявили высокую активность в гидрировании, позволяя достичь более 90% селективности по спирту при полной конверсии субстрата.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Maki P., Hajek J., Salmi T., Murzin D. // Appl. Catal A: General. – 2005. - Vol 292. – P. 1-49.
2. Kong X., Fang Z., Bao X., Wang Z., Mao S, Wang Y. // Journal of Catalysis. – 2018. – Vol. 367. – P. 139-149.

УДК: 612.039.327

Некрасова Анна Владимировна

**Определение содержания антоцианов в плодах черники,
жимолости и черноплодной рябины**

Руководитель: Н.В. Лакина

Тверской государственный технический университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Антоцианы – это группа водорастворимых пигментов, принадлежащих к семейству флавоноидов. Антоцианы исследуются за их потенциал в борьбе с главными убийцами современного мира: сердечно-сосудистыми заболеваниями, раком, диабетом 2 типа и нейродегенеративными расстройствами (например, болезнь Альцгеймера) [1]. Их антиоксидантные и противовоспалительные свойства могут играть защитную роль. Ученые активно изучают молекулярные механизмы, лежащие в основе положительного влияния антоцианов на здоровье, что позволяет более точно понимать их действие и разрабатывать новые стратегии профилактики и лечения заболеваний. Тонкослойная хроматография (ТСХ) остается актуальным и ценным методом в исследованиях антоцианов, несмотря на наличие более современных аналитических техник, таких как высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ) и масс-спектрометрия (МС), так как требует минимальных затрат на оборудование, позволяет быстро получить информацию о составе образца, а также он достаточно прост в освоении [2].

В данной работе определено содержание антоцианов в плодах черники, жимолости и черноплодной рябины методом восходящей тонкослойной хроматографии. По результатам видно, что в плодах черники содержится большое количество антоцианов, поскольку присутствуют зоны адсорбции синего, пурпурного и розового цвета, которые свидетельствуют о наличии цианидина, мальдивидина, дельфинидина, пеонидина и петунидина. В плодах жимолости и черноплодной рябины содержание антоцианов немного меньше, так как наблюдается зона адсорбции пурпурного цвета, что говорит о наличии цианидина, пеонидина и петунидина.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 1. Федоров, Р. А. Исследование антоцианов / Р. А. Федоров. – Воронеж: ВГУ, 2015. – 190 с.
2. 2. Смирнов, А. С. Химия антоцианов / А. С. Смирнов. – Саратов: СарГЮА, 2017. – 200 с.

УДК: 662.84

Носаева Валентина Сергеевна

**Изучение кинетики получения вератрола
в присутствии цеолитного катализатора**

Руководитель: А.А. Степачёва

Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Вератрол или 1,2-диметоксибензол – это природное соединение, обладающее разнообразной биологической активностью, включая антиоксидантное, противовоспалительное и противоопухолевое действие. В настоящее время основными методами получения 1,2-диметоксибензола являются гидрохиноновый метод, гваякольный метод и метод ортогалогенированного бензилового эфира. Метанольный метод является относительно «чистым» с выходом от 85% до 90%. Однако данный метод еще не является до конца разработанным, так как требует применения композитного катализатора, а также строгих условий проведения реакции и высоких требований к оборудованию [1].

Ранее нами был изучен способ синтеза 1,2-диметоксибензола из гваякола и метанола в присутствии цеолитного катализатора типа H-ZSM-5 [2]. В данной работе изучено влияние условий проведения метоксилирования гваякола и определены основные кинетические параметры процесса в присутствии модифицированного цеолита. Модификация цеолита H-ZSM-5 проводилась путем обработки 0,05 н. раствором щелочи с последующей кальцинацией. Было найдено, что при обработке исходного цеолита не происходит снижения удельной площади поверхности катализатора, однако изменяется соотношение микро- и мезопор. При этом при обработке растворами щелочей значительно снижается соотношение Si/Al (за счет вымывания кремния), что сказывается на кислотности цеолита, а следовательно, его каталитической активности. Обработка цеолита щелочами позволяет увеличить выход вератрола на 25%, что предположительно связано с образованием высокой концентрации кислотных центров Льюиса на поверхности цеолита после снижения соотношения Si/Al.

При исследовании влияния условий процесса на синтез вератрола были определены энергия активации и частные порядки реакции по гваяколу, метанолу и катализатору.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wang H.Y., Li X.Y., Zhang X.P. // Journal of the Chinese Chemical Society. – 2012. - №59. – P. 1434-1440.
2. Носаева В.С., Степачёва А.А. // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. 2023. № 4. – Т. 54. – С. 101-106.

УДК 66.092-977

Павлов Артем Сергеевич

Пиролиз отходов производства кофе в присутствии редкоземельных и амфотерных оксидов

Руководитель: Ю.В. Луговой

Тверской государственной технической университет
кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

В настоящее время кофе является одним из самых популярных напитков масштабы производства которого во всем мире достигают несколько млн. тонн в год [1]. В процессе производства растворимого кофе образуется большое количество отходов кофе переработки (около 50% по массе), которые должным образом не утилизируются, нанося вред окружающей среде [2].

В рамках данного исследования были проведены эксперименты по пиролизу отходов производства кофе в присутствии следующих оксидов металлов – CeO_2 , SnO_2 , ZnO . Летучие продукты, образующиеся в ходе процесса пиролиза отходов производства кофе, контактировали с слоем разогретого мелкодисперсного оксида металла и в результате осуществлялись реакции каталитического крекинга, направленные на повышение качества конечных продуктов процесса.

В присутствии SnO_2 , ZnO наблюдалось снижение массы газообразных продуктов пиролиза и увеличение выхода жидких продуктов, в то время как в присутствии CeO_2 наблюдалась обратная закономерность. При использовании в качестве катализаторов всех исследуемых оксидов металлов наблюдалось незначительное увеличение объема газообразных продуктов пиролиза в 1,08-1,1 раза по сравнению с некаталитическим процессом. При этом следует отметить тот факт, что процесс образования пиролизного газа происходил при более низкой температуре в присутствии данных оксидов. Все исследуемые оксиды приводили к увеличению низшей объемной теплоты сгорания пиролизного газа и по степени влияния на этот параметр данные оксиды можно расположить в следующий ряд:



Следует также отметить, что данные оксиды ускоряли процессы деоксигенирования и термодеструкции смол летучих продуктов пиролиза отходов кофе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Guangcan Su, and et al. Pyrolysis of waste oils for the production of biofuels: A critical review. *Journal of Hazardous Materials*. Volume 424, Part B, 2022.
2. Faisal Abnisa, Wan Mohd Ashri Wan Daud. A review on co-pyrolysis of biomass: An optional technique to obtain a high-grade pyrolysis oil. *Energy Conversion and Management*. Volume 87, 2014, Pages 71-85.

УДК. 54.057

Петрова Арина Игоревна

Синтез и анализ комплексов метионина с кальцием и железом

Руководитель: Н.В. Лакина

Тверской государственный технический университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Метионин входит в состав белков и пептидов. Кормовая добавка на основе метионина предназначена для улучшения роста и продуктивности крупного рогатого скота, в том числе коров. Соли метионина обладают значительными преимуществами перед самим метионином, делая их более привлекательными для широкого спектра применений. Главным преимуществом является улучшенная растворимость, позволяющая преодолеть ограничения чистого метионина в водных средах и облегчающая создание эффективных растворов и препаратов[1]. Кроме того, солеобразование может эффективно маскировать неприятный вкус и запах, характерные для метионина, повышая привлекательность продуктов для потребителей. Стабильность также является важным фактором, поскольку соли метионина часто более устойчивы к окислению и разложению, что увеличивает срок годности продуктов. Биодоступность, технологичность и возможность создания многофункциональных препаратов также расширяются благодаря солям метионина[2].

В ходе работы были синтезированы метионат Fe и Ca. Полученные продукты были охарактеризованы с использованием комплекса физико-химических методов, включающего ИК-спектроскопию, УФ – спектроскопию, рентгенофлуоресцентный анализ. Полученные результаты свидетельствуют о перспективности использования солей метионина для повышения его биодоступности и расширения областей применения. Были подобраны оптимальные условия проведения синтеза. В полученных солях обнаружено: метионат Fe – метионин 92,39207%, Fe 7,52744%; метионат Ca – метионин 86,30645%, Ca 13,31369%.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bastug, R.; et al. Improved Bioavailability of L-Methionine by Salt Formation // Journal of Pharmaceutical Sciences 2015, 104, 1234-1245.
2. Smith, J.; et al. Synthesis and Characterization of Novel Methionine Salts for Enhanced Drug Delivery // Journal of Controlled Release 2020, 200, 100-110.

УДК 631.811.98

Рябчикова Алина Валериевна

**Исследование антиоксидантной активности водных экстрактов,
полученных из шрота *Mentha piperita***

Руководитель: Е.В. Ожимкова

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

За последние несколько десятилетий микрозелень постепенно стала популярной как новая форма функциональных продуктов питания. Это очень чувствительная и незрелая листовая зелень, собираемая с первых двух пар листьев и продаваемая целиком, включая листья, стебли и семядоли. Для выращивания микрозелени используются различные виды семян, такие как овощи, травы, зерновые, злаки, бобовые и фасоль. Микрозелень обладает более высокой питательной ценностью, чем ее зрелые аналоги. Повышенное содержание фитонутриентов и антиоксидантных соединений в ее составе демонстрирует хорошие противораковые и противовоспалительные свойства.

Для повышения выносливости микрозелени к стрессовым условиям и адаптации к изменяющейся окружающей среде могут быть применены стимуляторы роста растений, обладающие антиоксидантными свойствами. Антиоксиданты представляют собой разнообразные органические соединения, способные устранять свободные радикалы, тормозить окислительные процессы и предотвращать повреждение клеток.

В работе исследована антиоксидантная активность экстрактов, полученных из шрота *Mentha piperita*. Экстракты получали путём настаивания измельченного шрота с дистиллированной водой при 23 ± 1 °C и отсутствии прямых солнечных лучей, варьируя соотношение «сырье:экстрагент» и продолжительность процесса. Антиоксидантная активность полученных водных экстрактов определялась перманганатным методом [1]. Экспериментально подобраны оптимальные условия проведения процесса, обеспечивающие получение экстрактов с максимальной антиоксидантной активностью. В ходе дальнейших экспериментов полученные экстракты будут исследованы в качестве стимуляторов роста при получении микрозелени различных культур.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Нилова, Л.П. Определение антиоксидантной активности порошков из растительного сырья перманганатным методом // Л.П. Нилова / Торгово-экономические проблемы регионального бизнес пространства. – 2015. – С. 118 – 122.

УДК 678.011

Савицкая Юлия Александровна

Влияние объёмного расхода на размерную точность изделий на основе полимерных композиционных материалов, полученных методом FDM/FFF-печати

Руководитель: К.И. Харламова

МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, г. Москва

Кафедра химии и технологии переработки пластмасс и полимерных композитов

Достижение линейных заданных размеров – важное условие производства практически любого изделия. Количественной мерой допустимых погрешностей является качество точности. Его определяют по расчёту отклонения от заданного размера – положительного или отрицательного «допуска». С целью снижения погрешности, то есть для приближения размера к заданному значению, можно либо компенсировать усадку, например, с помощью наполнителя, либо повлиять на подаваемое количество материала. Отношение действительного и теоретического объёмного расходов характеризует эмпирический параметр «коэффициент потока».

Цель работы заключается в определении влияния коэффициента потока на размерную точность изделий на основе дисперсно-наполненных полимерных композиционных материалов (ДНПКМ).

Для моделирования поведения ДНПКМ получили филаменты на основе ABS марки POLYLAC PA-757 (Chimei corporation, Тайвань) и 2 об. % полых стеклянных микросфер марки MC-ВП-A9 (НПО «Стеклопластик», Россия). Образцы получили методом FFF (FDM) 3D-печати на принтере Anyform XL250-G3 High-resolution 3D printer (Total Z, Россия).

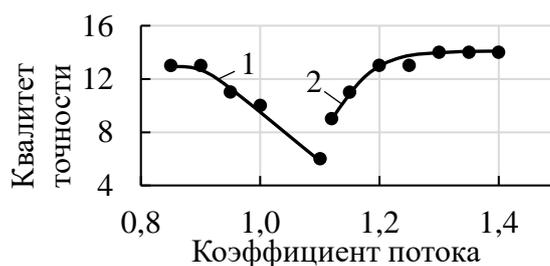


Рис. 1. Зависимость качества точности ширины от коэффициента потока при: 1 – отрицательном допуске, 2 – положительном допуске

Установлено, что для достижения максимально возможной размерной точности рекомендовано использовать коэффициент потока 1,1.

УДК 620.30

Смирнова Мария Павловна, Кудрявцева Екатерина Викторовна

Биохимический метод получения композитов хитозан-наночастицы серебра

Руководитель: А.А. Буринская

Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна

Кафедра химических технологий им. А.А. Хархарова

Разработка наноматериалов на основе полимеров природного происхождения является актуальной задачей современной науки и техники. Особый интерес представляют нанокompозиты, содержащие наночастицы серебра (НЧС), обладающие выраженными антимикробными свойствами.

В данной работе исследован биохимический метод получения нанокompозита хитозан – наночастицы Ag. Известно, что хитозан (ХТЗ) – природный полисахарид, обладающий биосовместимостью, биодegradируемостью и собственной бактерицидной активностью, может одновременно выполнять функции восстановителя ионов металлов до наночастиц и их оксидов, а также получать агрегативно устойчивую нанодисперсию без введения дополнительных реагентов. Хитозан не только предотвращает агрегацию наночастиц, но и усиливает антимикробные свойства коллоидных растворов за счёт образования наночастиц серебра.

Прекурсор AgNO_3 вводили в предварительно приготовленный раствор хитозана с концентрацией от 0,1 до 1,5 %. Реакционную смесь термостатировали при 80 – 90 °С. Синтез осуществляли при варьировании pH. Абсорбцию полученных растворов анализировали с помощью спектрофотометра УФ-6700.

В ходе реакции наблюдалось изменение цвета раствора от бесцветного до жёлтого с появлением полосы поглощения, соответствующей плазмонному резонансу с max в области $\lambda \approx 400 - 410$ нм, что свидетельствует о формировании НЧС. Предполагается участие функциональных групп ХТЗ, в том числе двух гидроксильных и свободных первичных аминогрупп в элементарном звене, непосредственно в процессах восстановления ионов серебра и стабилизации дисперсии металлических наночастиц. При этом все ионы Ag в растворе хитозана восстанавливаются до наночастиц.

УДК: 544.015

Соколов Иван Владимирович

Термодинамические параметры смеси н-гексан-пропанол-2 в диапазоне температур 30-300 °С

Руководитель: А.А. Степачёва

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

В последние несколько десятилетий интерес к сверхкритическим флюидам возрос в связи с их применением в различных отраслях химической промышленности. Сверхкритические флюиды проявляют уникальные свойства, сочетающие преимущества жидкостей (например, высокую плотность, способность растворять различные вещества) и газов (например, высокую диффузионную способность). Эти свойства легко контролировать при относительно небольших изменениях температур и давлений [1].

Данные по термодинамике и равновесию однокомпонентных сверхкритических систем широко известны. Для двухкомпонентных систем подобные данные ограничены. Переход в сверхкритическое состояние осуществляется при температуре выше критической точки для наиболее высококипящего компонента. При этом для одного из компонентов возможно возникновение гетерогенных (фазовых) равновесий. Поэтому получение и анализ фазовых диаграмм таких систем имеет большое значение для разработки технологий с использованием сверхкритических флюидов [2, 3].

В данной работе проведено экспериментальное исследование зависимости давления насыщенного пара смесей н-гексан-пропанол-2 в зависимости от температуры и содержания компонентов. Рассмотрены диапазоны температур 30-100 °С (вблизи температур кипения компонентов), 100-150 °С (докритическая область), 150-230 °С (субкритическая область) и 230-270 °С (около- и сверхкритическая область).

На основании полученных данных были рассчитаны термодинамические параметры парожидкостного равновесия (энтальпия, энтропия и изменение энергии Гиббса смешения, а также термодинамические коэффициенты активности) для смесей с различным содержанием компонентов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sun P., Hasting J.B., Ishikawa D., Baron A.Q.R., Monaco G. // The Journal of Physical Chemistry B. – 2021. – Vol. 125. – Is. 49. – P. 13494-13501.
2. Simeski F., Ihme M. // Nature Communications. – 2023. – Vol. 14. – P. 1996-2006.
3. Булейко В.М., Григорьев Б.А., Григорьев Е.Б., Сокотущенко В.Н. // Вести газовой науки. – 2019. - № 2. – Т. 39. – С. 168-179.

УДК.66.094.55

Соколова Елена Сергеевна, Пащенко Мария Павловна

Платиносодержащие каталитические системы, стабилизированные в реакции N-алкилирования ароматических аминов-интермедиатов синтеза фармацевтических субстанций

Руководитель: А.В. Быков

Тверской государственный технический университет, г. Тверь

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

N-алкилированные ароматические амины являются очень важными азотсодержащими соединениями в фармацевтической промышленности, агропромышленности, производстве красителей и функциональных материалов. Традиционные пути синтеза N-алкилированных аминов можно разделить на две категории: восстановительные аминирования с использованием карбониллов, аминов и стехиометрических металлгидридных восстановителей; замещение аминов, катализируемое переходными металлами, алкил- или арилгалогенидами или псевдогалогенидами. Хотя эти отработанные методики жизнеспособны и обеспечивают отличные выходы большинства аминов, они по-прежнему страдают некоторыми недостатками, такими как биотоксичность альдегидов, органических галогенидов и катализаторов на основе переходных металлов, жёсткие условия эксплуатации, такие как высокая температура, и использование опасных гидридов металлов в качестве восстановителей. Для удовлетворения этих требований крайне желательно использовать более экологичный алкилирующий реагент и проводить реакцию в более мягких условиях.

Основной целью данной работы является изучение реакции N-алкилирования анилина с линейными спиртами, а преимущественно с бутанолом-1, действующим как в качестве растворителя, так и реагента, с использованием платиносодержащего катализатора. Также в экспериментах рассматривалось влияние температуры, количества растворителя, среды (инертная/ с воздухом). Проведен анализ состава и выхода продуктов методом хромато-масс-спектрометрии.

УДК 547.992.2

Солодкова Софья Дмитриевна

**Изучение влияния гуминовых удобрений на качество и рост семян
пшеницы**

Руководитель: Е.А. Прутенская

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Гуминовые вещества(ГВ) входят в состав гумуса – почвенного органического вещества, определяющего почвенное плодородие. Реакционная способность ГВ обусловлена их гидрофобно-гидрофильным соотношением. ГВ представляют собой гетерогенные полидисперсные азотсодержащие соединения фенольной природы [1].

Для регулирования роста и продуктивности сельскохозяйственных культур, повышения хозяйственной эффективности и снижения экологической нагрузки возможно использование стимуляторов роста на основе гуминовых препаратов. Они положительно влияют на структуру почвы, защищают растения от болезней и неблагоприятных климатических условий. Гуминовые препараты содержат гуминовые и фульвокислоты, гуматы, микро и макроэлементы, которые обладают стимулирующим действием. Помимо стимулирующего влияния на растения, они активизируют деятельность почвенной микрофлоры, которые продуктами метаболизма разлагают труднорастворимые соединения фосфора, калия и других элементов, переводя их в доступное для растений состояние. Также они довольно прочно связывают многие радионуклиды, пестициды, детергенты, таким образом, препятствуя их поступлению в растения и обеспечивая, тем самым урожайность и экологическую чистоту продуктивности [2].

В данной работе изучено влияние гуминовых препаратов различного способа получения на энергию прорастания и амилалитическую активность семян пшеницы. Для проведения работы использовали два препарата: полученный из продуктов ферментации торфонавозной смеси и полученный путём щелочной экстракции отхода производства жидкофазного биопрепарата. Проращивание семян производилось в чашках Петри и в рулонах.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Пищик, В. Н. Влияние гуминовых веществ на растения и ризосферные микроорганизмы в растительно-микробных системах / В. Н. Пищик, Л. В. Бойцова, Н. И. Воробьев // *Агрохимия*. – 2019. – № 3. – С. 85–95.
2. Тимофеев, В. Н. Влияние гуминовых препаратов на развитие и урожайность яровой пшеницы / В. Н. Тимофеев, В. С. Рамазанова, О. А. Вьюшина // *Эпоха науки*. – 2019. – № 20. – Декабрь.

УДК 662

Спиридонов Семён Сергеевич

Изучение липазной активности личинок восковой моли

Руководитель: Е. А. Прутенская

Тверской Государственный Технический Университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Липазы – ферменты, катализирующие распад эфирных связей в молекулах липидов. Её применение не ограничено одним направлением. В пищевой промышленности, например, они используются для гидролиза молочного жира; в фармацевтической промышленности для лечения заболеваний ЖКТ.

Среди источников липаз выделяют органы и ткани животных (поджелудочные железы и прегестральные ткани молодых жвачных), микроорганизмы (*Achromobater*, *Bacillus*, и *Arthobacter*), грибы (*Thermomyces lanuginosus*) и насекомые (*Manduca sexta*; *Locusta migratoria* и *Galleria mellonella*).

Личинки восковой моли питаются пчелиным воском и имеют уникальную систему транспортировки и использования липидов. Пищеварительные ферменты восковой моли играют большую роль в защите от болезнетворных бактерий [1].

В данной работе были выделены белковые компоненты личинок восковой моли, изучена ферментативная активность составляющих экстракт. Для выделения ферментов использовали замороженные личинки восковой моли. Выделение осуществляли из гомогенизированной массы буфером, рН которого составлял 4,77. Липазную активность проверяли на сложных восках (пчелиный воск, продукт жизнедеятельности пчелиной моли). Ферментативную реакцию проводили в смеси органических растворителей спирта и толуола. Осуществляли варьирование времени, соотношения фермент:субстрата, температуры реакции.

На основании полученных данных было выяснено, что при увеличении времени ферментативной реакции кислотное число увеличивается, что свидетельствует о том, что органические растворители были выбраны правильно для проведения процесса.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ:

1. Кароматов, И. Д. Восковая моль перспективное лечебное средство / Д. И. Кароматов // Биология и интегративная медицина. – 2016. - № 3. – 56 – 65 с.
2. Rahma R. Z. Purification and characterization of fat body lipase from the greater wax moth, *Galleria mellonella* (Lepidoptera: Pyralidae) / R. Z. Rahma, Mahdy, A. Mo'men Shaimaa, M. Abd El-Bar Marah, M. S. Barakat // The Journal of Basic and Applied Zoology. – V. 81. – 2020. – 11 р.

УДК 66.092.097

Тарасова Анастасия Алексеевна

Исследование процесса охижения древесной коры

Руководитель: А.А. Степачёва

Тверской государственной технической университет, г. Тверь

Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации

Технология охижения широко используется для преобразования твердой лигноцеллюлозной биомассы в жидкость. Выделяют непрямоe охижение и охижение растворителем. Непрямоe охижение первоначально преобразует биомассу или продукты ее переработки в синтез-газ, из которого впоследствии синтезируются такие виды топлива, как спирты и алканы. Во время охижения растворителем лигноцеллюлозная биомасса непосредственно превращается в жидкие продукты, как правило, с использованием протонных растворителей, таких как вода, фенолы, низкомолекулярные спирты, сульфолан или другие ионные жидкости. По сравнению с непрямым охижением, охижение растворителем протекает в более мягких условиях, характеризуется более высоким выходом продуктов и более легким регулированием процесса [1]. При охижении биомасса может быть эффективно преобразована в важные соединения, такие как фурфурол, 5-гидроксиметилфурфурол, левулиновая кислота и ее сложные эфиры, γ -пентилактон, алкилгликозиды и фенолы. Охижение проводится в присутствии бифункциональных катализаторов [2]. Благодаря постоянной оптимизации технологических условий большое внимание уделяется получению базовых соединений с более высокими выходами, что требует понимания пути получения целевых продуктов.

В данной работе исследовался процесс охижения древесной коры лиственных и хвойных пород деревьев. Охижение проводилось в водной среде в присутствии никельсодержащего катализатора, нанесенного на шунгит. Процесс проводили в диапазоне температур 200-270 °С при давлении водорода 0,5-1,5 МПа. Анализ жидкой фазы проводили методом газовой хроматомасс-спектрометрии. Состав полученного жидкого продукта представлен в основном полиолами (этиленгликолем, сорбитолом), фурфуролом и 5-гидроксиметилфурфуролом, а также фенольными компонентами (гваяколом, эвгенолом, сиринголом и др.).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 22-79-10096).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mika L T, Cséfalvay E, Németh Á. // Chemical Reviews. – 2018. – Vol. 118(2). – P. 505–613.
2. Huber GW, Iborra S, Corma A. // Chemical Reviews. – 2006. – Vol. 106(9). – P. 4044–4098.

УДК: 66.092.097

Терешина Екатерина Денисовна

Конверсия продуктов деполимеризации лигнина

Руководитель: А.А. Степачёва, А.В. Быков

Тверской государственный технический университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Лигнин представляет собой аморфный трехмерный разветвленный полимер, состоящий из ароматических колец, соединенных боковыми цепями метокси- и гидроксипропильных групп. Процессы деполимеризации лигнина и превращения продуктов деполимеризации привлекают все большее внимание исследовательских групп. Бионефть, полученная при ожигении лигнина и лигноцеллюлозной биомассы, содержит большое количество фенольных соединений – мономеров лигнина. К таким соединениям относят анизол, гваякол, вератрол, фенол и другие [1]. Высокое содержание кислорода в фенольных соединениях не позволяет использовать бионефть напрямую в качестве компонентов топлива. Поэтому исследование путей превращения продуктов деполимеризации лигнина в процессах гидрооблагораживания является важной задачей для разработки технологий получения топлива из биомассы.

В работе [2] был изучен процесс деполимеризации лигнина в среде пропанола-2 в присутствии катализатора Ni-Ru/SiO₂@HPS. Была доказана эффективность процесса, позволяющая получить высокий выход монофенольных соединений (более 42 %) при практически полной (> 95 %) конверсии лигнина. Для более глубокого понимания процессов, протекающих при деполимеризации, в данной работе изучено превращение основных мономеров (фенола, анизола, гваякола, сирингола, эвгенола, п-этилфенола, гидрохинона) в пропаноле-2 в присутствии указанного катализатора.

Эксперименты показали, что изученные субстраты подвергаются реакциям гидрирования ароматического кольца и деоксигенации. При конверсии смеси продуктов деполимеризации лигнина преимущественно протекает процесс деоксигенации. Конкуренция субстратов за активные центры катализатора ингибирует дальнейшее гидрирование образующихся ароматических углеводородов, тем самым увеличивая селективность к их формированию. При этом скорости расходования субстратов в смеси снижаются по сравнению со скоростями расходования индивидуальных субстратов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (22-79-10096).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Jing Y., Dong L., Guo Y., Liu X., Wang Y. // ChemSusChem. 2019. Vol. 13. Is. 17. P. 4181-4198.
2. Степачёва А.А., Терешина Е.Д., Тарасова А.А. [и др.] // Кинетика и катализ. – 2024. – Т. 65, № 4. – С. 463-473.

УДК 631.83

Ткаченко Сергей Васильевич

**Изменение биохимического состава корнеплодов моркови при
использовании калийных удобрений**

Руководитель: О.В. Шилова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь
Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Одним из важнейших макроэлементов для полевых культур является калий, поскольку он участвует в основных реакциях обмена воды и веществ в растительном организме. Основным источником калия – калийсодержащие минеральные (или органические) удобрения.

Целью исследований стало изучение сравнительного влияния разных видов калийных удобрений на урожайность и биохимический состав клубней картофеля сортов Варяг и Евпатий. Схема опыта: 1. Контроль ($N_0P_0K_0$) – без удобрений; 2. $N_{60}P_{60}$ (фон – аммиачная селитра и суперфосфат); 3. $N_{60}P_{60}$ и K_{60} (сернокислый калий); 4. $N_{60}P_{60}$ и K_{60} (калмагнезия); 5. $N_{60}P_{60}$ и K_{60} (калийная селитра); 6. $N_{60}P_{60}$ и K_{60} (хлористый калий). Удобрения вносили весной (до посева моркови).

На опыте возделывалась морковь столовая сортов Нандрин F1 и Нантская 4 – высокоурожайные среднеспелые сорта. Норма посева обоих сортов – 0,5 г/м².

Внесение разных видов калийных удобрений на азотно-фосфорном фоне привело к возрастанию продуктивности моркови от 520 ц/га до 545 ц/га (у гибрида Нандрин F1) и от 364 ц/га до 384 ц/га (у сорта Нантская 4). Наибольшая урожайность получена на варианте с применением калмагнезии на азотно-фосфорном фоне питания растений (545 ц/га – у гибрида Нандрин F1 и 384 ц/га – у сорта Нантская 4).

Изменился и качественный состав корнеплодов. Максимальным содержанием сухого вещества отличались корнеплоды, выращенных на варианте с калмагнезией (12,9% – по сорту Нандрин F1 и 12,3% – по сорту Нантская 4), а минимальным – корнеплоды варианта с хлористым калием (12,4% – по сорту Нандрин F1 и 12% – по сорту Нантская 4). Наибольший процент зольности выявлен в корнеплодах контрольного варианта (0,6% – по сорту Нандрин F1 и 0,62% – по сорту Нантская 4), а наименьший – в корнеплодах варианта с сернокислым калием (0,59% – по сорту Нандрин F1 и 0,58% – по сорту Нантская 4).

Наибольшее содержание сахаров обнаружено в корнеплодах варианта с сернокислым калием: 8,8% (сорт Нандрин F1) и 8,2% (сорт Нантская). Эти значения оказались выше значений контрольного варианта (на 1,7% и на 1,3% соответственно) и на 1,2% и 1,1% значения остальных вариантов (в зависимости от сорта столовой моркови).

УДК 622.357.5

Ткаченко Сергей Васильевич

Эффективность применения опоки как сорбента микроэлементов при выращивании овощных культур

Руководители: О.В. Шилова, А.А. Акимов

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Опока – микрозернистая микропористая кремнистая осадочная горная порода, которая может использоваться в качестве адсорбента химических элементов при приготовлении почвогрунта для выращивания рассады овощных культур. Поэтому целью исследований стало эффективности использования опоки при приготовлении микроэлементных удобрений для перцев и томатов. В опыте была использована опока Центрально-Каменоярского месторождения, расположенного в Черноморском районе Астраханской области. Предварительно она была обогащена растворами неорганических соединений бора, меди, цинка, марганца, кобальта, молибдена, железа, селена и йода. Другая часть опоки была обработана растворами микро- и ультрамикроэлементов в хелатированной форме (хелатирующие агенты – экологически безопасные комплексоны – иминоуксусная кислота (ИДУК) и этилендиаминдиантарная кислота (ЭДДЯК).

Схема опыта: почвогрунт без опоки – контроль; почвогрунт и соли микроэлементов (20 г опоки или 40 г на 1 кг грунта); почвогрунт и комплексонаты микроэлементов (20 г опоки или 40 г на 1 кг грунта). На опыте возделывались перец сорта Богатырь и томат Непас F1.

Применение солей микроэлементов в неорганической форме способствовало увеличению высоты растений томата и перцев (на 4,3 – 5,5 см по отношению к контролю), а использование комплексонатов микроэлементов – на 6,7 – 19,3 см соответственно. Наибольшее количество листьев на растении томата к моменту высадки рассады обнаружено на варианте с комплексонатами микроэлементов в двойной норме (среднем 9 – 26 шт., что оказалось больше на 14 – 52% по отношению к контрольным значениям). Применение солей микроэлементов увеличило урожайность томатов на 1 – 1,4 кг/м², а комплексонатов микроэлементов – на 1,3 – 1,9 кг/м²; урожайность перцев – на 1,3 – 2,7 кг/м² и на 1,9 – 2,9 кг/м² по сравнению с контролем. В плодах возросло количество сухого вещества, особенно на вариантах с опокой, обогащенной комплексонатами микроэлементов (у томатов – на 0,22–0,48%; у перца – на 0,3 – 0,6%), на вариантах с неорганическими формами – на 0,1 – 0,16% (в плодах томатов) и на 0,15–0,25% (в плодах перцев) по сравнению с контролем.

УДК 635.92

Федоренко Ольга Григорьевна

Стилизация дачного участка под китайский сад в Тверской области

Руководитель: С.Н. Кузнецова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра растениеводства и технологий переработки льна

В настоящее время китайский стиль как пример благоустройства и озеленения личных подсобных участков популярен, как и ранее. Этот стиль ценят за многогранность, соблюдение древних канонов, и в то же время – изменчивость для творчества. Главное условие данного стиля – это как можно более полное использование окружающего ландшафта для достижения гармонии в общении с природой. Китайский стиль в оформлении участка – выбирают спокойные люди, ценящие комфорт в простоте окружающих деталей.

Личный дачный участок, где планируют проводить работы по благоустройству и озеленению, находится в деревне Печетово, Тверской области. Площадь участка – 12 соток. Цель работы – создать на личном дачном участке комфортные условия для проживания семьи, учитывающей все пожелания всех домочадцев с учетом воплощения определенного стиля ландшафтного дизайна – китайского. Задачи работы состоят в создании красивого ландшафта, в реализации функционального использования территории с учетом небольшого количества посаженных растений.

В проект будет входить: задача создать нескольких зон отдыха с обязательным присутствием водоема в виде прудика, создание рокария с использованием различных почвопокровных растений и других атрибутов под китайский стиль. Дорожки сада будут выложены плиткой каменкой. Вдоль дорожек к дому будут посажены несколько растений пузыреплодника калинолистного «Red Baron». Дорожка с угловыми поворотами, одна ведет к беседке, которая имеет восьмиугольную крышу, красно-коричневого цвета. Здесь будут посадки клён ясенелистный Royal Redot и войлочные вишни. У прудика размером примерно 6 м² будут посажены лилейники гибридные и ирисы сибирские, а в самом пруду – кувшинки. Через прудик будет проходить зигзагообразный мостик. В зоне отдыха будет размещена угловая каменная скамейка, с задней стороны которой будет высажена декоративная лиана актинидия коломикта. На территории участка обязательным элементом растительного оформления будет использование сосны горной, как символа долголетия и процветания хозяев участка.

При проектировании озеленения личного участка в любом стиле и стилизации руководствуются принципами практичности, эстетичности и комфортности хозяев дачной территории.

УДК 54.057

Цветков Дмитрий Юрьевич

Синтез и анализ комплексов метионина с марганцем и медью

Руководитель: В.Ю. Долуда

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Элементоорганические добавки в виде комплексов метионина с металлами становятся все более популярными в различных отраслях, включая сельское хозяйство, ветеринарию и пищевую промышленность. Элементоорганические добавки обладают высокой биодоступностью. Как правило, она выше в 2–3 раза по сравнению с неорганическими солями. Элементы в такой форме сразу готовы к усвоению, так как аминокислоты — это “знакомые” каждой клетке соединения. Связывание металлов с аминокислотами, такими как метионин, может снизить их токсичность и повысить безопасность применения [1]. Метионин является важной аминокислотой, участвующей в метаболизме и синтезе белков. В сочетании с металлами (медью или марганцем) он может способствовать улучшению обмена веществ. В животноводстве метионин часто используется как кормовая добавка для улучшения роста и здоровья животных. Анализ его солей может помочь оптимизировать рацион и повысить продуктивность [2].

В данной работе был проведен синтез комплексов метионина с Mn и Cu из хлоридов металлов с практическим выходом 77,44 и 81,22 % соответственно. Анализ полученных комплексов проводился с помощью методов ИК и УФ спектроскопии. Для определения элементарного состава соединений использовали рентгенофлуоресцентный анализ. Были выявлены оптимальные условия проведения синтеза комплексов с наибольшим выходом продукта, а также условия проведения нингидриновой реакции для УФ спектроскопии. По результатам исследований было определено качественно и количественно содержание метионина и микроэлементов в виде атомов металлов (в 1 метионата Mn содержится: метионина – 0,8544 г, Mn – 0,1445 г; в 1г метионата Cu: метионина – 0,8694 г, Cu- 0,1304 г).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Miller, J. M., Johnson, R. S. The Role of Methionine in Animal Metabolism: Implications for Feed Formulation // *Animal Feed Science and Technology*. 2020, 267, 114-123.
2. Johnson, R., Lee, T. Spectroscopic Techniques for Characterizing Amino Acid Complexes // *International Journal of Food Science*. 2019, 12(7), 567-578.

УДК: 14,07

Матвей Максимович Цыганков

Перспективы получения высокопрочного трикотажа на основе кулирных переплетений нитей сверхвысокомолекулярного полиэтилена

Руководители: А.В.Труевцев, В.В.Васильева, Л.П.Мясникова
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия
Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий
и дизайна, Санкт-Петербург

Одними из самых перспективных синтетических волокон являются сверхпрочные высокомодульные волокна из сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ), нашедшие широкое использование при производстве пуленепробиваемых жилетов, касок, брони, спортивного инвентаря, биоимплантов и пр. СВМПЭ уже использовался при выработке тканых и нетканых полотен. В то же время пытались связать трикотаж из параарамидов, что не дало существенно выигрыша в прочности [1].

Целью настоящей работы являлось проведение сравнительного анализа механических свойств трикотажа связанного из СВМПЭ нитей, полученных по гель-технологии из разных растворителей. В качестве сырья были использованы 2 вида синтетических нитей синтезированных по методу гель-формования на разных растворителях: GL-28, растворитель – минеральное масло и Chi-88-декалин. Из этих нитей были выработаны трикотажные полотна переплетение ластик 1+1 на машине ПВРК 8 класса. Найдено, что при петлеобразовании образуются полосы сброса в большем количестве трикотаже из Chi-88 чем в GL-28 (см. рис. 2-3 соответственно), что приводит к более низким механическим показателям трикотажного полотна. Технологические параметры рассчитывались по универсальной формуле А.С. Далидовича. Площадь сечения образцов рассчитывалась по схеме предложенной Сталевичем [2].

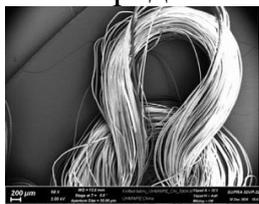


Рис. 1 – Нить
GL-28

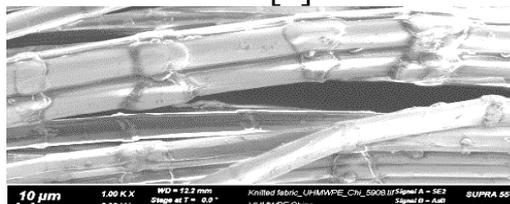


Рис. 2 – трикотаж из нити
Chi-88

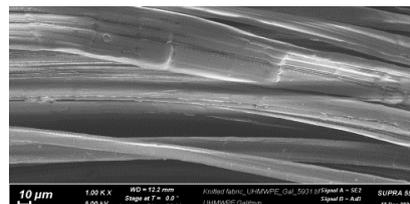


Рис. 3 – трикотаж из нити
GL-28

Обсуждаются возможности использования трикотажа в качестве

армирующего компонента для композиционных материалов.

1. Труевцев А.В. Армирование композитов кулирным трикотажем из параарамидной нити / А.В. Труевцев, Е.С. Цобкалло, К.А. Молоснов // Легкая промышленность. Курьер. – 2013 - №5. – С. 7-10.
2. Сталевич А.М., Труевцев А.В. Напряжение в структуре кулирного трикотажа при одноосном растяжении //Изв. Вузов. Технол. Текстил. Пром-си.-1996.- №3.- С. 10-13.

УДК: 544.18

Черепанова Маргарита Валерьевна

**Квантово-химическое исследование комплексов на основе
диацетилмонооксима**

Руководитель: И.Н. Веселов

Тверской государственный университет

Кафедра неорганической и аналитической химии

Объектом изучения в данной работе являются комплексы с ионами переходных металлов (Ni^{2+} , Pt^{2+} , Co^{2+}) и лиганда на основе диацетилмонооксима. Данный лиганд представляет собой основание Шиффа и образует устойчивые комплексы (Рис. 1), которые проявляют высокую биологическую активность. Исследования показывают, что диацетилмонооксим и его производные могут иметь большой потенциал в медицине и биологии, поэтому их изучение представляет значительный интерес.

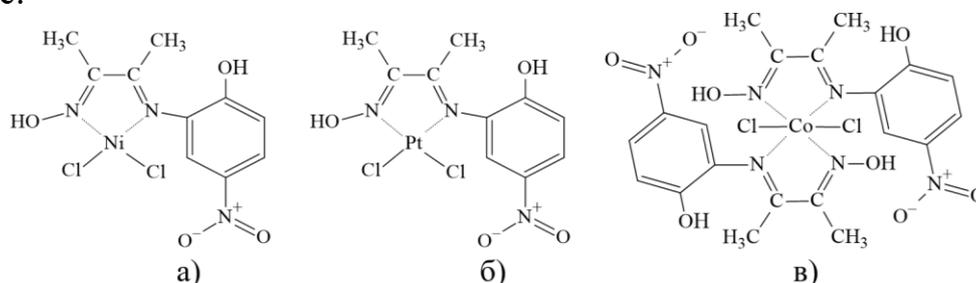


Рис. 1. а) $[\text{Ni}(\text{hnpio})\text{Cl}_2]$, б) $[\text{Pt}(\text{hnpio})\text{Cl}_2]$, в) $[\text{Co}(\text{hnpio})\text{Cl}_2]$

Оптимизация геометрии комплексов была выполнена с использованием программ Maestro и Jaguar, входящих в пакет Schrodinger Suite. Квантово-химические расчеты осуществляли методом теории функционала плотности с использованием функционала B3LYP-D3 в базисе 6-31G**++.

Комплексы никеля и платины имеют плоскоквадратную геометрию, а комплекс кобальта – октаэдрическую. Стоит отметить, что в результате взаимодействия гидроксильных групп и атомов хлора структура комплекса деформируется (Cl-Co-Cl отклоняется от четверной оси), что сказывается на его химических и оптических свойствах.

Для исследуемых комплексов были определены геометрические характеристики. Кроме того, для оценки оптической активности этих комплексов были рассчитаны молекулярные орбитали НОМО (наивысшая занятая) и LUMO (низшая вакантная).

УДК 634

Чистов Николай Дмитриевич

Использование корнестимулятора Корневина для черенкования йошты

Руководитель: С.Н. Кузнецова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра растениеводства и технологий переработки льна

Йошта – сравнительно новая, малоиспользуемая гибридная многолетняя плодово-ягодная культура семейства крыжовниковых. Это гибрид, полученный скрещиванием трех видов: чёрная смородина, крыжовник растопыренный, крыжовник обыкновенный. Кустарник йошты неприхотлив, растёт на любых типах почв, обладает повышенным иммунитетом к наиболее опасным болезням и обладает полезными свойствами обоих растений. Как правило, данная культура размножается только вегетативно – при помощи одревесневшими и зелеными черенками. В сельском хозяйстве для улучшенного корнеобразования применяют различные естественные корнестимуляторы. Один из самых популярных – это корневин. Он содержит действующее вещество, индолилмасляную кислоту. Это порошок бежевого цвета. В него обмакивают концы черенков непосредственно перед высаживанием.

Перед закладкой опыта, нами была выбрана и подготовлена опытная делянка. Для зелёного черенкования были срезаны молодые веточки куста йошты. Черенки нарезались так, чтобы на них оставалось 5-6 листочков. Верхние 2-3 листочка сохранялись, а нижние удалялись. Длина черенков была не менее 6 см. Перед посадкой зелёные черенки йошты замачивались сутки, норма корневина для замачивания – 1 г на 1 л воды. Расстояние между черенками в ряду – 10 см. Расстояние между рядами в опыте – 20 см. Опыт был заложен 20 мая 2024 года. Почва на опытной делянке поддерживалась во влажном состоянии. В течение первых 2 месяцев после посадки (контроль – 13 июля и 27 июля) часть черенков укоренились и составило 50%. Такой низкий процент приживаемости связан с адаптационным периодом черенков. При подсчете черенков осенью, 15 сентября, процент укоренившихся растений в среднем составил 70%.

Йошта пока не является слишком популярной ягодной культурой, как это можно сказать о смородине или крыжовнике. В плодах растения йошты содержится большое количество лечебных и полезных для человеческого организма веществ. В связи с этим их польза для человеческого организма достаточно велика. Йошта еще и достаточно проста в выращивании, неприхотлива в уходе, а также устойчива ко многим заболеваниям. Вырастить йошту, как и смородину черную достаточно просто. Главное, соблюдать все правила агротехники.

УДК 581.1:541.49

Чистов Николай Денисович

Влияние соединений молибдена на формирование урожая гороха посевного

Руководитель: О.В. Шилова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Для увеличения урожайности гороха посевного необходимо изучение биологической активности высокоэффективных экологически безопасных органических источников, включающих жизненно важные элементы питания (для зернобобовых культур, прежде всего, молибден и кобальт). К таким веществам можно отнести комплексонаты металлов и неметаллов, синтезированные на основе комплексонов (например, ЭДДЯК, ИДЯК и др.). Поэтому целью исследований было изучение эффективности применения разных форм молибденсодержащих соединений в посевах гороха среднеспелого сорта Рокет.

Схема двухфакторного опыта включала варианты: 1. Контроль (без опрыскивания растений); 2. Опрыскивание растений раствором $(\text{NH}_4)_2\text{MoO}_4$; 3. Опрыскивание растений раствором ЭДДЯК; 4. Опрыскивание растений раствором Мо-ЭДДЯК (с $\text{pH}_{\text{kcl}} = 5,5$). Комплексон ЭДДЯК (этилендиаминдиантарная кислота) и молибденовый комплекс (Мо-ЭДДЯК с $\text{pH}_{\text{kcl}} = 5,5$) были синтезированы доцентом Смирновой Т.И.

Норма высева семян – $1,5 \text{ г/м}^2$. Растения дважды опрыскивали растворами с концентрацией $1,26 \cdot 10^{-5} \text{ моль/л}$ в объёме 100 мл/м^2 .

Исходя из полученных результатов, максимальным суммарным количеством фотосинтетических пигментов отличался вариант с Мо-ЭДДЯК (111 мг/100 г листьев), а минимальным – вариант с $(\text{NH}_4)_2\text{MoO}_4$ (99 мг/100 г листьев). Обработка растений раствором комплексона позволила увеличить суммарное количество хлорофиллов *a* и *b* по отношению к контролю на 13 мг/100 г листьев. Количество каротиноидов уступало значениям в содержании хлорофиллов, однако зависимость оказалась аналогичной: в листьях растений, обработанных Мо-ЭДДЯК, их содержание оказалось больше на 7 мг/100 г листьев по отношению к варианту с применением $(\text{NH}_4)_2\text{MoO}_4$ и на 14 мг/100 г листьев – к контролю. Наименьшая урожайность гороха получена на контроле (21,8 ц/га), что на 5,8 ц/га (или 21%) меньше по сравнению с вариантом, на котором проведена некорневая подкормка хелатированным молибденом (27,6 ц/га). На вариантах с обработкой растений ЭДДЯК продуктивность составила 25,4 ц/га, а с $(\text{NH}_4)_2\text{MoO}_4$ – 25 ц/га. Наибольшим содержанием белка отличались семена на варианте с Мо-ЭДДЯК – 20,4%, а с $(\text{NH}_4)_2\text{MoO}_4$ и ЭДДЯК составило 18,6% и 19,2% соответственно.

УДК 631.83

Чистов Николай Денисович

Зависимость продуктивности столовых сортов моркови от видов калийных удобрений

Руководитель: О.В. Шилова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь
Кафедра агрохимии, земледелия и лесопользования

Калийные удобрения повышают урожай сельскохозяйственных культур, среди которых: картофель, свекла, гречиха, подсолнечник, топинамбур, табак и др. при условии одновременного внесения азотных и фосфорных туков. Целью исследований стало изучение сравнительного влияния разных видов калийных удобрений на свойства почвы и продуктивность клубней картофеля сортов Варяг и Евпатий.

Схема опыта: 1. Контроль ($N_0P_0K_0$) – без удобрений; 2. $N_{60}P_{60}$ (фон – аммиачная селитра и суперфосфат); 3. $N_{60}P_{60}$ и K_{60} (сернокислый калий); 4. $N_{60}P_{60}$ и K_{60} (калмагнезия); 5. $N_{60}P_{60}$ и K_{60} (калийная селитра); 6. $N_{60}P_{60}$ и K_{60} (хлористый калий).

Агрохимическая характеристика почвы опытного участка: $pH_{KCl} = 6,18$; $S_{орг. \text{вещ-ва}} = 6,8\%$; содержание обменного калия – 188–190 мг/кг почвы, подвижного фосфора – 420 – 425 мг/кг почвы. Опытными культурами были два сорта столовой моркови – Нандрин F1 и Нантская 4.

Применение калийных удобрений на азотно-фосфорном фоне питания растений позволило увеличить количество подвижных форм азота, фосфора и калия в дерново-подзолистой почве по сравнению с контролем в среднем на 27 – 58% (особенно на вариантах с калмагнезией и сернокислым калием на азотно-фосфорном фоне питания растений).

Величина урожая на контрольном варианте оказалась наименьшей: 480 ц/га (у Нандрин F1) и 330 ц/га (у сорта Нантская 4), что на 28 – 67 ц/га (в зависимости от сорта) меньше по сравнению к остальным вариантам опыта. Совместное применение азотных и фосфорных удобрений способствовало увеличению урожайности корнеплодов на 30 ц/га (у гибрида Нандрин F1) и на 25 ц/га (у сорта Нантская 4).

Внесение разных видов калийных удобрений на азотно-фосфорном фоне привело к возрастанию продуктивности моркови от 520 ц/га до 545 ц/га (у гибрида Нандрин F1) и от 364 ц/га до 384 ц/га (у сорта Нантская 4). При этом наибольшая урожайность получена на варианте с применением калмагнезии на азотно-фосфорном фоне питания растений (545 ц/га – у гибрида Нандрин F1 и 384 ц/га – у сорта Нантская 4). Наименьшая урожайностью и прибавка к контролю выявлены на варианте с применением хлористого калия – 518 ц/га и 38 ц/га (у гибрида Нандрин F1) и 364 ц/га и 34 ц/га (у сорта Нантская 4) соответственно.

УДК: 54.06

Шапошников Василий Юрьевич

Получение биоугля торрефикацией и исследование его адсорбционных свойств

Руководитель: А.А. Степачёва

Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Биоуголь - углеродистый продукт биомассы, получаемый путем удаления воды и других летучих компонентов, подвергая тепловой обработке растительную или животную биомассу. Одним из методов получения биоугля является метод торрефикации.

Торрефикация, или низкотемпературный пиролиз, представляет собой метод обработки биотоплива, заключающийся в его нагреве и выдержке в бескислородной среде при температуре в диапазоне 200 – 300°C. В процессе торрефикации из сырья удаляется влага, а также происходит частичная термическая деструкция основных органических составляющих биомассы (гемицеллюлозы, целлюлозы и лигнина). Достоинством данного процесса является утилизация древесных отходов и превращение различных пород древесины как сырья в однородную массу. Торрефикат может быть применён как топливо для прямого сжигания (совместно с углём либо как самостоятельное топливо), а также в качестве сырья в технологиях газификации и пиролиза [1].

В данной работе проведена торрефикация лигнина, инулина, целлюлозы, хвойных и берёзовых опилок. Оценено влияние температуры на процесс торрефикации. Процесс торрефикации проводился в муфельной печи в диапазоне температур 250-300 °С. Адсорбционные свойства полученных биоуглей исследованы методом адсорбции уксусной кислоты. Рассчитаны значения удельной адсорбции и коэффициентов уравнения Фрейндлиха. Результаты экспериментального исследования процесса торрефикации показали, что температура 260 °С является оптимальной с точки зрения выхода продукта и его сорбционной емкости.

Также проведена модификация полученного биоугля путем его сульфирования в концентрированной серной кислоте с целью формирования кислотных групп на поверхности. Формирование сульфогрупп подтверждено методом ИК-спектроскопии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Экоэнергия [Электронный ресурс]. Адрес доступа: https://ecology-energy.ru/production/biofuel/torrefied_wood. Дата обращения 16 июня 2024 г

УДК 620.30

Шарапова Анна Андреевна, Кудрявцева Екатерина Викторовна
**Синтез стабильных коллоидных растворов наночастиц оксида меди (I)
и исследование их фотокаталитических свойств**

Руководитель: А.А. Буринская

Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и
дизайна

Кафедра химических технологий им. А.А. Хархарова

Наночастицы оксида меди (I) (Cu_2O) вызывают большой интерес благодаря своим уникальным оптическим, антибактериальным и фотокаталитическим свойствам.

В данной работе представлен синтез коллоидных растворов наночастиц оксида меди (I) из прекурсора – сульфат меди (II) пентагидрат ($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) с концентрацией 0,0008 М. В качестве восстановителя использовали аскорбиновую кислоту в соотношении прекурсор:восстановитель 1:80. Реакцию проводили в водных средах стабилизатора ПЭГ – 1500. Синтез осуществляли в слабо-кислой и щелочной средах.

В ходе реакции цвет растворов изменялся от ярко-желтого до красно-багрового, что косвенно свидетельствует о формировании наночастиц оксида меди (I). С использованием спектрофотометра УФ-6700 зафиксирована экстинкция при длинах волн $\lambda \approx 290\text{--}360$ нм, что соответствует характерным пикам поглощения для наночастиц оксида меди (I). Полученные коллоидные растворы обладают высокой степенью однородности и стабильностью.

Размеры и форму полученных наночастиц оксида меди (I) определяли с использованием сканирующего электронного микроскопа *JEOL JSM-6390 LA*. Зафиксированы наночастицы размером от 30 до 50 нм преимущественно сферической формы.

Проводилась оценка фотокаталитических свойств синтезированных наночастиц оксида меди (I) путем взаимодействия с красителем метиленовым голубым (МВ) под воздействием УФ-излучения. Основной механизм реакции связан с образованием реактивных форм кислорода, которые разрушают молекулы МВ. Наилучшие результаты получены с использованием растворов наночастиц, синтезированных в щелочной среде (рН = 10).

Полученные данные указывают на способность наночастиц Cu_2O эффективно разрушать органические красители, в том числе метиленовый голубой, под воздействием УФ-излучения. Синтезированные наночастицы Cu_2O могут найти применение в фотокаталитических процессах, в частности, в технологиях очистки воды и воздуха, а также в качестве функциональных материалов для химической промышленности.

УДК 66.092.097

Шашуев Андрей Алексеевич

Получение и исследование биоугля гидротермальной карбонизацией древесной коры

Руководитель: А.А. Степачёва, Ю.В. Луговой
Тверской государственной технической университет, г. Тверь
Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации

Превращение отходов биомассы в функциональные материалы, такие как биоуголь, является перспективным методом повышения ценности отходов. Разработка технологии производства биоугля позволяет получать наноразмерный биоуголь с увеличенной площадью поверхности и структурными особенностями (Шарма и др., 2023) [1]. В последние годы гидротермальная карбонизация (ГТК) рассматривается как альтернативный метод переработки биомассы для получения продуктов с добавленной стоимостью. Во время ГТК биомассу нагревают в бескислородной среде в присутствии докритической воды и автогенного давления в диапазоне 2-10 МПа [2].

Во время ГТК биомасса претерпевает структурные изменения, распадаясь на твёрдые, жидкие и газообразные продукты. При этом протекают такие реакции, как гидролиз, дегидратация, декарбоксилирование, ароматизация и повторная конденсация.

В данной работе исследовался состав и свойства угля, полученного методом гидротермальной карбонизации при варьировании условий (температуры, соотношения биомасса-вода, время процесса). В качестве сырья использовалась кора хвойных и лиственных пород деревьев. Полученный твердый продукт исследовали методами элементного (CHNS) анализа, низкотемпературной адсорбции азота. Определены оптимальные параметры гидротермальной карбонизации, позволяющие получать высокий выход продукта.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 22-79-10096).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sharma A.K., Chodke P.K., Goyal N., Bobde P., Kwon E.E., Lin K.-Y. A., Chen W.-H. // *Bioresource and Technology*. – 2023. – Vol. 387. – P. 129632.
2. Makela M., Benavente V., Fullana A. // *Applied Energy*. – 2015. – Vol. 155. – P. 576–584.
3. Fang, June ; Zhan, Lu ; Ok, Yong Sik et al. // *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*. – 2018. – Vol. 57. – P. 15-21.

УДК: 66.061.3

Щихорская Елизавета Дмитриевна

Изучение эффективных методов экстракции биофлавоноидов

Руководитель: Н.В. Лакина

Тверской государственный технический университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Одним из перспективных методов выделения биологически активных веществ является экстракция сверхкритическими флюидами, в частности, диоксидом углерода в сверхкритических условиях. Сверхкритический флюид (СКФ) – особое состояние вещества, в которое оно переходит при превышении определенных пороговых значений температуры и давления, индивидуальных для каждого химического вещества и называемых критическими параметрами данного вещества[1].

Целью данной работы являлось изучение возможности использования СК-СО₂ для выделения флавоноидов, а также сравнение содержания биологически активных веществ в экстрактах, полученных с использованием СК-СО₂ и традиционной экстракции этанолом различной концентрации.

Для экстракции флавоноидов лабазника вязолистного использовали надземную часть из одной партии лекарственного растительного сырья. Сырьё лабазника измельчали до 6–8 мм, отбирали 10,0 г и экстрагировали при температуре 55 °С и давлениях 15, 20 и 30 МПа в течение 1 часа. Количественное определение содержания суммы флавоноидов проводилось с помощью УФ-спектрофотометрии.

В процессе экстракции методом сверхкритической экстракции диоксидом углерода были выявлены оптимальные параметры (20 МПа и 55 °С), при которых обнаружено наибольшее содержание суммы флавоноидов по сравнению с методом традиционной экстракции 70%-ным этанолом. Высокий выход биофлавоноидов обусловлен низкой температурой процесса, предотвращающую термическую деградацию термолабильных соединений, а также растворяющей способностью флюида, что позволяет селективно извлекать исследуемые флавоноиды, минимизируя содержание нежелательных веществ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Могилюк В., Добровольный А. Сверхкритическая флюидная экстракция растительного сырья: перспективная технологическая платформа для фармацевтической промышленности // Фармацевтическая отрасль. 2015. Т. 48, №1. С. 62-68.

УДК: 661.17:665.6/.7

Яковлев Борис Алексеевич

**Исследование кинетики каталитического пиролиза сшитого
полиэтилена**

Руководитель: К.В. Чалов

Тверской государственный технический университет

Кафедра химия и технология полимеров

Технология пиролиза широко применяется для переработки различных видов отходов включая пластиковые, резинотехнические и сельскохозяйственные отходы. Пиролиз включает термическое разложение органических материалов в отсутствие кислорода, что позволяет избежать процессов окисления и максимально сохранить углеродную структуру исходного материала. Сшитый полиэтилен, обладая высокой термостойкостью и механической прочностью, становится все более популярным в различных отраслях. Однако его долговечность также приводит к проблемам утилизации его отходов, так как традиционные методы переработки не всегда эффективны. В этом контексте пиролиз предлагает решение, позволяя преобразовывать этот материал в жидкие углеводороды, газ и углеродные остатки. Процесс пиролиза сшитого полиэтилена может быть разделен на несколько этапов. Первоначально, при нагревании, происходит разложение полимерной структуры, что приводит к образованию низкомолекулярных углеводородов. Эти продукты могут включать как жидкие углеводороды, так и газообразные компоненты, которые могут быть использованы в качестве топлива или сырья для химической промышленности. Одним из преимуществ пиролиза является получения пиролизного масла, которое может быть использовано как альтернативное топливо. В отличие от традиционных методов переработки, пиролиз позволяет достичь более высоких выходов жидких продуктов и минимизировать образования твердых остатков. Это делает процесс более экономически выгодным и экологически чистым. Исследования показывают, что варьирование температуры и времени процесса может значительно влиять на состав и выход конечных продуктов. [1]

В данной работе изучено влияние катализаторов и условий проведения процесса пиролиза. Проведен анализ состава и выхода продуктов пиролиза. Для проведения процесса пиролиза углеводородов использовался сшитый полиэтилен марки РЕ-Ха. Процесс проводился в реакторе объемом 100мл в инертной среде азота и аргона. Анализ продуктов пиролиза проводился методами ГЖХ, МС, ИК спектроскопии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cynthia Dega, Rachid Boukhili, Babak Esmaili, Justine Decaens. Microwave-Assisted Pyrolysis of Carbon Fiber-Reinforced Polymers and Optimization Using the Box–Behnken Response Surface Methodology Tool. *Materials*. -2024. P. 19.

УДК 633.521:633.522

Яковлева Агата Анатольевна

Биоактивация семян конопли (*Cannabis sativa* L.) и льна (*Linum usitatissimum* L.) методом кратковременного проращивания

Руководитель: И.Э. Миневич

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение Федеральный научный центр лубяных культур, Тверь

В настоящее время становятся более популярными для перерабатывающей промышленности такие культуры как техническая конопля и лен масличный. Семена данных культур можно использовать как источник биологически активных веществ, а также применять в пищевых технологиях ввиду высокого содержания макронутриентов [1].

Одним из наиболее экономически выгодных методов максимальной реализации биохимического потенциала семян является способ кратковременного проращивания. Ферментативная модификация семян конопли и льна способствует повышению их биологической активности за счет появления продуктов гидролитического распада биополимеров – физиологически активных пептидов, моно- и олигосахаридов, нуклеотидов.

В рамках данной работы установлено, что при проращивании семян конопли и льна в течение 5 суток соотношение основных макронутриентов изменяется периодически. Основной гидролитический распад запасных белков осуществляется одновременно с синтезом новых белков, которые необходимы для прорастания и изменения не заметны. Интенсивности пиков функциональных групп в области липидов семян льна свидетельствуют об отсутствии на раннем этапе проращивания расщепления запасных липидов. В семенах конопли происходит гидролиз триглицеридов до глицерина и жирных кислот под действием ферментов. Анализ углеводной области ($1200-680\text{ см}^{-1}$) ИК-спектров пророщенных семян конопли и льна и интенсивности полос соответствующих функциональных групп позволяет предположить интенсивное протекание гидролитического расщепления полисахаридов [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гореева В.Н. Качество семян лубяных и масличных культур // Пермский аграрный вестник. – 2021. – № 4 (36). – С. 30-37.
2. Andronie L., Pop I. D., Sobolu R., Diaconeasa Z., Truță A., Hegeduş C., Rotaru A. Characterization of Flax and Hemp Using Spectrometric Methods // Applied Sciences. – 2021. No. 11(18). – 8341 p. <https://doi.org/10.3390/app11188341>

УДК 544.47

Ясиновенко Мария Андреевна

**Жидкофазное карбонилирование бромбензола в синтезе эфиров
бензойной кислоты**

Руководитель: А.В.Быков

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

В промышленности реакции карбонилирования занимают особое место, поскольку позволяют получать широкий спектр альдегидов, кетонов, сложных эфиров, которые затем используются как промежуточные продукты и целевые вещества в различных отраслях промышленности.

Бензойная кислота - простейшая одноосновная карбоновая кислота ароматического ряда - широко востребованный продукт химической промышленности. Она и ее соли обладают высокой бактерицидной и бактериостатической активностью, благодаря чему, а также нетоксичности, бензойную кислоту применяют при консервировании пищевых продуктов, в медицине при кожных заболеваниях как наружное антисептическое и фунгицидное средство. Её эфиры используют в парфюмерной промышленности; а различные производные, например, хлор- и нитробензойные кислоты, - для синтеза красителей. Бензойную кислоту используют в производстве фенола, капролактама, бензоилхлорида как добавку к алкидным лакам, улучшающую блеск, адгезию, твердость и химическую стойкость покрытия.

В данной работе был исследован процесс жидкофазного синтеза октилового эфира бензойной кислоты карбонилированием бромбензола в присутствии соли палладия, стабилизированной в промышленном стиролдивинилбензольном сорбенте MN100. Определено влияние катализаторов, оснований и условий проведения реакции карбонилирования. Проведён анализ состава и выхода продуктов карбонилирования. Реакция проводилась при атмосферном давлении в присутствии растворителя и угарного газа. Анализ катализата проводился методом ГХ-МС. Максимальная достигнутая конверсия составила 98,83%.

УДК 537.226

Александров Евгений Васильевич

**Влияние включений кристаллического сегнетоэлектрика на
диэлектрические характеристики композита P(VDF-TrFE) + ДТГС**

Руководитель: А.В. Солнышкин

Тверской государственный университет

Кафедра физики конденсированного состояния

Полукристаллический полимер поливинилиденфторид PVDF и его статистический сополимер с трифторэтиленом P(VDF-TrFE) принадлежат к классу электроактивных диэлектриков, которые обладают спонтанной поляризацией в полярной β -фазе, обуславливающей существование пиро- и пьезоэлектрических свойств. Внедрение включений кристаллических сегнетоэлектриков в полимерные матрицы на основе PVDF или P(VDF-TrFE) могут существенно усилить пиро- и пьезоэлектрическую активность, а также приводить к изменению диэлектрического отклика.

Целью данной работы являлось исследование диэлектрических характеристик пленочных образцов композитного материала на основе P(VDF-TrFE) с различным уровнем содержания включений кристаллического сегнетоэлектрика дейтерированного триглицинсульфата (ДТГС).

Для создания полимерных пленок использовался метод кристаллизации из раствора, в результате чего получались образцы с различным содержанием ТГС – 0,5; 1; 5; 10% и толщиной 15 – 25 мкм. Для диэлектрических исследований на поверхность образцов методом вакуумного распыления нанесены алюминиевые электроды. Измерения диэлектрических параметров композиционных пленок проводились в частотном интервале $25 \div 3 \cdot 10^6$ Гц с помощью измерителя иммитанса E7-30.

Исследования показали, что диэлектрическая проницаемость (ϵ) композитов увеличивается с ростом концентрации ДТГС. Это связано с тем, что диэлектрическая проницаемость ДТГС приблизительно в 3 раза величину ϵ полимерной матрицы. Эти результаты хорошо подтверждаются моделями Максвелла-Гарнетта и Пуна-Шина.

Получены температурные зависимости диэлектрической проницаемости исследуемого композита. Фазовый переход, регистрируемый по положению максимума ϵ , наблюдается при $T_C = 112^\circ\text{C}$ для пленок P(VDF-TrFE) без включений. Наличие ДТГС в композитных пленках смещает температуру фазового перехода в высокотемпературную область. Подобный эффект схож с действием постоянного внешнего электрического поля. Причиной наблюдаемого сдвига является внутреннее электрическое поле, формирующееся при внедрении кристаллических включений ДТГС в полимерную матрицу.

УДК: 537.226.4

Александрова Дарья Дмитриевна

**Влияние примеси церия на процессы переключения в кристаллах
ниобата бария стронция**

Руководитель: И.Л. Кислова

Тверской государственной университет, г. Тверь

Кафедра физики конденсированного состояния

Монокристаллы ниобата бария стронция (SBN), легированные различными редкоземельными примесями, широко используются в оптоэлектронике. Нами исследовались процессы переключения в образцах SBN с примесью церия под действием переменного поля, в частности исследовались петли диэлектрического гистерезиса при различных температурах.

Из анализа установившихся во времени петель диэлектрического гистерезиса были рассчитаны величины коэрцитивного поля и переключаемой поляризации. Данные, полученные при комнатной температуре, представлены в таблице 1.

Таблица 1. Величины коэрцитивного поля и переключаемой поляризации в кристаллах SBN pure и SBN Ce.

Образцы	Коэрцитивное поле E , кВ/см	Переключаемая поляризация P , мкКл/см ²
SBN-61 pure	0,7	50
SBN-61 0,002 % Ce	1,1	6,2
SBN-61 0,01 % Ce	1,2	8,6
SBN-61 0,1 % Ce	2,7	6,0

Обнаружено, что величина переключаемой поляризации в образцах с примесью церия значительно уменьшается по сравнению с беспримесным SBN или SBN с примесями других редкоземельных металлов, а коэрцитивное поле, напротив увеличивается. Однако, как таковой зависимости величины переключаемой поляризации и коэрцитивного поля от концентрации церия в данных образцах не установлено.

Уменьшение величины переключаемой поляризации в исследуемых образцах может быть связано с тем, что данная примесь распределяется более равномерно, чем примеси других редкоземельных металлов. Равномерное распределение примеси приводит к уменьшению подвижности доменных стенок, а, следовательно, к увеличению величины коэрцитивного поля.

УДК 536.421.1 + 536.911

Анофриев Виталий Александрович

Исследование фрактального рельефа тонких плёнок молибдена

Руководитель: Н.Ю. Сдобняков

Тверской государственной университет, г. Тверь

Кафедра общей физики

Плёнки Мо представляют значительный научный интерес благодаря своим уникальным физическим свойствам. Ранее в [1] была установлена обратная зависимость между фрактальной размерностью (ФР) и площадью покрытия подложки одно- и многослойными плёнками на основе Мо. В [2] сделан акцент на деформационных изменениях различных материалов, включая Мо, и их влиянии на ФР. При деформации наблюдается рост ФР, что указывает на усиление фрагментации структуры и увеличение количества зерен. Такой эффект обусловлен не только пластической деформацией, но и влиянием обратного давления, которое играет ключевую роль в формировании структуры Мо. Исследование морфологии плёнок Мо [3] показало, что ФР варьируется в пределах 2,41–2,84 в зависимости от масштаба. Таким образом, возможно говорить о наличии взаимосвязи между ФР, зависящей от метода получения плёнок, и их физическими свойствами.

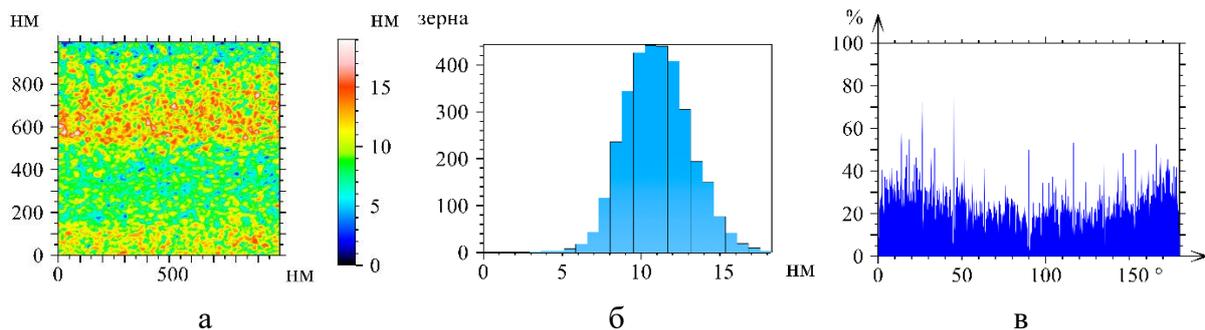


Рис. 1. Изображения плёнки Мо и диаграмм её поверхностных параметров, где: а – СТМ-изображение со шкалами размера поверхности и её высоты; б – изображение диаграммы распределения зёрен в зависимости от их размера; в – декартова диаграмма направления текстуры поверхности, полученная преобразованием Фурье.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Jiang Y., to Baben M., Lin Y. et al. Analyzing growth kinematics and fractal dimensions of molybdenum disulfide films // *Nanotechnology*. 2021. V. 32. № 24. Art. № 245602. 13 p.
2. Zavdoveev A., Beygelzimer Y., Varyukhiv V., Efros B. Influence of deformation on fractal dimension of deformed metals structure // *arXiv:1204.6398*. 2012. 5 p.
3. Anofriev V.A., Sdobnyakov N.Yu. et al. Fractal relief on the surface of molybdenum films // *Proceedings of the 2025 Conference of Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering (2025 EICon)*. St. Petersburg, 2025. P. 958-963.

УДК 535-1

Бериллов Владислав Васильевич

Применение халькогенидных стёкол в инфракрасной оптике

Руководитель: И.В. Каплунов

Тверской государственной университет, г. Тверь

Кафедра общей физики

Прогресс, достигнутый в области технологий, связанных с недостаточно изученным диапазоном частот, привлек внимание к разработке новых материалов в терагерцовом диапазоне. В 2019 году впервые были представлены халькогенидные стекла на основе As, S и Se, которые обеспечивают эффективную работу в спектрах прозрачности атмосферы на длинах волн 3-5 и 8-12 мкм. Активное использование инфракрасных волоконных световодов в таких областях, как оптическая связь, медицина и экология, продемонстрировало, что халькогенидные сплавы являются наиболее перспективными материалами для работы с инфракрасным излучением. Для волоконной оптики были синтезированы различные халькогенидные сплавы, включая As-S, As-Se, As-S-Se, Ge-S, Ge-Se, Ge-As-S, As-Se-Te, Ge-As-Se, Ge-Se-Te, Ga-La-S и Ge(Ga) [1]. В нашей работе получены спектры пропускания и отражения образцов халькогенидных стёкол Ge-As-Se (см. Рис. 1). Показано, что коэффициент оптического пропускания исследуемых образцов составляет более 63% в диапазоне 2–14 мкм, при этом оптимальный спектр пропускания находится в диапазоне 2–10 мкм.

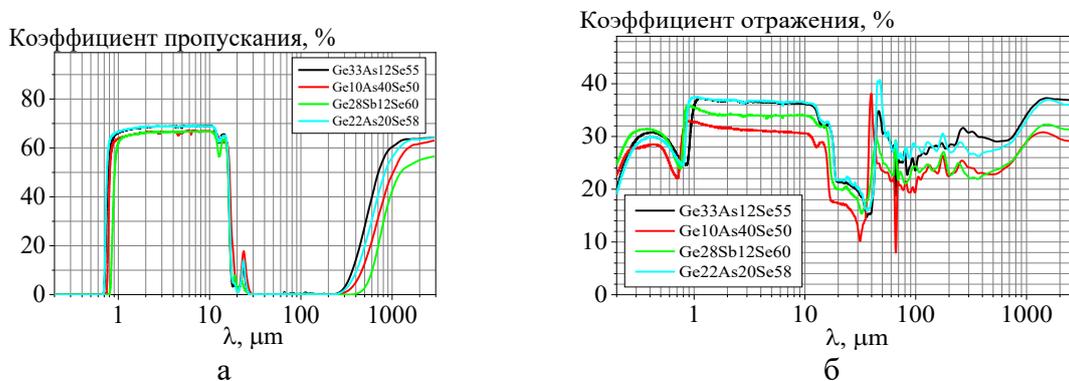


Рис. 1. Сравнение спектров пропускания и отражения образцов халькогенидных стёкол Ge-As-Se с различными просветляющими покрытиями: а – спектр пропускания халькогенидных стёкол, б – спектр отражения халькогенидных стёкол (длина волны указана в мкм).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рыжов, В. А., Мелех, Б. Т. Оптические свойства халькогенидных сплавов на основе теллура в дальнем инфракрасном диапазоне ($\lambda > 30$ мкм) // Физика и техника полупроводников. 2018. Т. 52. Вып. 2. С. 221-226.

УДК 536.421.1 + 536.911

Вересов Сергей Александрович, Серов Сергей Викторович

Влияние скорости охлаждения на структуру четырёхкомпонентных наночастиц

Руководитель: Н.Ю. Сдобняков

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра общей физики

В четырехкомпонентных наночастицах факторами, определяющими их конечную структуру в процессе быстрого охлаждения, может являться не только размерный эффект [1] или выбор начальной конфигурации [2, 3], но и сама скорость охлаждения. В работе диапазон изменения скорости в молекулярно-динамическом эксперименте с использованием потенциала [4] был в пределах 0,25-1 К/пс. Для всех исследованных систем (а – (Cu200-Au600-Pt800)@Pd2400, б – Cu200@Au600@Pt800@Pd2400, в – Pd2400-Pt800-Au600-Cu200), отвечающих различным типам начальных конфигураций температуры начала плавления практически не зависит от скорости нагревания (наблюдается слабо выраженный рост с ростом скорости нагрева). Температуры начала кристаллизации (пример конечных конфигураций представлен – Рис. 1) уменьшается с ростом скорости охлаждения на 70-110 К при увеличении скорости охлаждения до 1 К/пс.

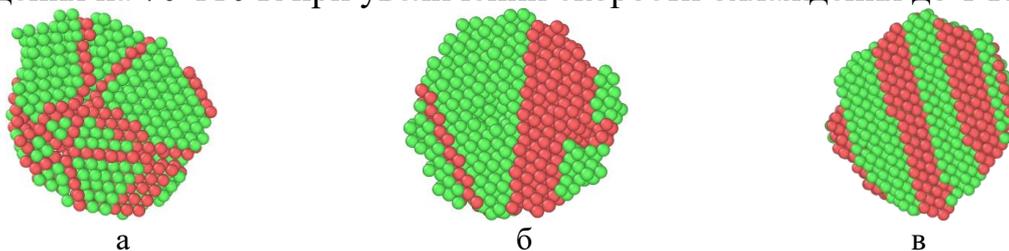


Рис. 1. 3D конечные конфигурации, полученные при скорости охлаждения 0,5 К/пс (цветовое обозначение атомов соответствует упорядоченным фазам: зеленые – ГЦК, красные – ГПУ).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Колосов А.Ю., Вересов С.А. и др. Размерный эффект в четырехкомпонентных наночастицах Au-Cu-Pd-Pt и их стабильность // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2024. Вып. 16. С. 361-372.
2. Колосов А.Ю., Савина К.Г. и др. Сценарии структурообразования в четырехкомпонентных наночастицах: атомистическое моделирование // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2023. Вып. 15. С. 432-443.
3. Вересов С.А., Савина К.Г. и др. К вопросу изучения процессов структурообразования в четырехкомпонентных наночастицах // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2022. Вып. 14. С. 371-382.
4. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. 1993. V. 48. I. 1. P. 22-33.

УДК 537.226.4

Галкин Иван Константинович
**Процессы переключения медьсодержащих
кристаллов триглицинсульфата**

Руководитель: Н.Н. Большакова
Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Настоящая работа поставлена с целью получения информации о влиянии легирования кристаллов триглицинсульфата (ТГС) ионами меди на процессы их переполяризации. Концентрации ионов меди в кристаллах составляли (10^{-5} - 10^{-3}) вес.%. Динамические характеристики переполяризации кристаллов изучены при $T=293\text{K}$ методом Сойера-Тауэра в переменном электрическом поле частотой 50 Гц.

Установлено, что петли диэлектрического гистерезиса медьсодержащего кристалла ТГС не имеют существенных отличий от аналогичных для беспримесного ТГС. Они прямоугольны, не искажены и имеют смещения по координатным осям. В таблице представлены основные переключательные характеристики кристаллов [1].

Таблица 1 – диэлектрические и гистерезисные характеристики медесодержащих кристаллов ТГС

№	Cu^{2+} , 10^{-3} вес. %	$\epsilon_{\text{эф}}, 10^4$	$P, 10^{-2}$ Кл· м ⁻²	$E_c,$ 10^3 В·м ⁻¹	$E_{\text{см}},$ 10^3 В·м ⁻¹	η	$\text{tg}\delta$
1	4,2	1,4	1,9	94	52	0,18	0,15
2	4,2	2,3	2,4	71	81	0,07	0,15
3	7,4	2,8	2,4	62	50	0,08	0,16
4	7,7	2,6	2,6	62	52	0,12	0,13
5	8,1	1,5	2,1	92	76	0,1	0,13
6	8,7	3,3	2,9	57	27	0,7	0,12
7	8,7	3,3	2,7	60	33	0,5	0,14

Видно, что с ростом концентрации примеси величины эффективной диэлектрической проницаемости, переключаемой поляризации и коэффициента униполярности кристаллов имеют тенденцию к увеличению, а значения напряженности коэрцитивного поля и тангенса угла диэлектрических потерь – к уменьшению.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Богомолов А.А. Иванов В.В. Физика сегнетоэлектрических явлений. Тверь 2014.160 с

УДК 537.226.4

Глинский Дмитрий Романович
**Модифицированная керамика ниобата калия натрия
оксидом циркония**

Руководитель: Е.В. Барабанова
Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра прикладной физики

На сегодняшний день в связи с требованиями экологической безопасности и токсичности свинца актуальной задачей является поиск бессвинцовых сегнетоэлектрических материалов, таких как твердые растворы на основе ниобата калия натрия (KNN). Для решения задачи улучшения характеристик керамики KNN проводится модификация её состава [1]. Цель данной работы — получение и исследование диэлектрических свойств керамики KNN, модифицированной ZrO_2 в количестве 1 мол. %. Образцы получены методом твердофазного синтеза. Измерения параметров проводили в широком диапазоне температур (25-500 °С) и частот (10^3 - 10^6 Гц) при помощи фазочувствительного измерителя «Вектор – 175».

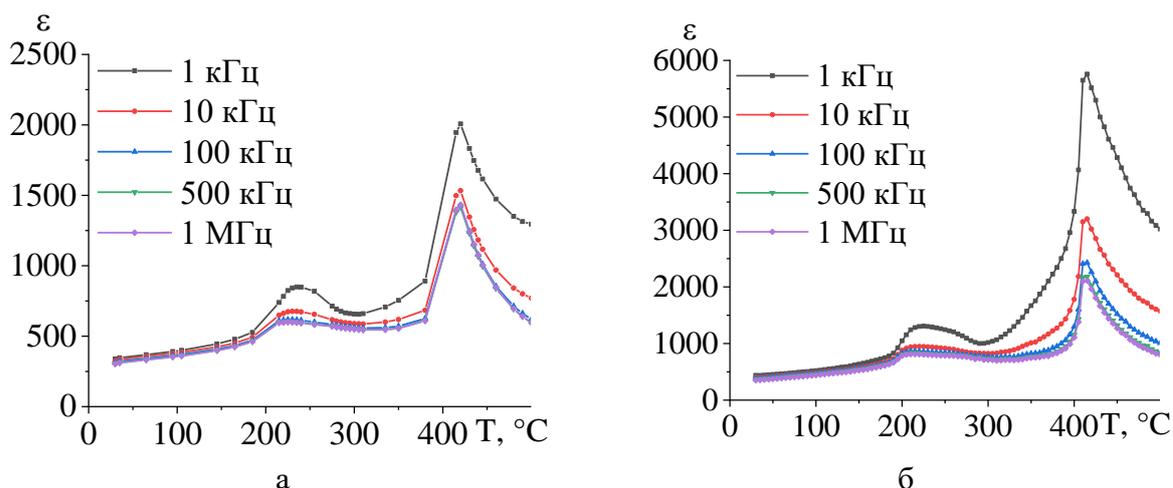


Рис. 1. Зависимость диэлектрической проницаемости от температуры при разных частотах: а – KNN; б – KNNZr_{0,01}.

Согласно результатам исследования $\epsilon(T)$ (Рис. 1) немодифицированная керамика имеет два фазовых перехода: размытый при 240 °С и основной узкий максимум при 420 °С. Введение оксида циркония немного смещает максимумы в сторону низких температур (225 °С и 415 °С) и увеличивает значение ϵ .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Барабанова Е.В., Кондратьев С.Е., Иванова А.И. Диэлектрические свойства керамик ниобата титаната натрия калия // Труды Кольского научного центра РАН. Сер.: Технические науки. 2023. Т. 14. № 3. С. 33-37.

УДК 538.913

Гурьева Светлана Анатольевна, Борисов Артем Константинович

Кинетика полиморфных превращений трикозана при нагревании

Руководитель: В.А. Марихин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

На станции БЕЛОК-РСА Курчатовского источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» получены 2D-дифрактограммы фазовых превращений монодисперсного длинноцепочечного *n*-алкана трикозана $C_{23}H_{48}$ при линейном нагревании со скоростью $0.4^\circ C/min$.

На основании анализа рентгеновских данных в больших и малых углах установлена последовательность полиморфных модификаций трикозана при нагревании (Рис. 1). Обнаружено, что исходная орторомбическая модификация трикозана с пространственной группой $Pbcm$ (57) трансформируется в новую фазу $Pnma$ (62) вблизи $T = 38^\circ C$. Дальнейшее повышение температуры в диапазоне $\Delta T = 40 - 42^\circ C$ приводит к метастабильному развитию моноклинной ротационной фазы R_V (Aa (9)). При $T = 42^\circ C$ возникает орторомбическая ротационная фаза R_I ($Fmmm$ (69)), которая с повышением температуры постепенно трансформируется так, что соотношение параметров элементарной ячейки b/a резко увеличивается, стремясь к значению $\sqrt{3}$, характеризующему гексагональную суб-ячейку. Вблизи $T = 45^\circ C$ наблюдается финальная ротационно-кристаллическая модификация трикозана – гексагональная (ромбоэдрическая) ротационная фаза R_{II} с пространственной группой $R\bar{3}m$ (166), из которой образец переходит в расплав. Таким образом, установлена кинетика полиморфных превращений трикозана при нагревании, а также определены параметры элементарных ячеек, в том числе, и для метастабильных ротационных фаз.

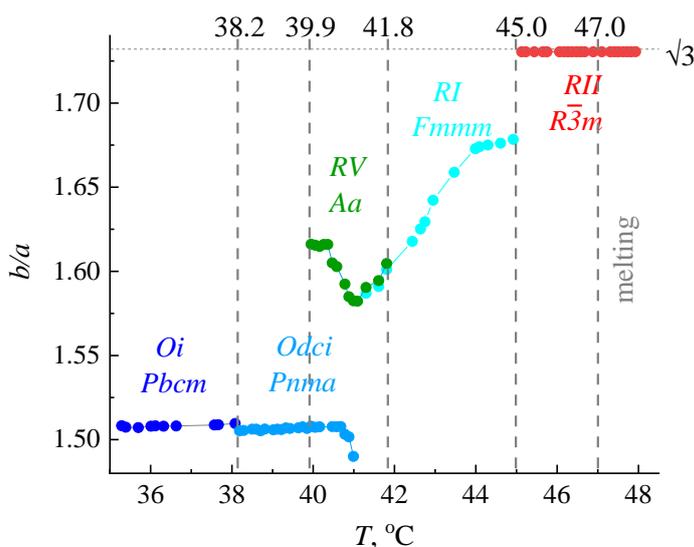


Рис. 1. Температурная зависимость соотношения параметров элементарных ячеек b/a , соответствующих различным фазовым состояниям трикозана $C_{23}H_{48}$ при нагревании.

УДК: 537.622

Гусева Анна Марковна, Сметанникова Софья Дмитриевна
**Применение методов МСМ для выявления доменов соединений
RFe₁₁Ti**

Руководитель: Е. М. Семенова

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Соединения RFe₁₁Ti с структурой ThMn₁₂ для некоторых редкоземельных металлов характеризуются высокой намагниченностью насыщения, одноосной магнитокристаллической анизотропией и температурой Кюри в пределах от 488 до 607 К [1-2]. Поэтому рассматриваются специалистами как перспективные функциональные магнитные материалы.

В данной работе объектами исследования являлись образцы соединений RFe₁₁Ti, где R = Y, Gd, Ho, Er, Предметом исследования являлась доменная структура (ДС) на базисной плоскости монокристаллов. Задачей работы являлось определение параметров их доменной структуры и расчет поверхностной плотности энергии доменных границ γ .

Исходные сплавы выплавлялись методом высокочастотной индукционной плавки. Поля рассеяния доменной структуры регистрировались методом магнитно-силовой микроскопии на СЗМ Solver Next. Для определения поверхностной плотности энергии доменных границ использовался метод Боденбергера-Хуберта, который применялся к МСМ-изображениям. Для того, чтобы определить среднюю ширину домена, осуществлялась регистрация полей рассеяния ДС на разной высоте сканирования. Показано, что величина γ исследованных составов варьируется от значений 2,98 мДж/м² для соединения ErFe₁₁Ti до 5,93 мДж/м² для GdFe₁₁Ti.

Экспериментальные данные получены на оборудовании Лаборатории магнитных материалов Центра коллективного пользования научной аппаратурой и оборудованием ТвГУ

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Каминская Т.П., Терёшина И.С. Исследование свойств соединений Sm-Fe-Co-Ti-H со структурой типа ThMn₁₂ методами магнитометрии, атомно-силовой и магнитно-силовой микроскопии // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия. – 2020. – №. 6. – С. 99-105.
2. Tereshina I.S. et al. ThMn₁₂-type phases for magnets with low rare-earth content: Crystal-field analysis of the full magnetization process // Scientific reports. – 2018. – V. 8. – I. 1. – P. 3595.

УДК 53.098

Егорова Карина Автандиновна

**Влияние знакопеременного магнитного поля на микротвёрдость
монокристаллов германия и кремния**

Руководитель А.И. Иванова

Тверской государственный университет
Кафедра прикладной физики

Монокристаллы германия (Ge) и кремния (Si) широко используются в оптике ИК и ТГц диапазонов, а также фотопреобразователях, лазерной технике и микроэлектронике. Важное практическое значение имеют исследования влияния силовых полей, в частности, магнитного поля на механические свойства этих функциональных материалов.

Цель настоящей работы - исследование микротвердости монокристаллов германия и кремния, подвергнутых действию знакопеременного магнитного поля (ЗМП) с максимальной магнитной индукцией 1,85 Тл. Исследования проводились на образцах монокристаллов германия и кремния n-типа и p-типа проводимости. Образцы германия и кремния обрабатывались по оптической технологии. Микротвердость была определена методом Виккерса, отпечатки наносились четырехгранным алмазным индентором на твердомере ПМТ-3. Измерения и расчеты проводились сначала на исходных образцах, затем - на тех же образцах после воздействия магнитным полем.

Таблица. Значения микротвердости монокристаллов германия и кремния.

	Ge (n)	Ge (p)	Si (p)
HV до ЗМП кгс/мм ²	692	665	967
HV 24ч после ЗМП кгс/мм ²	777	892	1129
HV 116ч после ЗМП кгс/мм ²	795	768	1047
HV 168ч после ЗМП кгс/мм ²	631	660	1020
HV 216ч после ЗМП кгс/мм ²	662	685	969

Проведенные эксперименты позволяют сделать вывод об изменениях значений микротвердости исследованных образцов после воздействия ЗМП, что коррелирует с динамикой изменения параметров шероховатости поверхности.

*Работа выполнена с использованием ресурсов Центра коллективного пользования
Тверского государственного университета.*

УДК 537.226

Зварич Мария Сергеевна

Пироэлектрические свойства монокристаллов ниобата бария стронция, легированных ионами тулия и гольмия

Руководитель: И.Л Кислова

Тверской государственный университет

Кафедра физики конденсированного состояния вещества

В данной работе исследовано влияние примесей тулия и гольмия на пироэлектрические свойства в монокристалле ниобата бария стронция. Образцы состава $\text{Sr}_{0,61}\text{Ba}_{0,39}\text{Nb}_2\text{O}_6$ (SBN61) выращены по модифицированной методике Степанова [1].

Из полученных графиков (рис.1) видно, что наиболее однородная поляризация у образцов SBN61:0,5%Tm и с двойной примесью SBN61:0,5%Ho+1,0%Tm. Диэлектрическая проницаемость после поляризации для кристаллов SBN с двойной примесью является наибольшей. Также с учетом однородности поляризации можно предположить, что у образца SBN61:0,5%Ho+1,0%Tm примеси распределены однородно по всему кристаллу. Следует отметить, что наибольший пирокоэффициент наблюдается у монокристаллов с примесью гольмия, а наименьший - с 0,5% тулия. По результатам проведенных исследований можно сказать, что примесь гольмия улучшает пироэлектрический отклик у кристаллов ниобата бария стронция.

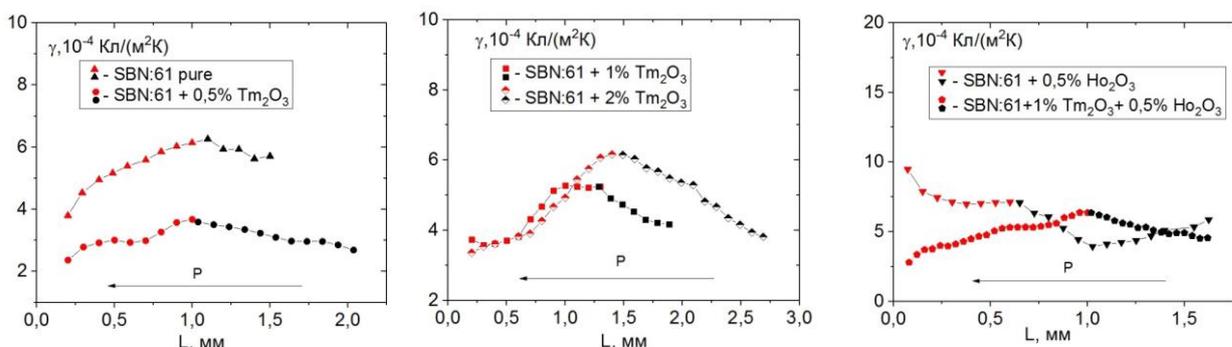


Рис. 1. Распределение пирокоэффициента по толщине монокристалла SBN61 с различными концентрациями примесей тулия и гольмия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ivleva L.I. Physicochemical and technological peculiarities of multicomponent oxide crystal growth from melt by modified Stepanov technique // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2009. V. 73. I. 10. P. 1338–1340.

УДК 536.42:536.912

Зорин Данила Романович, Веселов Алексей Дмитриевич

О формировании луковичной структуры в бинарных наночастицах Ti-V

Руководитель: Н.Ю. Сдобняков

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

Переход от изучения однокомпонентных к бинарным наночастицам (БНЧ) очевидно сопровождается вариабельностью идентификации их структуры, в частности это справедливо и для БНЧ Ti-V [1, 2]. Интерес представляет обнаружение экзотических конфигураций таких как, например, луковичные структуры (onion-like structure). На Рис. 1. представлены конечные конфигурации БНЧ Ti-V, полученные в ходе молекулярно-динамического эксперимента с использованием потенциала сильной связи [3], в котором исследуемые БНЧ подвергались нагреванию до температуры, превышающей температуру плавления более тугоплавкого компонента системы на 50 К. После этого образцы охлаждались до 0,1 К. Время шага в МД-эксперименте составляло 1 фс, скорость нагрева и охлаждения – 0,6 К/пс. По мере увеличения размера БНЧ фиксируются небольшие области, состоящие из атомов ванадия, окруженные атомами титана, что в дальнейшем может приводить к формированию луковичной структуры.

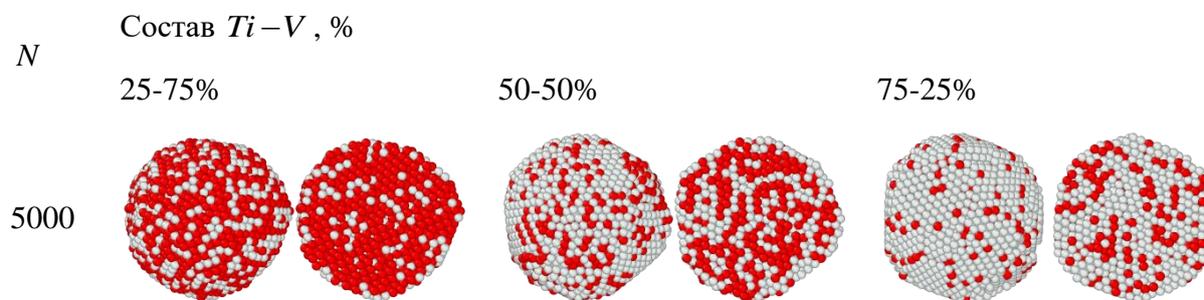


Рис. 1. Конечные конфигурации БНЧ Ti-V различного состава, (левый столбец – объемные конфигурации, правый столбец – сечение плоскостью). Светло-серые атомы – титан, красные – ванадий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Савина К.Г., Григорьев Р.Е. и др. Проблема получения кристаллических фаз в процессе охлаждения бинарных наночастиц Au-Co и Ti-V // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2023. Вып. 15. С. 543-553.
2. Савина К.Г., Веселов А.Д. и др. Структурные превращения в бинарных наночастицах Ti-V: размерный эффект и эффект изменения состава // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2024. Вып. 16. С. 532-542.
3. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. 1993. V. 48. I. 1. P. 22-33.

УДК: 544.144

Каракеян Игорь Владимирович

**Икосаэдрические нанокластеры как структуры, предшествующие
плавлению металлических наночастиц**

Руководитель: В.М. Самсонов

Тверской государственный университет

Кафедра общей физики

Изучение особенностей изомеров металлических нанокластеров представляет большой интерес для современных нанотехнологий. С помощью молекулярно-динамического моделирования с использованием метода погружённого атома (ЕАМ) был воспроизведён процесс нагревания наночастиц шести металлов (Ag, Au, Cu, Ni, Pd и Pt), содержащих 561 атом. Моделирование плавления металлических наночастиц было проведено в NVT ансамбле с помощью известной компьютерной программы LAMMPS с использованием алгоритма скоростей Верле и термостата Нозе-Гувера. Скорость нагрева составляла $15 \cdot 10^{10} \text{ K/c}$, а время одного шага моделирования составило 10^{-15} c . В ходе моделирования было установлено, что изначальные ГЦК-нанокластеры, имеющие кубоктаэдрическую структуру, переходили в икосаэдрические наночастицы. Средняя (на основе 5 компьютерных экспериментов) температура данного перехода, а также средняя температура плавления наночастиц, представлены в таблице.

Таблица: средняя температура перехода из кубоктаэдрической в икосаэдрическую структуру (T_{th}) и средняя температура плавления (T_m) для металлических ГЦК-нанокластеров, содержащих 561 атом.

Металл	T_{th} , К	T_m , К
Ag	–	875
Au	420	875
Cu	380	1060
Ni	795	1430
Pd	425	1240
Pt	10	1220

УДК: 537.622

Карапетян Альберт Арамович, Кокорина Ксения Андреевна
**Релаксационные процессы при перемагничивании гетерогенных
сплавов SmCo_3Cu_2**

Руководитель: Е.М. Семенова

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Сплавы SmCo_3Cu_2 в литом состоянии характеризуются высокими значениями коэрцитивной силы, так как содержат структурные неоднородности, и демонстрируют наличие магнитного последействия [1]. Изучение релаксационных явлений, которые сопровождают процесс перемагничивания, важно с практической точки зрения, так как понимание природы магнитной вязкости позволит учесть этот эффект при разработке новых магнитных материалов.

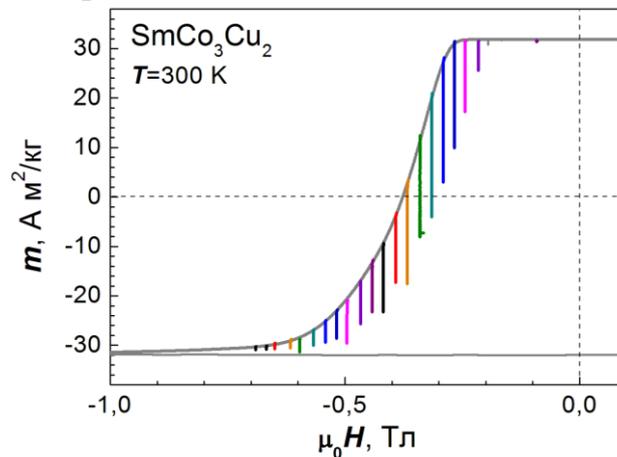


Рис. 1. Интервалы релаксации удельной намагниченности на размагничивающей части петли гистерезиса, измеренные при комнатной температуре вдоль оси легкого намагничивания.

В работе были измерены временные зависимости удельной намагниченности образцов при различных значениях обратного поля. На Рис. 1. вертикальными линиями показаны интервалы изменения намагниченности, соответствующие разным значениям обратных магнитных полей. В работе обсуждается механизм магнитной релаксации рассматриваемых сплавов.

Исследования выполнены на базе ЦКП ТвГУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tellez-Blanco J. C., Grössinger R., Turtelli R. S. Structure and magnetic properties of $\text{SmCo}_{5-x}\text{Cu}_x$ alloys // Journal of alloys and compounds. 1998. V. 281. I. 1. P. 1-5

УДК 577.332

Качановская Светлана Витальевна

Расчёт колебательных спектров суматриптана сукцината

Руководитель: П.П. Кобчикова

Тверской государственной университет, г. Тверь

Кафедра общей физики

Расчеты колебательных спектров малых лекарственных молекул с использованием метода теории функционала плотности (DFT) представляют собой мощный инструмент теоретической химии. DFT позволяет эффективно и относительно точно моделировать электронную структуру молекул, что является основой для предсказания их колебательных характеристик. Нормальные моды колебаний, полученные из расчетов, описывают возможные колебательные движения молекулы и дают возможность оценить колебательные частоты, которые могут быть сопоставлены с экспериментальными данными, полученными с помощью инфракрасной (ИК) и Раман-спектроскопии [1].

Объектом исследования настоящей работы является суматриптан сукцинат ($C_{18}H_{27}N_3O_6S$) — лекарственный препарат для купирования приступов мигрени. Молекула суматриптана включает индольное кольцо, присоединенное к этаноламиновому фрагменту. Также присутствуют две функциональные группы: аминогруппа и метиловый заместитель. Такая структура позволяет суматриптану эффективно связываться с серотониновыми рецепторами 5-HT(1B) и 5-HT(1D).

В ходе исследований были проведены расчеты колебательных (ИК- и Раман-) спектров суматриптана (сукцината) в пакете ORCA 5.0.4 методом UKS BP86 в базисе def2-TZVP. Затем рассчитанные спектры были сравнены со спектрами из литературных данных.

Стоит отметить, что у хиральных молекул с несколькими вращающимися связями, таких как суматриптан, возможно несколько конформационных изомеров, обусловленных вращением вокруг σ -связей. Эти конформации могут отличаться пространственным расположением групп атомов, что может влиять на их физико-химические свойства. Поэтому в дальнейшем планируется провести конформационный анализ для молекулы суматриптана. Также планируется провести сравнительный анализ колебательных спектров суматриптана и ризатриптана – еще одного представителя класса триптанов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Аксенов В. Л., Балагуров А. М. Основы нейтронографии / В. Л. Аксенов, А. М. Балагуров — 1-е издание. — М: Издательский дом МГУ, 2022 — 579 с.

УДК: 537.62

Козенкова Марина Владимировна, Ракунов Павел Андреевич

Обратимое изменение коэрцитивной силы сплава $Gd(Zr,Co,Cu,Fe)_{6,2}$ после повреждающей и восстановительной температурной обработки

Руководитель: А.Ю. Карпенков

ФГБОУ ВО Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра физики конденсированного состояния

Дисперсионно-твердеющие магнитные материалы РЗМ–Co–Fe–Cu–Zr привлекают значительное внимание из-за их высокой температуры Кюри ($T_c > 1000$ К) и высокой магнитокристаллической анизотропии. Для получения мелкозернистой ячеистой микроструктуры, которая отвечает за высокую коэрцитивную силу и механизм коэрцитивности, указанные сплавы подвергаются многоступенчатому процессу термообработки.

В работе проанализированы причины обратимого изменения коэрцитивной силы в сплаве $Gd_{0.85}Zr_{0.15}(Co_{0.7}Cu_{0.09}Fe_{0.21})_{6.2}$ для постоянных магнитов в результате циклической термообработки.

Исходный сплав был получен методом индукционной плавки и подвергнут термической обработке (ТО) по следующему режиму: нагрев до 1170°C → выдержка 3 ч. → закалка в воду → нагрев до 800°C → выдержка 24 часа → охлаждение до 400°C со скоростью $2^\circ\text{C}/\text{мин}$ → охлаждение до 30°C со скоростью $7^\circ\text{C}/\text{мин}$. Указанный режим ТО способствовал формированию высокого значения коэрцитивной силы (H_C) равной 1,53 Тл (синяя кривая). Дальнейший нагрев сплава до 800°C привел к необратимому уменьшению H_C до 0,05 Тл (голубая кривая). ТО, включающая нагрев до 800°C → выдержку 2 часа → охлаждение до 400°C со скоростью $0,4^\circ\text{C}/\text{мин}$ → охлаждение до 30°C со скоростью $7^\circ\text{C}/\text{мин}$ позволила восстановить H_C сплава до 1,56 Тл (красная кривая).

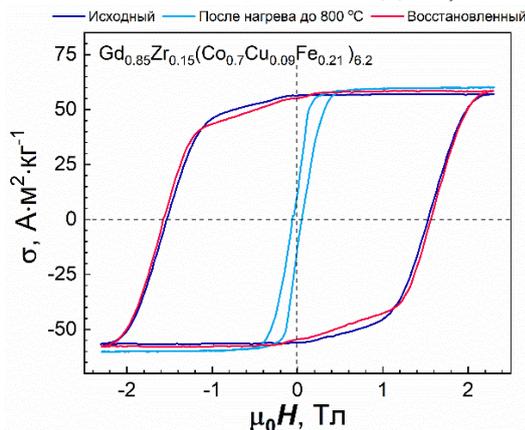


Рис. 1. Петли гистерезиса сплава $Gd_{0.85}Zr_{0.15}(Co_{0.7}Cu_{0.09}Fe_{0.21})_{6.2}$ после термической обработки, обеспечивающей наилучшие гистерезисные свойства (синяя кривая), после повреждающей термической обработки (нагрев до 800°C) (голубая кривая) и восстанавливающей термической обработки (красная кривая).

Исследования выполнены при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2023-0006).

УДК 53.082.73, 537.226.

Бирюкова Софья Сергеевна, Кондратьев Сергей Евгеньевич

Сравнительный анализ структуры поверхности пьезоэлектрической керамики ЦТС -26, 43, 51 и НЦТС, используемых в пьезоэлектронном приборостроении

Руководитель: Б.Б. Педько

Тверской государственной университет, г. Тверь

Кафедра физики конденсированного состояния

В настоящее время активно разрабатывается пьезокерамика на основе ЦТС для волновых твердотельных гироскопов (ВТГ), датчиковой аппаратуры и многослойных пьезокерамических элементов. Потребность в такой керамике испытывают производители бесплатформенных инерциальных навигационных систем (БИНС), применяемых для решения задач навигации подвижных объектов. В известной литературе [1,2] для подобных разработок применяется пьезокерамика системы PIC151 (PI Ceramic), PZT-5A (США). Керамика этих систем является «сегнетомягкой», характеризуется высокой подвижностью доменов и легко поляризуется.

Целью настоящей работы является проведение сравнительного анализа структура поверхности пьезоэлектрической керамики ЦТС -26, 43, 51, НЦТС и сравнение с известными зарубежными аналогами. Такой анализ позволит дать рекомендации по применению отечественной пьезокерамики для указанных выше целей.

Исследование структуры и элементного состава было выполнено на растровом электронном микроскопе (РЭМ) JEOL JSM-6610 LV в режиме вторичных электронов в Центре коллективного пользования Тверского государственного университета. Использовалась оптическая микроскопия на микроскопе НЕОРНОТ (Carl Zeiss) с видеокамерой. Образцы пьезокерамики предоставлена НИИ АО «Элпа» (г. Зеленоград) и представляли собой диски с толщиной 0,5 мм и диаметром 10 мм. Исследования проводились на шлифованных поверхностях образцов и свежих сколах.

Изучение поверхности показало наличие зернистой структуры для всех исследованных систем с размерами клисталлитов от 1 до 10 мкм. Более пористую структуру имеет ЦТС-51, более «размытую» ЦТС-43, наиболее выраженную огранку имеют кристаллиты керамики ЦТС-26.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.

1. Каталог фирмы «Piezotechnology «Pi», Германия./ https://www.piezo.usa.us/fileadmin/user_upload/pi_us/files/catalogs/Piezo_Ceramics_Piezo_Technology_Catalog-PIC.pdf
2. Патент РФ/ № 2012155116/03, 20.12.2012

УДК 669.017.165 : 616.314-7

Кравченко Дарья Алексеевна

О формировании структуры тернарного сплава CoCrMo

Руководитель: Н.Ю. Сдобняков

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра общей физики

Переход от исследования монометаллических наночастиц к бинарным [1] и тем более к многокомпонентным [2] связан с наличием вариации как условий их получения, так и выбором их компонентного состава. В [3] на примере тернарного наносплава CoCrMo проведено сравнительное исследование с применением экспериментальной методики растровой электронной микроскопии, выявившей наличие участков, обогащенных и обедненных кобальтом и хромом.

Атомистическое моделирование методом молекулярной динамики показало, что, как и предполагалось нами в [2], атомы различных металлов могут демонстрировать разные сценарии сегрегационного поведения. Для тернарного наносплава CoCrMo атомы кобальта формируют оболочку, атомы хрома формируют или ядро наночастицы, или периферийную область, атомы молибдена ведут себя индифферентно, т.е. распределены равномерно по всему объему исследуемых наночастиц. Пример такого поведения представлен на Рис. 1.

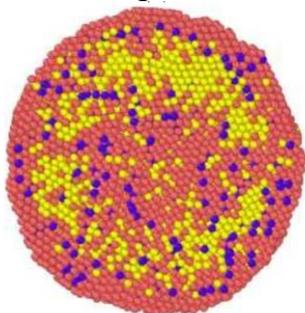


Рис. 1. Пространственное распределение атомов наночастицы тернарного сплава CoCrMo размером 15,5 нм (розовым цветом показаны атомы кобальта, фиолетовым – молибдена, желтым – хрома).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сдобняков Н.Ю., Колосов А.Ю., Богданов С.С. Моделирование процессов коалесценции и спекания в моно- и биметаллических наносистемах. Монография. Тверь: Издательство ТвГУ, 2021. 168 с.
2. Сдобняков Н.Ю., Колосов А.Ю. и др. Комплексный подход к моделированию плавления и кристаллизации в пятикомпонентных металлических наночастицах: молекулярная динамика и метод Монте-Карло // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2023. – Вып. 15. – С. 589-601.
3. Кравченко Д.А., Колосов А.Ю. и др. Комплексный подход к исследованию структуры тернарного сплава CoCrMo: растровая электронная микроскопия и атомистическое моделирование // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2024. Вып. 16. С. 198-209.

УДК 535.345.1

Кудрян Александр Вячеславович

Аналитический метод определения коэффициента отражения просветляющего покрытия

Руководитель А.И. Иванова

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра прикладной физики

Просветляющее покрытие имеет широкое применение в оптике, а также в акустооптических ячейках (АО), которые изготавливаются из монокристаллов парателлуриата (TeO_2), используемых в оптоэлектронике, процессорах для спектрального анализа слабых радиосигналов на фоне помех, создания модуляторов и дефлекторов лазерного излучения, в астрофизике[1]. Целью настоящей работы является разработка аналитического метода определения коэффициента отражения от одной грани просветляющего покрытия акустооптических ячеек (TeO_2).

В работе определены коэффициенты оптического пропускания (T) АО методом спектрофотометрии, проведены расчеты коэффициента отражения и пропускания аналитическим методом. На рис.1 представлены спектры пропускания АО с просветлением и АО без просветления, также представлены расчетные соотношения ρ [2]. При значениях $T_1 = 0,71226$, $T_2 = 0,97205$ получено $\rho = 0,012899$.

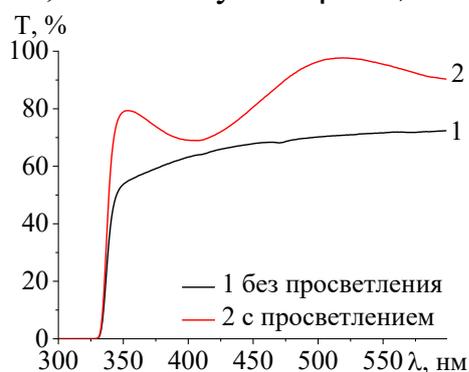


Рис. 1. Спектры оптического пропускания акустооптических ячеек (TeO_2).

Расчетные соотношения:

$$x = \frac{-(1-r)^2 + \sqrt{(1-r)^4 + 4T_1^2 r^2}}{2T_1 r^2},$$

$$r = \left(\frac{r_1 - r_2}{2} \right), r_1 = \left(\frac{n_0 - 1}{n_0 + 1} \right)^2, r_2 = \left(\frac{n_e - 1}{n_e + 1} \right)^2,$$

$$\rho = \frac{x - \sqrt{x^2 - x(T_2 x + 1)(x - T_2)}}{x(T_2 x + 1)},$$

где T_1 коэффициент пропускания без просветления, T_2 с просветлением, n_0 и n_e показатель преломления обыкновенного и необыкновенного луча, r отражательная способность, ρ – коэффициент отражения от одной грани просветляющего покрытия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Молчанов В.Я., Китаев Ю.И., Нарвер А.И. и др. Теория и практика современной акустооптики. М.: Изд. Дом МИСиС, 2015. 459 с.
2. Кашлунов И.А., Колесников А.И., Седова Л.В. и др. Измерение коэффициентов ослабления света кристаллами германия и парателлуриата // Оптический журнал. 2005. Т. 72. № 7. С. 76-84.

УДК 544.08 + 538.9

Кузьмин Николай Борисович

Применение фрактального анализа для исследования структуры биметаллического нанослоя Cu-Ag

Руководители: П.М. Пахомов, П.В. Комаров, Н.Ю. Сдобняков
Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

В настоящее время фрактальный анализ активно используется в качестве одного из методов изучения процессов структурообразования в наноразмерных системах. Идея фрактального анализа заключается в поиске корреляций фрактальной размерности с различными структурными характеристиками исследуемого объекта. Представлены результаты использования программы Gwyddion [1] для расчета фрактальной размерности конфигураций атомов на сечениях образца биметаллического нанослоя Cu-Ag с целью фиксации происходящих в нем структурных переходов в ходе модельного эксперимента по изучению контактного плавления методом молекулярной динамики [2]. На Рис. 1. а представлены мгновенные снимки конфигураций атомов на сечении нанослоя плоскостью (xOy) в различные моменты времени. Полученная трёхмерная зависимость изменения фрактальной размерности с течением времени для фрагментов разбиения изображения нанослоя показана на Рис. 1. б.

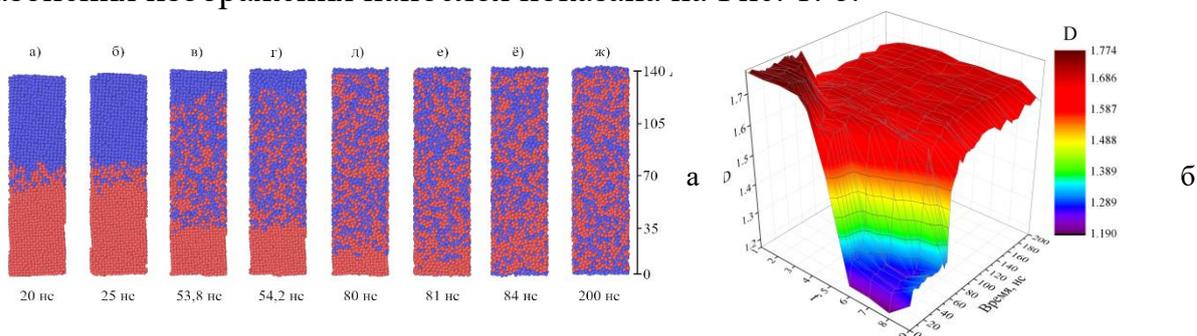


Рис. 1. а – Структура боковой проекции биметаллического нанослоя CuAg, б – Зависимость изменения фрактальной размерности D фрагментов разбиения поверхности структуры образца с номером f с течением времени.

Работа выполнена при поддержке фонда «Талант и успех» Президента Российской Федерации (договор № 42-м от 25.12.2023).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

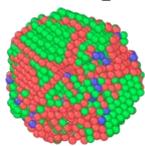
1. Gwyddion – Free SPM (AFM, SNOM/NSOM, STM, MFM, ...) data analysis software. Режим доступа: [www.url: http://gwyddion.net](http://gwyddion.net). 25.11.2023.
2. Самсонов В.М., Кузьмин Н.Б., Талызин И.В., Сдобняков Н.Ю., Пахомов П.М., Комаров П.В. Применение фрактального анализа для характеристики процесса контактного плавления в биметаллическом нанослое Cu-Ag // Вестник Тверского государственного университета. Серия «Химия». 2024. № 4 (58). С. 16-25.

УДК 539.2 : 536.912

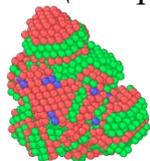
Ломоносов Георгий Денисович, Савельев Ярослав Павлович
О структурной сегрегации в бинарных наночастицах Pd-Pt

Руководитель: Н.Ю. Сдобняков
Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

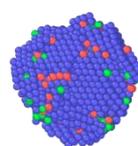
Закономерности структурной сегрегации в моно- и биметаллических наночастицах привлекают внимание исследователей поскольку непосредственно влияют на физические характеристики наночастиц [1]. В качестве примера в [2] были выбраны бинарные наночастицы Pd–Pt для апробации параметров потенциала сильной связи (ПСС), а именно изучения влияния соотношения между парным и многочастичным взаимодействиями на процесс структурной сегрегации. Использованы три параметризации ПСС [3] для перекрестных параметров: набор (I) отвечал использованию правила Лоренца-Бертло, наборы (II) и (III) задавали законы масштабирования параметров парного взаимодействия и параметров многочастичного взаимодействия. Набор (III) предсказывает доминирование локальной ОЦК структуры (см. Рис. 1).



Pd–Pt (I) [3]



Pd–Pt (II) [3]



Pd–Pt (III) [3]

Рис. 1. Мгновенные конфигурации наночастиц Pd–Pt, полученные путем кристаллизации из расплава. Цветом обозначена принадлежность атомов к определенной локальной структуре: зеленый цвет – ГЦК, красный – ГПУ, синий – ОЦК.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сдобняков Н.Ю., Колосов А.Ю., Богданов С.С. Моделирование процессов коалесценции и спекания в моно- и биметаллических наносистемах. Монография. Тверь: Издательство ТвГУ, 2021. 168 с.
2. Сдобняков Н.Ю., Колосов А.Ю., Соколов Д.Н. и др. К проблеме апробации параметров потенциала сильной связи: влияние соотношения между парным и многочастичным взаимодействиями на процесс структурообразования в бинарных наночастицах Pd-Pt // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2024. Вып. 16. С. 399-408.
3. Massen C., Mortimer-Jones T.V., Johnston R.L. Geometries and segregation properties of platinum–palladium nanoalloy clusters // Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions. 2002. I. 23. P. 4375-4388.

УДК: 530.1

Лузик Дмитрий Игоревич
**Механика сплошных сред
с учётом запаздывания взаимодействия**

Руководитель: В.В. Зубков
Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

Полевой подход к описанию механики сплошной среды объединяет динамику системы частиц и полей с учетом принципа причинности и позволяет без привлечения статистических гипотез объяснить необратимое поведение в гидродинамике. Так, в работе [1] был разработан новый метод описания динамики сплошных сред с учетом микроскопических уравнений движения частиц. В работе [2] был предложен метод учета запаздывания взаимодействия в теории функций распределения. Как продолжение указанных методов в настоящей работе получен тензор внутренних напряжений сплошной среды, определяемый запаздывающим потенциалом, что является следствием полевой природы взаимодействия:

Показано, что упругие свойства вещества определяется не только тем, какие положения занимают частицы в данный момент времени, но и тем, каковы они были до этого. Т.е. пластичные свойства определяются, вообще говоря, всей предысторией эволюции среды.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зубков В.В., Майфат Д.А., Зубкова А.В. Метод тензорных полей в теории бинарных смесей: теория линейного отклика // Вестник НовГУ. 2023. 1(130). С. 71-79.
2. Zubkov V.V. Distribution functions for continuous medium without probability // Journal of Physics Conf. Series 2019, V.1325, P.012067

УДК 004.932 : 53.086

Макаев Владислав Викторович

Применение машинного обучения для автоматизированного анализа СЭМ-изображений металлических поверхностей

Руководители: Н.Ю. Сдобняков, А.Н. Базулев, В.А. Анофриев
Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

Развитие нанотехнологий требуют прецизионного исследования поверхности, что невозможно без высокоточных методов визуализации: сканирующей туннельной (СТМ) и атомно-силовой (АСМ) микроскопии. Подходы, основанные на генеративно-состязательных нейросетях, позволяют формировать базы данных СТМ и АСМ изображений, что упрощает обработку данных и обучение нейросетей [1]. Локальное преобразование Фурье в сочетании с методами машинного обучения (МО) позволяет выделять особенности микроскопических изображений, улучшая автоматический анализ наноструктур [2]. Использование методов МО для автоматизированного анализа изображений микроскопии представляет собой перспективное направление (см. Рис. 1), способное существенно повысить эффективность и точность исследования поверхности. Внедрение таких технологий позволит автоматизировать рутинные задачи, снизить субъективность интерпретации результатов и ускорить разработку новых материалов с заданными свойствами.

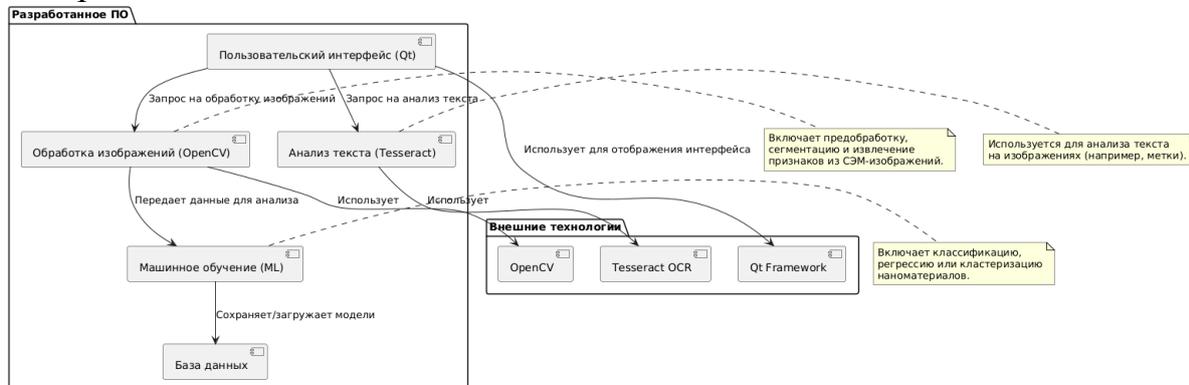


Рис. 1. UML-диаграмма, представляющая общий принцип работы ПО для анализа изображений наноперехностей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шелковникова Т.Е., Егоров С.Ф., Гуляев П.В. Применение генеративно-состязательных нейросетей для формирования баз данных в сканирующей туннельной микроскопии // Компьютерная оптика. 2023. Т. 47. № 2. С. 314-322.
2. Jany B.R., Janas A., Krok F. Automatic microscopic image analysis by moving window local Fourier transform and machine learning // Micron. 2020. V. 130. Art. № 102800. 8 p.

УДК 537.226.83

Макулин Андрей Алексеевич

Влияние технологии на электрофизические свойства легированной керамики ниобата натрия калия

Руководитель: Е.В. Барабанова

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра прикладной физики

Сегнетоэлектрические материалы относятся к одним из наиболее востребованных современной промышленностью функциональным материалам. Наличие спонтанной поляризации, нелинейно зависящей от внешнего электрического поля, пьезоэлектрического, пироэлектрического, нелинейных оптических эффектов обеспечивает широкое применение сегнетоэлектриков. Целью данной работы является сравнение электрофизических свойств сегнетоэлектрической керамики $K_{0.495}Na_{0.495}Ba_{0.01}NbO_3$ (KNBN), изготовленной по двум разным технологиям. В технологии I предварительно отдельно синтезировались ниобат натрия и ниобат калия, которые в соответствующих пропорциях смешивались с карбонатом бария. В технологии II все исходные оксиды и карбонаты смешивались согласно формуле соединения. Методом диэлектрической спектроскопии проведено исследование комплексной диэлектрической проницаемости в широком интервале частот и температур. На температурной зависимости действительной части диэлектрической проницаемости (Рис. 1) для обоих образцов можно наблюдать два максимума при температурах, характерных для KNN. Установлено, что температура неосновного фазового перехода у образца I составляет 235°C , у образца II - 245°C , у нелегированной керамики KNN - 220°C . Следовательно, легирование приводит к сдвигу неосновного фазового перехода в область более высоких температур и увеличению значения диэлектрической проницаемости, особенно в области низких частот.

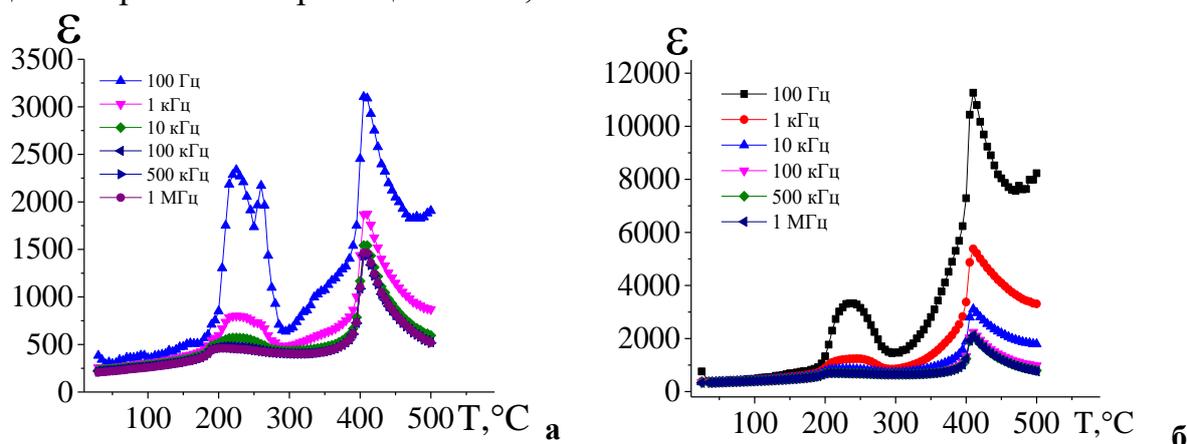


Рис. 1. Зависимость $\varepsilon(T)$ для керамики KNBN, полученной по технологии I (а) и по технологии II (б) на частотах от 100 Гц до 1 МГц.

УДК 548.57

Мамаев Павел Владимирович

Влияние дислокаций на теплоперенос в германии

Руководитель: О.В. Малышкина

Тверской государственный университет, г. Тверь
кафедра прикладной физики

В работе проведены сравнительные исследования тепловых свойств монокристаллов германия с дислокациями (ДГ) и без них (БДГ) в условиях прохождения температурной волны через образец (динамический режим) по методике, подробно описанной в работе [1].

Установлено, что образцы бездислокационного германия обладают большим значением коэффициента теплопроводности (на 18% в направлении $\langle 100 \rangle$ и на 9% в направлении $\langle 111 \rangle$), по сравнению с образцами германия, содержащими дислокации (см. Табл.1 и 2). Более высокое значение коэффициента теплопроводности у БДГ объясняется большей совершенностью его кристаллической структуры. Согласно теории теплопроводности, идеальный кристалл должен иметь максимальное значение коэффициента теплопроводности.

Различия в значениях коэффициента температуропроводности оказались менее заметными. У образцов с низким удельным сопротивлением ($0.75 \text{ Ом}\cdot\text{см}$), исследованных в направлении $\langle 100 \rangle$, различия находятся в пределах погрешности измерений. В то же время у образцов с высоким удельным сопротивлением ($22 \pm 2 \text{ Ом}\cdot\text{см}$), изученных в направлении $\langle 111 \rangle$, разница между коэффициентами температуропроводности БДГ и ДГ составила 8%.

Таблица 1. Значения коэффициентов теплопроводности (k) и температуропроводности (α) образцов БДГ и ДГ с удельным сопротивлением $22 \pm 2 \text{ }\Omega\cdot\text{см}$ ($n \sim 10^{14} \text{ см}^{-1}$).

Кристаллографическое направление $\langle 100 \rangle$.

образец	k , Вт/(м·К)	α , $10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$
БДГ	87 ± 5	7 ± 0.5
ДГ	72 ± 5	6 ± 0.5

Таблица 2. Значения коэффициентов теплопроводности (k) и температуропроводности (α) образцов БДГ и ДГ с удельным сопротивлением $0.75 \text{ }\Omega\cdot\text{см}$ ($n \sim 2.5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-1}$).

Кристаллографическое направление $\langle 111 \rangle$

образец	k , Вт/(м·К)	α , $10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$
БДГ	87 ± 5	7.5 ± 0.5
ДГ	80 ± 5	8 ± 0.5

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. О.В. Малышкина, И.А. Каплунов, В.Ю. Фокина. Анализ тепловых характеристик монокристаллов германия р-типа // Известия РАН. Сер. Физ. Т.82, №5, С.650, 2018.

УДК 537.226.4

Михалева Наталия Олеговна

Диэлектрические и переполяризационные свойства дейтерированных кристаллов триглицинсульфата

Руководитель: Н.Н. Большакова

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра физики конденсированного состояния

Настоящая работа поставлена с целью получения информации о влиянии дейтерирования на диэлектрические и переполяризационные свойства кристаллов триглицинсульфата, выращенных в различных организациях. Электроёмкость образцов определена с помощью измерителя иммитанса Е7-20. Динамические характеристики переполяризации кристаллов изучены при $T=293\text{K}$ методом Сойера-Тауэра в переменном электрическом поле частотой 50 Гц.

Установлено, что петли диэлектрического гистерезиса дейтерированных кристаллов триглицинсульфата (ДТГС) не имеют существенных отличий от аналогичных для беспримесного триглицинсульфата (ТГС). Они прямоугольны, не искажены и имеют незначительные смещения по координатным осям. В таблице представлены основные переключательные характеристики кристаллов [1].

№	Кристалл	ϵ	$\epsilon_{\text{эф}}, 10^3$	$P, 10^{-2}$ Кл*м ⁻²	$\text{tg}\delta$	η	$E_c, 10^3$ В*м ⁻¹	$E_{\text{см}}, 10^3$ В*м ⁻¹	Производитель
1	ТГС	45	46	2,6	0,17	0,06	50	26	Институт кристаллографии РАН, Москва
2	ДТГС	17	17	2,4	0,12	0,04	89	47	«Полюс», Москва
3	ДТГС	18	22	2,4	0,15	0,01	81	28	«Полюс», Москва
4	ДТГС	24	18	2,2	0,16	0,04	94	51	«Монокристаллреактив», г. Харьков
5	ДТГС	18	22	2,1	0,17	0,04	81	32	«Монокристаллреактив», г. Харьков
6	ДТГС	16	27	2,7	0,12	0,16	83	88	«Монокристаллреактив», г. Харьков
7	ДТГС	19	21	2,8	0,08	0,03	66	47	Монокристалл, г. Ревда

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Богомолов А.А. Иванов В.В. Физика сегнетоэлектрических явлений. Тверь 2014.160 с

УДК: 537.226.4

Мухин Олег Алексеевич

Диэлектрическая дисперсия в кристаллах PZN-PT

Руководитель: И.Л. Кислова

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра физики конденсированного состояния

Нами исследовались дисперсионные зависимости диэлектрической проницаемости (ϵ) и тангенса угла диэлектрических потерь ($\text{tg}\delta$) поляризованного, деполяризованного, а также отождённого кристалла PZN-PT двух срезов (001) и (111) в широком частотном диапазоне (от 10 Гц до 3 МГц).

Первичные измерения диэлектрических характеристик проводились на частично поляризованных образцах при комнатной температуре.

Установлено, что в образце среза (001) дисперсия диэлектрической проницаемости незначительна, в частности значение ϵ на частоте 10 Гц равно 1800, а на частоте 10^5 – 1500. Отметим, что дисперсия $\text{tg}\delta$ так же незначительна в указанном частотном диапазоне, а сами значения тангенса угла диэлектрических потерь не превышают 0,1. Для среза (111) так же была зафиксирована незначительная дисперсия, как и в случае среза (001), однако, величина ϵ данного образца во всём частотном диапазоне меньше, чем у образца (001). Отметим, что в данном образце на частотах выше 10^5 Гц мы так же наблюдаем аномалии типа «резонанс-антирезонанс» как на зависимости $\epsilon(f)$, так и на зависимости $\text{tg}\delta(f)$ [1]. Это говорит о хороших пьезоэлектрических свойствах данных образцов.

После нагревания и охлаждения образцы деполяризовались. Обнаружено, что у деполяризованных образцов отсутствуют аномалии типа «резонанс-антирезонанс». Это подтверждает тот факт, что данные аномалии связаны с пьезооткликом кристаллов. Дисперсионные зависимости ϵ и $\text{tg}\delta$ у среза (111) до и после поляризации существенно отличаются. В частности, у деполяризованного образца возникла значительная дисперсионная зависимость ϵ , а у $\text{tg}\delta$ на этих же частотах возникает максимум. Это может быть связано с тем, что на данном срезе возникли области с объемно-зарядовой поляризацией, или с объёмным зарядом, возникшим на доменных стенках.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Poplavko Y.M. *Dielectric Spectroscopy of Electronic Materials: Applied Physics of Dielectrics*, Woodhead Publishing, 2021, 376 p.

УДК 536.421.1 + 536.911

Непша Никита Игоревич

Влияние термической обработки на поверхностную энергию наночастицы $\text{Co}_{8,5}\text{Cr}_{6,1}\text{Cu}_{25,2}\text{Fe}_{25,8}\text{Ni}_{34,4}$

Руководитель: Н.Ю. Сдобняков

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра общей физики

Одной из важных характеристик наночастиц (НЧ), определяющей в том числе их стабильность, является поверхностная энергия (ПЭ) [1]. В работе исследуется изменение ПЭ сферической пятикомпонентной НЧ $\text{Co}_{8,5}\text{Cr}_{6,1}\text{Cu}_{25,2}\text{Fe}_{25,8}\text{Ni}_{34,4}$ в процессе термической обработки. Исходная НЧ имела равномерное распределение атомов и преобладающую ГЦК-структуру ($N=10000$). Методом молекулярной динамики [2] (потенциал [3]) проведено моделирование нагрева, сопровождающегося разрушением упорядоченности, и последующего охлаждения, приводящего к рекристаллизации. Начальная и конечная температуры 300 К и 2000 К, скорость 0,3 К/пс. Показано, что при нагреве разрушение кристаллической структуры приводит к росту ПЭ до тех пор, пока атомная диффузия становится значительной. Установлено, что при переходе из аморфного состояния в кристаллическое, ПЭ возрастает, что связано с изменением морфологии поверхности и поверхностной сегрегацией атомов.

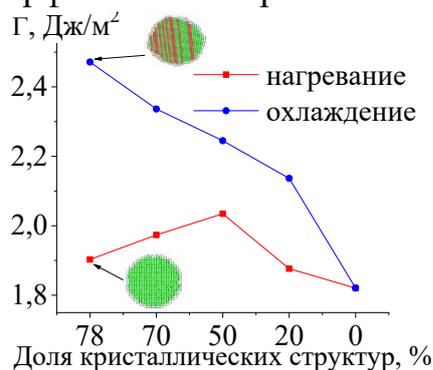


Рис. 1. Эволюция ПЭ НЧ в зависимости от содержания кристаллической структуры (зелёным показаны атомы ГЦК, красным — атомы ГПУ). Анализ выполнен в ПО Ovito [4]: для определения кристаллических структур применен модификатор полиэдральных шаблонов (polyhedral template matching), для определения поверхностной энергии — модификатор surface mesh.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Samsonov V.M., Chernyshova A.A., Sdobnyakov N.Yu. Size dependence of the surface energy and surface tension of metal nanoparticles // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. 2016. V. 80. No. 6. P. 698-701.
2. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. Режим доступа: [www.url: http://lammps.sandia.gov](http://lammps.sandia.gov). 02.02.2025.
3. Farkas D., Caro A. Model interatomic potentials and lattice strain in a high-entropy alloy // Journal of Materials Research. 2018. V. 33. I. 19. P. 3218-3225.
4. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO — the open visualization tool // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2010. V. 18. I. 1. P. 015012-1-015012-7.

УДК: 621.382.3

Огнев Даниил Дмитриевич

Подбор оптимального режима на установке плазмохимического травления для процесса травления подзатворной области канала полевого транзистора на гетероструктуре

Руководитель: М.А. Захаров

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого»,
Великий Новгород

Кафедра физики твердого тела и микроэлектроники

В статье описывается подбор оптимального режима на установке плазмохимического травления (ПХТ) для процесса травления подзатворной области канала полевого транзистора на гетероструктуре *GaAs/AlGaAs/InGaAs* с *InGaP* слоем, ограничивающим травление. В начале работы по предварительным данным был выбран цитратный травитель, чтобы убрать контактный слой. Для того чтобы убрать монослой *GaP* который образовался на поверхности *InGaP* был подобран режим на установке ПХТ указанный в таблице 3. По току насыщения был выбран оптимальный режим для травления монослоя *GaP*, который препятствовал попаданию травителя к слою *InGaP* (стоп-слой). По итоговым измерениям был получен удовлетворительный результат.

Таблица – Параметры плазмохимического травления

Параметры	Значение
Cl ₂ , см ³ /мин	8
ICP мощность, Вт	50
RF смещение, Вт	-
Давление, Па	0,25
Температура, °С	-5
Время травления, сек.	5

УДК 537.226.4

Озеров Владислав Алексеевич

Электрофизические свойства керамики $(1-x)K_{0.5}Na_{0.5}NbO_3 - xCaTiO_3$

Руководитель: Е.В. Барабанова

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра прикладной физики

Внедрение дополнительных модификаторов в сегнетоэлектрическую керамику представляет большой интерес, так как благодаря легированию можно добиться изменения или получения новых электрофизических свойств данного материала.

Целью данной работы является изучение электрофизических свойств сегнетоэлектрической керамики ниобата калия натрия KNN, легированной титанатом кальция ($CaTiO_3$) в количестве 1 мол. %: $0.99K_{0.5}Na_{0.5}NbO_3 - 0.01CaTiO_3$ (KNN-СТ). Исходные компоненты смешивались в течении часа с помощью керамической ступки в среде этилового спирта. Далее проводили синтез при $700\text{ }^\circ\text{C}$ в течение 4 часов. После повторного измельчения были сформированы образцы в форме диска, которые в дальнейшем спекались при температуре $1125\text{ }^\circ\text{C}$.

Для исследования электрофизических свойств измерялись ёмкость и тангенс угла диэлектрических потерь в диапазоне частот от 1 до 10^6 Гц. При этом образец постепенно нагревался до $500\text{ }^\circ\text{C}$ со скоростью не более $1.5\text{ }^\circ\text{C}/\text{мин}$.

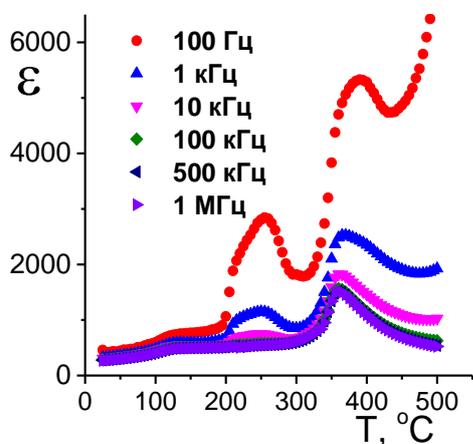


Рис.1 Температурная зависимость диэлектрической проницаемости ϵ для керамики KNN-СТ

Как видно из графика температурной зависимости диэлектрической проницаемости (рис.1), фазовые переходы образца KNN-СТ происходят при температурах $250\text{ }^\circ\text{C}$ и $370\text{ }^\circ\text{C}$, что не согласуется с температурами фазовых переходов нелегированной керамики KNN ($220\text{ }^\circ\text{C}$ и $420\text{ }^\circ\text{C}$) [1]. Таким образом, после легирования фазовые переходы как бы сближаются.

Для исследованной керамики характерны монотонный спад комплексной диэлектрической проницаемости с ростом частоты измерительного поля, а также линейные диаграммы дисперсии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Y. Saito, H. Takao, T. Tani, et al. Lead-free piezoceramics // Nature. 2004. Vol. 432. P. 84–87.

УДК: 538.956

Оспельников Никита Михайлович

**Сравнительное исследование электрофизических свойств керамики
при изменении температуры синтеза для состава
 $\text{Na}(\text{Fe}_{0.5}\text{Bi}_{0.5})_{0.1}\text{Nb}_{0.9}\text{O}_{3-\delta}$**

Руководитель: Е.В. Барабанова

Тверской государственной университет

Кафедра прикладной физики

В постоянно меняющемся современном мире получение новых керамических сегнетоэлектриков и изучение уже известных составов является неотъемлемой частью прогресса. Бессвинцовая керамика на основе ниобата натрия (NN) широко применяется благодаря тому, что обладает большим числом разнородных фазовых переходов и легко образует твердые растворы.

В данной работе проводились исследования электрофизических свойств керамики NN с добавлением легирующих примесей в виде оксидов железа (Fe_2O_3) и висмута (Bi_2O_3) в количестве 10 мол. %. Образцы были получены традиционной двухступенчатой технологией изготовления керамики и различаются температурой синтеза: 650 °C (NN650) и 700 °C (NN700).

Для обоих образцов зависимости диэлектрической проницаемости от частоты показывают рост диэлектрической проницаемости в области низких частот. Значения действительной ϵ' и мнимой ϵ'' частей комплексной диэлектрической проницаемости в образце NN650 возрастают на порядок. На частотах ниже 10^3 Гц поведение комплексной диэлектрической проницаемости характерно для миграционного типа поляризации. Для электропроводности характерна степенная зависимость от частоты после 100 кГц.

У образца NN700 наблюдается размытый максимум при 190 °C, который смещается с ростом частоты в область более высоких температур. У образца NN650 основной максимум соответствует температуре 330 °C.

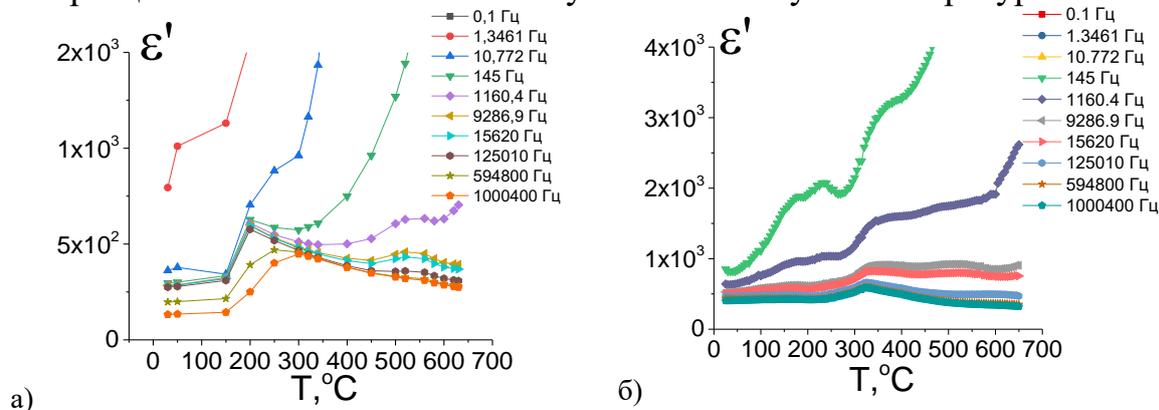


Рис. 1. Зависимость диэлектрической проницаемости от температуры для $\text{Na}(\text{Fe}_{0.5}\text{Bi}_{0.5})_{0.1}\text{Nb}_{0.9}\text{O}_{3-\delta}$ а) синтез при 700°C, б) синтез при 650°C.

УДК 537.226.4

Павлов Дмитрий Алексеевич
**Диэлектрический гистерезис в ниобийсодержащих кристаллах
титаната бария**

Руководитель: Н.Н. Большакова
Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Настоящая работа поставлена с целью получения информации о диэлектрических свойствах процессах переключения и гистерезисных явлениях в ниобийсодержащих кристаллах титаната бария. Содержание примеси в расплаве составляло (0,1; 0,3; 0,9) мол. %. Петли диэлектрического гистерезиса получены по методике Сойера-Тауэра [1].

Установлено, что для образцов $\text{BaTiO}_3:\text{Nb}^{5+}$ петли диэлектрического гистерезиса близки к прямоугольным и практически не искажены. По оси абсцисс наблюдаются различия в величинах коэрцитивных полей, что свидетельствует о наличии полей смещения. По оси ординат петли гистерезиса смещены относительно нулевого уровня, что соответствует униполярному состоянию образцов, т.е. существует преимущественная ориентация доменов одного из направлений вектора \vec{P}_s .

В таблице приведены характеристики переключения кристаллов [1] при температуре 293К.

№	Nb^{5+} , мол. %	ϵ	$\epsilon_{\text{эф.}}$, 10^4	P , 10^{-2} Кл·м ⁻²	E_c , 10^4 В·м ⁻¹	$E_{\text{см}}$, 10^4 В·м ⁻¹	η	$\text{tg}\delta$	K
1	0,0	340	3,7	17	9,8	1,0	0,27	0,05	0,8
2	0,1	210	3,9	14	10,0	1,3	0,07	0,08	0,8
3	0,3	270	3,0	17	12,4	3,0	0,02	0,06	0,7
4	0,9	310	2,8	18	19,5	1,1	0,11	0,07	0,6

Видно, что с ростом концентрации примеси ниобия значения ϵ возрастают, а величины эффективной диэлектрической проницаемости уменьшаются. Существенные различия порядка 10^2 значений ϵ и $\epsilon_{\text{эф}}$ связаны с вкладом доменной структуры кристалла в процессы его переполаризации. С ростом концентрации примеси величины переключаемой поляризации и коэрцитивного поля возрастают, а тангенса угла диэлектрических потерь и коэффициента прямоугольности петли уменьшаются.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Богомолов А.А. Иванов В.В. Физика сегнетоэлектрических явлений. Тверь 2014.160 с

УДК 544.23.022

Патренков Иван Константинович

Построение мезомасштабной модели наночастицы состаренного микропластика

Руководитель: П.В. Комаров

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра общей физики

В последнее время активно обсуждается проблема загрязнения окружающей среды частицами микропластика. Микропластик попадает в окружающую среду в результате термической и фотохимической деградации полимерных отходов. Возможное вредное воздействие микропластика на здоровье человека связывают с его способностью накапливаться в организме и вызывать воспалительные реакции, аллергию, астму и т. д. Поэтому изучение процесса старения частиц микропластика и их взаимодействия с тканями живых организмов и различными молекулами загрязнителей окружающей среды являются актуальными задачами.

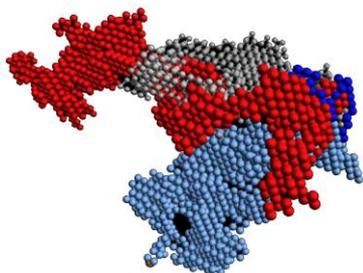


Рис. 1. Пример построенной модели частицы неправильной формы из пяти полимерных цепей, помеченных разными цветами.

В докладе представлен алгоритм построения мезомасштабной модели частицы микропластика из нескольких полимерных цепочек заданной степени полимеризации. Алгоритм основан на методе случайных блужданий на решётке методом Розенблут-Розенблут [1]. Построение производится в трёхмерном кубе, размер стороны которого является параметром алгоритма. Степень старения частицы определяется числом

кислородсодержащих групп, распределяемых по цепям случайным образом. Пример построенной частицы показан на Рис. 1.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (государственный контракт № 075 15 2024 629, МегаГрант).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Monte Carlo Calculation of the Average Extension of Molecular Chains / M. N. Rosenbluth, A.W. Rosenbluth // J. Chem. Phys. 1955. V. 23. P. 356-359.

УДК 536.421.1 + 536.911

Полев Олег Валерьевич

О температуре коллапса структуры моно- и бинарных металлических наноклеток

Руководитель: Н.Ю. Сдобняков, Д.Н. Соколов
Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

Изучение структурной стабильности моно- и бинарных металлических наноклеток (НК) является важной технологической задачей. В [1, 2] исследуется термическая стабильность моно- и бинарных металлических НК, состоящих из атомов Au и Ag. Одной из важных характеристик НК является температура коллапса [2]. Именно эта температура определяет температурный интервал стабильности НК и отвечает технологической границе её использования. Выше данной температуры, НК превращается в наночастицу (см. Рис. 1). В качестве примера приведена визуализация бинарной НК Au-Ag с числом атомов 3000 внешним радиусом 2,73 нм и внутренним радиусом полости 2 нм.

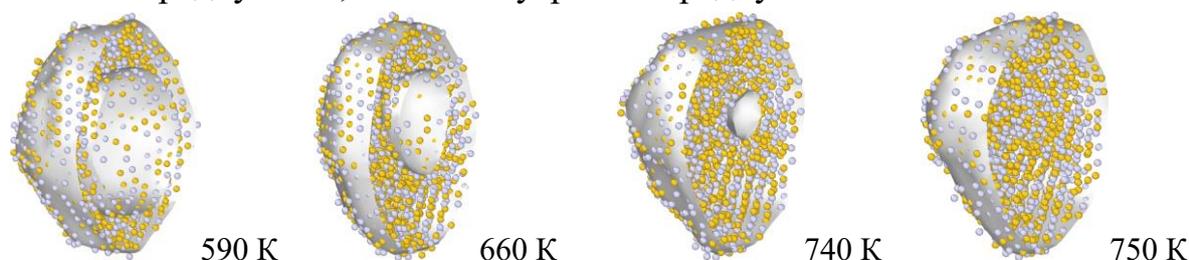


Рис. 1. Эволюция структуры бинарных НК (желтым показаны атомы золота, серым - серебра) при термическом воздействии (положение НК в сечении выбрано с учётом лучшей визуализации полости, а также применён модификатор surface mesh [3], размер атомов уменьшен до 50%).

Автор благодарит В.С. Мясниченко за помощь в проведении расчетов и их интерпретацию.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Соколов Д.Н., Полев О.В., Мясниченко В.С., Савина К.Г., Сдобняков Н.Ю. О структурной стабильности моно- и бинарных металлических наноклеток // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2023. Вып. 15. С. 602-613.
2. Соколов Д.Н., Мясниченко В.С., Полев О.В., Савина К.Г., Сдобняков Н.Ю. О стабильности и релаксации структуры металлических наноклеток // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2024. Вып. 16. С. 543-556.
3. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the open visualization tool // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2010. V. 18. I. 1. P. 015012-1-015012-7.

УДК 536-33:538.91:544.01

Пуйтов Владимир Владимирович

Молекулярно-динамическое моделирование спекания полиэдрических наночастиц, представленных различными металлами

Руководитель: В.М. Самсонов

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра общей физики

Интерес к спеканию обусловлен практическим применением этого явления, прежде всего – в порошковой металлургии. Спекание наночастиц лежит в основе получения наноструктурированных материалов, но может играть и отрицательную роль, например в катализе. Ранее [1, 2] мы изучали закономерности и механизмы коалесценции и спекания наночастиц, представленных одним и тем же металлом. Установлено, что в окрестности температуры плавления наночастиц наблюдается процесс бифуркации: с определенной вероятностью, зависящей от температуры, имеет место либо коалесценция, либо спекание. Гораздо сложнее процесс спекания наночастиц двух различных металлов. Для бинарных наносистем, включая систему Ni (икосаэдр) – Pt (кубооктаэдр), ориентированных вершинами по отношению друг к другу, нами установлено, что при высоких температурах реализуются три сценария эволюции: спекание, коалесценция и сценарий, названный нами полукоалесценцией, когда в конечной конфигурации ядро является кристаллическим, а оболочка жидкоподобной. Сделанный вывод иллюстрирует Рис. 1.

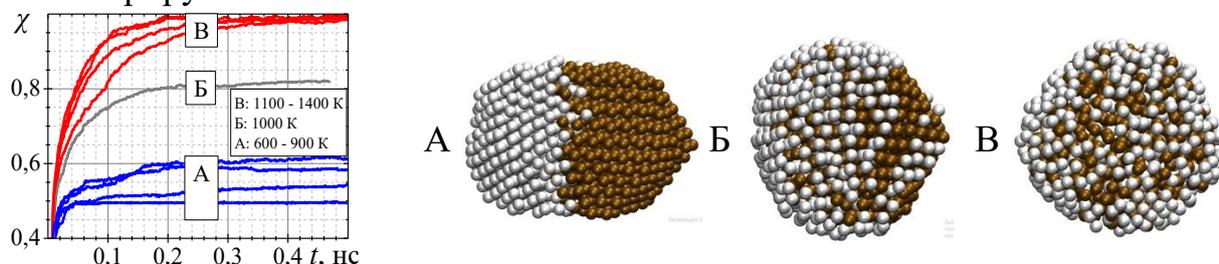


Рис. 1. Зависимость коэффициента усадки χ от времени t . Кривые А соответствуют процессу спекания, кривые Б – полукоалесценции и кривые В – процессу коалесценции.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.

1. Samsonov V.M., Talyzin I.V., Puytov V.V. et al. When mechanisms of coalescence and sintering at the nanoscale fundamentally differ: Molecular dynamics study // *The Journal of Chemical Physics*. 2022. V. 156. I. 21. Art. No. 214302. 52 p.
2. Пуйтов В.В., Романов А.А., Талызин И.В., Самсонов В.М. Закономерности и механизмы коалесценции наночастиц и спекания металлических наночастиц: молекулярно-динамическое моделирование // *Известия Академии наук. Серия химическая*. 2022. № 4. С. 686-693.

УДК: 537.622

Радаева Александра Антоновна

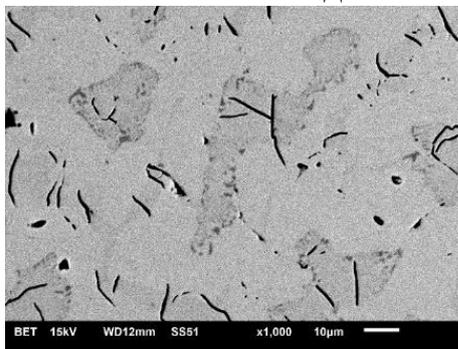
Микроструктура и фазовый состав сплавов $Y_2(Fe,Co)_{14}B$

Руководитель: Е.М. Семенова

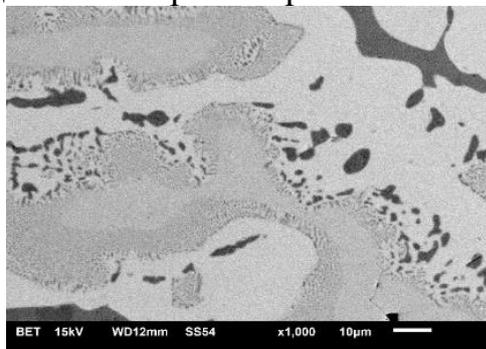
Тверской государственный университет

Кафедра физики конденсированного состояния

Сплавы RE-TM-B используются для создания наиболее мощных на сегодняшний день промышленных постоянных магнитов. Мировая потребность рынка редкоземельных магнитов в 2017 г. составляет 30 тыс. тонн и увеличивается каждый год. Причины возрастания потребностей в магнитах связаны с массовым изготовлением высокотехнологичных продуктов: томографы (требуют массивных и очень совершенных магнитов), ЭПР и ЯМР спектрометры, ветряные генераторы, узлы микро- и нанoeлектроники, транспорт на магнитной подушке, постоянные магниты для электростанций и электромоторов.



$Y_2(Fe_{0.6}Co_{0.4})B$



$Y_2(Fe_{0.8}Co_{0.2})B$

Рис. 1. Микроструктура, выявленная методом растровой электронной микроскопии на сплавах $Y_2(Fe_xCo_{1-x})_{14}B$.

В данной работе объектами исследования являются сплавы $Y_2(Fe_xCo_{1-x})_{14}B$, где в качестве редкоземельного элемента используется Y, так как он не обладает собственным магнитным моментом и это позволит оценить вклад от замещения Fe на Co в намагниченность. Предметом изучения являлась микроструктура сплавов, поскольку после выплавки в слитке формируется гетерогенная микроструктура (рис.1). Показано, что сплавы содержат не менее трех фазовых составляющих. В работе описаны качественные и количественные особенности их микроструктуры.

Исследования выполнены на базе ЦКП ТвГУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Королев Д.В., Валеев Р.А., Пискорский В.П., Моргунов Р.Б. Анализ применимости редкоземельных магнитов RE-TM-B и RE-TM для магнитокалорического охлаждения (обзор) // Труды ВИАМ. 2023. № 4 (122). С. 60-68.

УДК: 544.163.2

Рихмайер Артем Михайлович, Рихмайер Мария Андреевна

Изучение влияния положения заместителя (-) на полупроводниковые и интегральные характеристики монохлорантрацена

Руководитель: Ю.Д. Орлов

Тверской государственный университет

Кафедра общей физики

Хлорзамещенные антраценовые производные, благодаря уникальным физико-химическим свойствам, являются наиболее перспективным классом соединений для различных приложений в области органической электроники, материаловедении и химии.

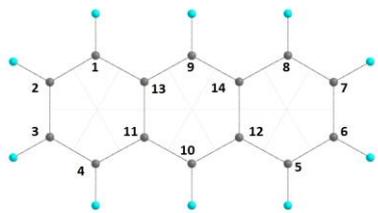


Рис. 1. Антрацен с нумерацией углеродов

Хлорзамещение в антраcene осуществлялось заменой атомов водорода (H) на атомы хлора (Cl) в соответствии с тремя возможными конформациями данного соединения (в положениях 7, 8, 9 (Рис. 1)).

Равновесная геометрия хлорированного антрацена получена в Gaussian 03 методом B3LYP с использованием базисного набора 6-311G. Посредством программы AIMALL для исследуемых соединений были рассчитаны основные интегральные параметры атомов: заряд ($q(\Omega)$), абсолютная энергия ($E(\Omega)$), объем ($V(\Omega)$), концентрация свободных носителей заряда ($N(\Omega)$).

Основной характеристикой, оказывающей значительное влияние на оптимизацию работы полупроводниковых устройств, является ширина запрещенной зоны (E_g), которая определяет минимальную энергию, необходимую для перехода электрона из валентной зоны в зону проводимости. Оценка E_g может быть проведена теоретически, на основании энергетического зазора между высшей занятой (ВЗМО) и низшей свободной (НСМО) молекулярных орбиталей ($E_g = E_{НСМО} - E_{ВЗМО}$).

Согласно представленным на диаграмме данным (Рис. 2), можно сделать вывод о том, что вид конформации монохлорантрацена не оказывает существенного влияния на значения энергий ВЗМО и НСМО.

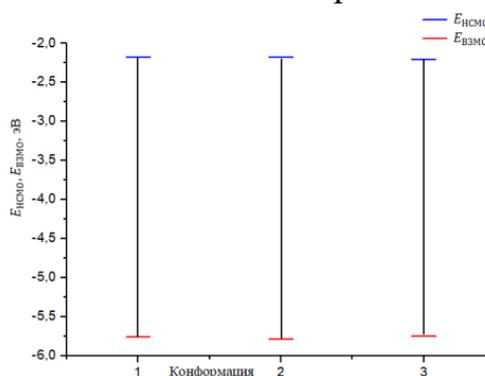


Рис. 2. Визуализация распределения энергий НСМО и ВЗМО в зависимости от конформации соединения

УДК 53.087+539.32

Родин Сергей Владимирович

Ёмкостный датчик линейного перемещения

Руководитель: В.В. Макаров

Тверской государственный университет, Тверь

Кафедра общей физики

Для инженеров и разработчиков автоматизированных систем существует необходимость в простом и недорогом датчике линейного перемещения, который обеспечивал бы высокую точность и стабильные характеристики без использования сложного прецизионного оборудования и дорогих компонентов. В рамках данной работы в качестве измерителя перемещения был выбран ёмкостный датчик, так как он способен обеспечить необходимую точность и стабильность при более низких затратах по сравнению с традиционными решениями.

С целью оценки работоспособности и характеристик был изготовлен макет датчика, на котором проведены измерения. Датчик представляет собой конденсатор с переменной ёмкостью, состоящий из неподвижной каретки и подвижной пластины, выполненных из фольгированного стеклотекстолита.

Принцип работы датчика заключается в следующем: при перемещении подвижной пластины в каретке изменяется площадь перекрытия пластин, что, в свою очередь, приводит к изменению ёмкости конденсатора. Зависимость ёмкости от перемещения является линейной. Конденсатор включён в цепь обратной связи генератора прямоугольных импульсов, собранного по классической схеме на элементах КМОП логики. Период колебаний такого генератора определяется постоянной времени τ (RC), и также линейно зависит от ёмкости.

В результате изменения ёмкости конденсатора при перемещении подвижной пластины на выходе генератора формируется меандр КМОП-уровня, период T которого прямо пропорционален координате x подвижной пластины датчика:

$$T(x) = a \cdot x + b,$$

где a и b — константы, которые можно измерить и изменить, настраивая частоту генератора и координату нуля соответственно.

Измерения, проведённые на макете, показали линейную зависимость $T(x)$ и продемонстрировали хорошую точность и стабильную работу датчика. В рабочем диапазоне перекрытия пластин от 10% до 90% датчик обеспечивал необходимую линейность и устойчивость. Также была отмечена высокая помехозащищённость устройства.

УДК 539.2 : 536.912

Савельев Ярослав Павлович, Ломоносов Георгий Денисович

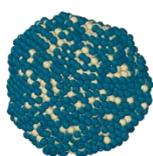
О влиянии выбора потенциала на процесс структурообразования бинарных наночастиц Pd-Pt

Руководитель: Н.Ю. Сдобняков

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра общей физики

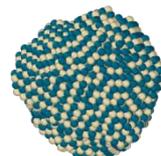
Применение методов атомистического моделирования неразрывно связано с проблемой выбора параметров межатомного взаимодействия [1, 2]. Для бинарных наночастиц Pd–Pt в работе [3] исследовалась проблема апробации параметров потенциала сильной связи (ПСС): влияние соотношения между парным и многочастичным взаимодействиями на процесс структурообразования. Используются три параметризации ПСС [4] для перекрестных параметров: набор (I) отвечал использованию правила Лоренца-Бертло, наборы (II) и (III) задавали законы масштабирования параметров парного взаимодействия и параметров многочастичного взаимодействия. Для наборов (I) и (III) установлена поверхностная сегрегация атомов Pd, в то время как использование набора (II) приводит к формированию Янус-структуры (см. Рис. 1).



Pd–Pt (I) [4]



Pd–Pt (II) [4]



Pd–Pt (III) [4]

Рис. 1. Мгновенные конфигурации наночастиц Pd–Pt, полученные путем кристаллизации из расплава. Желтые атомы – Pt, темно-зеленые – Pd.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сдобняков Н.Ю., Колосов А.Ю., Богданов С.С. Моделирование процессов коалесценции и спекания в моно- и биметаллических наносистемах. Монография. Тверь: Издательство ТвГУ, 2021. 168 с.
2. Сдобняков Н.Ю., Соколов Д.Н. Изучение термодинамических и структурных характеристик наночастиц металлов в процессах плавления и кристаллизации: теория и компьютерное моделирование: монография. Тверь: Издательство ТвГУ, 2018. 176 с.
3. Сдобняков Н.Ю., Колосов А.Ю., Соколов Д.Н. и др. К проблеме апробации параметров потенциала сильной связи: влияние соотношения между парным и многочастичным взаимодействиями на процесс структурообразования в бинарных наночастицах Pd-Pt // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2024. Вып. 16. С. 399-408.
4. Massen C., Mortimer-Jones T.V., Johnston R.L. Geometries and segregation properties of platinum–palladium nanoalloy clusters // Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions. 2002. I. 23. P. 4375-4388.

УДК 539.2 : 536.912

Савельев Ярослав Павлович, Савина Ксения Геннадьевна

Описание закономерностей структурной сегрегации с использованием различных методов атомистического моделирования

Руководитель: Н.Ю. Сдобняков

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра общей физики

В настоящее время методы атомистического моделирования играют важную прогностическую роль для понимания условий синтеза и технологического использования наночастиц (НЧ). В качестве примера на Рис. 1. представлены конечные конфигурации при температуре 300 К, полученные с использованием как альтернативных методов атомистического моделирования (молекулярная динамика (МД) и метод Монте-Карло (МК)), так и альтернативного ПО LAMMPS (соответствующие ссылки приведены в [1]). Используются три набора параметров потенциала для НЧ $Pd-Pt$. Показано, что при адекватном подборе стартовых параметров расчетов как МД, так и МК должен предсказывать аналогичные закономерности структурообразования.

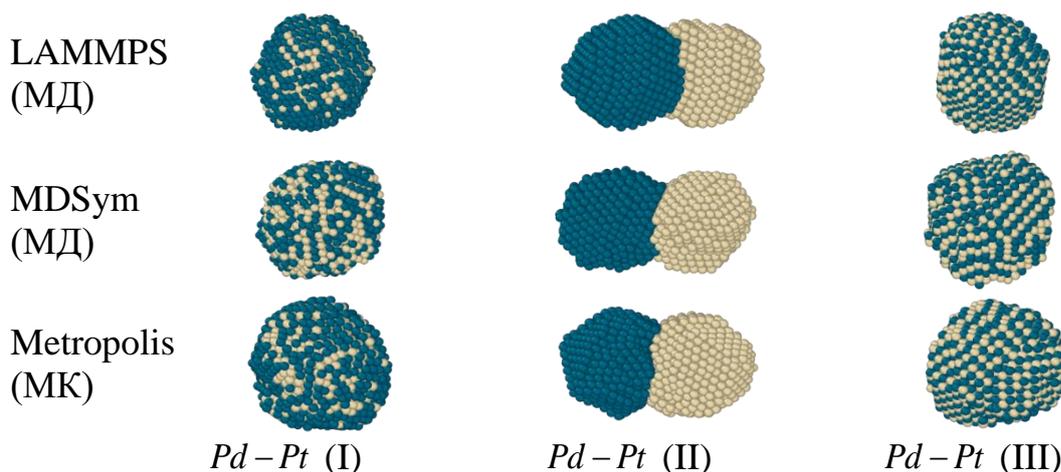


Рис. 1. Мгновенные конфигурации НЧ $Pd-Pt$ эквиатомного состава (размер 4 нм), полученные путем кристаллизации из расплава [1].

Исследования выполнены при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения ГЗ в сфере научной деятельности (проект № 0817-2023-0006).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сдобняков Н.Ю., Колосов А.Ю., Соколов Д.Н. и др. К проблеме апробации параметров потенциала сильной связи: влияние соотношения между парным и многочастичным взаимодействиями на процесс структурообразования в бинарных наночастицах $Pd-Pt$ // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2024. Вып. 16. С. 399-408.

УДК 539.219.2 : 519.7

Григорьев Роман Евгеньевич, Савина Ксения Геннадьевна
**Об отдельных аспектах процесса избирательной коррозии в
биметаллических наночастицах**

Руководитель: Н.Ю. Сдобняков
Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

Одним из перспективных направлений в области создания новых функциональных наноматериалов является исследование процессов избирательной коррозии (ИК) [1-3]. Объектом исследования выступают наночастицы Au-Ag (3000 атомов), метод моделирования – молекулярная динамика (ПО MDSym). ИК приводит к обогащению поверхностных слоёв атомами золота вследствие преимущественного удаления серебра, что согласуется с [3], а так же к образованию развитой поверхности и пор. Однако межатомные взаимодействия оказывают существенное влияние на механизм ИК, поэтому формирование пористых структур может быть затруднено для отдельных металлических систем. В подобных случаях требуется поиск альтернативных методов реализации процесса ИК с целью получения заданных свойств материала.

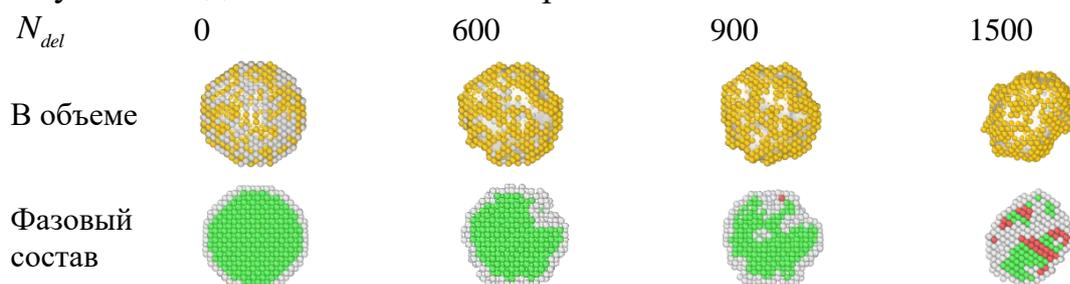


Рис. 1. Эволюция наночастицы Au-Ag в процессе ИК. Желтые атомы – золото, серые – серебро. Цветовое обозначение атомов соответствует упорядоченным фазам: зеленые – ГЦК, красные – ГПУ, белые – нераспознанные.

Исследования выполнены при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения ГЗ в сфере научной деятельности (проект № 0817-2023-0006).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sdobnyakov N.Yu., Samsonov V.M., Kolosov A.Yu. et al. Computer simulation of dealloying in Cu-Pt nanoparticles // Journal of Physics: Conference Series. 2020. V. 1658. Art. № 012048. 6 p.
2. Savina K., Grigoryev R., Myasnichenko V. et al. Dealloying in Pt-based nanoalloys as a way to synthesize bimetallic nanoparticles: Atomistic simulations // Nano-Structures & Nano-Objects. 2023. V. 34. Art. no. 100977. 7 p.
3. Мясниченко В.С., Самсонов В.М., Сдобняков Н.Ю. и др. Компьютерные модели процесса избирательной коррозии бинарных металлических наночастиц // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2019. Вып. 11. С. 487-499.

УДК 536.421.1 + 536.911

Серов Сергей Викторович, Вересов Сергей Александрович

**О влиянии начальных конфигураций четырёхкомпонентных
наночастиц на их структуру в процессе охлаждения**

Руководитель: Н.Ю. Сдобняков

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра общей физики

К настоящему времени очевидны перспективы практического применения многокомпонентных наночастиц благородных металлов [1]. Данная работа продолжает цикл исследований [2-4] термодинамических и структурных характеристик четырехкомпонентных наночастиц Au-Cu-Pd-Pt методами атомистического моделирования с использованием потенциала сильной связи [5]. На Рис. 1. показаны примеры начальных конфигураций, которые использовались в цикле нагревания до разупорядочения и последующего охлаждения до начальной температуры (300 К). Показано, что выбор начальной конфигурации влияет больше на структурную сегрегацию, а не на химическую.

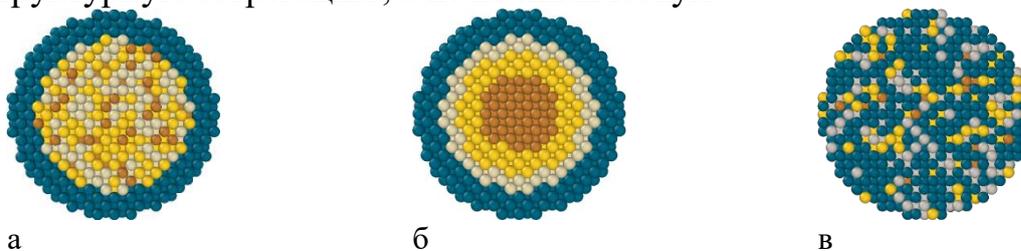


Рис. 1. Примеры начальных конфигураций: а – (Cu₂₀₀-Au₆₀₀-Pt₈₀₀)@Pd₂₄₀₀, б – Cu₂₀₀@Au₆₀₀@Pt₈₀₀@Pd₂₄₀₀, в – Pd₂₄₀₀-Pt₈₀₀-Au₆₀₀-Cu₂₀₀. Здесь желтые атомы – золото, коричневые – медь, синие атомы – палладий, серые – платина.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. We, S., Li A., Liu J.-C. et al. Direct observation of noble metal nanoparticles transforming to thermally stable single atoms // *Nature Nanotechnology*. 2018. V. 13. P. 856-861.
2. Вересов С.А., Савина К.Г. и др. К вопросу изучения процессов структурообразования в четырехкомпонентных наночастицах // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. 2022. Вып. 14. С. 371-382.
3. Колосов А.Ю., Савина К.Г. и др. Сценарии структурообразования в четырехкомпонентных наночастицах: атомистическое моделирование // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. 2023. Вып. 15. С. 432-443.
4. Колосов А.Ю., Вересов С.А. и др. Размерный эффект в четырехкомпонентных наночастицах Au-Cu-Pd-Pt и их стабильность // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. 2024. Вып. 16. С. 361-372.
5. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // *Physical Review B*. 1993. V. 48. I. 1. P. 22-33.

УДК: 537.6

Сметанникова Софья Дмитриевна

**Алгоритм обработки данных магнитно-силовой микроскопии,
полученных на образцах объёмных одноосных ферромагнетиков**

Руководитель: А.И. Синкевич

Тверской государственный университет, Тверь

Кафедра физики конденсированного состояния

Магнитно-силовая микроскопия (МСМ) – это современный метод получения изображения полей рассеяния доменной структуры (ДС) магнетиков. Качественный анализ полученных снимков позволяет сделать вывод о магнитном состоянии образца, его анизотропии и наличии напряжённых слоев. Детализация МСМ изображения сильно зависит от расстояния между сканирующим зондом и исследуемой поверхностью, в связи с чем важной задачей является получение снимка на минимально возможной высоте.

В рамках данной работы была получена серия МСМ изображений ДС одноосного объёмного монокристалла $Nd_2Fe_{14}B$. На основе экспериментальных данных, для каждой точки МСМ изображений были построены графики зависимости величины сигнала зонда от высоты сканирования. Для получения моделированных изображений каждая выявленная зависимость аппроксимировалась аналитической функцией в виде трехкомпонентной экспоненциальной суммы.

Аппроксимация неортогональной функцией является сложной математической проблемой из-за взаимной зависимости искомых коэффициентов. Чтобы минимизировать ошибку аппроксимации, необходимо одновременно перебирать все параметры, что значительно замедляет время работы алгоритма. В работе предложено несколько способов значительно сократить время вычислений, с учётом особенностей выбранной функции и возможных значений сигнала. Рассчитанные аналитические зависимости хорошо описывают экспериментальные данные, что позволяет получить моделированное изображение полей рассеяния ДС на любой высоте подъема зонда над образцом, а также на поверхности образца. На основе моделированных МСМ изображений может быть произведен как качественный, так и количественный анализ ДС образца.

На базе предлагаемого алгоритма аппроксимации создана компьютерная программа (свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2024669721), позволяющая на основе загруженной серии МСМ снимков получить моделированное изображение полей рассеяния ДС на любой высоте исследуемого диапазона.

УДК 538.971

Сукнев Владислав Александрович
**Влияние воздействия лазерного излучения
на поверхность оптических монокристаллов**

Руководитель: И.А. Каплунов
Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра прикладной физики

Влияние лазерного излучения на поверхность оптических монокристаллов является сложным и многофакторным процессом, определяемым параметрами лазерного излучения (длина волны, мощность, длительность импульса и др.), свойствами материала (оптические, термические, механические) и условиями окружающей среды. Интенсивное лазерное воздействие может приводить к различным типам повреждений поверхности, от абляции и плавления до генерации дефектов и изменения химического состава [1]. Изучено воздействие лазерного излучения (длина волны 1064 нм) на поверхность ряда монокристаллов. На поверхности Ge при лазерном воздействии формируется правильная чередующаяся структура [2]. Воздействие на поверхность кремния имеет дислокационную природу и приводит к возникновению, росту, размножению и взаимодействию дислокаций с последующим хрупким механическим разрушением. Воздействие лазерного излучения на поверхность арсенида галлия сопровождается образованием зоны оплавления, на поверхности которой формируется волнообразный рельеф, связанный с появлением термокапиллярной неустойчивости [3]. В Таблице приведены характеристики материалов и мощность импульса, приводящая к абляции при нормальных условиях на воздухе.

Таблица. Характеристики материалов.

Материал	T, К	Коэффициент поглощения, см ⁻¹	λ' , Вт/(м·К)	T _{плав} , °С	Мощность импульса, Дж/см ²
Ge	300	~ 5000	60	938	~ 0,1-0,3
GaAs		~ 1000	45	1238	~ 0,3-0,7
Si		~ 500	150	1414	~ 0,5-1,0

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Железнов В.Ю., Малинский Т.В., Миколуцкий С.И. и др. Лазерное травление германия // Письма в ЖТФ. 2021. Т. 47. № 14. С. 18-20.
2. Вейко В.П., Скворцов А.М., Ту Х.К., Петров А.А. Лазерная абляция монокристаллического кремния под действием импульсно-частотного излучения волоконного лазера // Письма в ЖТФ. 2015. Т. 41. № 14. С. 79-87.
3. Федоров В.А., Кузнецов П.М., Бойцова М.В. Морфологические особенности поверхности GaAs, обусловленные лазерным и термическим воздействием // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. 2012. Т. 17. № 1. С. 128-130.

УДК: 621.382.3

Тимофеев Александр Михайлович
**Исследование фотолитографических процессов
в технологии МИС на GaAs**

Руководитель: И.С. Телина.

ФГБОУ ВО «Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого»,
г. Великий Новгород

Кафедра физики твердого тела и микроэлектроники

Наиболее сложными изделиями полупроводниковой СВЧ микроэлектроники являются монолитные интегральные схемы (МИС), выполняющие различные функции обработки электрических сигналов (усиление, ослабление, фильтрация, ограничение и т.д.).[1]. В технологии производства МИС на основе GaAs большое внимание уделяется процессам фотолитографии и напыления металлизации, так как они являются взаимосвязанными и играют ключевую роль при формировании и изготовлении полупроводниковых приборов.

В статье рассмотрены методы проведения фотолитографических процессов. Выявлен наиболее подходящий метод при производстве МИС на основе GaAs. Рассмотрен метод проведения процесса напыления металлизации на установке электронно-лучевого напыления EvoVac. Обнаружена проблема рассовмещения центра тигля с центром напыляемой пластины, которая приводит к подпылению боковых граней фоторезистивной маски при формировании металлизации стока, истока и затвора транзистора МИС на GaAs. Предложен вариант решения проблемы за счет изменения расположения полупроводниковой пластины в имеющейся напылительной установке с помощью дополнительной оснастки-держателя с изменяемым углом наклона.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бабак Л.И., Черкашин М.В., Шеерман Ф.И. и др. Разработка GaAs и SiGe СВЧ монолитных интегральных схем, библиотек элементов и модулей САПР в Томском университете систем управления и радиоэлектроники // Электронная техника. Сер.3: Микроэлектроника. 2015. №4 (160). С.4–17.

УДК 537.226.4

Токарев Григорий Геннадьевич

Процессы переключения медь- и хромсодержащих кристаллов триглицинсульфата

Руководитель: Н.Н. Большакова

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра физики конденсированного состояния

В целенаправленном поиске новых сегнетоэлектриков особое место занимают работы по исследованию кристаллов с дозированным количеством дефектов. Вводимые при росте кристаллов примеси могут изменять его свойства, создавая в кристалле, точечные дефекты, объемные комплексы. Влияние примесей на физические свойства кристаллов зависит от их концентрации, знака заряда хелата и изменения отношения сил связей в структуре кристалла. Среди примесей типа внедрения ионы меди и хрома являются наиболее активными модификаторами форм роста и свойств кристаллов (ТГС). Огранка кристаллов с двумя примесями меди и хрома вне зависимости от содержания меди сходна с огранкой хромсодержащего ТГС [1]. Проведенные исследования показали, что ионы хрома оказывают более сильное влияние на процессы переполаризации и гистерезисные явления в кристаллах ТГС: Cu^{2+} : Cr^{3+} по сравнению с ионами меди [2] (см. Таблица). Это может быть связано с тем, что, внедряясь в кристалл, ионы хрома образуют заряженный хелатный комплекс, а ионы меди незаряженный. Вследствие этого ионы хрома являются более активной примесью по сравнению с ионами меди.

Таблица. Характеристики медь- и хромсодержащих кристаллов триглицинсульфата.

№	Cu^{2+} , 10^{-3} вес. %	Cr^{3+} , 10^{-3} вес. %	$\epsilon_{\text{эф}}$, 10^4	P , 10^{-2} Кл. м ⁻²	E_c , 10^4 В·м ⁻¹	η	$\text{tg}\delta$
До отжига; после отжига образцов							
1	0	0	2,2; 1,6	1,9; 2,5	6,2; 5,0	0,15; 0,20	0,10; 0,19
2	1,9	$<1 \cdot 10^{-2}$	2,9; 1,4	2,2; 2,8	8,5; 8,5	0,28; 0,20	0,14; 0,20
3	$<1 \cdot 10^{-2}$	2,1	2,3; 1,2	2,1; 2,8	7,7; 7,7	0,15; 0,20	0,10; 0,07
4	$<1 \cdot 10^{-2}$	2,5	1,3; 1,1	1,9; 2,4	6,4; 6,4	0,22; 0,30	0,09; 0,01
5	$<1 \cdot 10^{-2}$	3,3	1,4; 0,9	1,5; 1,7	5,8; 5,8	0,09; 0,18	0,08; 0,10
6	1,9	0,8	1,5; 1,5	1,7; 2,0	8,6; 6,5	0,81; 0,60	0,13; 0,12

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Большакова Н.Н., Дружинина Н.Ю., Иванова А.И. и др. Переполаризационные свойства медьсодержащих кристаллов триглицинсульфата // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2022. Вып. 14. С. 50-60.

УДК 53.098

Чичельницкий Никита Максимович

Разработка блока управления для генератора магнитных импульсов

Руководитель А.И. Иванова

Тверской государственной университет г. Тверь

Кафедра прикладной физики

Импульсные магнитные поля (ИМП) широко применяются в физическом эксперименте и современных технологиях. Разработка установки генерации магнитных импульсов и использование ее в экспериментальных исследованиях по влиянию ИМП на свойства полупроводниковых материалов, таких как германий и кремний, является практически значимой задачей.

В настоящей работе были выполнены следующие задачи: расчет параметров и сборка соленоидов для генератора магнитных импульсов, разработка цифрового регулятора напряжения для генератора ИМП, проведение испытаний по воздействию ИМП на монокристаллы германия и кремния. Принципиальная схема и внешний вид цифрового регулятора напряжением для генератора ИМП приведена на Рис. 1. Разработанный блок управления для генератора магнитных импульсов позволит более эффективно исследовать влияние магнитного поля на структуру, поверхность и свойства как упорядоченных магнетиков, так и магнито-неупорядоченных веществ [2].

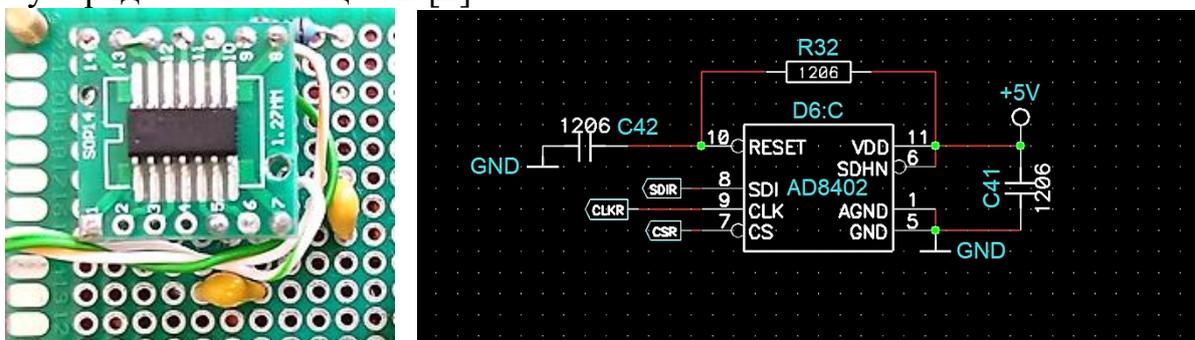


Рис. 1. Микросхема цифрового регулятора напряжением для генератора ИМП.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мариничева К.А., Иванова А.И., Егорова К.А. и др. Влияние импульсного магнитного поля на оптические свойства монокристаллов германия и кремния // Четырнадцатая Всероссийская научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика»: сборник материалов. Тверь: Изд-во ТвГУ, 2024. С. 211-212.
2. Мариничева К.А., Иванова А.И., Каплунов И.А. и др. Влияние магнитного поля на структуру поверхности и свойства монокристаллов германия // Известия Российской академии наук. Серия физическая. 2024. Т. 88. № 5. С. 788-793.

УДК: 53.086

Ятманов Михаил Иванович

Применение Flash-модели для изучения латеральных сил взаимодействия зонда и образца

Руководитель: Ю.В. Кузнецова

Тверской государственный университет

Кафедра физики конденсированного состояния

Атомно-силовая микроскопия (АСМ) активно применяется для изучения поверхностей и является экспериментальным инструментом для исследования сил на субмикронном уровне. Основным инструментом АСМ является кантилевер, состоящий из упругой балки, закрепленной с одной стороны, и зонда, расположенного на свободном конце. Для исследования сил трения используется метод латеральных сил (МЛС), который основан на регистрации боковых отклонений зонда (сигнала LAT) при сканировании и дает возможность оценить силу трения [1]. Встроенная программа Flash-модель позволяет варьировать параметры задачи и следить, как при этом изменяется сигнал LAT. Целью данной работы является построение и оценка профилей движения кантилевера в зависимости от его параметров и времени сканирования. Характерный профиль силы трения, приведённый на рисунке 1, соответствует эффекту прилипания-скольжения, т.е. пилообразному изменению силы трения со временем, при котором зонд задерживается в определённых точках.

Анализ проведенных исследований позволяет сделать вывод, что параметры кантилевера и его жесткость влияют на вид латеральной кривой. В работе выявлен интервал коэффициентов жесткости кантилевера, при которых наблюдается скачкообразное изменение сигнала LAT от времени, пропорциональный силе трения. Выявлена оптимальная скорость сканирования $v_{\text{опт}}$, при которой наблюдается эффект прилипания-скольжения, что может быть использовано при измерениях силы трения с помощью МЛС.

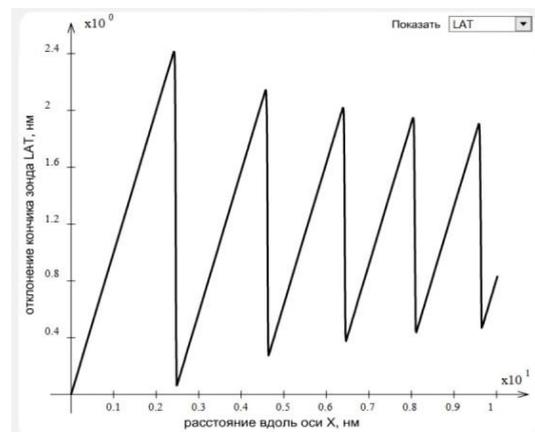


Рис. 1. Результаты численного моделирования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Munz M. Force calibration in lateral force microscopy: a review of the experimental methods //Journal of Physics D: Applied Physics. – 2010. – Т. 43. – №. 6. – С. 063001.

УДК: 661.7:544.1

Абрамова Елена Сергеевна

**Тетрамеры целлюлозы, хитина и хитозана и их способность
к растворению в ионных жидкостях**

Муравьев А.А., Новоселов Н. П., Витковская Р.Ф.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна», г. Санкт-Петербург
Кафедра теоретической и прикладной химии

Самым распространенным и широко применяемым в качестве сырья природным полимером является целлюлоза. Целлюлоза широко применяется в промышленности, в медицине, в косметике, в других целях. Распространенным также природным полимером является хитин. Переработка целлюлозы и хитина, затруднена из-за отсутствия прямых растворителей. Поэтому хитин переводят в хитозан, который находит широкое применение в медицине и для косметических целей, а целлюлозу растворяют через эфиры экологически вредным способом. В связи с этим, поиск прямых растворителей является важной научной и технологической задачами.

Например, использование квантово-химическими методов позволяет выявить поиск и подбор подходящих растворителей для растворения природных полимеров. Нами рассматриваются основные характеристики их состояния: распределение электронной плотности в молекулярных структурах тетрамеров целлюлозы, хитина и хитозана, длины и углы связей, энергии связей и дипольные моменты. Вычисления проводили в рамках теории функционала плотности с применением гибридного функционала плотности B3LYP и базисным набором 6-311++G(d, p).

Нами получены значения квантово-химических расчётов для мономеров, димеров и тетрамеров целлюлозы, хитина и хитозана, которые позволяют глубже понимать структуру этих полисахаридов, распределение электронной плотности, наличие и расположение активных центров, что необходимо для прогнозирования их взаимодействия с растворителями.

Выполненные вычисления согласуются с экспериментальными данными: термодимические измерения, теплоемкость, плотность и вискозиметрия.

УДК: 661.7:544.1

Абрамова Елена Сергеевна

**Численные методы для выявления распределения электронной
плотности и строения природных полимеров**

Муравьев А.А., Новоселов Н. П., Рожков Н.Н.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
образования «Санкт-Петербургский государственный университет промышленных
технологий и дизайна», г. Санкт-Петербург
Кафедра теоретической и прикладной химии

Важное значение для промышленности имеет широкое использование полимеров, особенно природных экологически безвредных и возобновляемых соединений. Самыми распространенными из них являются целлюлоза и хитин. Благодаря уникальным свойствам целлюлозы, хитина и производной хитина – хитозана они нашли широкое применение в различных отраслях. Их переработка затруднена из-за отсутствия прямых растворителей и поэтому связана с применением агрессивных сред, негативно влияющих на окружающую среду. Важной технологической задачей является поиск перспективных растворителей целлюлозы, хитина и хитозана для их переработки.

Для поиска перспективных растворителей природных полимеров полезно использование численных методов расчёта. Нами проведен ряд квантово-химических расчётов по оптимизации структур тетрамеров целлюлозы, хитина и хитозана. Для расчета была выбрана теория функционала плотности с применением гибридного функционала плотности B3LYP и базисным набором 6-311++G(*d*, *p*). Применение выбранного метода с указанными параметрами в рамках исследования полисахаридов позволяет получить наилучшее соотношение между производительностью и точностью расчёта. Квантово-химические расчёты проводились с использованием свободно распространяемого ПО Firefly на базе QC package и GAMESS (US) на базе кластера из 48 ядер с частотой 3,6 ГГц, 64-разрядной ОС Windows 10, для графического отображения использовалась программа ChemCraft. Оптимизацию структур проводили в рамках теории функционала плотности с применением гибридного функционала плотности B3LYP и базисным набором 6-311++G(*d*, *p*).

По результатам расчетов анализировали: длины и углы связей, распределение зарядов, энергии связей и дипольные моменты. Квантово-химические исследования, выполненные с применением выбранного метода, согласуются с ранее полученными экспериментальными данными, что свидетельствует о надежности этих расчетов.

УДК: 504.054

Андреев Кирилл Игоревич

**Анализ экологического состояния родников, речной
и водопродной воды Тверской области**

Руководитель: В.М. Никольский

Тверской государственной университет

Кафедра неорганической и аналитической химии

Актуальность темы заключается в том, что качество питьевой воды оказывает непосредственное влияние на здоровье населения, а также на состояние экосистем водных объектов. В условиях возрастающего антропогенного воздействия на природные источники водоснабжения, мониторинг их экологического состояния становится приоритетной задачей.

Цель работы: Оценка жёсткости воды в родниковой, речной и водопродной воде Тверской области.

Метод исследования: для определения жёсткости воды использован комплексометрический метод, основанный на титровании пробы раствором Трилона Б при рН 10 в присутствии металлохромного индикатора. Методика соответствует требованиям государственного стандарта [1].

Таблица
Показатели жёсткости воды в различных источниках Тверской области

Источник воды	Жёсткость (ммоль/л)
Водопродная вода (г. Тверь)	5,6±0,1
Водопродная вода (дер. Лужниково, Вышневолоцкий район)	4,7±0,1
Родник (дер. Лужниково, Вышневолоцкий район)	4,3±0,1
Река Волга (г. Тверь)	6,2±0,1
Река Белая (дер. Лужниково, Вышневолоцкий район)	4,5±0,1

Вывод: Анализ показал, что жёсткость воды различных источников Тверской области находится в диапазоне от 4,3 до 6,2 ммоль/л, что соответствует средней жёсткости. Самая высокая жёсткость зафиксирована в воде реки Волга (6,2 ммоль/л), вероятно, из-за высокого содержания карбонатов и примесей. Родниковая вода обладает самой низкой жёсткостью (4,3 ммоль/л), что подтверждает её природную фильтрацию.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ГОСТ 31954-2012. Вода питьевая. Методы определения общей жесткости воды.

УДК 543.544.943.3

Аразгелдиева Шасенем

Разделение витаминов группы В методом тонкослойной хроматографии

Руководитель: В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет, Тверь
Химико-технологический факультет

Для разделения витаминов, входящих в состав препарата «Витамины группы В Эвалар» методом тонкослойной хроматографии использованы три смеси растворителей.

Смесь 1: *n*-бутанол (66,6 % об.) + ледяная уксусная кислота (16,7 % об.) + вода (16,7 % об.).

Смесь 2: *n*-бутанол (60 % об.) + ледяная уксусная кислота (15 % об.) + вода (25 % об.).

Смесь 3: этанол (85,7 % об.) + вода (14,3 % об.).

Для разделения использовали пластины Sorbfil, которые представляют собой алюминиевую фольгу, покрытую слоем силикагеля. Хроматограммы проявляли в парах йода. В таблице представлены значения коэффициентов удерживания R_f витаминов группы В для трёх смесей растворителей. Видно, что лучшее разделение витаминов происходит при использовании смеси 1.



Рис. Биологически активная добавка «Витамины группы В Эвалар». Внешний вид упаковки.

Витамин	Rf		
	Смесь 1	Смесь 2	Смесь 3
В1 (Тиамин)	0,33	0,25	0,004
В2 (Рибофлавин)	0,20	0,146	0,003
В3 (Никотиновая кислота)	0,237	0	0,076
В6 (Пиридоксин)	0,1	0,073	0
В9 (Фолиевая кислота)	0	0,03	0
В12 (Цианокобаламин)	0,262	0,187	0

УДК 544.773.423

Арефьев Александр Алексеевич

Синтез квантовых точек сульфида кадмия с использованием N-додецилпиридиний тетрафторбората

Руководитель: О.Е. Журавлев

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

В современной промышленности стоит задача получения квантовых точек заданных размеров. Ионные жидкости, обладающие поверхностно-активными свойствами, способны выступать в качестве стабилизатора золь наночастиц.

Целью данной работы было получение квантовых точек сульфида кадмия из сульфида натрия и ацетата кадмия с использованием ацетонитрильного раствора N-додецилпиридиний тетрафторбората (ДПТФБ).

Золи сульфида кадмия получены одновременным добавлением при перемешивании равных количеств 0,01 М водных растворов сульфида натрия и ацетата кадмия в ацетонитрильный раствор ДПТФБ (3 и 4 %). Перед добавлением каждой порции прекурсоров реакционная смесь выдерживалась 30 мин. Для оценки среднего размера наночастиц полупроводника (d , нм) по величине сдвига края фундаментального поглощения (λ , нм), вызванного увеличением ширины запрещенной зоны (E , эВ) квантовой точки, спектральным методом были записаны спектры поглощения в УФ-области золь CdS. Результаты представлены в таблице.

Таблица: Данные из электронных спектров квантовых точек CdS

C (ДПТФБ), %	C (CdS), 10^{-5} моль/л	λ , нм	d , нм	E, эВ
3	1,00	299	5,86	4,15
	1,99	298	5,84	4,16
	2,98	299	5,86	4,15
	3,97	295	5,77	4,20
	4,95	301	5,91	4,12
4	1,00	307	6,06	4,04
	1,99	305	6,01	4,06
	2,98	302	5,94	4,10
	3,97	300	5,89	4,13
	4,95	299	5,86	4,15

Все полученные золи были монодисперсными, а размеры квантовых точек не превышали 6,1 нм. Отсутствие заметного увеличения размеров частиц при добавлении прекурсоров говорит о том, что они расходуются на образование новых частиц, а не на рост уже имеющихся. Концентрация ДПТФБ не оказывала существенного влияния на размер наночастиц CdS.

УДК: 54.543.3

Артамонова Анастасия Александровна
Химический анализ ключевой воды
из источников пригородной зоны города Тверь

Руководитель: М.И. Скобин

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

Качество воды играет важную роль в жизни человека. Она необходима для поддержания здоровья и нормального функционирования организма. непригодная для употребления вода снижает качество продолжительности жизни. Именно поэтому важно следить за качеством употребляемой воды.

Целью данной работы было исследовать ключевую воду из источников пригородной зоны города Тверь. Было исследовано пять источников: 1 - 56.736801, 35.906267, 2 - 56.792642, 36.030758, 3 - 56.940117, 35.745784, 4 - 56.830525, 36.097137, 5 - 56.803708, 36.173081.

Методом титриметрического анализа были определены жесткость, окисляемость и содержание хлоридов. Потенциометрическим методом определили pH раствора. Результаты исследования представлены в таблице.

Таблица

Данные о содержании хлоридов в воде, жесткость, окисляемость и кислотность

Вода	Образец				
	№1	№2	№3	№4	№5
$[Cl^-] \cdot 10^{-4}$, мг/л	5,6	4,7	2,8	7,6	8,46
Общая жесткость ммоль·экв/л	6	4,8	6,4	3,6	1,4
Карбонатная жесткость ммоль·экв/л	4,4	4	5,4	3	0,8
Окисляемость мг/л	2,56	2,08	1,6	3,52	2,4
Кислотность раствора	7,598	7,633	7,437	7,608	6,917

По результатам исследования можно сделать вывод, качество воды соответствует ГОСТам. Содержание хлоридов в воде очень низкое, окисляемость воды соответствует нормам ГОСТ 23268.12-78. Жесткость воды в пределах нормы ГОСТ 31954-2012. Образец № 5 имеет низкую жесткость, что говорит о небольшом содержании солей кальция и магния. Данная вода больше подойдет для промышленных целей. Кислотность воды соответствует санитарным нормам и ГОСТ Р 70152-2022.

УДК: 615.322

Афанасьева Татьяна Максимовна

**Анализ стабильности наночастиц серебра, синтезированных
в водных экстрактах листьев и коры ивы**

Руководитель: С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Зелёный синтез наночастиц серебра (НЧС) с использованием водных растительных экстрактов отличается простотой, низкой себестоимостью и экологичностью. Биоактивные метаболиты растений участвуют в восстановлении ионов металла, формировании и стабилизации НЧС, предназначенных для биомедицинского применения, пищевой промышленности и др. Целью работы является анализ стабильности НЧС, синтезированных с использованием водных экстрактов листьев и коры ивы из разных мест сбора. Основные методы исследования – спектроскопия УФ-видимого диапазонов, динамическое светорассеяние (ДСР) и сканирующая электронная микроскопия (СЭМ). Электронные спектры экстрактов листьев (А) и коры (Б) после добавления раствора AgNO_3 , показанные на рисунке, демонстрируют кинетику формирования НЧС. Из рисунка видно, что скорость формирования, размер и агрегативная стабильность наночастиц в экстрактах листьев и коры ивы различаются, о чем свидетельствуют величина поглощения и положение максимума полосы плазмонного резонанса (ППР) в спектрах. По данным ДСР образцы характеризуются бимодальным распределением частиц: размеры НЧС в листьях составляют 10 и 142 нм, в коре – 12 и 153 нм, а величина дзета-потенциала -17 и -14, соответственно, что согласуется с данными спектроскопии УФ-видимого диапазонов.

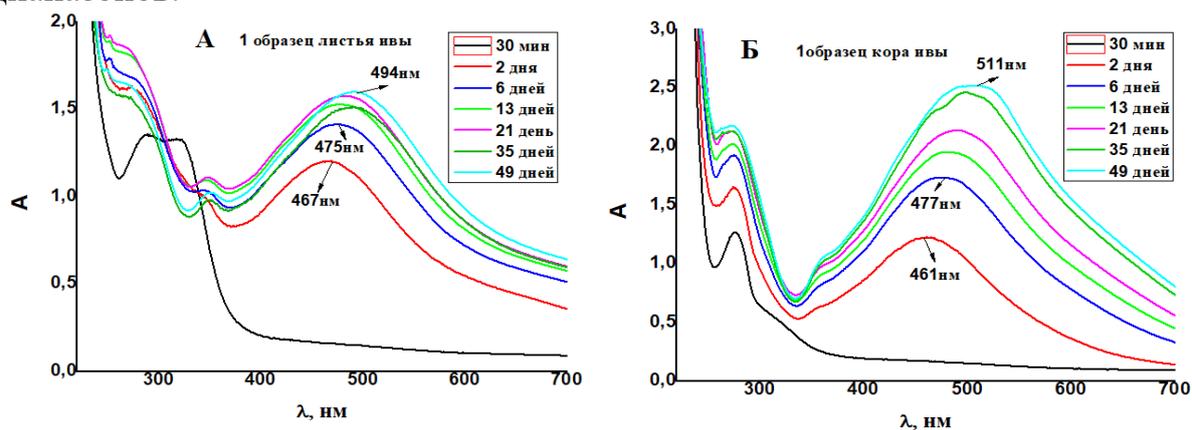


Рис. Электронные спектры водных экстрактов листьев (А) и коры (Б) ивы (Петрозаводск) в зависимости от времени после добавления раствора AgNO_3

Работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии и электронной микроскопии ЦКП ТвГУ

УДК: 541.49:615.33

Бадаева Марьям Аптиева

**Изучение процессов самоорганизации и гелеобразования
в цистеин-серебряном растворе под действием альгината натрия**

Руководители: П.М. Пахомов, Н.А. Ершов

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Альгинат натрия (АН) — это природный полисахарид, который легко подвергается химической модификации или смешивается с другими компонентами для придания различных функциональных свойств. АН привлекателен тем, что он обладает биосовместимостью и низкой токсичностью, что позволяет использовать его в биомедицине, фармацевтике [1].

Целью данной работы является исследование процессов самоорганизации и гелеобразования в водном растворе L-цистеина и нитрата серебра (цистеин-серебряный раствор – ЦСР) под действием АН.

В работе приготовлена серия водных растворов различной концентрации на основе двойных (АН/ЦСР) и тройных систем (АН/ K_2SO_4 /ЦСР). Из рассматриваемых водных растворов получены гидрогели и пленки. Методами исследования служили динамическое светорассеивание (ДСР), измерение дзета потенциала, УФ-спектроскопия и РН-метрия.

В УФ-спектрах всех растворов и гелей обнаружены две полосы поглощения с максимумами ~316 и ~390 нм, ответственные за комплексы с переносом заряда в супрамолекулярных цепочках ЦСР [2]. С помощью данного метода изучалось влияние концентрации АН на переход от супрамолекулярного геля к макромолекулярному. Установлено, что АН хорошо совместим с ЦСР, т.к. полосы поглощения не исчезают. С помощью метода ДСР показано, что ЦСР и АН характеризуются мономодальным распределением рассеивающих частиц по размерам с максимумами 24 и 1718 нм, соответственно. В то же время в смешанном растворе АН/ЦСР наблюдается бимодальное распределение с максимумами 58 и 618 нм. Можно предположить, что при смешении двух растворов ассоциаты (кластеры) молекул АН (1718 нм) разрушаются, но при этом образуются ассоциаты противоположно заряженных цепочечных структур ЦСР с макромолекулами АН за счет электростатического взаимодействия. В настоящее время приступили к изучению тройных систем, а также условий геле- и пленкообразования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Teng K., An Q., Chen Y., Zhang Y., Zhao Y. ACS Biomater. Sci. Eng. 2021. N7. P.1302–1337.
2. Овчинников М.М., Хижняк С.Д., Пахомов П.М. Физико-химия полимеров. Тверь, 2006. Т. 12. С. 215.

УДК: 577.15

Балакшина Дарья Вадимовна
**Магнитоотделяемые неорганические носители
в иммобилизации глюкозооксидазы**

Руководитель: А.М. Сульман
Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

С недавних пор в биотехнологии, чтобы добиться лучших результатов в иммобилизации ферментов, стало выгодно использовать магнитные носители, чье преимущество заключается в лёгком отделении от реакционной массы с помощью наружного магнита. Не менее важным процессом является модификация их поверхностей, благодаря чему энзим прочнее закрепляется на них. Суть заключается в их обработке специальными реагентами с функциональными группами, образующими ковалентную связь с молекулами фермента, например, хитозаном. Хитозан, иногда называемый деацетилированным хитином, представляет собой природный поликатионный линейный полисахарид, полученный путем частичного деацетилирования хитина. Хитин является структурным элементом экзоскелета насекомых, ракообразных и клеточных стенок грибов, а также вторым по распространенности природным полисахаридом после целлюлозы [1]. Не до конца оптимизированное использование хитина приводит к тому, что значительная его часть выбрасывается в виде отходов без надлежащей обработки и вторичной переработки, что приводит к нарушению экологического равновесия в природе, так как микробиологическое разложение хитина потребляет большое количество кислорода [2]. Утилизация хитиновых отходов с целью получения ценных химических веществ может стать решением проблемы.

В работе был синтезирован биокатализатор на основе глюкозооксидазы (GOx), иммобилизованной на магнитных наночастицах, модифицированных хитозаном, а также изучены его каталитические и физико-химические свойства. Оптимальный состав биокатализатора, который показал хорошие результаты: 0,1 г хитозана; 0,1 г EDC, 0,04 г NHS и 0,05 г GOx. Присутствие слоя хитозана, покрывающего наночастицы, доказан методами ИК-спектроскопии и низкотемпературной физической адсорбции азота. Согласно кинетическим параметрам, иммобилизация GOx на магнитных наночастицах, покрытых хитозаном и триполифосфатом натрия, позволяет расширить диапазоны pH и температуры по сравнению с нативным ферментом, а также повысить устойчивость к ингибиторным эффектам.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cheung R.C.F., Ng T.B., Wong J.H., Chan W.Y. // Mar. Drugs. 2015. № 13. С. 5156-5186.
2. Unuofin J.O. // Environmental Science and Pollution Research. 2024. № 31. С. 38045–38060.

УДК 577.1:543.422.27

Баранник Александр Андреевич

Супрамолекулярная самосборка в водных растворах на основе L-цистеина и нитрата серебра в присутствии ПАВ

Руководитель: С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра физической химии

Супрамолекулярные гидрогели на основе солей серебра и L-цистеина (L-Cys) привлекают исследователей долгие годы, за счет чувствительности геле-систем к изменению pH, добавлению электролитов и др., это открывает обширные возможности к их усовершенствованию. До сегодняшнего момента исследований цистеин-серебряных систем включающих в свой состав ПАВ не было, поэтому целью данной работы является сравнение свойств супрамолекулярных гидрогелей на основе L-цистеина, нитрата серебра, иодида калия и лаурилсульфата натрия (SDS).

Синтез образцов происходил по одностадийному методу. В образцах варьировали концентрацию SDS в интервале от 0 до 0,5 мМ, концентрация иодида калия составляла 0 и 0,75 мМ для разных образцов, при этом молярное соотношение (Ag^+/Cys) оставалось постоянным и равнялось 1,83.

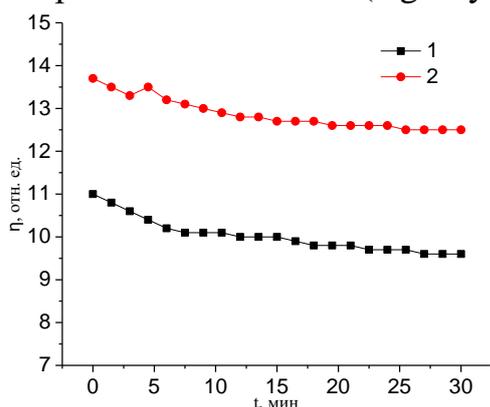


Рис.1 Зависимость относительной вязкости гидрогелей от времени при $t^0C = 20^0C$, для систем:

1 — L-Cys-AgNO₃-KI;

2 — L-Cys-AgNO₃-KI-SDS.

отличии от соответствующих систем без SDS.

Исходя из наблюдения и данных УФ-спектроскопии добавление SDS увеличивает стабильность геле образцов во времени. Добавление 0,25 мМ SDS в систему способствует в значительной степени замедлению восстановления серебра, вероятно за счет дополнительных межмолекулярных взаимодействий Ag-SDS по сульфатной группе.

Рис. 1 демонстрирует зависимость относительной вязкости от времени для гидрогелей с добавлением SDS и без его. Характерной особенностью данного типа гелей является уменьшение вязкости в процессе измерения, что сохраняется в системе с добавлением SDS. В ходе исследования обнаружен концентрационный диапазон SDS в котором происходит гелеобразование. Интересно, что SDS не инициирует гелеобразование, но системы, включающие SDS и KI характеризуются увеличенным показателем вязкости в

УДК 544.774.4

Беляков Александр Андреевич

**Исследование механизма взаимодействия глутатиона
и нитрата серебра**

Руководители: Вишневецкий Д.В., Андрианова Я.В.
ФГБОУ «Тверской государственный университет», г. Тверь
Кафедра физической химии

В данное время известны водные растворы пептидов, как правило, ди- и трипептидов, которые способны взаимодействовать с ионами благородных, а также некоторых тяжелых и токсичных металлов в нейтральной среде, связывая их и образуя устойчивые гели. Данные системы имеют хорошо выраженный антибактериальный эффект, а также может быть применен в лечении онкологии [1]. Хорошо известны системы L-цистеина и солей серебра, которые образуют золь и тиксотропный гель уже при соотношении 1:1.25 (цистеин: нитрат) [2]. Исследованные ранее процессы взаимодействия глутатиона с солями серебра не дают полной картины механизма организации этих систем и не описаны с точки зрения строения ассоциатов и корреляции силы межмолекулярных связей от концентрации ионов серебра.

ИК-спектроскопия способна отразить структурные особенности образующихся хорошо растворимых в воде комплексов. Исходя из этого, в качестве объектов исследования были использованы водные растворы глутатиона и нитрата серебра с исходными концентрациями 0,01 М в следующих соотношениях (глутатион: нитрат): 1:0.25, 1:0.5, 1:0.75, 1:1, 1:1.25, 1:1.5, 1:1.75, 1:2, 1:2.25. Стабильные золи формировались только в диапазоне соотношений 1:1.75–1:2.25. Свежеприготовленная серия образцов исследовалась методом ИК спектроскопии, с предварительным высушиванием и прессованием в таблетку бромистого калия. Даже с учетом того, что L-цистеин составляет одну из трех аминокислот глутатиона, гелеобразования в исследуемой серии не наблюдалось и система выпадает в осадок тиолята при определенном количестве серебра [3]. Это означает, что характер связей, структура и устойчивость комплексов отличается от пространственной сетки в системах с L-цистеином и подлежит глубокому изучению различными физико-химическими методами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. D.V. Vishnevetskii et al. L-cysteine and N-acetyl-L-cysteine-mediated synthesis of nanosilver-based sols and hydrogels with antibacterial and antibiofilm properties // *Journal of Materials Chemistry*. – 2023. – №11. – P. 5794-5804.
2. L. Yong et al. Silver(I)-glutathione biocoordination polymer hydrogel: effective antibacterial activity and improved cytocompatibility // *Journal of Materials Chemistry*. – 2011 – №21. – P. 19214–19218.
3. Я.В. Андрианова, А.А. Беляков, Д.В. Вишневецкий, П.М. Пахомов Исследование процессов самоорганизации в водном растворе глутатиона при взаимодействии с нитратом серебра // *Вестник Тверского государственного университета. Серия «Химия»*. – 2025 – №1(59). – С. 7–21.

УДК 544.478

Бикбаева Вера Рафаэлевна

Новые подходы к золь-гель синтезу кристаллических титаносиликатов TS-1 для окисления циклогексена

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Титаносиликаты - промышленные катализаторы процессов окисления пропилена и гидроксирования фенола. Кроме того, они катализируют окисление различных олефинов [1], окислительное десульфирование [2].

Современная тенденция в процессах окисления - это использование H_2O_2 . Окисление циклических алкенов с применением H_2O_2 в присутствии титаносодержащих молекулярных сит - это сложная задача. Циклены менее реакционноспособны, чем линейные алкены и за счет большего диаметра молекулы быстрее дезактивируют микропористые катализаторы.

Цель данной работы — разработка нового золь-гель метода синтеза наноразмерного титаносиликата TS-1 структурного типа MFI, не содержащего анатаз, проявляющего активность и селективность в окислении перекисью водорода циклогексена в соответствующий эпоксид.

Синтез TS-1 основан на золь-гель и сольвотермальном подходах. Исследованные образцы катализаторов получали, изменяя pH золь. Образцы из золь с большей основностью отличаются меньшей пористостью и наличием микропористой структуры. Образцы, полученные из менее основных золь, мезопористые. Титаносиликаты с соотношением Si/Ti 20-60 характеризуются высокой дисперсностью, однородностью и воспроизводимостью, размером кристаллитов до 300 нм.

Полученные образцы охарактеризовали с помощью рентгенофазового анализа, СЭМ, низкотемпературной адсорбции-десорбции азота, УФ-вид ДО спектроскопии.

Каталитические свойства образцов изучали в процессе окисления циклогексена пероксидом водорода (20-60 °С, 5 ч, AcCN). Установлено, что на образце с Si/Ti=60, полученном из золь с меньшей основностью, конверсия циклогексена составляет 16%, из золь с большей основностью - только 7%, а селективность по эпоксидному продукту достигает 30%. Наибольшая конверсия циклогексена (30%) наблюдается на образце с Si/Ti=20, при этом селективность по эпоксициклогексену составляет 40%.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 24-73-00169.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Smeets V., Gaigneaux E.M., Debecker D.P. ChemCatChem. 2022. Vol. 14. № 1. e202101132 p.
2. Wróblewska A. React. Kinet. Mech. Catal. 2013. V. 108. № 2. 491–505 p.

УДК: 541(49+64)

Бровина Валентина Сергеевна

**Исследование влияния рН на структуру дисперсий
(био)полиэлектrolитного комплекса на основе хитозана и
карбоксиметилкрахмала маниоки**

Руководитель: А.В. Подшивалов

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО»,
Центр химической инженерии. г. Санкт-Петербург

В настоящее время все больше внимания исследователей привлекают различные надмолекулярные структуры - (био)полиэлектrolитные комплексы ((био)ПЭК). Материалы на основе данных структур могут быть применены в различных областях, включая медицину и промышленность. Среди доступных материалов для получения (био)ПЭК особый интерес представляют хитозан и карбоксиметилкрахмал (КМК), которые отличаются низкой стоимостью и разнообразием сырьевой базы. Хитозан, получают из раковин крабов и креветок, а КМК синтезируют из крахмала путём его химической модификации. (Био)ПЭК КМК/хитозан образуется преимущественно благодаря электростатическим взаимодействиям между положительно заряженными аминогруппами хитозана и отрицательно заряженными карбоксиметильными группами КМК.

Для получения карбоксиметилкрахмала (КМК), крахмал маниоки, добываемый из корней многолетнего тропического кустарника *Manihot esculenta*, карбоксиметилировали с гидроксидом натрия и монохлоруксусной кислотой в растворе изопропилового спирта при различной доле кислоты. Для установления химической структуры КМК применяли метод ИК-Фурье спектроскопии с приставкой нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО). Растворы дисперсий (био)ПЭК КМК/хитозан готовились путем смешивания двух растворов при комнатной температуре с концентрациями 0,25 масс. % в различных соотношениях, увеличивая долю КМК от 1:1 до 1:6. Для изучения влияния рН на образование (био)ПЭК методом турбодиметрического титрования измеряли поглощение на спектрофотометре (Unico, США) при 25°C и $\lambda=364$ нм, а рН раствора корректировали растворами NaOH 0,1 М и HCl 0,1 М до рН=2 и 12, соответственно. Стабильность (био)ПЭК оценивали на спектрофотометре (Shimadzu, UV 1800) со специальной встроенной приставкой для измерения поглощения во времени. Было показано, что формирование (био)ПЭК происходит в три стадии: образование первичных структур комплекса, формирование сложных коацерватов и процесс седиментации.

УДК: 544.774.4

Бурлаков Егор Сергеевич

**Исследование влияния катионов металлов на процесс самосборки
в системе L-цистеин/AgNO₃**

Руководители: Д.В. Вишневецкий, Я.В. Андрианова
ФГБОУ «Тверской государственный университет», г.Тверь
Кафедра физической химии

В настоящее время перспективной отраслью в химии являются соединения, образующихся за счет слабых взаимодействий. В данной работе в качестве такой системы будет рассмотрена система на основе L-цистеина и нитрата серебра. Для инициации самосборки в данной системе будут взяты соли биоактивных металлов. На данный момент известно, что для образования геля или золя необходимо участие как катиона, так и аниона. При этом влияние катиона и аниона по отдельности исследовано не было. В данной работе будет рассмотрено влияние катионов металлов по средством добавления их нитратов во избежание влияния аниона на процесс самоорганизации.

Целью работы является изучение влияния катионов металлов на процесс самосборки в системе L-цистеин/AgNO₃. Гидрогели получали на основе L-цистеин/AgNO₃ при соотношении L-цистеин/AgNO₃ 1,00/1,25 и концентрации дисперсной фазы 0,01М путем введения в созревший раствор нитратов и сульфатов металлов (Na⁺, Cu⁺², Mg⁺², Al⁺³) с концентрацией 0,01М. Электронные спектры образцов регистрировали на УФ-спектрофотометре Evolution Array (Thermo Scientific). Измерение размеров частиц и зарядов систем проводили с помощью анализатора Zetasizer Nano ZS (Malvern). ИК-спектры образцов регистрировались на спектрометре Vertex 70 (Bruker). Вязкость растворов и гидрогелей измеряли с помощью вибрационного вискозиметра SV-10 (A&D). Цитотоксичность гелей и зольей исследовали на клетках рака молочной железы человека MCF-7 и нормальных эмбриональных клетках легких человека WI-38.

Установлено, что при добавлении в L-цистеин/AgNO₃ солей нитратов и сульфатов металлов происходит изменение интенсивности полосы 390 нм относительно спектра L-цистеин/AgNO₃ в обоих случаях. При помощи вибрационной вискозиметрии было выявлено влияние катионов металлов на структурирование в системе, а следовательно, и на вязкость системы. Анализ методом динамического светорассеяния показал, что при введении в системы электролита происходит увеличение размеров частиц. Для комплексов на основе цистеина и ионов серебра 68 нм, а для L-цистеин/AgNO₃ + электролит происходило увеличение размеров частиц 70-110 нм в зависимости от катиона. Методом ИК-спектроскопии установили процесс встраивания катионов металлов в L-цистеин/AgNO₃. Измерение ζ-потенциала показало, что при добавлении катионов металлов происходит изменение заряда системы.

УДК 544.36

Васильева Ксения Денисовна

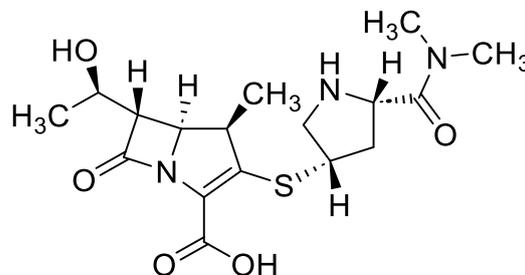
**Теоретическое и экспериментальное исследование
кисотно-основных свойств меропенема**

Руководитель: В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет, Тверь

Кафедра аналитической химии

Меропенем - высокоэффективный антибиотик из группы карбапенемов. Его молекула содержит карбоксильную, вторичную аминную и две амидные группы, и по кислотно-основным свойствам близка к аминокислотам и пептидам.



Теоретическая оценка значений констант кислотно-основных равновесий в растворе меропенема была проведена с применением компьютерной программы Epik (Schrodinger LLC), использующей метод химических графов. Рассчитаны значения десятичных логарифмов констант протонирования аниона меропенема M_{rp}^- : 8,22 для аминогруппы, 3,05 для карбоксилатной группы. Экспериментальные значения констант протонирования M_{rp}^- были получены методом рН-метрического кислотно-основного титрования раствора NaM_{rp} на фоне 0,1 М KNO_3 при 25 °С 0,05М раствором HNO_3 . Расчёт значений десятичных логарифмов констант протонирования аниона M_{rp}^- был проведён в программе NewDALSFЕК.

Для равновесия $M_{rp}^- + H^+ \leftrightarrow HM_{rp}$ расчёт даёт значение логарифма константы $lg\beta_1 = 7,55 \pm 0,03$. Для равновесия $M_{rp}^- + 2H^+ \leftrightarrow H_2M_{rp}^+$ — значение $lg\beta_2 = 10,48 \pm 0,07$. В соотнесении с результатами моделирования в программе Epik эти результаты можно интерпретировать как протонирование аминогруппы с константой $lgK_1 = 7,55 \pm 0,03$ и затем протонирование карбоксилатной группы с константой $lgK_2 = 10,48 - 7,55 = 2,93 \pm 0,07$. Полученные результаты хорошо согласуются с имеющимися литературными данными о значениях констант протонирования аниона меропенема в 18%-ном растворе метанола в воде: $lgK_1 = 7,30$ для аминогруппы и $lgK_2 = 3,30$ для карбоксилатной группы, определенными хроматографическим методом.

Также был записан ИК спектр порошка меропенема для образца в виде таблетки с KBr , в котором проявились полосы валентных колебаний связей $C=O$ бета-лактамой (1749 cm^{-1}), амидной (1654 cm^{-1}) и карбоксилатной групп (1616 cm^{-1}). Это показывает, что в твёрдом состоянии меропенем существует в виде цвиттер-иона, котором протонирована аминогруппа и депротонирована карбоксильная группа.

УДК: 544.478.1

Викторова Дарья Дмитриевна

Каталитическое гидрирование фурфурола до фурфурилового спирта в присутствии рутениевых катализаторов на модифицированном цеолите ZSM-5

Руководитель: М.Е. Григорьев

Тверской государственной технической университет, г. Тверь

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Фурфурол является продуктом гидролизной промышленности. Из фурфурола в промышленных масштабах можно получать фурфуриловый спирт, который является многотоннажным продуктом и может использоваться для производства смол, синтетических волокон и некоторых других химических продуктов, таких как витамин С, лизин и тетрагидрофурфуриловый спирт [1].

Процесс гидрирования фурфурола представляет собой сложный многоступенчатый процесс, поэтому разработка эффективного катализатора, позволяющего получить высокий выход фурфурилового спирта, является актуальной на сегодняшний день задачей.

Целью данного исследования является изучение влияния Ru-содержащих катализаторов, синтезированных на основе цеолита ZSM-5 на гидрирование фурфурола с получением фурфурилового спирта. Исследование проводилось на реакторе Series 5000 Multiple Reactor System при температуре 150 °С и давлении H₂ 60 атм. Серия опытов проводилась при применении катализаторов: Ru/HZSM-5, Ru/NaZSM-5-0.05, Ru/NaZSM-5-0.10, Ru/NaZSM-5-0.15, Ru/HZSM-5-1ч. Носителем для активной фазы катализатора были в восстановленной форме цеолит HZSM-5, а также его модификации (обработка раствором щелочи с молярными концентрациями 0.05, 0.1, 0.15 и 0.5 М раствором HCl в течение часа). Наибольшая конверсия была достигнута в присутствии катализатора Ru/HZSM-5-1ч (99,5% при селективности по фурфуриловому спирту 91,1%). Высокая селективность также была достигнута при использовании катализатора Ru/NaZSM-5-0.15 (82,9%) при конверсии фурфурола 89,2%. Таким образом, наиболее перспективным для дальнейших исследований является катализатор Ru/HZSM-5-1ч.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Y. Nakagawa, M. Tamura, K. Tomishige // ACS Catal. 2013. №3. P. 2655– 2668.

УДК: 66.094.524.52, 547.484.541

Гаврилова Евгения Павловна

Сульфированный сверхсшитый полистирол как твёрдый кислотный катализатор для синтеза леулиновой кислоты

Руководитель: О.В. Манаенков

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Сверхсшитый полистирол (СПС) представляет собой многофункциональный гидрофобный сорбент, который состоит из очень прочных полимерных сеток, сформированных в результате сшивания цепей полистирола [1]. Обладая развитой удельной поверхностью, исключительными адсорбционными свойствами, контролируемой пористостью, возможностью модификации, химической и термической стабильностью, низкой стоимостью, СПС завоевал большую популярность на коммерческом рынке [2]. Благодаря возможности функционализации область применения сверхсшитых полимеров значительно расширяется. Перспективным направлением является использование сверхсшитого полистирола в качестве твердого кислотного катализатора.

В данном исследовании разработана методика синтеза сульфированного сверхсшитого полистирола марок MN270 и MN250. Согласно методике, полимер смешивают дихлорэтаном и перемешивают в течение 1 ч. Затем к смеси добавляют концентрированную серную кислоту и нагревают до 80 °С. Смесь выдерживают при данной температуре в течение определенного времени. Сульфированный полимер отделяют на фильтре, промывают водой, этанолом и высушивают. Синтезированные образцы были охарактеризованы методами хемосорбции аммиака, низкотемпературной адсорбции азота, термогравиметрии и протестированы в реакции конверсии фруктозы и инулина в леулиновую кислоту (ЛК). Было обнаружено, что сульфированные образцы способны выдерживать температуры до 200 °С, а выход ЛК из фруктозы и инулина достигал 39,5% и 37,4%, соответственно, при 100% конверсии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 23-79-00009).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Popova, A.Yu.; Blinnikova, Z.K.; Tsyurupa, M.P.; Davankov, V.A. Synthesis and Physicochemical Properties of Hypercross-linked Polystyrene Restricted-Access Materials. *Polym. Sci. Ser. B* 2018, 60(5), 680–687
2. Ahn J.-H., Jang J.-E., Oh C.-G., Ihm S.-K., Cortez J., Sherrington D.C., 2006, Rapid generation and control of microporosity, bimodal pore size distribution, and surface area in Davankov-type hyper-cross-linked resins. *Macromolecules*, 39(2), 627–632.

УДК: 54.057

Гапоненко Оксана Васильевна

Получение производных бетулина и исследование их свойств

Руководитель: Н.В. Веролайн

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра органической химии

В настоящее время сложные эфиры бетулина находят широкое применение в фармацевтической, косметической и пищевой отраслях. Класс тритерпеноидов, к которому относятся бетулин и его производные, отличается разнообразием соединений, сочетающих доступность с важной биологической активностью. Производные бетулина обладают анти-ВИЧ, гепатопротекторной, противовоспалительной, противовирусной и иммуномодулирующей активностью. Кроме того, сложные эфиры карбоновых кислот на основе бетулина служат основой для многих органических синтезов [1,2]. В связи с этим, поставленные в данной работе задачи являются особенно важными и актуальными.

В настоящей работе сложные эфиры бетулина получали реакцией ацилирования соответствующими кислотами в заданных условиях. Для синтеза были выбраны стеариновая, пальмитиновая и олеиновая кислоты. В качестве катализатора использовали серную концентрированную кислоту. Оптимальное время проведения синтезов, установленное опытным путем, составляет 1 час.

Полученные в работе производные бетулина представляют собой бесцветные жидкости. Определены поверхностное натяжение и эфирное число эфиров бетулина. Растворы полученных производных бетулина обладают поверхностно-активными свойствами. Обнаружено уменьшение поверхностного натяжения. Следовательно, полученные соединения являются поверхностно-активными. Строение и состав полученных производных бетулина подтверждены методом ИК-спектроскопии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кузнецова С.А. Получение диацетата бетулина из бересты коры березы и изучение его антиоксидантной активности / С.А. Кузнецова, Н.Ю. Васильева, Г.С. Калачева [и др.] // Институт химии и химической технологии СО РАН. 2008. С. 151-165.
2. Яновский В.А. Синтез полиэфиров на основе бетулина и некоторых дикарбоновых кислот / В.А. Яновский, В.В. Жук, А.А. Бакибаев // Ползуновский вестник. 2009. №3. С. 348-352.

УДК 615.322

Горбань Анастасия Павловна

Влияние сезонного колебания химического состава листьев ольхи и боярышника на характеристики наночастиц серебра, полученных зелёным синтезом

Руководитель С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Зеленый синтез наночастиц металлов привлекает повышенное внимание исследователей как экологически безопасная и экономически выгодная альтернатива традиционным методам. Природные растительные экстракты содержат разнообразные биологически активные соединения, которые способны выступать в роли восстановителей и стабилизаторов наночастиц. Цель работы – изучение влияния сезонного колебания химического состава листьев ольхи и боярышника, собранных в разное время года (лето и осень) на территории г. Твери и Тверской области в 2024 году, на характеристики наночастиц серебра (НЧС), синтезированных в водных экстрактах этих растений.

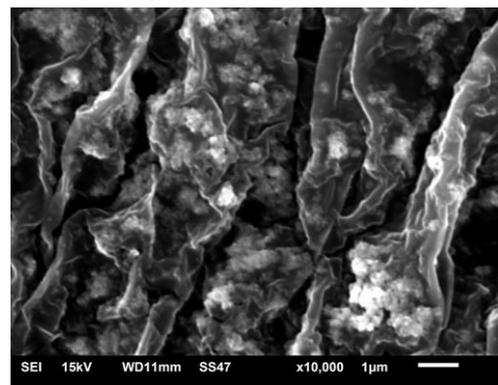
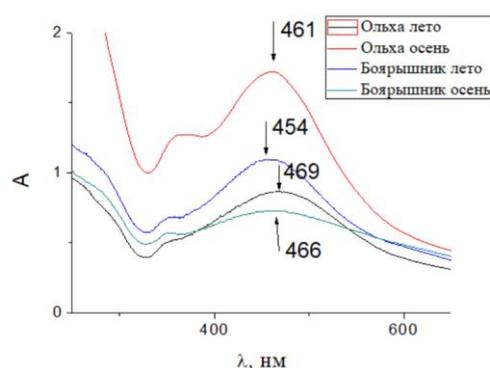


Рис. Электронные спектры водных экстрактов листьев боярышника и ольхи (лето/осень) через 6 дней после добавления $AgNO_3$; СЭМ изображение НЧС, полученных в экстракте листьев ольхи (осень).

Анализ полосы плазмонного резонанса (ППР) в электронных спектрах НЧС, образованных в водных экстрактах листьев ольхи и боярышника (лето/осень) после добавления $AgNO_3$, указывает на различия в размере и количестве наночастиц (рис. а). Таким образом было получено доказательство различной эффективности зеленого синтеза НЧС, зависящего от содержания полифенольных соединений, аминокислот и др. в листьях лекарственных растений, собранных в разное время года (лето/осень), что согласуется с результатами СЭМ (рис. б) и динамического светорассеяния.

Работа выполнена на оборудовании лабораторий спектроскопии и электронной микроскопии ЦКП ТвГУ.

УДК: 547.781.1

Горбунова Дарья Валерьевна

Изучение электропроводности имидазолиевых ионных жидкостей гексафторфосфатов и тетрафторборатов 1-децил-3-алкилимидазолия в растворе ацетонитрила

Руководитель: О.Е. Журавлев

Тверской государственной университет, г. Тверь

Кафедра органической химии

В современном мире ионные жидкости (ИЖ) привлекают к себе значительное внимание как со стороны научного сообщества в целом, так и исследователей в области электрохимии. Учитывая их уникальные свойства и физико-химические характеристики, которые могут изменяться в зависимости от структуры, ИЖ в настоящее время все чаще применяются в качестве реакционных сред, растворителей, а также в качестве электролитов в разнообразных электрохимических системах.

Цель работы заключается в исследовании электропроводности (ЭП) растворов ИЖ – гексафторфосфатов и тетрафторборатов 1-децил-3-алкилимидазолия в ацетонитриле в интервале температур от 25 до 50°C.

Проведено кондуктометрическое исследование разбавленных растворов ИЖ в ацетонитриле. Установлено, что эквивалентная ЭП разбавленных растворов ИЖ в ацетонитриле монотонно снижается при увеличении концентрации и повышается при увеличении температуры.

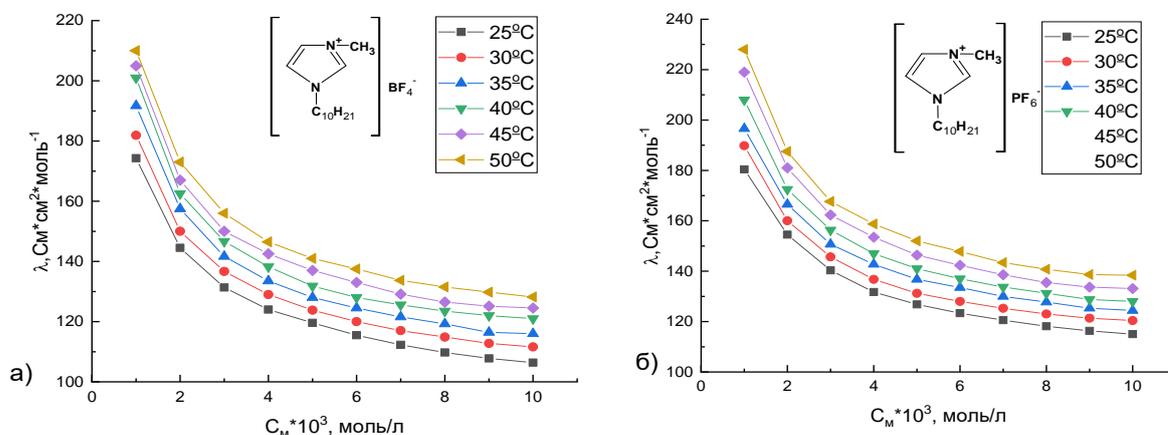


Рис. Зависимость эквивалентной электропроводности раствора а) тетрафторбората 1-децил-3-метилимидазолия, б) гексафторфосфата 1-децил-3-метилимидазолия от концентрации в ацетонитриле при температурном интервале от 25°C до 50°C.

При сравнении ЭП растворов гексафторфосфатов и тетрафторборатов 1-децил-3-алкилимидазолия показано, что анион в составе ИЖ не оказывает значительного влияния на ЭП изученных ИЖ в ацетонитриле.

УДК 543.42.061

Горячева Евгения Алексеевна

Экспериментальное и теоретическое исследование электронных спектров дитизона

Руководитель: Минина М.В.

ФГБОУ ВО «Тверской государственной университет», г. Тверь

Кафедра неорганической и аналитической химии

Дитизон (дифенилтиокарбазон) — органическое химическое соединение, один из представителей азокрасителей, металлохромный индикатор. Является высокочувствительным фотометрическим реагентом, который широко применяется для разделения и экстракционно-фотометрического определения и концентрирования ионов тяжелых металлов и для создания новых оптических химических сенсоров на основе полиметакрилатной матрицы. В медицине используется для оценки чистоты препаратов островков Лангерганса поджелудочной железы человека.

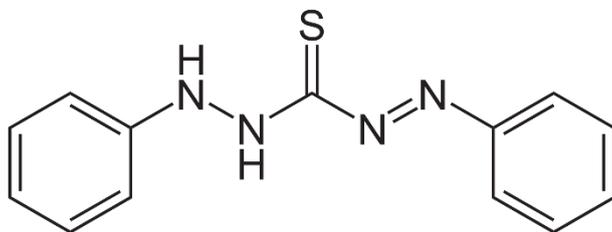


Рис. 1. Структурная формула дитизона

Спектры дитизона были записаны в видимой области. Приготовлен раствор дитизона в четыреххлористом углероде: навеску 0,02 г дитизона растворяют в 100 мл четыреххлористого углерода. Полученный раствор фотометрировали в видимой области на спектрофотометре ПЭ-5400ВИ. С помощью квантово-химических расчетов (DFT TPSS/6-31G++**) были определены колебательные спектры, распределение электронной плотности и значения энергий для НОМО и LUMO орбиталей.

Таблица 1

Сравнение экспериментально полученных данных спектров дитизона с расчетными

Экспериментальные данные		Расчетные данные	
λ_{\max} , нм	λ_{\max} , нм	λ_{\max} , нм	λ_{\max} , нм
430	618	413	590

В ходе работы установлено хорошее соответствие экспериментально полученных данных и значений, полученных с использованием функционала TPSS.

УДК 543.2

Гультяева Ксения Александровна
Определение примесей в образце стали

Руководитель: Алексеев В.Г.

Тверской государственный университет, Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

С использованием комплекса химических и физико-химических методов проведён анализ образца стали на содержание металлических и неметаллических примесей.

Предварительный анализ проведён методом атомно-эмиссионной спектроскопии с использованием спектрометра FOUNDRY-MASTER UVR. Обнаружено содержание углерода (0,202 %), серы (0,0119 %), фосфора (0,0063 %), кремния (0,245 %), марганца (0,535 %), меди (0,129 %). Уточнённые значения были получены с использованием нескольких методов. Содержание углерода (по ГОСТ 12344-2003) и серы (по ГОСТ 22536.2-87) определено методом ИК-микроскопии на газовом анализаторе. Содержание фосфора – фотометрическим методом в соответствии с ГОСТ 22536.3 по поглощению восстановленного фосфомолибдата при 810 нм. Содержание кремния – гравиметрическим методом (по ГОСТ 22536.4-88) по массе осадка диоксида кремния. Содержание меди – фотометрическим методом (по ГОСТ 22536) по поглощению аммиачного комплекса при 675 нм. Содержание марганца – титриметрическим методом по ГОСТ 12348-87.

Результаты анализа:

Определяемый элемент	Содержание, %
Углерод	0,1926
Сера	0,01005
Марганец	0,5385
Фосфор	0,0090
Кремний	0,224
Медь	0,127

УДК 543.06

Гусева Дарья Дмитриевна
**Определение свойств различных замасливателей методами
аналитической химии**

Руководитель: М.В. Минина
Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

Замасливатель - это специальная смесь, наносимая на стекловолокна для улучшения их обрабатываемости и физико-механических свойств в процессе производства и дальнейшего использования.

Использование замасливателя позволяет добиться лучшего сцепления, снижает риск возникновения дефектов и улучшает общие характеристики конечного продукта.

Содержание замасливателя на волокне влияет на его физико-механические и электрические свойства, а также на обработку. Недостаток замасливателя приводит к плохому увлажнению и повышенному трению, а избыток — к неравномерной намотке и сползанию волокон.

В данной работе представлено определение свойств различных замасливателей методами аналитической химии.

Рассмотрим на примере определения свойств 14 замасливателя методами аналитической химии.

Замасливатель проверили на стабильность с помощью метода центрифугирования. Число оборотов 5000 об/мин, время вращения 10 мин. За стабильную принимают эмульсию без видимых следов расслоения, однородную и одинаковую по цвету по всему объему образца.

С помощью рН-метра измерили рН замасливателя. Значение рН указывает на кислотно-основные свойства замасливателя, что важно для предотвращения негативного воздействия на материалы, с которыми они взаимодействуют.

Определение массовой доли сухого остатка. Проводили по методике ГОСТ 12172-74, с навеской массой 1 грамм, при температуре сушильного шкафа 110 °С и времени прокаливании 1 час.

Сравнение результатов этих методов позволяет сделать вывод о свойствах замасливателя, его эффективности в разных условиях эксплуатации.

УДК 544.36

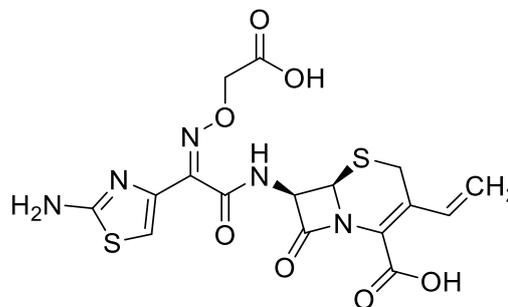
Джабраилова Аминат Гамидовна

Теоретическое и экспериментальное исследование кислотно-основных свойств цефиксима

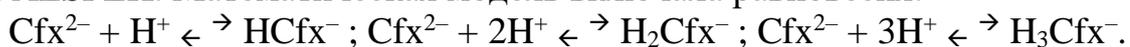
Руководитель: В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет, Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

Молекула цефиксима – цефалоспоринового антибиотика третьего поколения – содержит две кислотные карбоксильные группы и одну основную аминотиазольную группу, вследствие чего может как отдавать, так и принимать протоны.



Теоретическая оценка значений констант кислотно-основных равновесий в растворе цефиксима была проведена с использованием компьютерной программы EriK (Schrodinger LLC), использующей метод химических графов. Рассчитаны значения десятичных логарифмов констант протонирования: 4,05 для аминотиазольной группы, 3,12 для карбоксилатной группы боковой цепи, 3,07 для карбоксилатной группы ядра молекулы. Экспериментальные значения констант протонирования аниона цефиксима Cfx^{2-} были получены методом pH-метрического кислотно-основного титрования раствора Na_2Cfx на фоне 0,1 М KNO_3 при 25 °С 0,05 М раствором HNO_3 . Расчёт значений десятичных логарифмов констант протонирования аниона Cfx^{2-} был проведён в программе NewDALSFEK. Математическая модель включала равновесия:



Для равновесия $Cfx^{2-} + H^+ \rightleftharpoons HCfx^-$ расчёт даёт значение константы $lg\beta_1 = 3,98 \pm 0,05$. Программа отклоняет как незначимое равновесие $Cfx^{2-} + 2H^+ \rightleftharpoons H_2Cfx^-$, а для равновесия $Cfx^{2-} + 3H^+ \rightleftharpoons H_3Cfx^-$ даёт значение константы $lg\beta_3 = 9,20 \pm 0,15$. В соотношении с результатами моделирования в программе EriK эти результаты можно интерпретировать как протонирование аминотиазольной группы с константой $lgK_1 = 3,98 \pm 0,05$ и затем одновременное протонирование обеих карбоксилатных групп с близкими значениями констант константы $lgK_2 \approx lgK_3 \approx (9,20 - 3,98) / 2 = 2,61$. Полученные результаты хорошо согласуются с имеющимися литературными данными о значениях констант протонирования аниона цефиксима: $lgK_1 = 3,72$ для аминотиазольной группы, для карбоксилатных групп $lgK_2 = 2,70$, $lgK_3 = 2,06$, определенными при 25 °С хроматографическим методом.

УДК: 544.723.23

Дроздова Лариса Владимировна, Кузнецов Александра Юрьевна
Адсорбция ионов свинца из модельных растворов полистиролом

Руководители: И.В. Зыкова

Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и
дизайна, г. Санкт-Петербург

Кафедра теоретической и прикладной химии

Микропластик (диаметр меньше 5 мм) – одна из главных экологических проблем современности. При механическом измельчении полистирола возможно образование микропористой структуры, увеличивающей его удельную поверхность. В пористом состоянии полистирол приобретает способность адсорбировать загрязняющие вещества. Микропластик в окружающей экосистеме адсорбирует органические соединения, формируются биоплёнки, способствующие адсорбции тяжёлых металлов, пестицидов, гербицидов, антибиотиков, различных микроорганизмов, включая патогенные бактерии. С этой целью была изучена адсорбция ионов свинца (II) на измельченных изделиях из полистирола.

Полистирол – состоит из мономерных звеньев стирола. Относится к классу ароматических полимеров и широко используется в промышленности.

Изучение адсорбции свинца (II) с концентрациями 0,5 и 10 мг/дм³ проводили на изделиях из полистирола (тарелки и вилки), которые перемалывались в мельнице лабораторной зерновой LM – 250 до размеров частиц 600 – 800 мкм при температуре 293К в статических условиях при соотношении раствор:сорбент = 100:1. Концентрацию свинца определяли потенциометрическим методом с ион-селективным электродом на Pb (II) (элис-131Pb)

Экспериментальные данные кинетики адсорбции ионов свинца (II) изделиями из полистирола представлены в таблице 1.

Таблица 1. Зависимость величины адсорбции ионов свинца(II) со временем

τ, ч	1		2		4		8		24	
C _{исх} , мг/дм ³	0,5	10	0,5	10	0,5	10	0,5	10	0,5	10
C _τ , мг/дм ³	0,10	8,28	0,06	5,22	0,05	2,94	0,05	2,94	0,05	2,94
a _τ ·10 ³ , ммоль/г	0,19	0,83	0,21	2,30	0,22	3,40	0,22	3,40	0,22	3,40

Равновесие адсорбции ионов свинца (II) изделиями из полистирола достигается в течение 4 часов.

УДК: 544.723.23

Дроздова Лариса Владимировна, Кузнецова Александра Юрьевна
Адсорбция ионов меди из модельных растворов полистиролом

Руководитель: И.В. Зыкова

Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и
дизайна, г. Санкт-Петербург

Кафедра теоретической и прикладной химии

Увеличение количества пластиковых отходов в окружающей среде и их фрагментация на более мелкие частицы размером менее 5 мм вызывают обеспокоенность из-за их возможности выступать в качестве переносчиков вредных веществ или патогенных микроорганизмов.

Нами изучена адсорбция ионов меди (II) измельченными изделиями из полистирола.

Полистирол состоит из мономерных звеньев стирола и относится к классу ароматических полимеров.

Адсорбцию меди (II) при концентрациях 0,5 и 10 мг/дм³ проводили на изделиях из полистирола. Тарелки и вилки перемалывали в мельнице лабораторной зерновой LM– 250 до размеров частиц 600 – 800 мкм при температуре 293К в статических условиях при соотношении раствор:сорбент (100:1). Концентрацию меди (II) определяли потенциометрическим методом с ион-селективным электродом на Cu(II) (Элис-131Cu). Кинетические данные адсорбции ионов меди (II) изделиями из полистирола представлены на рисунке 1.

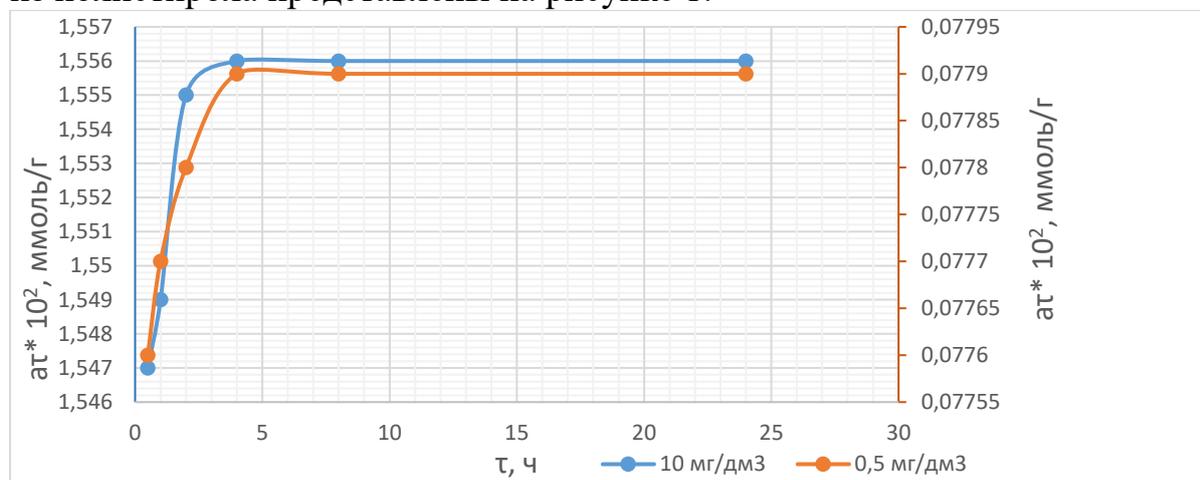


Рис. 1. Зависимость величины адсорбции ионов меди (II) со временем

Равновесие адсорбции ионов меди (II) изделиями из полистирола достигается в течение 4 часов.

УДК: 547.781.1

Дю Мария Андраниковна

Получение имидазолиевых ионных жидкостей с гексафторфосфат-анионом

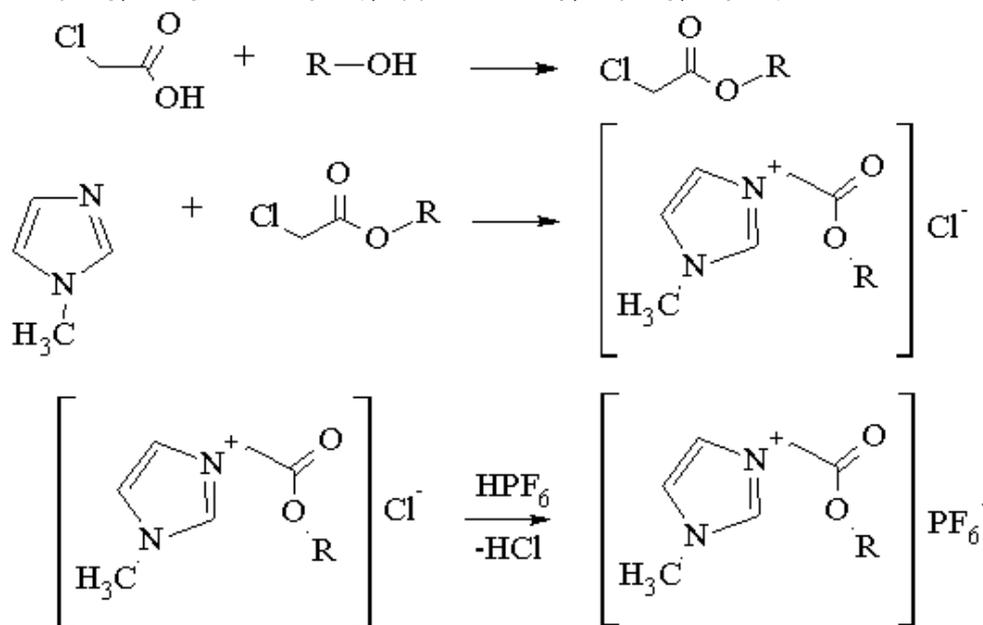
Руководители: О.Е.Журавлев

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

Ионные жидкости (ИЖ) — низколетучие соединения с высокой термической стабильностью, применяемые в катализе и электрохимии. Имидазолиевые ИЖ с гексафторфосфат-анионом (PF_6^-) отличаются особой стабильностью и ионной проводимостью.

Целью данной работы является получение имидазолиевых ионных жидкостей с гексафторфосфат-анионом с заместителями: $\text{CH}_3\text{COOC}_4\text{H}_9$, $\text{CH}_3\text{COOC}_6\text{H}_{13}$, $\text{CH}_3\text{COOC}_8\text{H}_{17}$, где $\text{R}=\text{C}_4\text{H}_9$, C_6H_{13} , C_8H_{17}



Синтез замещенных имидазолиевых ИЖ с гексафторфосфат-анионом был проведён в три стадии. Первая стадия: проведение азеотропной этерификации между хлоруксусной кислотой и бутиловым, гексиловым, октиловым спиртами в растворителе (толуол). Вторая стадия: алкилирование имидазола полученными эфирами при нагревании. Третья: замещение хлорид-аниона на гексафторфосфат-анион

Все синтезированные соединения охарактеризованы по температуре плавления, структура всех полученных соединений подтверждена данными ИК-спектроскопии и спектроскопии в видимой области.

УДК: 543.383.2

Дядько Анастасия Юрьевна

Анализ содержания нефтепродуктов в природных водах

Руководитель: В.М. Никольский

Тверской государственной университет, г. Тверь

Кафедра аналитической химии

Загрязнение природных вод нефтепродуктами (НП) разрушающе воздействует на флору и фауну, нарушает экосистемы. Нефтепродукты являются канцерогенами, могут вызывать заболевания сердечно-сосудистой системы, поражения печени и ЦНС.

Наибольшую опасность приносят аварийные выбросы нефти и нефтепродуктов. В Мировой океан за последние 20 лет попало более 20 млн. тонн нефти из-за произошедших крупных катастроф, а также при её транспортировке (выброс может составлять до 36 тысяч тонн нефти в год).

Проведя анализ имеющихся данных по методам определения нефтепродуктов, был сделан вывод, что в практике лабораторий по анализу НП в водах используется: гравиметрический, ИК-спектрометрический, флуориметрический методы и метод газовой хроматографии.

Гравиметрический метод является более трудоемким и не обладает должной чувствительностью, так как позволяет определять НП от 0,3 мг/дм³, а ПДК в питьевой воде составляет не более 0,1 мг/дм³.

Методом газовой хроматографии можно определять НП от 0,02 мг/дм³, но ограничением к применению может стать стоимость оборудования и отсутствие готового стандартного образца.

Флуориметрический и ИК-спектрометрический метод не имеют недостатков вышеперечисленных методов. Обладают достаточной чувствительностью, являются более экономически выгодными для мониторинга состояния загрязненности природных вод нефтепродуктами.

Для дальнейших исследований будет проведен анализ вод реки Яуза на содержание нефтепродуктов методами ИК-спектрометрии и флуориметрии, и приведена их сравнительная характеристика.

УДК 543.422:615.074

Егорова Ксения Вячеславовна

**Фотометрическое определение кофеина, парацетамола,
ацетилсалициловой кислоты в лекарственном препарате Цитрамон П**

Руководители: М.В. Минина

Тверской государственный университет, Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

Важным элементом в фармацевтической промышленности является качественное и количественное определение лекарственных препаратов. Из-за большого количества компонентов, содержащихся в лекарствах, стоит обратить внимание на более простые и экспрессные методы определения отдельных веществ, подтверждённые фармакопейей.

Необходимо акцентировать внимание на точном измерении концентрации всех активных компонентов, используемых в составе лекарственных средств, для повышения эффективности производственного процесса в фармацевтической отрасли.

В ходе исследования были определены три компонента: кофеин, парацетамол, ацетилсалициловая кислота, которые содержатся в лекарственном препарате Цитрамон П.

В работе использовали реактивы, которые готовили и стандартизировали в соответствии с требованиями Государственной Фармакопеи [1]. Оптическую плотность регистрировали на спектрофотометре СФ – 2000.

Предварительно взвешенную таблетку растворяют в 50 мл гидроксида натрия 0,1 н или ацетатного буфера. Отобрав 5 мл из полученного раствора, проводили извлечение кофеина хлороформом из щелочного раствора за три последовательные экстракции с дальнейшим определением его по УФ-спектрам при длине волны равной 271 нм. Условия экстракции подходят как для кислот, так и для щелочной среды.

Количественное определение парацетамола и ацетилсалициловой кислоты проводили с помощью метода Фиррордта. Снятие спектров чистых веществ парацетамола и ацетилсалициловой кислоты в щелочной среде проводили при длинах волн 230 и 255 нм, в кислотной - 220 и 245 нм.

В ходе работы были проанализированы трехкомпонентные смеси кофеина, парацетамола и ацетилсалициловой кислоты в лекарственном препарате Цитрамон П.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Государственная Фармакопея РФ. — XV изд. — М.: Изд-во «Научный центр экспертизы средств медицинского применения», 2023. — Ч.1. — 3577 с.

УДК 544.01

Егоров Андрей Алексеевич

Влияние двумерных наночастиц на микрофазное расслоение асимметричного диблок-сополимера: мезомасштабное моделирование

Руководитель: М.Д. Мальшев

Тверской государственный университет, Тверь

Кафедра физической химии

В рамках метода диссипативной динамики частиц (ДДЧ) [1] с использованием разработанной мезомасштабной модели самоорганизующегося нанокompозита [2] выполнено изучение влияния двумерных наночастиц (НЧ) на микрофазовое расслоение диблок-сополимера. Рассматривался фиксированный состав сополимера A_7B_{13} , при котором в результате микрофазного расслоения ненаполненной полимерной матрицы образуется гироидная фаза. При моделировании варьировалась степень термодинамической несовместимости между НЧ и блоком А сополимера.

Результаты моделирования показывают, что введение НЧ в объем матрицы диблок-сополимера инициирует переход из гироидной фазы в ламеллярную (см. Рис. 1). Также установлено, что при фазовом переходе образуется метастабильная структура в виде перфорированных ламелей (см. Рис. 1).

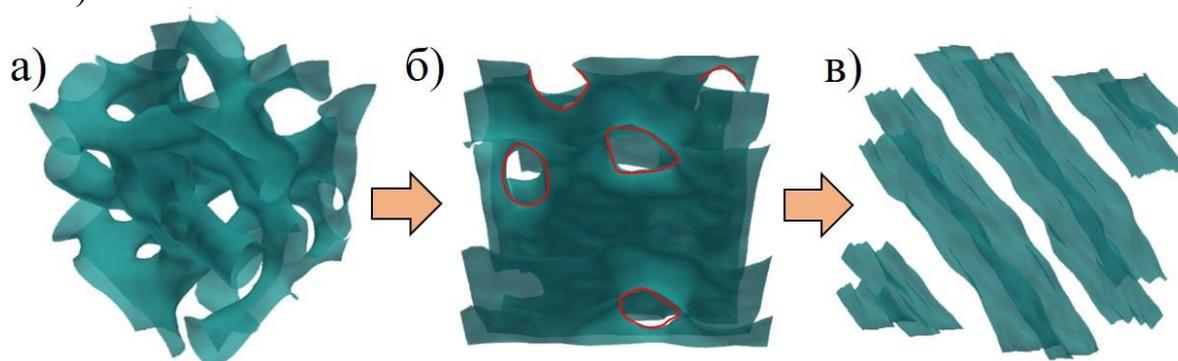


Рис. 1. Визуализация в виде изоповерхности состояний модельной системы, соответствующих: а) ненаполненной полимерной матрице по завершению $11 \cdot 10^6$ ДДЧ шагов моделирования; б), в) нанокompозиту по завершению $6 \cdot 10^6$ и $11 \cdot 10^6$ ДДЧ шагов моделирования соответственно.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Groot, R.D. Dissipative particle dynamics: Bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation / R.D. Groot, P.B. Warren // Journal of Chemical Physics. – 1997. – V. 107. – I. 11. – P. 4423–4435.
2. Malyshev, M. Two-state nanocomposite based on symmetric diblock copolymer and planar nanoparticles: mesoscopic simulation / M. Malyshev, D. Guseva, P. Komarov // Molecular Systems Design and Engineering. – 2024. – V. 9. – I. 4. – P. 409–422.

УДК: 541.49:615.33

Ершов Никита Алексеевич

Способность к геле- и плёнокообразованию в цистеин-серебряном растворе при добавлении каррагинана

Руководители: П.М. Пахомов

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Одной из актуальных задач в настоящее время является получение биосовместимых препаратов, обладающих низкой цитотоксичностью и бактерицидными свойствами. Наиболее перспективными материалами для этих целей служат полисахариды. Каррагинан (КАР) является природным полианионом, в составе которого содержится сульфогруппа. Кроме того, КАР обладает хорошей пленкообразующей способностью, что позволяет получать различные пленочные материалы [1].

Целью данной работы является исследование процессов геле- и пленкообразования в водном растворе L-цистеина и нитрата серебра (цистеин-серебряный раствор – ЦСР) при добавлении КАР.

В работе приготовлена серия водных растворов на основе чистого КАР для установления минимальной концентрации пленкообразования и тройных систем (КАР/Na₂SO₄/ЦСР). Количество ЦСР составляет 0,1 мл на 1,0 мл КАР, при этом концентрация КАР составляла 1,5%. Методами исследования служили УФ-спектроскопия, потенциометрическое титрование, электронная микроскопия (СЭМ) и механических испытаний.

В УФ-спектрах всех растворов были обнаружены две полосы поглощения с максимумами ~316 и ~390 нм, ответственные за комплексы с переносом заряда в супрамолекулярных цепочках ЦСР [2]. При увеличении содержания КАР в ЦСР происходит уменьшение интенсивности полос, связанное с преобладанием КАР и переходом от супрамолекулярного состояния к макромолекулярному. На снимках пленок, полученных с помощью СЭМ, заметна пористая структура, причем количество пор увеличивается с содержанием электролита. Предел прочности при растяжении и относительное удлинение при разрыве для пленки из чистого КАР составили 58,7 МПа и 4,9% соответственно, для композитной пленки – 2,8 МПа и 3,7%.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mirzaei A. Journal of Polymers and the Environment – 2022. №5(3), С. 734-745
2. Овчинников М.М., Хижняк С.Д., Пахомов П.М. Физико-химия полимеров. Тверь, 2006. Т. 12. С. 215.

УДК 615.454.547:615.9

Жихарева Валерия Евгеньевна

Синтез грамина и его четвертичной соли

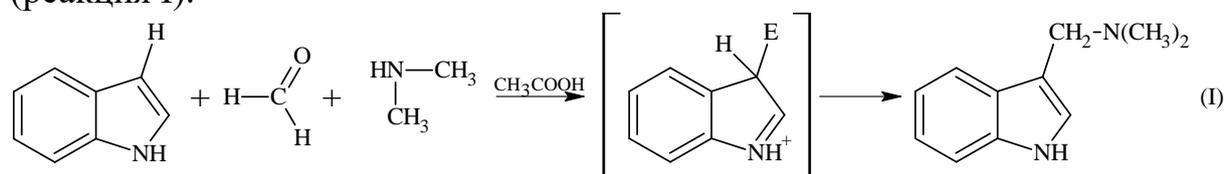
Руководитель: Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет, г. Тверь

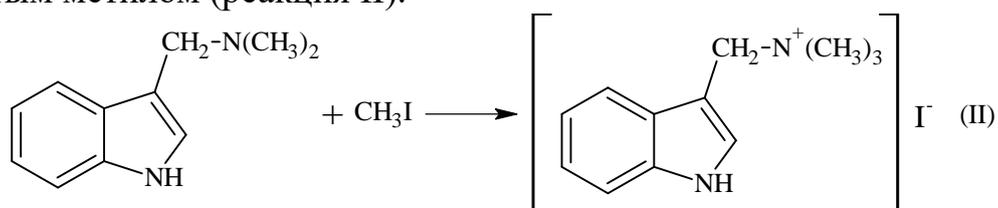
Кафедра органической химии

Грамин представляет собой гетероциклический амин и является одним из важнейших производных индола. Он содержится в природных соединениях и используется в синтезе наиболее важных физиологически активных веществ.

В настоящей работе грамин получали по реакции Манниха, представляющей собой аминотелерование С-Н кислотного соединения – индола. В силу малой С-Н кислотности индола реакция протекает как электрофильное замещение в ароматических соединениях. На первой стадии присоединение электрофила происходит в β -положение кольца (реакция I).



Синтез грамина проводили при 60°C в течение двух часов; продукты реакции выделяли подщелачиванием раствора. Грамин – белое кристаллическое вещество с температурой плавления 134°C, растворимое в полярных растворителях. На основе грамина, представляющего собой третичный амин, получена его четвертичная соль взаимодействием с йодистым метилом (реакция II).



Четвертичная соль – β -индолилметилтриметиламмония йодит представляет собой белое кристаллическое вещество, растворимое в воде и полярных растворителях. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопии. При температуре 175°C вещество темнеет и в этом состоянии устойчиво до 400°C.

В дальнейшем на основе грамина будут получены четвертичные соли с различной длиной алкильного радикала и изучены их свойства как поверхностно-активных веществ.

УДК: 547.822.3

Зайцева Анастасия Евгеньевна

Защита от коррозии стали-3 в кислой среде солями N-алкилпиперидиния

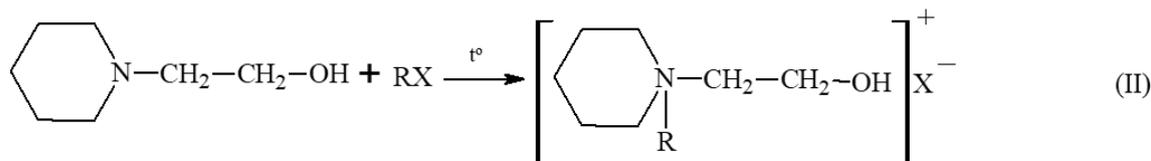
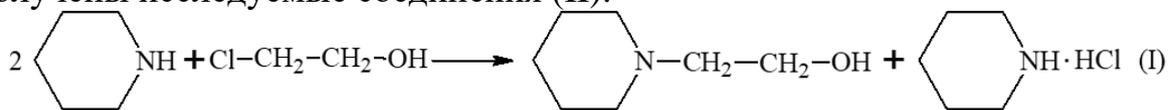
Руководитель: Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра органической химии

Ингибиторная защита металлов является одним из наиболее технологически и экономически обоснованных методов противокоррозионной защиты металлов в широком диапазоне агрессивных сред. В качестве средств защиты от коррозии используют органические соединения самых различных классов – это соли аммония, гетероциклических аминов и др., причем высокие защитные свойства, как правило, проявляют соли с объемными противоионами.

В настоящей работе синтезированы четвертичные соли N-алкилпиперидиния с различными радикалами и изучена их ингибирующая способность в 20% H₂SO₄ при защите стали-3 (0,14% С, 0,55% Мн, 0,05% Сr). Концентрация ингибитора во всех случаях составляла 0,1% масс., метод исследования – гравиметрический, температура 25°C, время испытаний 240 часов. Учитывая, что пиперидин является вторичным амином, то на первой стадии он был переведен в третичный амин взаимодействием с этиленхлоргидрином (I). Последующей кватернизацией N-(2-гидрокси)этилпиперидиний различными алкилгалогенидами были получены исследуемые соединения (II):



R: CH₂-CH=CH₂; C₄H₉; C₆H₅CH₂

X: Cl; Br.

Соединения представляют собой кристаллические вещества, растворимые в полярных растворителях, строение подтверждено данными ИК-спектроскопии.

Результаты коррозионных исследований позволяют сделать вывод, что исследуемые четвертичные соли N-алкилпиперидиния могут быть использованы для защиты стали-3 в растворах H₂SO₄.

УДК 543.64

Замурьева Екатерина Эдуардовна

Определение антоцианов и органических кислот в плодах рябины обыкновенной

Руководитель: Г.Н. Демиденко

Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Создание препаратов из растительного сырья является одной из важнейших задач, которая стоит перед российским фармацевтическим сообществом. Лекарственные препараты растительного происхождения, характеризующиеся мягким терапевтическим действием и отсутствием значительных побочных эффектов, широко применяются для профилактики и лечения различных заболеваний.

Исследования различных научных групп подтвердили противоопухолевые и антималярийные свойства флавоноидов, алкалоидов, гликозидов и полисахаридов, что открывает возможности их применения в комплексной терапии злокачественных новообразований. Особое значение имеют плоды рябины обыкновенной (*Sorbus aucuparia* L.), представителя семейства Розовых (*Rosaceae*), как потенциального источника веществ для препаратов, используемых в онкологии [1]. Плоды рябины содержат сахара, органические кислоты, витамины, каротиноиды, флавоноиды, антоцианы и т.д. Особого внимания заслуживают антоцианы, которые оказывают антиоксидантное, иммуностимулирующее, противовоспалительное и капилляроукрепляющее действие на организм человека [2].

В данной работе были исследованы четыре образца плодов рябины обыкновенной, один из которых был собран и высушен самостоятельно. Изучены органолептические свойства и проведено микроскопирование всех образцов [3]. Выявлены оптимальные условия проведения экстракции горячим способом; определено содержание суммы антоцианов и органических кислот в пересчете на яблочную кислоту.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Препараты из *Sorbus aucuparia* (*Rosaceae*) в экспериментальной терапии злокачественных новообразований: открывающиеся возможности / О.Ю. Рыбалкина, Т.Г. Разина, Е.П. Зуева [и др.]. – Текст: непосредственный // Растительные ресурсы. – 2023. – №3. – С. 217-227.
2. Функции и свойства антоцианов растительного сырья (обзор) / Макаревич А.М., Шутова А.Г., Спиридович Е.В., Решетников В.Н. – Текст : электронный // ГНУ «Центральный ботанический сад НАН Беларуси». – 2010. – Вып. 2. – С. 1-11.
3. Рябины обыкновенной плоды (ФС.2.5.0093.18) // XIV Государственная Фармакопея Российской Федерации. Том 2. – Москва, 2015. – С. 1-9.

УДК 544.182.32

Зверева Алёна Александровна

Квантовохимический расчёт электронных орбиталей олигомерных фрагментов полианилина

Руководитель: В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет, Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

Методом DFT/r²SCAN-D3(BJ)/6-31G**++ в программе Jaguar рассчитаны модели олигомерных фрагментов полианилина, содержащие четыре атома азота и пять циклических структур, в полностью восстановленной (лейкоэмеральдин), полуокисленной (эмеральдин) и полностью окисленной (пернигранилин) формах. Окисление приводит к понижению уровня энергии электронных орбиталей. При этом уровень энергии LUMO понижается в большей степени, что приводит к уменьшению энергетической щели E_g. Протонирование сильно понижает уровни энергии электронных орбиталей (табл. 1 и 2) и приводит к перераспределению электронной плотности:

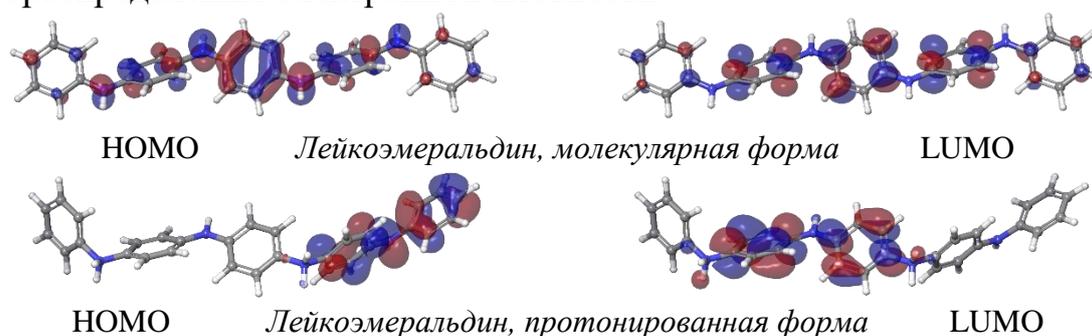


Таблица 1. Значения энергии электронных орбиталей в моделях молекул олигомеров полианилина, эВ

Модель	E(НОВО)	E(LUMO)	E _g
Лейкоэмеральдин	-4.08	-1.25	2.83
Эмеральдин	-4.57	-3.36	1.21
Пернигранилин	-5.15	-3.93	1.22

Таблица 2. Значения энергии электронных орбиталей в моделях катионов олигомеров полианилина, эВ

Модель	E(НОВО)	E(LUMO)	E _g
Лейкоэмеральдин	-9.14	-6.97	2.17
Эмеральдин	-9.97	-8.85	1.12
Пернигранилин	-15.75	-15.05	0.70

УДК: 541.49:615.33

Зеников Герман Романович

Композитные материалы на основе хитозана и соединений серебра

Руководитель: С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Композитные материалы на основе хитозана (ХЗ) – полисахарида природного происхождения, обладающего свойством мукоадгезивности, антибактериальной и антиоксидантной активностью [1] – находят широкое применение в биомедицине. Добавление к ХЗ веществ различного спектра действия (наночастиц серебра, нитрата серебра, низкоконцентрированного L-цистеин-серебряного раствора) позволит расширить область применения таких композитных материалов. Наночастицы серебра (НЧС) обладают уникальными антибактериальными свойствами, а в случае «зеленого» синтеза – получение из водных экстрактов различных лекарственных растений – это экологически чистый, альтернативный метод по отношению к традиционным физико-химическим. L-цистеин-серебряный раствор (ЦСР), состоящий из кластерных цепочек меркаптида серебра $[-Ag-S(R)-]_n$ (МС), проявляет антибактериальную и цитостатическую активность. Цель работы – получение и исследование композитных материалов (растворов, пленок) на основе хитозана (средняя молекулярная масса ~200 кДа) с наночастицами серебра, полученными в экстрактах лекарственных растений (листья багульника, дуба), раствором нитрата серебра и ЦСР, имеющем супрамолекулярную природу. Раствор ХЗ в воде получали с добавлением уксусной кислоты. Установлено, что раствор ХЗ хорошо смешивается с НЧС, в электронных спектрах ХЗ-НЧС систем отсутствуют признаки рассеяния и проявляются полосы плазмонного резонанса наночастиц. Для сравнения были получены образцы ХЗ с раствором $AgNO_3$. Обнаружено, что ЦСР смешивается с ХЗ средней молекулярной массы в очень узком концентрационном диапазоне, что объясняется возникновением двух подсистем в этой композиции. Для выяснения природы межмолекулярных взаимодействий ХЗ с ионами серебра было изучено влияние дневного света на системы ХЗ-НЧС, ХЗ- $AgNO_3$, ХЗ-ЦСР.

Работа выполнена на оборудовании лабораторий спектроскопии и электронной микроскопии ЦКП ТвГУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zenikov, G.R., Khizhnyak, S.D., Ivanova, A.I. et al. The Self-Organization and Gelation Processes in a Cysteine–Silver Solution Containing Chitosan and an Electrolyte. *Colloid J* 86, 370–380 (2024). <https://doi.org/10.1134/S1061933X24600143>

УДК: 544.723

Иванов Павел Евгеньевич

Синтез сорбентов на основе сшитого хитозана для очистки сточных вод от красителей и неорганических ионов

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Процесс индустриализации тесно связан с нежелательными последствиями, такими как наличие промышленных отходов, которые влияют на окружающую среду. Попадание сточных вод в водоемы может привести к снижению качества и количества пресной воды, что обуславливает необходимость разработки эффективных методов очистки.

Одними из распространенных загрязнителей сточных вод являются тяжелые металлы и органические красители. Хитозан представляет собой уникальный биополимер, который содержит большое количество функциональных групп и обладает исключительными свойствами и широким применением. Высокая адсорбционная способность хитозана используется для поглощения неорганических катионов и анионов, а также органических загрязнителей из сточных вод. Таким образом, разработка новых материалов на основе хитозана является постоянно растущей областью исследований.

В ходе данной работы было исследован процесс адсорбции ионов Ni^{2+} , $Cr_2O_7^{2-}$ и метилового оранжевого хитозановыми сферами, сшитыми эпихлоргидрином. Было изучено влияние концентрации загрязнителей, продолжительности адсорбции, а также молекулярной массы хитозана (200, 400 и 600 кДа).

Было выявлено, что сшитые сферы с молекулярной массой хитозана 200 кДа могут накапливать: более 5.4 %(масс.) Ni^{2+} , что составляет 46.6 мг/г; 9.1 %(масс.) ионов Cr^{6+} , что составляет 387.3 мг/г; 0.13 %(масс.) метилового оранжевого, что составляет 1.3 мг/г. В случае хитозана с молекулярной массой 400 кДа сферы могут накапливать: 6.9 %(масс.) Ni^{2+} (64.1 мг/г); 9.4 %(масс.) Cr^{6+} (497.3 мг/г); 0.15 %(масс.) метилового оранжевого (1.6 мг/г). Сферы с молекулярной массой хитозана 600 кДа могут накапливать: 8.4 %(масс.) Ni^{2+} (73.0 мг/г); 10.2 %(масс.) Cr^{6+} (555.8 мг/г); 0.25 %(масс.) метилового оранжевого (2.7 мг/г).

На основе полученных данных был сделан вывод о том, что сшитые хитозановые сферы с молекулярной массой хитозана 600 кДа обладают лучшими адсорбционными свойствами, что говорит о перспективности применения таких сорбентов для очистки сточных вод как в проточных реакторах, так и реакторах периодического действия.

УДК 615.2:616-073.524

Иванюта Ярослава Викторовна

**Определение дифенгидрамина гидрохлорида в препарате
Антигриппин-АНВИ спектрофотометрическим методом**

Руководители: М.В. Минина

Тверской государственный университет, Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

Дифенгидрамин гидрохлорид — белый мелкокристаллический порошок, являющийся одним из представителей антигистаминных препаратов первого поколения.

Для исследования был взят комбинированный лекарственный препарат Антигриппин-АНВИ, который используется для лечения ОРВИ и гриппа у взрослых. Дифенгидрамин гидрохлорид входит в состав капсул Б.

В работе использовали стандартный образец дифенгидрамина гидрохлорида, который удовлетворяет требования нормативной документации (НД) [1]. Реактивы готовили и стандартизовали, а также пригодность применения методики устанавливали в соответствии с требованиями Государственной Фармакопеи [2].

В мерную колбу на 100 мл поместили точную навеску 0,15 г содержимого капсул Б, добавили 20-30 мл дистиллированной воды, перемешивали в течении 2 минут, после чего довели содержимое до метки, взболтали и отфильтровали. К фильтрату объёмом 1 мл добавили 3 мл фосфатного буфера (рН=7,4), 10 мл хлороформа, 1 мл 0,04% раствора бромтимолового синего и перенесли в делительную воронку для экстракции. Экстрагирование проводили в течение 2 минут. Хлороформное извлечение отделили и измерили на спектрофотометре ПЭ-5400ВИ при 400 нм в кювете толщиной 10 мм относительно растворителя. Параллельно проводили испытание рабочего стандартного образца дифенгидрамина гидрохлорида, содержание которого 80 мкг/мл.

Для проверки эффективности разработанного метода в аналитических целях проводилась процедура валидации по указанным критериям, как специфичность, диапазон применения, линейность, правильность и сходимость результатов анализа. В ходе проверки метода были достигнуты результаты, соответствующие установленным требованиям НД [3].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ФСП 42-0008402503. Димедрол.
2. Государственная Фармакопея РФ. — XV изд. — М.: Изд-во «Научный центр экспертизы средств медицинского применения», 2023. — Ч.1. — 3577 с.
3. ФСП 42-0125031200. Антигриппин-АНВИ, капсулы.

УДК 547.821.3

Ипатова Ольга Алексеевна

Получение хлоридов N-алкоксикарбонилметилпиридиния

Руководитель: О.Е. Журавлёв

Тверской государственный университет, Тверь

Кафедра органической химии

Ионные жидкости представляют собой соединения с температурой плавления ниже 100°C, как правило состоящие из органического объёмного катиона и органического или неорганического аниона. Благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам ионные жидкости широко применяются в качестве катализаторов и растворителей в органическом синтезе. Преимуществом ионных жидкостей, имеющих в составе катион со сложноэфирной функциональной группой, является их низкая токсичность и биоразлагаемость. Целью данной работы является получение четвертичных солей пиридиния со сложноэфирной группой в структуре катиона.

На первом этапе были получены сложные эфиры монохлоруксусной кислоты методом азеотропной этерификации. В качестве азеотропообразователя применялся толуол, в качестве катализатора – паратолуолсульфоновая кислота. Полученные сложные эфиры были очищены перегонкой при атмосферном давлении и в вакууме. По реакции кватернизации пиридина с алкилхлорацетатами были синтезированы хлориды 1-алкилоксикарбонилметилпиридиния с различной длиной алкильной цепи. Процесс протекал в течение 16-24 часов (в зависимости от алкильного радикала).

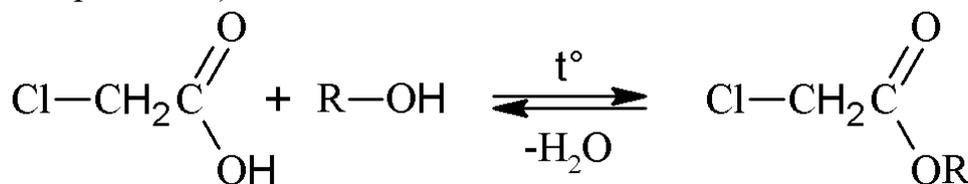


Схема 1. Реакция этерификации, где R: C₄H₉, C₆H₁₃, C₈H₁₇.

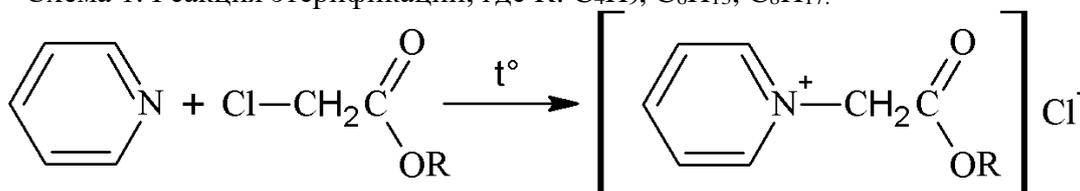


Схема 2. Реакция кватернизации пиридина, где R: C₄H₉, C₆H₁₃, C₈H₁₇.

Синтезированные соли представляют собой аморфные вещества, растворимые в воде и полярных органических растворителях. Структура всех полученных соединений подтверждена данными ИК-спектроскопии.

УДК 544.773.432

Исаев Иван Денисович

Гелеобразование в системах цефтриаксон – Co(II) и цефтриаксон – Ni(II)

Руководитель: В.Г. Алексеев

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», Тверь

Кафедра неорганической и аналитической химии

Цефтриаксон ($C_{18}H_{18}N_8O_7S_3$; рис.1) – антибиотик III поколения цефалоспоринового ряда, имеющий широкий спектр действия и малую токсичность. Ранее нами было замечено гелеобразование в исследуемых системах «цефтриаксон – Co(II)», «цефтриаксон – Ni(II)» [1].

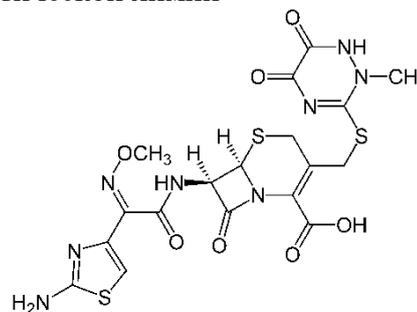


Рис. 1. Цефтриаксон

В данной работе представлены результаты изучения влияния концентрации растворов на способность к образованию коллоидных систем.

Для проведения исследований использовали препарат «цефтриаксон» производства ОАО «Борисовский завод медицинских препаратов» и гексагидраты хлорида кобальта(II) и никеля(II). Результаты эксперимента фиксировали в табл. 1 и табл. 2. Используемые обозначения: М – наблюдается помутнение, УХ* – образование отдельных устойчивых хлопьев в малых количествах, УХ – образование устойчивых хлопьев в достаточных количествах, УГ – образование устойчивого геля. При мольном соотношении Сtx:М(II) = 3:1 и более образуется истинный раствор.

Таблица

Результаты эксперимента. Система «цефтриаксон – Ni(II)»

Концентрация компонентов, моль/л	Мольное соотношение Сtx : Ni(II)				Мольное соотношение Сtx : Co(II)			
	2,5:1	2:1	1,5:1	1:1	2,5:1	2:1	1,5:1	1:1
0,0045	–	–	–	–	–	–	–	М
0,0090	–	–	–	М	–	–	УХ	УГ
0,0180	–	–	–	УГ	–	–	УХ	УГ
0,0360	–	–	УХ	УГ	–	–	УХ	УГ
0,0720	–	УХ*	УХ	УГ	–	УХ*	УХ	УГ
0,1440	УХ*	УХ	УХ	УГ	УХ*	УХ	УХ	УГ

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Исаев И.Д., Алексеев В.Г. Гелеобразование в водных растворах комплексов цефтриаксона с Ni(II) и Co(II) // В сборнике: Химические проблемы современности 2023. Сборник материалов VII Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Редколлегия: А.В. Белый (отв. ред.) [и др.]. Донецк, 2023. С. 36-37.

УДК 547.821.3

Кафтанов Арсений Дмитриевич

Синтез и физико-химические свойства бромтрихлорферратов 1-алкилпиридиния

Руководитель: О.Е. Журавлев

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

Ионные жидкости (ИЖ) – органические соединения, состоящие из органического катиона и органического или неорганического аниона с температурой плавления ниже 100 °С. Разнообразие ИЖ обусловлено большим количеством подходящих комбинаций катионов и анионов, из за чего они могут обладать самыми различными свойствами и иметь широкое практическое применение.

Целью работы являлось получение железосодержащих ИЖ на основе четвертичных солей пиридиния и изучение их физико-химических свойств.

В ходе работы были получены ИЖ, для которых была изучена их термическая стабильность на воздухе в температурном интервале 25 – 600 °С и определен молярный коэффициент экстинкции в ацетоне. Для соединений обладающих поверхностной активностью были получены изотермы поверхностного натяжения и методом кондуктометрии определены критические концентрации мицеллообразования (ККМ).

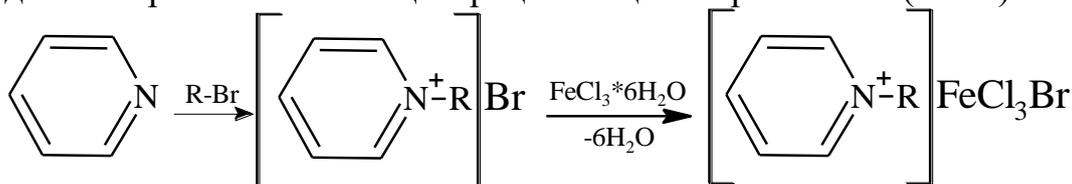


Рис. 1. Схема синтеза ионных жидкостей, где R: -H, -C₂H₅, -C₄H₉, -C₆H₁₃, -C₈H₁₇, -C₁₀H₂₁, -C₁₂H₂₅, -C₁₆H₃₃

Показано, что среди исследованных ИЖ бромтрихлорферраты пиридиния и 1-этилпиридиния обладают наибольшей термической стабильностью с температурами начала разложения 403 и 402 °С, наименее термостабильными являются бромтрихлорферраты 1-октил, 1-децил и 1-додецилпиридиния, температуры начала разложения 326, 324, 328 °С соответственно. Было установлено, что полученные бромтрихлорферраты 1-алкилпиридиния обладают большей поверхностной активностью по сравнению с исходными бромидами.

УДК 661.746.24

Ким Ольга Тимуровна

Синтез эфиров молочной кислоты

Руководитель: С.А. Темникова

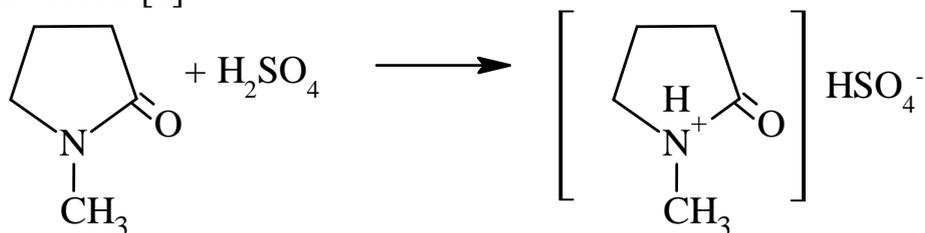
Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

Известно, что обычные органические растворители (хлоралифатические, ароматические, хлорароматические углеводороды и т.д.) наносят вред окружающей среде, для них характерна летучесть и низкая биоразлагаемость. В качестве замены предлагаются сложные эфиры молочной кислоты, они имеют хорошие растворяющие способности и при этом нетоксичны. Также алкиллактаты применяют для растворения лаков, эфиров нитро- и этилцеллюлозы, в производстве продуктов питания, фармацевтических препаратов, косметических средств [1].

В данной работе методом азеотропной этерификации с различными кислотными катализаторами и азеотропообразователями были получены алкиллактаты по схеме:

Использовали 80%-ный раствор молочной кислоты, спирты – бутиловый, октиловый и изоамиловый, азеотропообразователи – бензол и тетрахлорметан, катализаторы – *n*-толуолсульфоновую кислоту и ионную жидкость – *N*-метилпирролидон гидросульфат. Ионная жидкость была синтезирована протонированием *N*-метилпирролидона концентрированной серной кислотой [2]:



Применение *N*-метилпирролидон гидросульфата позволило оптимизировать синтез эфиров молочной кислоты. Выходы продуктов составили 32-55%.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Счастливая С. В. и др. Разработка гетерогенно-каталитического способа получения бутиллактата // Химическая промышленность сегодня. 2007. №. 4. С. 20-25.
2. Мамедбейли Э.Г.О. и др. Применение *N*-метилпирролидон гидросульфата в качестве катализаторов химических реакций // Известия Тульского государственного университета. Естественные науки. 2024. №. 2. С. 36-53.

УДК 54.057

Клименко Анна Анатольевна

Синтез бис-четвертичных солей аммония

Руководитель: Л.И. Ворончихина

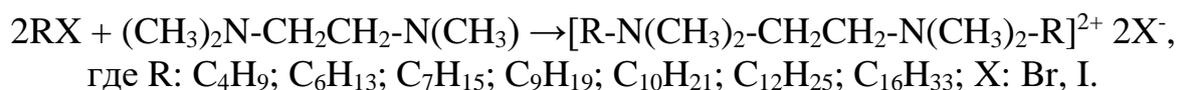
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», г. Тверь

Кафедра органической химии

Димерные поверхностно – активные вещества (ПАВ) в настоящее время являются объектом многочисленных исследований, результаты которых позволяют предсказать, что их особые свойства – высокая эффективность, низкие значения концентрации мицеллообразования (ККМ) и поверхностного натяжения, найдут широкое применение в практических целях.

Цель данной работы синтезировать димерные катионные поверхностно–активные вещества на основе N,N,N,N-тетраметилэтилендиамина и изучить физико-химические и коллоидные свойства.

Синтез бис-четвертичных аммониевых солей – это реакция нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода, протекающего по механизму нуклеофильного замещения второго порядка S_N2 :



Бис - четвертичные соли получены по аналогичной методике при взаимодействии N,N,N,N–тетраметилэтилендиамина с галоидными алкилами с длинной и короткой углеводородной цепью в среде ацетона при кипячении 3-10 часов. Продукты реакции были выделены из реакционной среды и перекристаллизованы из этанола.

Строение полученных солей было подтверждено данными ИК - спектроскопии. Наличие галогена в составе соли подтвердили пробой Бейльштейна. Чистоту продукта контролировали по данным тонкослойной хроматографии, в качестве элюента использовали воду, ацетон и метанол в соотношении (1:8:2), проявляли парами йода. Тесты на принадлежность соединений к катионным ПАВ для длинноцепочечных солей с бромфеноловым синим и перманганатно-хлороформная проба были положительны. Среда раствора полученных соединений – кислая. Вещества хорошо растворяются в полярных растворителях (вода, ацетон, этанол) и не растворяются в неполярных растворителях (хлороформ).

Установлено, что длинноцепочечные соединения в зависимости от длины углеводородного радикала снижают поверхностное натяжение с 66 до 38 мН/м. Исследованные соли лучше смачивают гидрофильную поверхность, чем гидрофобную. Устойчивость пены повышается с увеличением длины углеводородного радикала.

УДК 54.061

Комарова Валерия Дмитриевна

Определение состава и подлинности эфирного масла апельсина сладкого

Руководитель: Г.Н. Демиденко

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Эфирные масла, выделяемые из различных частей растений (цветков, мякоти, кожуры, семян), с давних времен широко применяются в качестве лекарственных средств, и в настоящее время активно используются в медицине, косметологии, ароматерапии и парфюмерии [1]. При этом способы выделения и получения эфирных масел весьма просты и малозатратны.

Одним из растений-источников эфирного масла, является апельсин сладкий (*Citrus sinensis*), из семейства рутовых (*Rutaceae*) [2]. Сырьем для производства эфирного масла апельсина сладкого, в составе которого около 90% лимонена; витамины (С, группы В, РР, Р, каротин); флавоноиды и многие другие соединения, является корка плодов апельсина [1, 3].

Эфирное масло апельсина сладкого тонизирует нервную систему, снижает уровень стресса, повышает работоспособность; способствует укреплению иммунной системы и облегчения симптомов простуды; широко применяется в косметологии, так как является прекрасным средством по уходу за сухой кожей лица, используется для очищения кожи и устранения жирного блеска, выравнивает рельеф кожи и улучшает цвет лица, устраняет морщины. Кроме ухода за кожей лица, его применяют для обогащения средств ухода для волос: способствует укреплению структуры волос, придает им гладкость и блеск [2].

В данной работе была определена подлинность, органолептические показатели, перекисное число эфирного масла апельсина сладкого шести отечественных производителей; проведен хромато-масс-спектрофотометрический анализ и изучен состав каждого образца.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Растительные терпеноиды: общая характеристика, свойства, применение: учебное пособие / Г.М. Латыпова [и др.]. Уфа: ФГБОУ ВО БГМУ Минздрава России, 2020. 118 с.
2. Лечебные свойства цитрусовых / Т.Л. Киселева [и др.] // Традиционная медицина. 2008. № 2 (13). С. 44–50.
3. Саякова Г.М. Фармакогнозия / Г.М. Саякова, У.М. Датхаев, В.С. Кисличенко. - М.: Литтерра, 2019. 225 с.

УДК: 543.061

Копин Владислав Александрович
**Некоторые аспекты синтеза и выделения N-
карбоксиметиласпаргиновой кислоты**

Руководитель: Л. Н. Толкачева

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра неорганической и аналитической химии

Целью данной работы стало изучить способ получения комплексона — N-карбоксиметиласпаргиновая кислота который является производным янтарной кислоты и образует прочные комплексы с ионами металлов.

Способ получения заключается в следующем, 23,1734 г малеиновой кислоты полностью растворяют в 50 мл воды, затем приливают 10 % раствор гидроксида лития до рН примерно 9–10. Далее добавляют 15,1181 г глицина и наблюдают за изменением рН. Значение рН снизилось до 7–8, что и нужно было. Не следует приливать раствор гидроксида лития до рН сразу равным 7–8, так как при последующем добавлении глицина рН может упасть до 6–7, что влечет за собой трудности в дальнейшем выделении продукта. Реакционную смесь оставляют на несколько дней при нормальных условиях (было оставлено на 14 дней) или же нагревают в течение 5 часов при температуре 90-100°C. Следует отметить, что при любом выборе реакция образования комплексоната идет хорошо и нагревание в данном случае только ускоряет скорость химической реакции. Далее к раствору приливают раствор бромоводородной кислоты до тех пор, пока рН станет равным 2–3. В реакционной колбе практически моментально выпадает осадок N-карбоксиметиласпаргиновой кислоты, что и является продуктом синтеза.



Рис. 1. Схема синтеза комплексона

Для подтверждения того, что в осадок выпал действительно комплексон была проведена реакция комплексоната с ионами металлов. Для этого следует перевести полученный комплексон в комплексонат добавлением щелочи до слабощелочной среды и оттитровать стандартным раствором нитрата цинка с концентрацией 0,005 М в аммиачном буфере с индикатором мурексид. Также для подтверждения структуры был снят ИК-спектр с полученного комплексона. Полученный комплексон не растворим в воде, ацетоне и этаноле, но хорошо растворим в метаноле.

УДК: 66.096.4

Крылова Анна Вадимовна

**Исследование взаимодействия комплексона, производного
валерьяновой кислоты, с ионом Ni^{2+}**

Руководитель: М.И. Скобин

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра неорганической и аналитической химии

Методами рН-метрии и математического моделирования было исследовано комплексообразование этилендиамин-N-N'-тетравалерьяной кислоты (EDTVA) с никелем (II) в водной системе. Соотношение компонентов EDTVA и Ni^{2+} составляло 1 к 1.

По результатам моделирования были обнаружены кислые и средние комплексные формы, также были рассчитаны их константы образования.

Корректность метода моделирования можно оценить по графикам экспериментальной и смоделированной кривых титрования (рис.).

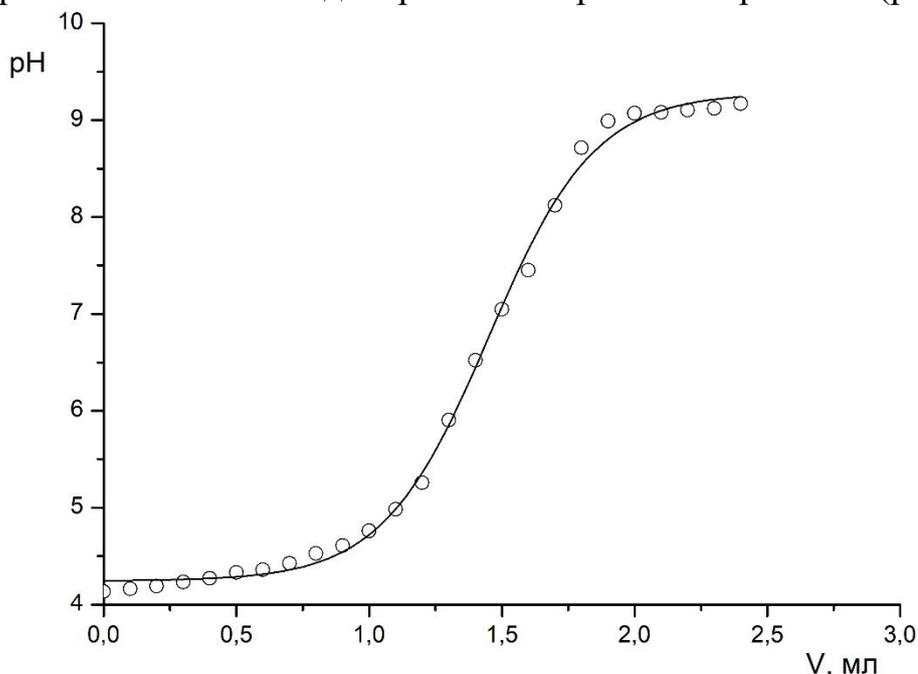


Рис. Кривые титрования системы $Ni^{2+} - EDTVA^{4-} - H_2O$: точки – экспериментальные данные, сплошная линия - моделирование

На основе полученных данных была проанализирована устойчивость координационных соединений, а также определен наиболее оптимальный диапазон pH для выделения обнаруженных комплексных форм. Достоверность полученных результатов позволяет использовать константы устойчивости для пополнения баз данных координационных соединений.

УДК: 544.473-039.63:66.097.3

Кунарёва Анастасия Андреевна

Влияние различных параметров на протекание реакции селективного гидрирования алкинолов в присутствии палладиевых полимерных катализаторов

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Гидрирование – одна из наиболее важных реакций в различных отраслях промышленности, от тонкой химии и фармацевтики до производства продуктов питания. В некоторых случаях требуется селективное гидрирование. В частности, в синтезе витаминов А, Е и К, а также различных душистых веществ проводят несколько стадий селективного гидрирования, превращая тройные углерод-углеродные связи в алкинолах в двойные, не затрагивая гидроксильные функциональные группы [1]. Для проведения данного процесса могут использоваться катализаторы на основе наночастиц металлов (главным образом, палладия), нанесенных на полимерные материалы.

В данной работе было проведено исследование влияния способа подачи водорода на поведение палладиевого катализатора (2%Pd/MN100) на основе свёрнутого полистирола марки MN100 (функционализированного третичными аминогруппами), предварительно восстановленного в токе водорода, в реакции селективного гидрирования 2-метил-3-бутин-2-ола (ДМЭК) до 2-метил-3-бутен-2-ола (ДМБК) с использованием изопропилового спирта в качестве растворителя. Процесс проводился в реакторе с перемешиванием магнитной мешалкой. При сравнении способов подачи водорода было показано, что использование капилляра, по сравнению с поверхностным обдувом, оказывает незначительное влияние на каталитическую активность, но позволяет достичь 99% селективности. При этом увеличение частоты отбора проб и продувки реактора водородом заметно снижает селективность.

Также, в рамках работы проводилось исследование влияния природы растворителя при различных температурах в реакции гидрирования ДМЭК с использованием катализатора 1%Pd/НФ на основе аморфного ароматического полимера, полученного одностадийной сшивкой нафталина с применением метилаля в качестве сшивающего агента. Было показано, что 1%Pd/НФ позволяет достичь высокой селективности по ДМБК (95-96%) при практически полной конверсии ДМЭК.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Asano S., Adams S.J., Tsuji Y, Yoshizawa K., Tahara A., Hayashi J., Cherkasov N. // React. Chem. Eng., 2022, Vol. 7, P. 1818-1826.

УДК 547.556

Куш Ангелина Дмитриевна

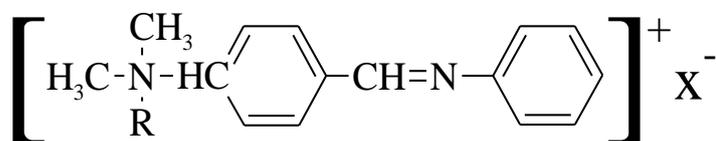
Синтез четвертичных солей аммония, содержащих азотометиновую группировку

Руководитель: Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

Получены четвертичные соли аммония, принадлежащие к классу катионных поверхностно активных веществ (ПАВ) и содержащие в гидрофильной части молекулы азотометиновую группировку такие соединения могут представлять интерес как вещества, обладающие поверхностной активностью и красящей способностью за счет наличия сопряженной хромофорной системы.



(I)

где R: CH₃ (T_{пл.} > 200°C); C₁₂H₂₅ (T_{пл.} > 220°C); C₁₆H₃₃ (T_{пл.} > 190°C); X⁻: Br; I.

Соединения получены кватернизацией оснований Шиффа высшими алкилгалогенидами. Исходные азометины (основания Шиффа) получены по реакции нуклеофильного присоединения ароматического амина – анилина к бензальдегиду и n-N, N-диметилбензальдегиду при взаимодействии реагентов в соотношении 1:1 при комнатной температуре. Выходы анилов количественные.

В ИК-спектрах наблюдаются полосы валентных колебаний азотометиновой группы в области 1630-1600 см⁻¹ и полосы сопряженного ароматического кольца при 1600 см⁻¹ и 1480 см⁻¹. Четвертичные соли (I) получены при соотношении реагентов 1:2 в среде этанола при кипячении в течение 2-3 часов. Соединения представляют собой окрашенные кристаллические вещества, хорошо растворимые в воде.

Выходы составили 50-60%, принадлежность к классу катионных ПАВ подтверждена тестом перманганатной пробы. Снижение выхода целевого продукта вероятно связана с тем, что реакция кватернизации протекает не только по аминному азоту, но и по иминному -CH=N-. Синтезированные соединения имеют высокие температуры плавления и плавятся с разложением, что, вероятно, связано с межмолекулярной ассоциацией, характерной для данного типа соединений.

УДК: 547.569+544.478.2

Лебедев Владимир Викторович

Влияние природы основания на протекание реакции Сузуки для последующего применения в тандемных процессах кросс-сочетания-гидрирования

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

Тверской государственной технической университет, Тверь

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Тандемные процессы, сочетающие кросс-сочетание и гидрирование, представляют собой мощный инструмент в органическом синтезе, позволяющий получать сложные молекулярные структуры с высокой селективностью и эффективностью. Палладий-содержащие катализаторы играют ключевую роль в таких процессах благодаря уникальной способности активировать связи С-Н и С-Х, а также обеспечивать восстановление ненасыщенных связей. Исследования в области Pd-катализируемых реакций показали, что сочетание кросс-сочетания и гидрирования в одном процессе позволяет минимизировать количество стадий синтеза, снизить затраты на катализаторы и реагенты, а также уменьшить образование побочных продуктов.

Реакция кросс-сочетания Сузуки – это сочетание арил-/винил- борных кислот с арил-/винил- галогенидами. Катализируемая палладием, реакция Сузуки требует наличия основания для активации бороновой кислоты и стабилизации промежуточных продуктов, что делает выбор основания критически важным для эффективности процесса.

В рамках исследования было проведено сравнение эффективности двух оснований (карбоната натрия и карбоната калия) в реакции кросс-сочетания Сузуки между 4-бромнитробензолом и фенилбороновой кислотой, катализируемой 1%Pd/MN100, в идентичных условиях (60°C, растворитель – смесь этанола и воды). Было показано, что карбонат натрия проявляет более высокую эффективность, что подтверждается значительным увеличением конверсии арилгалогенида (4-бромнитробензола) через 15 минут после начала реакции (65% против 42% для карбоната калия). Это может быть связано с его лучшей растворимостью в реакционной среде, что обеспечивает более высокую доступность карбонат-ионов для активации бороновой кислоты и стабилизации промежуточных продуктов.

Полученные результаты планируется использовать в дальнейшем для разработки тандемных процессов кросс-сочетания-гидрирования с применением палладий-содержащих катализаторов, что открывает новые перспективы создания эффективных и экологически безопасных методов синтеза сложных органических соединений.

УДК 541.64:539.2

Лукиев Иван Васильевич^{1,2}

Влияние качества растворителя на взаимодействие полимерных щёток

Руководитель: О.В. Борисов^{1,2}

¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО», Санкт-Петербург, Россия

²Филиал НИЦ "Курчатовский институт" - ПИЯФ - ИВС, Санкт-Петербург, Россия

Полимерные щетки, используемые в качестве модифицирующих покрытий, улучшают трибологические свойства контактирующих поверхностей. Их трение определяется энергией взаимодействия и глубиной взаимопроникновения. Взаимодействие полимерных щеток в низкомолекулярном растворителе определяется качеством растворителя. Параметры среды, такие как температура, давление, химический состав раствора, кислотность среды, наличие или отсутствие ионов позволяют контролировать силу трения между щетками. Не смотря на высокую востребованность полимерных щёток в качестве модификаторов поверхностного трения взаимодействующих поверхностей теоретические исследования, направленные на изучение влияния качества растворителя на трибологические свойства щёток, практически отсутствуют.

Аналитический и численный методы самосогласованного поля использовались для изучения взаимодействия плоских полимерных щеток. Качество растворителя учитывалось через параметр Флори–Хаггинса. Оценивались ширина зоны перекрывания, распирающее давление и сила трения при сближении щеток. Теоретически описана сила трения в режиме малых скоростей сдвига с использованием уравнения Бринкмана.

Установлено, что при постоянных параметрах (полимеризация, плотность прививки, скорость сдвига) ширина зоны перекрывания убывает по степенному закону, независимо от качества растворителя. При сильном сжатии сила трения достигает предельного значения, а коэффициент трения стремится к нулю. В области умеренного давления снижение растворимости полимеров увеличивает коэффициент трения [1].

Аналитические расчеты согласуются с численным моделированием. Результаты позволяют прогнозировать трибологические свойства полимерных щеток и оценивать влияние растворителя на силу трения между модифицированными поверхностями.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, грант № 25-23-00222.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лукиев И. В., Михайлов И. В., Борисов О. В. Влияние качества растворителя на трибологические свойства полимерных щеток //Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. – 2024. – Т. 24. – №. 5. – С. 751-757.

УДК 539.2:541.68

Лукиев Иван Васильевич^{1,2}

Исследование конформационных свойств полимерных щёток из гребнеобразных макромолекул в условиях сильного растяжения

Руководитель: О.В. Борисов^{1,2}

¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО», Санкт-Петербург, Россия

²Филиал НИЦ "Курчатовский институт" - ПИЯФ - ИВС, Санкт-Петербург, Россия

Гребнеобразные полимеры благодаря своей разветвлённой структуре и уникальным свойствам широко применяются для модификации поверхностей, находя применение в промышленности и биомедицине. Ключевой задачей является предсказание их конформационных свойств. Существует модели, предсказывающие эти свойства в условиях малых плотностей прививки. Однако, при высоких плотностях прививки макромолекул аналитические модели отсутствуют.

В данной работе исследуются конформационные свойства плоских полимерных щёток из привитых гребнеобразных макромолекул в условиях сильного растяжения. Использована крупнозернистая модель. Проведено моделирование полимерных щёток с помощью аналитического и численного методов самосогласованного поля. Первый метод применялся для аналитического описания профиля объёмной доли мономерных звеньев привитых макромолекул при их растяжении на объёмно-центрированной кубической решётке, второй – для проверки предложенной аналитической модели путем сравнения её результатов с результатами численных расчетов на простой кубической решётке.

Получена универсальная формула, описывающая профиль объёмной доли мономерных звеньев при различных плотностях прививки и степенях разветвлённости макромолекул. Показано, что увеличение разветвлённости макромолекул при фиксированной плотности прививки и длине основной цепи увеличивает толщину щётки и уменьшает среднюю плотность мономерных звеньев. При высокой разветвлённости зависимость средней плотности от эффективной плотности прививки стремится к линейной. Разработанная аналитическая модель согласуется с численным моделированием на простой кубической решётке и позволяет прогнозировать конформационные свойства полимерных щёток из гребнеобразных макромолекул при высокой плотности прививки.

УДК 541.6

Малинина Алина Александровна

Анализ химического состава листьев подорожника большого с использованием метода ИК-спектроскопии

Руководитель: М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Подорожник большой (*Plantago major* L.) - лекарственное растение, которое используется в медицине как комплексное средство при лечении кашля и для стимуляции пищеварения.

Антропогенное загрязнение окружающей среды влияет на химический состав растений. Поэтому тема данной работы является актуальной.

Цель настоящей работы – изучение химического состава листьев подорожника большого в фитоценозах Калининского муниципального округа Тверской области методом ИК-спектроскопии.

В качестве объектов исследования были выбраны образцы подорожника большого собранные в августе 2024 года: д. Езвино в лесном фитоценозе и вблизи пилорамы; на Тургиновском шоссе (27-й километр); в д. Рязаново около АО «Птицефабрика Верхневолжская». Фоновым образцом послужила аптечная форма растения.

Для получения ИК спектров листьев подорожника большого использовалась стандартная методика приготовления таблеток с бромидом калия (KBr).

Регистрация спектров осуществлялась на ИК спектрометре «ALPHA» фирмы «Bruker» на кафедре органической химии ТвГУ.

Во всех спектрах, исследованных образцов обнаружены полосы поглощения, отражающие общий химический состав листьев подорожника большого. Это валентные и деформационные колебания метиленовых групп на частотах ~ 2922 , ~ 1405 см^{-1} ; гидроксильных групп на частотах ~ 3410 , ~ 1206 см^{-1} и др.

Основные различия для ряда характеристических полос поглощения, обусловленные повышением действия загрязняющих веществ на растения проявляются в области валентных и деформационных колебаний на частотах ~ 1365 – 536 см^{-1} . Особенно это проявляется у образцов, взятых вблизи пилорамы, птицефабрики и шоссе, что говорит о повышенной рекреационной нагрузке на растения.

УДК 678+577.114

Маранджян Елена Саргисовна

Мембраны на основе крахмала, полученные ковалентной сшивкой эпихлоргидрином с добавлением пластификатора

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Для изготовления биоразлагаемых мембран, являющихся потенциальной заменой обычным мембранам благодаря своим способностям к разложению, нетоксичности, биосовместимости и, в ряде случаев, противомикробному действию, используется множество полисахаридов [1]. Среди таких биополимеров наиболее экономичным является крахмал. Крахмальные мембраны, обладая хорошими механическими и барьерными свойствами, приобрели популярность в различных областях применения: упаковка пищевых продуктов, доставка лекарственных средств, тканевая инженерия, очистка сточных вод и т.д.

В рамках данной работы была получена крахмальная мембрана, сшитая эпихлоргидрином, и, для придания материалу эластичности, был использован глицерин в качестве пластификатора. Выбранные оптимальные условия позволили получить прочную и эластичную мембрану, устойчивую в различных средах. Было показано, что мембрана не растворяется в горячей воде (80-90°C). В кислой среде (соляной кислоте) при pH 1-2 также не происходило никаких деформаций. Воздействие NaOH (pH 10.5), напротив, привело к набуханию образца в 3-4 раза и уменьшению его прочности. Такую мембрану, вероятно, можно использовать в медицине для создания капсул, растворимых в кишечнике.

Кроме того, было показано, что отверждение мембраны должно происходить с применением силикона или тефлона в качестве подложки, от которых полученный образец можно легко отделить, в отличие от стекла, отделение от которого приводит к разрушению целостности материала. Кроме того, в ходе синтеза варьировалась температура сушки, которая также влияет на свойства получаемой пленки. Было показано, что мембрана, высушенная при 65°C, оказалась достаточно тягучей, что нельзя сказать об образце, высушенном при 90°C. Можно предположить, что при высокой температуре происходит быстрое испарение сшивающего агента (эпихлоргидрина), который не успевает прореагировать с крахмалом. В результате мембрана получается хрупкой, и ее невозможно отделить от подложки без повреждений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ehsani M., Kalugin D., Doan H., Lohi A., Abdelrasoul A. Bio-Sourced and biodegradable membranes // Appl. Sci. 2022. № 12. P. 12837.

УДК 543:615.2.3

Мартынюк Анжелина Валерьевна

Количественное определение ибупрофена разных производителей

Руководитель: Н.В. Баранова

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», г. Тверь

Кафедра неорганической и аналитической химии

В связи с большим количеством лекарственных препаратов на фармацевтическом рынке возникает необходимость в их анализе с целью контроля качества. Методом кислотно-основного титрования было определено количественное содержание ибупрофена в лекарственных препаратах двух производителей (OZON и AKOC).

Анализ препаратов проводили по следующей методике: количество порошка растертых таблеток, содержащее 0,1 г ибупрофена взбалтывали с 15 мл хлороформа в течение 15 минут и фильтровали. Остаток промывали хлороформом дважды по 5 мл и фильтровали через тот же фильтр в ту же колбу. Прибавляли 20 мл этилового спирта, предварительно нейтрализованного по фенолфталеину, и титровали 0,1 н. раствором гидроксида натрия с тем же индикатором до розового окрашивания [1].

Результаты количественного определения представлены в таблице 1. Расчет проводили исходя из того, что 1 мл 0,1 н. раствора гидроксида натрия соответствует 0,02063 г ибупрофена.

Таблица 1

Результаты количественного определения ибупрофена

Препарат	Масса теоретическая, г	Масса практическая, г
Ибупрофен, OZON	0,100	0,0965
Ибупрофен, AKOC	0,100	0,0972

В результате проведенного анализа можно сделать вывод о соответствии содержания определяемого компонента заявленному и, соответственно, о подлинности данных препаратов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Государственная фармакопея Российской Федерации. XV изд. – Т. 1-5. – М.: 2023.

УДК: 544.773.432

Метлин Фёдор Алексеевич

Получение и свойства гидрогелей на основе L-цистеин/AgNO₃ золя и метиленового синего

Руководитель: Д. В. Вишневецкий
ФГБОУ ВО Тверской Государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

В настоящее время гидрогели на основе низкомолекулярных гелеобразователей являются весьма перспективными носителями в медицине для доставки различных активных веществ, которые в свободном состоянии могут быть дезактивированы в биологической среде. Среди таких веществ может выступать краситель метиленовый синий, обладающий антибактериальными и противогрибковыми свойствами. Целью работы является синтез гидрогелей на основе золя L-цистеин/AgNO₃ и метиленового синего в качестве фотосенсибилизатора для фотодинамической терапии (ФДТ).

Анализ вязкости полученных гелей показал, что с увеличением концентрации метиленового синего повышается вязкость систем. С помощью УФ-спектроскопии удалось узнать, что электронные спектры ЦСЗ и МС при смешивании не меняются. Это означает, что ЦСЗ и МС связаны слабыми нековалентными связями. Снимки сканирующей электронной микроскопии помогли понять морфологию гелей. Каркас гелей имеет волокнистую структуру в виде ленты. При высоких концентрациях МС волокна гель-сетки становились толще, а структура поверхности менялась от шероховатой до гладкой. Молекулы красителя были включены как в волокна гель-сетки, так и вне её. Динамическое светорассеяние (ДСР) показало, что распределение размеров частиц является мономодальным. Частицы постепенно растут с увеличением концентрации МС. Высокие значения дзета-потенциалов систем показали их хорошую стабильность при невысоких концентрациях МС за счёт слабых ион-ионных и ион-дипольных взаимодействий между =S⁺ или =N⁺ сайтами МС и COO⁻ или SO₄²⁻ сайтами частиц ЦСЗ.

Полученные гели проявили синергетический эффект подавления клеток плоскоклеточного рака в экспериментах *in vitro*, что даёт возможность использовать их в будущем как без облучения, так и в режиме ФДТ.

Работа выполнена в рамках развития НЦМУ ИБМХ им. В. Н. Ореховича. (№ 075-15-2022-305).

УДК: 544.163.2

Механников Илья Алексеевич

Процессы структурирования в коллоидных растворах на основе аминокислоты L-цистеин и нитрата серебра под влиянием галогенид-анионов

Руководитель: С.Д.Хижняк

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Аминокислоты и пептиды - структурные элементы белков - обладают уникальными свойствами и широким спектром применения. Благодаря такому сочетанию они активно используются в синтезе супрамолекулярных гидрогелей, которые формируются в результате самосборки низкомолекулярных компонентов за счет нековалентных взаимодействий, таких как водородные связи, электростатические силы и взаимодействия Ван-дер-Ваальса. Переход из золя в гель в подобных системах может быть вызван добавлением электролитов, изменением pH, температуры. Гидрогели на основе водных растворов аминокислоты L-цистеин (L-Cys) и солей серебра классифицируются как анион-чувствительные, так как гелеобразование в этих системах инициируется различными электролитами, включая сульфаты, хлориды и молибдаты, и др. Цель работы - изучение золь-гель перехода в коллоидном растворе L-Cys-AgNO₃ (ЦСР) под воздействием галогенид-анионов (Br⁻, I⁻) с использованием методов вибровискозиметрии, ультрафиолетовой и Фурье-ИК спектроскопии, динамического светорассеяния (ДСР) и сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Установлено, что золь-гель переход в ЦСР происходит в узком диапазоне концентраций KBr и KI, при этом гидрогели оказались нестабильными во времени, быстро мутнели и разрушались. Данный переход в ЦСР приводит к резкому изменению размеров наноагрегатов, к процессам агрегации и формирования фрагментов гель-сетки (данные ДСР). Результаты, полученные с помощью СЭМ, подтверждают трансформацию морфологии образцов. Процесс гелеобразования сопровождается изменениями в электронных спектрах ЦСР: при добавлении галогенид-аниона исчезают полосы поглощения с максимумами ~316 и ~390 нм и появляется поглощение в области 350 нм. В Фурье-ИК спектрах вымороженных ЦСР, ЦСР-KBr и ЦСР-KI образцов обнаружены изменения, указывающие на нарушение под влиянием галогенид-аниона межмолекулярных взаимодействий, в которых участвуют амино- и карбоксильные группы L-Cys.

Данная работа выполнена на оборудовании лабораторий спектроскопии и электронной микроскопии ЦКП ТвГУ.

УДК 541.49 : 615.33

Миронова Софья Валерьевна

Квантово-химическое моделирование комплекса цефуроксима с алюминием

Руководитель: М.В. Минина

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Цефуроксим относится к цефалоспориновым антибиотикам II поколения. Активен в отношении широкого спектра возбудителей, включая штаммы, продуцирующие бета-лактамазы. В настоящее время цефуроксим широко используется в медицинской практике. Продолжается изучение его взаимодействия с различными металлами.

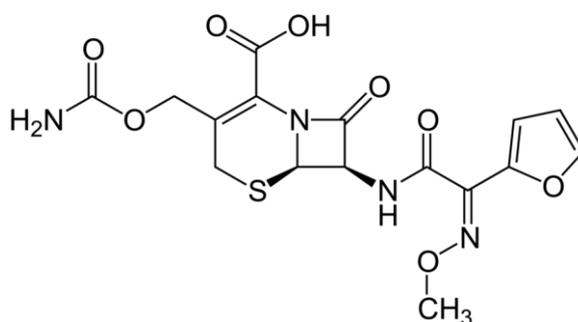


Рис. 1. Структурная формула молекулы цефуроксима

Для создания компьютерной модели комплекса алюминия с цефуроксимом был выбран программный пакет «Schrödinger». Основанная на физических вычислениях платформа сочетает в себе дифференцированные решения для прогнозного моделирования, анализа данных и совместной работы с данными в искусственном пространстве, позволяя быстро исследовать конкретный объект.

Расстояния Al-O для C(O)O – 1,83 ангстрема, для бета-лактама 1,94, для карбамата 1,92. Координационная сфера алюминия, таким образом, представляет собой почти правильную тетрагональную бипирамиду, почти октаэдр. Координационное число алюминия равно 6.

Результаты моделирования полностью совпадают с данными ИК спектроскопии.

Согласно результатам компьютерного моделирования, полученная соль представляет собой внутрикомплексное соединение, в котором анионы антибиотика координированы через атомы кислорода карбоксилатной, бета-лактамной и карбаматной групп.

УДК: 577.15

Миронова Александра петровна
**Иммобилизация пероксидазы на полимерных носителях
растительного происхождения**

Руководитель: А.Е. Филатова
Тверской государственный университет
Кафедра биохимии и биотехнологии

В настоящее время остро стоит проблема загрязнений водных ресурсов фенольными соединениями. Большое количество коллективов занято разработкой способов очистки. В основе данного способа лежит реакция окисления фенольных соединений биокатализаторами. В качестве биокатализаторов используют различные ферменты иммобилизованные как, правило, на полимерные носители не природного происхождения.

В последние годы в качестве носителей для иммобилизации ферментов в биотехнологии используют магнитные наночастицы. А применение таких носителей для иммобилизации ферментов позволяет в дальнейшем их легкое отделение от реакционной смеси, однако это требует дополнительных затрат. В качестве иммобилизуемого фермента все чаще применяют пероксидазу и тирозиназу относящиеся к классу оксиредуктаз. Кроме того под,ор носителя для иммобилизации ферментов представляет собой острую проблему. В данной работе предлагается использовать в качестве носителя микрокристаллическую целлюлозу. Данный носитель является достаточно дешевым и экологически чистым носителем. Применение целлюлозы объясняется ее хорошими дренирующими свойствами, кроме того она не взаимодействует с биологическими тканями и жидкостями, что позволяет проводить очистку вод в открытых водоемах, а не только в лабораторных условиях. Таким образом в совокупности с высокой эффективностью пероксидазы и тирозиназы, применение целлюлозы в качестве носителя позволит получить высокоэффективные и экологичные биокатализаторы, позволяющие очистить сточные воды от фенольных соединений. Кроме того целлюлоза является биоразлагаемым природным полимером, что дает ей большое преимущества в использовании ее как носителя.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. И.Н. Липунов, А.Ф. Никифоров, И.Г. Первова, Н.О. Толмачева Извлечение фенола из сточных вод сорбентами на основе древесных отходов// Водное хозяйство России 2018. №6. с. 101-110.
2. Филатова А.Е., Гребенникова О.В., Сульман А.М., Шиманская Е.И., Синтез биоаталгических систем с использованием пероксидазы корня хрена / Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. 2022. № 2 (48). С. 7-15.

УДК 543:615.2.3

Митрика Карина Викторовна

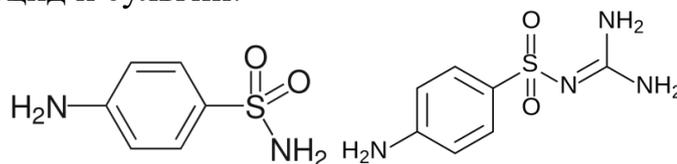
Нитритометрическое исследование сульфаниламидных препаратов

Руководитель: Н.В. Баранова

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», г. Тверь

Кафедра неорганической и аналитической химии

Проведено физико-химическое исследование сульфаниламидных препаратов стрептоцид и сульгин:



В качестве методов исследования были использованы качественные реакции и нитритометрическое титрование.

Качественные реакции показали наличие функциональных групп, характерных для сульфаниламидов. Реакция с азокрасителем подтвердила присутствие свободной аминогруппы, а взаимодействие с раствором хлорида кобальта позволило идентифицировать соединения по образованию характерного осадка. Пиролиз продемонстрировал различие в термической устойчивости изученных соединений [1].

Количественное определение сульфаниламидов проводилось методом нитритометрического титрования. Исследуемые препараты растворяли в смеси воды и хлороводородной кислоты, затем титровали 0,1 М раствором нитрита натрия. Для определения точки эквивалентности использовался индикатор тропеолин ОО. Определены массы активного вещества в препаратах. Результаты нитритометрического титрования представлены в таблице 1.

Таблица 1

Результаты количественного определения стрептоцида и сульгина

Препарат	$m_{\text{теор.}}, \Gamma$	$m_{\text{пр.}}, \Gamma$
Стрептоцид	0,250	0,248
Сульгин	0,208	0,206

Результаты исследования показали наличие действующего препарата в образцах, а также количественное соответствие массы сульфаниламидного препарата относительно заявленной массы активного вещества в аннотации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Государственная фармакопея Российской Федерации. XIII изд. – Т. 1-3. – М.: 2015.

УДК 544.774.4

Мочалов Владислав Владимирович

Радикальная полимеризация акрилонитрила в ионных жидкостях

Руководитель: Н.В. Веролайн

ФГБОУ «Тверской государственный университет», г. Тверь

Кафедра органической химии

В настоящее время перед современной химией стоит задача : синтезировать экологически безопасные аналоги нынешних органических растворителей. Из-за этого большее внимания получают ионные жидкости или органические растворители , способные к многократному рециклу синтеза. Данные органические соединения также находят применение в качестве растворителей при синтезе полимеров. Синтез полиакрилонитрила и сополимеризация его с метилакрилатом на основе 1,3-диалкилзамещенного имидазола. Целью работы было проверить влияния различных ионных жидкостей на процессы полимеризации и сополимеризации. В качестве растворителей использовались ионные жидкости на основе гексафторфосфата лития, тетрафторбората аммония и гексафторфосфата калия. При анализе растворимости АН в разных ионных жидкостях было установлено, что этот мономер растворяется во всех ионных растворителях(солях) на основе 1,3-диалкилзамещенного имидазола. Концентрация АН в растворе ионной жидкости 20-50% масс.[1] В процессе полимеризации все полимеры выпали в виде белого осадка порошкообразного вида. Также было установлено, что в ионных жидкостях с ассиметричным строением катиона имидазолия ПАН образуется существенно более высоким ММ, чем при синтезе в ДМФА и за более короткое время. Увеличение температуры до 85 °С скорость реакции значительно возрастает благодаря разложению инициатора, но приводит к уменьшению молекулярной массы ПАН. Было установлено, что температура стеклования не зависит от природы растворителя.[2] Помимо гомогенизации АН исследовано его радикальная полимеризации с ММА в ионных растворителях. Сопolíмеры представляют собой прозрачные жидкости . Строение сополимеров подтверждены элементным анализом, ИК-спектроскопией и ГПХ. В ИК-спектрах найдены полосы поглощения характерные для ПАН (2400см⁻¹), так и ПММА (1720 и 1100-1250 см⁻¹).

Работа выполнена на оборудовании ЦКП ТвГУ

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Hong K., Zhang H., Mays J.W., Visser A.E., Brazel C.S., Holbrey J.D., Reichert W.M., Rogers R.D. // Chem. Commun. – 2002 – №13. – P. 1368
2. Bonhote P., Dias A.P., Papageorgiou N., Kalyana-sundaram K., Gratzel M. // Inorg.Chem.– 1196 – №35. – P. 1168-1250

УДК 543.61:613.495

Найман Екатерина Викторовна

Анализ косметических кремов на содержание витамина Е

Руководитель: Л.Н.Толкачева

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра неорганической и аналитической химии

Актуальность данной работы обусловлена тем, что витамин Е является частым компонентом в косметике, однако его эффективность будет зависеть от типа и концентрации, поэтому так важно проводить химический анализ.

Для обнаружения и количественной оценки активного компонента кремов - витамина Е, был использован метод тонкослойной хроматографии [1]. В качестве элюента была взята смесь гексана с этилацетатом (в соотношении 95:5), а реагентом детектором был гексациноферрат калия (III) (Рис. 1).

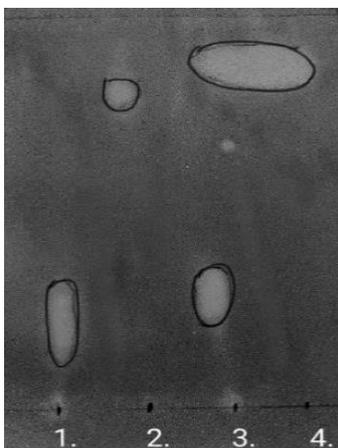


Рис. 1. Хроматограмма (Образец 1 – крем фирмы «SkinНогia», образец 2 – крем фирмы «Нежный лён», образец 3 – крем фирмы «Nivea», образец 4 – 98% токоферол).

В образце 1 и 3 был обнаружен витамин Е в виде Tokopheryl Acetate $R_f = 0,124$. Он менее эффективен, однако более стабильный, что позволяет ему существовать даже при резких перепадах температур, а в образце 2 и 4 витамин Е представлен в виде Tokopherol $R_f = 0.89$, он значительно эффективнее, но менее стабильный.

Анализируя размер хроматографических пятен, можно сделать вывод, что количество витамина Е больше в образцах 1 и 3, однако его эффективность ниже, а в образце 2 меньше витамина Е, однако он более биологически активен.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тринеева О.В. Методы анализа витамина Е (обзор) // Вестник ВГУ, Серия: Химия. Биология. Фармация. – 2013. – №1. – С.212.

УДК 544.773.432

Неелова Алина Викторовна, Полякова Елизавета Эдуардовна

Влияние галогенид-ионов на свойства цистеин-серебряных гидрозолей

Руководитель: Д.В. Вишневецкий

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра физической химии

Стимул-чувствительные супрамолекулярные гидрогели на основе низкомолекулярных соединений являются интересом многих учёных мира по причине того, что такие системы, обладая рядом ценных свойств, находят применение в различных отраслях.

Данное исследование направлено на анализ процессов самоорганизации в системе на основе цистеин-серебряного золя (ЦСЗ) и галогенид-анионов (F^- , Cl^- , Br^- , I^-) с определением свойств полученных материалов. Было установлено, что фторид-анион способствует образованию устойчивых супрамолекулярных гидрогелей с высокой механической стабильностью, тогда как хлорид-, бромид- и иодид-анионы вызывали выпадение осадков.

Физико-химические методы показали, что при введении в определенном концентрационном диапазоне фторид-анионов наблюдаются следующие изменения в цистеин-серебряной системе: увеличение относительной вязкости и размеров агрегатов, снижение значений ζ -потенциала, морфологические преобразования гель-сетки. Колориметрический тест для оценки метаболической активности клеток (МТТ) *in vitro* показал, что цистеин-серебряные гидрогели (ЦСГ) с F^- при умеренной токсичности для нормальных клеток фибробластов человека обладают наиболее выраженной активностью против клеток плоскоклеточной карциномы человека (SiHa), чем — с SO_4^{2-} , что показано на рис. 1.

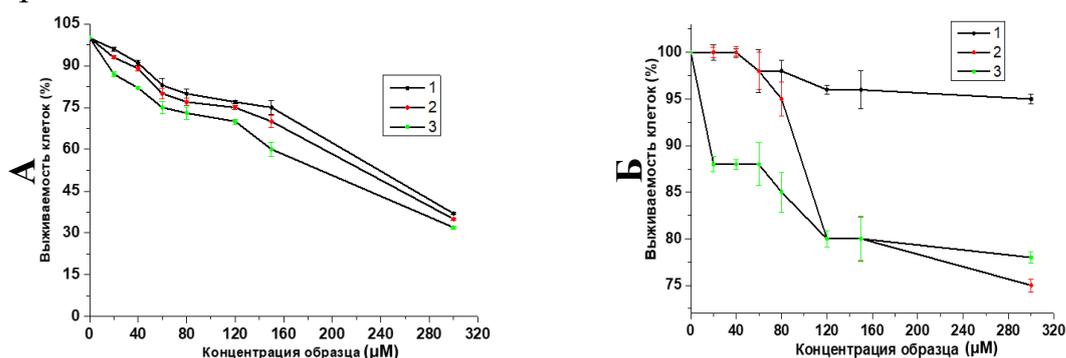


Рис.1 Цитотоксичность (МТТ) ЦСГ на основе F^- - А (мМ): 1 - 3,1, 2 - 3,5, 3 - 3,9 и ЦСГ на основе SO_4^{2-} (1), ЦСЗ (2) и NaF (3) для клеток SiHa.

Работа выполнена в рамках развития НЦМУ ИБМХ им. В.Н. Ореховича. (№ 075-15-2022-305).

Работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии и электронной микроскопии ЦКП ТвГУ.

УДК: 543.062

Немцова Алина Евгеньевна

Анализ микроэлементов в препарате «Кальцемин Адванс»

Руководитель: В.М. Никольский

Тверской государственный университет

Кафедра неорганической и аналитической химии

Актуальность темы заключается в необходимости обеспечения качества и безопасности фармацевтических препаратов, таких как «Кальцемин Адванс», содержащих важные для организма макро- и микроэлементы.

Цель работы: валидация аналитических методов для количественного определения магния, кальция, цинка и бора в препарате «Кальцемин Адванс».

Методы исследования: для определения кальция и магния: использован комплексонометрический метод с применением трилона Б (ЭДТА) в качестве титранта и эриохрома черного Т в качестве металлоиндикатора. При рН 10 ионы кальция и магния образуют комплексы с ЭДТА, что позволяет их количественно определить.

Определение цинка: использован гравиметрический метод, основанный на осаждении ионов цинка в виде малорастворимого соединения с последующим взвешиванием осадка.

Определение бора. Использован потенциометрический метод с применением электрода, чувствительного к ионам бора.

Таблица

Содержание микрокомпонентов в препарате, мг/таблетка (1,84 г)

Компонент	Рецептура [1]	Содержание в препарате, найдено
Кальций	200,00	198,45±2,00
Магний	24,00	23,20±0,82
Цинк	65,00	64,30±0,75
Бор	11,00	10,72±0,30

Вывод: Анализ препарата «Кальцемин Адванс» фирмы АО «БАЙЕР» показал, что найденное содержание микроэлементов соответствует заводской рецептуре.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. https://www.vidal.ru/drugs/calcemin_advance_3732

УДК 544.773.432

Немытышева Ирина Андреевна

Сравнительный анализ материалов для изготовления контактных линз

Руководитель: Н.В. Веролайнен

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра органической химии

В качестве оптимального способа коррекции аномалий рефракции широко применяется контактная коррекция зрения. Наиболее часто используются 2 типа мягких контактных линз (МКЛ) – гидрогелевые и силикон-гидрогелевые. Целью данной работы являлся анализ материалов для МКЛ по литературным данным.

Одним из основных требований к материалам для МКЛ являются химическая стабильность, биоинертность, смачиваемость, прочность, гидрофильность и кислородопроницаемость. Гидрогелевые мягкие контактные линзы изготавливают из гидроксиэтилметакрилата (HEMA). Такие линзы имеют невысокое влагосодержание (до 38%) и соответственно невысокую кислородопроницаемость, что не позволяет использовать их в постоянном режиме. Повышение влагосодержания за счет введения в их состав звеньев гидрофильных мономеров (диметилакриамид, N-винилпирролидон) повышает кислородопроницаемость, но ухудшает прочность и формоустойчивость. К достоинствам также можно отнести совместимость со всеми способами ухода, устойчивость к белковым и липидным загрязнениям. Современные силикон-гидрогелевые линзы представляют собой материал, в котором сочетаются комбинация полисилоксановой и гидрофильной фаз. Для МКЛ из силикон-гидрогеля характерны высокая кислородопроницаемость, достаточное влагосодержание. К недостаткам материала можно отнести низкую смачиваемость. Эта проблема решается дополнительной обработкой поверхности, например, введением инкорпорированного увлажняющего компонента или созданием полимерной композиции в виде взаимопроникающих сеток из гидрофильного полимера и полисилоксанов. Это ведет к повышению стоимости линз данного типа. Кроме того, не все способы ухода совместимы с данным типом материала.

УДК 543:615.2.3

Никитин Сергей Александрович

Количественное определение индометацина в лекарственных препаратах

Руководитель: Н.В. Баранова

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», г. Тверь

Кафедра неорганической и аналитической химии

Методом алкалиметрического титрования было определено количественное содержание индометацина в лекарственном препарате индометацин (Софарма).

Для алкалиметрического определения индометацина точную навеску 0,1 г растертых таблеток индометацина, растворяли в 10 мл этанола, предварительно нейтрализованного по фенолфталеину. Полученный раствор титровали 0,1 М раствором NaOH при постоянном перемешивании до появления устойчивой бледно-розовой окраски. Аналогично проводили титрование из ацетона. Реакция протекала по уравнению:

Результаты количественного содержания индометацина в исследуемом лекарственном препарате представлены в таблице 1. Данные значения получены из расчёта, что на 1 мл 0,1 М раствора NaOH приходится 0,0342 г индометацина.

Таблица 1

Результаты алкалиметрического определения индометацина

Растворитель	Масса теоретическая индометацина, г	Масса практическая индометацина, г
Этиловый спирт	0,025	0,02486
Ацетон	0,025	0,02494

В результате проведенного анализа можно сделать вывод о соответствии содержания определяемого компонента заявленному и, соответственно, о подлинности данных препаратов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Государственная фармакопея Российской Федерации. XIII изд. – Т. 1-3. – М.: 2015.

УДК 541.6

Новожилова Алина Сергеевна

Корреляции структура-энтальпия образования простых эфиров

Руководитель: М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Простые эфиры широко используются в промышленности и органическом синтезе, но экспериментальных сведений по их физико-химическим свойствам немного. Поэтому развитие расчетных методов их определения в настоящее время актуально.

Целью данной работы является установление количественных корреляций “структура – энтальпия образования” в простых эфирах.

В работе используются: феноменологические методы, методы статистического анализа и линейной алгебры, метод наименьших квадратов.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи: анализ экспериментальных данных по исследуемым соединениям; построение расчётных схем; проведение численных расчётов.

Для рассматриваемых соединений были получены расчётные схемы в третьем приближении, хорошо согласующиеся с экспериментом [1].

Так в третьем приближении для алифатических эфиров имеем:

$$P_{C_nH_{2n}O} = h_{CC}p_{CC} + h_{CO}p_{CO} + x_{CC_1}\Gamma_{CC} + x_{CO_1}\Gamma_{CO} + x_{CCC_1}\Delta_{CCC} + \\ + x_{CCO_1}\Delta_{CCO} + x_{CC_2}\tau_{CC} + x_{CO_2}\tau_{CO} + x_{CC_3}\omega_{CC} + x_{CO_3}\omega_{CO}$$

Где h_{CC} и h_{CO} – число связей СС и СО; x_{CC_1} и x_{CO_1} , x_{CCC_1} и x_{CCO_1} – соответственно число взаимодействий атомов СС и СО, ССС и ССО через один атом С; x_{CC_2} и x_{CO_2} – число взаимодействий атомов СС и СО через два таких атома; x_{CC_3} и x_{CO_3} – число связей СС и СО через три атома, а p_{CC} , p_{CO} , Γ_{CC} , Γ_{CO} , Δ_{CCC} , Δ_{CCO} , τ_{CC} , ... – соответствующие параметры.

По данной схеме нами были проведены численные расчёты энтальпии образования $\Delta_f H^\circ$ (ж, 298 К) выбранных соединений.

Средняя абсолютная ошибка расчета ($|\bar{\varepsilon}|$) составила 0,5 кДж/моль, а максимальное отклонение (ε_{\max}) соответственно -1,6 кДж/моль. Таким образом, это позволило нам предсказать недостающие значения свойств членов исследуемого ряда.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lange's Handbook of Chemistry / Editor: J.A. Dean. (15th Edition), McGraw-Hill. 1999. [Электронный ресурс]. — URL: <http://fptl.ru/biblioteka/spravo4niki/dean.pdf> (дата обращения: 21.01.25).

УДК: 556.5:574.5

Павлов Иван Евгеньевич

Динамика загрязнённости водоёмов-охладителей Калининской АЭС

Руководитель: В.М. Никольский

Тверской государственный университет

Кафедра неорганической и аналитической химии

Физический пуск первого энергоблока Калининской АЭС (КАЭС) состоялся в 1984 году. Сегодня, практически через 40 лет, на этой станции вырабатывают ток уже четыре энергоблока. В качестве охладителей в производственном цикле КАЭС используются озера Песьво и Удомля, соединенные протокой, обеспечивающей переток воды [1].

Озеро Удомля принадлежит бассейну Балтийского моря. Из озера вытекает река Съежа, воды которой через реку Уверь текут в реку Мсту [2].

Цель исследования: анализ изменения состава воды водоемов-охладителей за время работы КАЭС.

Сегодня в озерах-охладителях отмечается повышение температуры воды относительно естественного фона на 6 – 10 градусов. Попутно, в озерах достоверно возросло содержание микрокомпонентов из-за усиления испарения воды, что отобразено в Таблице.

Таблица

Содержание микрокомпонентов в водоемах-охладителях, мг/л

Показатели	1984год [1]	2024год [2]	ПДК[3]
Водородный показатель, рН	6,70	7,35	6,50 – 8,50
Гидрокарбонаты	159	214	-
Сульфаты	2,0	13,1	100
Хлориды	6,0	10,5	300
Кальций	36,0	40,9	180
Магний	8,5	12,1	40
Натрий и калий	5,8	16,9	-

Вывод: за сорок лет работы КАЭС рост показателей качества воды не превысил ПДК для водоемов рыбохозяйственного назначения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Григорьева И.Л., Комиссаров А.Б., Ланцова И.В. и др. // Промышленное и гражданское строительство, 2014, №2, С. 66-69.
2. Григорьева И.Л., Комиссаров А.Б., Кузовлев В.В. и др. // Вестник ТвГУ. Серия «География и геоэкология», 2024, №1 (45), С. 13-22; doi.org/10.26456/2226-7719-2024-1-13-22
3. Приказ Минсельхоза РФ №552 от 13.12.2016 «Об утверждении нормативов качества воды водных объектов рыбохозяйственного значения, в том числе нормативов предельно допустимых концентраций вредных веществ в водах водных объектов рыбохозяйственного значения» (с изменениями на 13 июня 2024 года).

УДК 538.9, 544.35.03, 577

Павлова Кристина Игоревна

**Исследование взаимодействия ДНК с ионами меди (II) и катехином
методом УФ-спектрофотометрии**

Руководитель: С.В. Пастон

Санкт-Петербургский государственный университет
Кафедра молекулярной биофизики и физики полимеров

Взаимодействие с ионами металлов играет важнейшую роль в структуре и функционировании нуклеиновых кислот. Двухвалентные ионы переходных металлов способны образовывать комплексы с отрицательно заряженными фосфатными группами ДНК, эндоциклическими атомами N и экзоциклическими кетогруппами азотистых оснований. Связывание ионов Cu^{2+} с азотистыми основаниями приводит к снижению оптической анизотропии нуклеотида и характерным изменениям в спектрах УФ поглощения и КД ДНК [1]. В данной работе проводится исследование спектральных параметров ДНК в растворе при взаимодействии с ионами Cu^{2+} и катехином (Cat). Катехины – природные антиоксиданты – в присутствии ионов меди могут проявлять прооксидантную активность, механизм которой пока недостаточно изучен [2].

В УФ-спектрах Cat наблюдали рост оптической плотности в основной полосе поглощения ($\lambda_{max1} = 279\text{нм}$) и появление широкой бесструктурной полосы в длинноволновой области ($\lambda_{max2} = 386\text{нм}$), возникающие с течением времени после растворения Cat, зависящие от условий хранения растворов (на свету или в темноте) и связанные с возникновением его окисленных форм. В присутствии ионов меди процессы окисления Cat протекают с большей скоростью. В растворах Cat с ДНК и ионами меди каталитическое действие Cu^{2+} при окислении Cat усиливается. Методом СФ плавления показано, что при $\frac{[\text{DNA(P)}]}{[\text{Cu}^{2+}]} = 1$, $[\text{Cu}^{2+}] = 5 \cdot 10^{-5}\text{M}$ температура плавления ДНК не меняется при добавлении Cat до $5 \cdot 10^{-5}\text{M}$, однако, наблюдается уширение перехода спираль-клубок, свидетельствующее об увеличении гетерогенности вторичной структуры ДНК.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Касьяненко Н.А. Конформационные изменения молекулы ДНК при ее взаимодействии с биологически активными соединениями. I. Влияние ионов металлов на конформацию молекулы ДНК в растворе // Журнал структурной химии, 2006, 47, №1, 163-169.
2. Farhan M., Zafar A., Chibber S., Yar Khan H., Arif H., Hadi S.M. Mobilization of copper ions in human peripheral lymphocytes by catechins leading to oxidative DNA breakage: A structure activity study // Arch. of Biochem. Biophys, 2015, 580, 31-40. <https://doi.org/10.1016/j.abb.2015.06.019>.

УДК: 628.3:543

Перепелица Ольга Валерьевна

Загрязнённость верхней Волги нитритным азотом

Руководитель: В.М. Никольский

Тверской государственный университет

Кафедра неорганической и аналитической химии

Появление нитрит-ионов в водоемах может вызываться как биологическими процессами, так и антропогенным влиянием.

Цель исследования: анализ нитритного состава воды Волги в пределах г. Твери.



Рис. Места забора проб воды р. Волга в г. Твери. 1 – р-н Мигалово, 2 – р-н кинотеатра Звезда, 3 – р-н ВНИИ синтетического волокна с опытным заводом

На входе Волги в Тверь (поз. 1) в воде содержалось нитрит-ионов 0,07 мг/л (далее в скобках делается стандартный пересчет на азот - 0,0175 мг/л). После впадении в Волгу Тьмаки в районе кинотеатра «Звезда» (поз. 2) содержание нитрит-ионов 0,076 мг/л (0,019 мг/л). На выходе из г. Твери в Волге в районе ВНИИ синтетического волокна с опытным заводом (поз. 3) содержание нитрит-ионов составило 0,078 мг/л (0,0195 мг/л).

Вывод: содержание нитрит-ионов в Верхней Волге находится на уровне крайне близком к ПДК (0,08 мг/л) [1]. Контроль нитрит-ионов обеспечивает поддержание чистоты водоемов на должном уровне.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Приказ Минсельхоза РФ №552 от 13.12.2016 «Об утверждении нормативов качества воды водных объектов рыбохозяйственного значения, в том числе нормативов предельно допустимых концентраций вредных веществ в водах водных объектов рыбохозяйственного значения» (с изменениями на 13 июня 2024 года).

УДК 544.773.422

Полякова Елизавета Эдуардовна

Гидрогель с фоточувствительной активностью на основе L-цистеина, нитрата серебра и иодат-анионов

Руководитель: Д.В. Вишневецкий

Тверской государственной университет, г. Тверь

Кафедра физической химии

Неорганические анионы – важнейшие участники во многих биологических процессах. Некоторые из них способны инициировать процесс гелеобразования в гидрозолях на основе низкомолекулярных соединений, способствуя появлению супрамолекулярных гелей. Данный факт позволяет использовать такие системы в детектировании анионов.

В данном исследовании рассматривается открытие уникальной анион-фоточувствительной гелевой системы, созданной на основе L-цистеина, нитрата серебра и иодат-анионов. Впервые было выявлено, что иодат-анионы, добавленные к цистеин-серебряному золю (ЦЗ), могут выполнять одновременно функции гелеобразующего и светочувствительного компонента в видимой области спектра. Присутствие черт окислительно-восстановительного процесса в взаимодействии ЦЗ с IO_3^- , способствует формированию наночастиц $\text{AgI}/\text{Ag}_2\text{O}$ эллиптической формы внутри и на поверхности частиц ЦЗ, что подтверждалось физико-химическими методами (Рис.1)

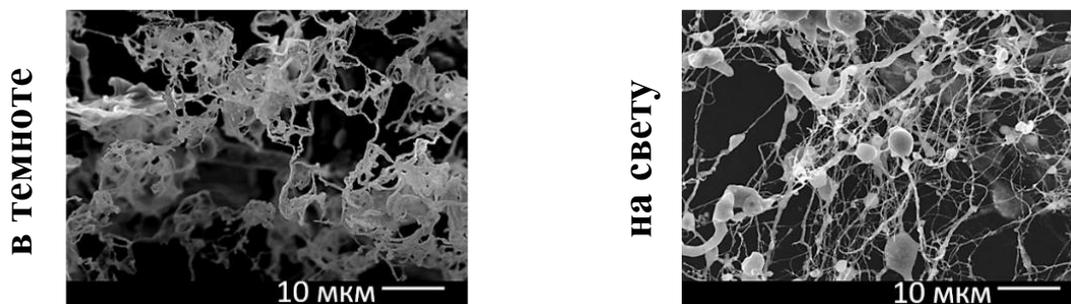


Рис. 1. СЭМ-изображения гелевой системы с $[\text{IO}_3^-] = 1,070 \text{ мМ}$ до — в темноте и после воздействия видимого света — на свету в течение 1 часа.

Одновременно с этим было установлено, что цистеин-серебряный золь обладает селективностью только к IO_3^- анионам, что подтверждалось характерной окраской красно-коричневого цвета, по сравнению со многими другими неорганическими ионами, важными для человека и окружающей среды.

Суммируя полученные данные, можно сделать вывод, что систему ЦЗ/ IO_3^- можно рассматривать как новый подход для обнаружения иодат-анионов и как альтернативный способ получения наночастиц AgI .

Работа выполнена в рамках развития НЦМУ ИБМХ им. В.Н. Ореховича. (№ 075-15-2022-305).

УДК 543.33

Прокофьева Дарья Александровна

Сравнительный анализ образцов минеральной воды на содержание ионов натрия, калия, магния и кальция

Руководитель: В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет, Тверь

Химико-технологический факультет

Проведён анализ пяти образцов лечебно-столовой минеральной воды: «Аш-Тау», «Стэлмас», «Славяновская», «Нарзан», «Кашинская» – на содержание ионов натрия, калия, магния и кальция.

Содержание кальция определено методом комплексонометрического титрования в щелочной среде соответствии с ГОСТ 23268.5-78. При pH 10 в присутствии эриохрома черного Т определяли суммарное содержание кальция и магния. В другой пробе при pH 12–13 в присутствии мурексида определяли содержание кальция и по разнице находили содержание магния. Содержание натрия и калия находили методом фотометрии пламени также в соответствии с (ГОСТ 23268.6-78). Результаты анализа представлены в таблицах.

Таблица 1. Содержание кальция и магния в образцах

Образец	Ca ²⁺ , мг/л		Mg ²⁺ , мг/л	
	Заявлено производителем	Результат анализа	Заявлено производителем	Результат анализа
«Аш-Тау»	200-500	327,1	50-200	106,5
«Стэлмас»	300-1000	302,2	200-500	462,6
«Славяновская»	250-350	246,9	Меньше 50	27,2
«Нарзан»	200-600	450,5	50-180	104,1
«Кашинская»	250-550	314,2	100-180	151,3

Таблица 2. Содержание натрия и калия в образцах

Образец	Заявлено производителем, Na ⁺ + K ⁺ , мг/л.	Результат анализа, мг/л		
		K ⁺	Na ⁺	Na ⁺ + K ⁺
«Аш-Тау»	900-1900	87,3	481,6	568,9
«Стэлмас»	300-1000	27,3	437,4	464,6
«Славяновская»	600-800	44,3	416,6	461,0
«Нарзан»	50-450	9,9	161,3	171,2
«Кашинская»	250-400	23,2	168,0	191,2

УДК 544.773.432

Пуртиев Руслан Надирович

Компьютерное моделирование гелеобразующей системы на основе цистеин-серебряного раствора и поливинилового спирта

Руководитель: М.Д. Малышев

Тверской государственный университет, Тверь

Кафедра физической химии

В работе методом молекулярной динамики с использованием валентно-силового поля PCFF выполнено моделирование гелеобразующей системы на основе «созревшего» цистеин-серебряного раствора (ЦСР) и поливинилового спирта (ПВС). Рассматривался ЦСР на основе водных растворов L-цистеина и AgNO_3 . При построении модели системы ЦСР/ПВС мы учли результаты предыдущей работы [1], согласно которым главной субъединицей «созревшего» ЦСР является кластер меркаптида серебра (МС).

Результаты моделирования (см. Рис. 1) системы ЦСР/ПВС показывают, что полимерные цепи ПВС и кластеры МС при сближении могут взаимодействовать за счет образования водородных связей между гидроксильными группами полимера и функциональными группами МС. Однако число таких связей минимально, что связано с особенностями строения кластеров МС и взаимодействием полимерных цепей между собой. По итогу, в ходе эволюции системы кластеры МС вытесняются в отдельную фазу.

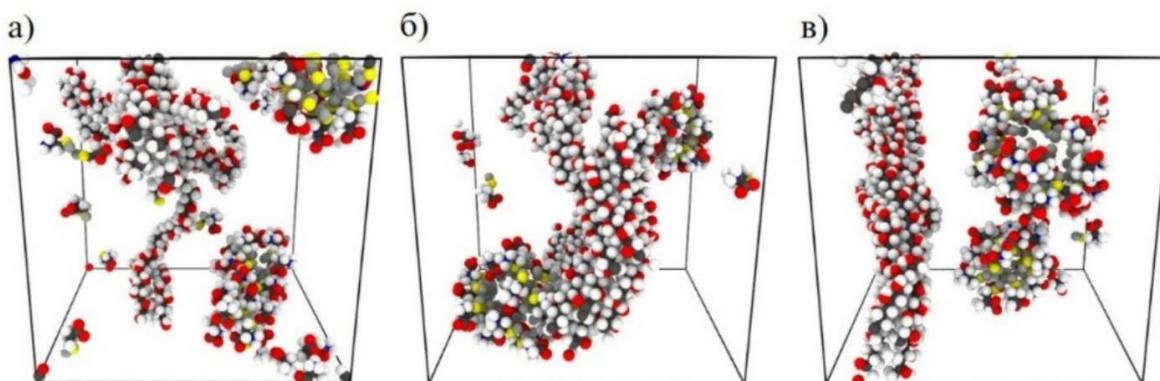


Рис. 1. Мгновенные снимки модели системы ЦСР/ПВС на разных временах моделирования: а) 30 нс, б) 144 нс, в) 200 нс. Молекулы воды и нитрат анионы удалены для лучшей визуализации. Цветовое обозначение атомов: белые соответствуют атомам водорода, черные – углерода, синие – азота, красные – кислорода, желтые – серы, серые – серебра.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Malyshev, M.D. Self-assembly in systems based on L-cysteine–silver–nitrate aqueous solution: multiscale computer simulation / M.D. Malyshev, S.D. Khizhnyak, L.V. Zherenkova, P.M. Pakhomov, P.V. Komarov // *Soft Matter*. – 2022. – V. 18. – I. 39. – P. 7524-7536.

УДК 544.773.3

Рязанова Анастасия Юрьевна

Модификация поливинилового спирта при получении эмульсии кремнийорганической смолы

Руководитель: В.В. Строкова

Белгородский государственный технологический университет им. В.Г. Шухова

Кафедра материаловедения и технологии материалов

В настоящее время большое внимание уделяется исследованию физико-химических свойств водных полисилоксановых эмульсий, это связано с использованием водных эмульсий полимерных смол в различных сферах деятельности. В качестве модификаторов границы раздела фаз эмульсии типа «масло в воде» использованы два вида коалесцентообразующего компонента – поливинилового спирта (ПВС) – пропиленгликоль и гликоль. Для оценки гидрофобизирующей способности эмульсии производили определение краевого угла поверхности полимерной пленки, после полного высыхания на стекле KRUSS DSA 30 методом лежащей капли.

Таблица: Значение краевого угла в зависимости от вида коалесцента

Наименование коалесцента-модификатора эмульгатора эмульсии	Содержание коалесцента в составе эмульсии, масс.%	Краевой угол, °
Пропиленгликоль	0,1	112,9
	0,2	97,7
	0,4	105,5
	0,8	108,6
Гликоль	0,1	114,4
	0,2	90,4
	0,4	104,7
	0,8	95,7

Результатом проведенного анализа данных значение краевого угла служит установление возможности модифицирования ПВС, путем введения коалесцента. С этой целью наилучшим образом применим гликоль с содержанием 0,1 масс.%, способный увеличить угол смачивания до 114,4°, тогда как пропиленгликоль при этой же концентрации до 112,9°. Может объясняться понижением способности капель эмульсии к слиянию при высыхании, вследствие упрочнения (жесткости) макромолекул частиц ПВС.
Работа выполнена в рамках реализации государственного задания Минобрнауки РФ № FZWN-2023-0006 с использованием оборудования Центра высоких технологий БГТУ им. В.Г. Шухова

УДК: 544.773.32

Савенко Анастасия Олеговна

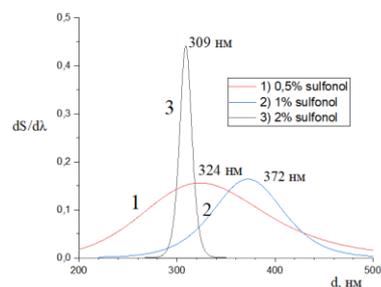
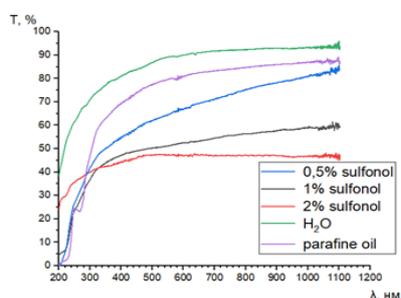
Спектральный анализ морфологии эмульсий, стабилизированных ПАВ

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

Тверской государственной университет

Кафедра физической химии

Эмульсии - это дисперсные системы, состоящие из двух несмешивающихся (например, масло/вода) или ограниченно растворимых жидкостей, стабилизированные поверхностно-активными веществами (ПАВ). Актуальность исследования эмульсий (Э) обусловлена их широким применением в различных отраслях промышленности, включая нефтяную, пищевую и фармацевтическую. При этом важным показателем Э является устойчивость, которая определяется, главным образом, природой стабилизатора и условиями получения. Цель работы - исследование морфологии и оценка агрегативной устойчивости Э, стабилизированных различными растворами ПАВ: анионными (сульфонол, SLS) и неионогенными (ОР-10, ДС-10) с помощью электронной спектроскопии. В качестве независимого метода анализа морфологии Э использовали оптическую микроскопию. Для каждого эмульгатора была приготовлена серия образцов на основе парафинового масла с различной концентрацией ПАВ (0,05 - 2%). На основе спектральных данных, полученных для различных Э, рассчитаны распределения рассеивающихся частиц - капель (рисунок). Спектроскопический подход в анализе морфологии и стабильности Э основан на оценке эффекта рассеяния, максимум которого соответствует среднему размеру капель в образце [1]. В результате обработки данных спектров получены распределения капель по размерам в диапазоне 200-860 нм для Э с разным содержанием ПАВ, которые согласуются с результатами оптической микроскопии.



а)

б)

в)

Электронные спектры эмульсий в зависимости от концентрации сульфонола (а);
распределение капель эмульсии сульфонола по размерам (б); микрофотография 0,5%
эмульсии, стабилизированной сульфонолом (в).

Работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии ЦКП ТвГУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Маркова, А. И. Изучение морфологии эмульсий методом электронной спектроскопии / А. И. Маркова и др. // Журнал прикладной спектроскопии. – 2020. – Т. 87. – № 6. – С. 881–885.

УДК 544.773.432

Сальников Денис Вадимович

Моделирование водных растворов нитрата серебра с серосодержащими соединениями

Научный руководитель: М.Д. Малышев

Тверской государственный университет, Тверь

Кафедра физической химии

В данной работе методами молекулярной и ланжевеновой динамики изучаются закономерности самоорганизации в водных растворах нитрата серебра с *L*-цистеином (ЦИС), *N*-ацетил-*L*-цистеином (НАЦ), изомерами меркаптопропионовой кислоты (МПК) и цистеамином (ЦА). Рассматриваются модели растворов $\text{AgNO}_3/\text{ЦИС}$, $\text{AgNO}_3/\text{НАЦ}$, $\text{AgNO}_3/2\text{-МПК}$, $\text{AgNO}_3/3\text{-МПК}$, $\text{AgNO}_3/\text{ЦА}$, $\text{AgNO}_3/\text{ЦА}/2\text{-МПК}$ и $\text{AgNO}_3/\text{ЦА}/3\text{-МПК}$. При построении модельных образцов систем учитывался экспериментально установленный факт [1], что в растворах с нитратом серебра атом водорода тиольной группы (в составе рассматриваемых соединений) замещается серебром (см. рис. 1). Моделирование реализовано на базе программного пакета LAMMPS [2]. В случае молекулярно-динамических расчетов используется валентно-силовое поле PCFF [3].

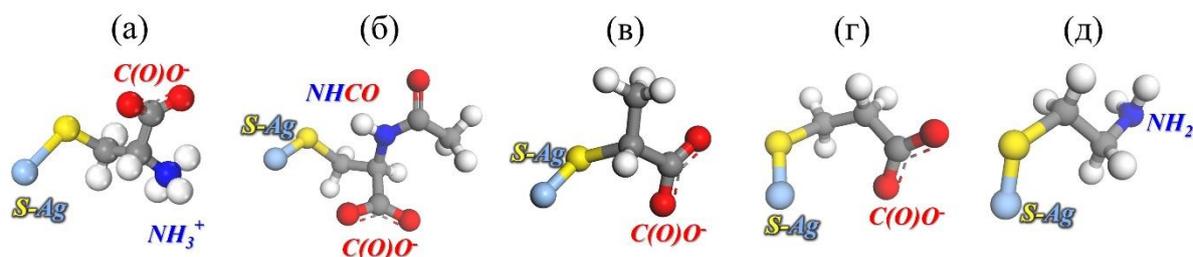


Рис. 1. Модели серосодержащих соединений с учетом замещения атома водорода тиольной группы серебром: (а) *L*-цистеин, (б) *N*-ацетил-*L*-цистеин, (в) 2-меркаптопропионовая кислота, (г) 3-меркаптопропионовая кислота и (д) цистеамин.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Khizhnyak, S.D. Mechanism of gelation in low-concentration aqueous solutions of silver nitrate with *L*-cysteine and its derivatives / S.D. Khizhnyak, P.V. Komarov, L.V. Zherenkova, et al. // *Soft Matter*. – 2017. – V. 13, – I. 30. – P. 5168-5184.
2. LAMMPS molecular dynamics simulator. – Режим доступа: [www.url: https://lammps.org](http://www.url:https://lammps.org). – 05.03.2025.
3. Sun, H. Ab initio calculations and force field development for computer simulation of polysilanes / H. Sun // *Macromolecules*. – 1995. – V. 28. – I. 3. – P. 701-712.

УДК 678.046.364

Самыловская Светлана Алексеевна

**Получение и исследование свойств связующего на основе
ненасыщенной полиэфирной смолы и стеклянных микросфер**

Руководитель: Н.Ю. Старовойтова

Тверской государственный технический университет, г.Тверь

Кафедра химии и технологии полимеров

Ненасыщенные полиэфирные (НПЭ) смолы широко используются в качестве связующего для получения композиционных материалов и изделий на их основе. Наполнителями для композитов могут служить стеклянные, базальтовые, углеродные, целлюлозные волокна и материалы, металлические и керамические частицы, различные мелкодисперсные минералы (микромрамор, тальк, каолин и пр.). Особый интерес представляют полые стеклянные микросферы, получающие все более широкое применение в промышленности. Путем добавления полых стеклянных микросфер в состав НПЭ смол можно достичь снижения плотности (вплоть до положительной плавучести) и усадки изделий, улучшения механических, тепло- и звукоизолирующих характеристик, а также экономии полимера и повышения устойчивости к воздействию среды.

В данной работе проводилось исследование возможности использования микросфер из малощелочного боросиликатного стекла для получения НПЭ связующего. Преимущества данных микросфер в том, что они имеют хорошую совместимость с большинством полимеров, а также дают стабильную вязкость. Для исследования были взяты микросферы с различным размером частиц (от 40 до 65 мкм), плотностью (от 0,15 до 0,38 г/см³) и теплопроводностью (от 0,055 до 0,127 Вт/м К при 21° С) и ненасыщенная предускоренная тиксотропная полиэфирная смола марки СПЭФ. Получены образцы связующего с разным соотношением смолы и микросфер.

Результаты демонстрируют прямую зависимость вязкости связующего от объема введенных микросфер, а также незначительное влияние типа микросфер на ход зависимости. Последующее отверждение полученных композиций показало отличия во времени гелеобразования, а также времени достижения и высоте экзотермического пика для образцов с разными видами микросфер. Также отмечается удлинение времени гелеобразования и снижение экзотермического пика при увеличении объема вводимых микросфер.

УДК: 544.774

Саркисян Вазген Кароевич
Цистеин-серебряные золи:
особенности поведения при различных рН

Руководитель: Д.В. Вишневецкий
Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Явление самосборки с участием низкомолекулярных соединений представляет собой уникальный процесс, имеющий важное значение для фундаментальной и прикладной науки. Одним из наиболее ярких примеров самосборки является водная система, состоящая из L-цистеина и солей серебра. Недавние исследования выявили необычные свойства этой системы и был предложен возможный механизм самосборки [1-3]. Однако структура частиц, формирующихся в процессе самосборки, остается не до конца изученной.

В данной работе были исследованы водные растворы L-цистеина с AgNO_3 , AgNO_2 и AgOOCCH_3 , являющиеся предшественниками геля. Для уточнения структуры частиц, образующихся в растворах, в системы добавляли различные количества гидроксида калия и анализировали изменения с помощью комплекса физико-химических методов. Турбидиметрический анализ показал, что системы обладают изоэлектрической точкой, т.е. поведением, свойственным для полиэлектролитов. Измерение дзета-потенциала систем подтверждает данный тезис. УФ-спектроскопия выявила значительные изменения в структуре частиц при переходе среды из кислой в щелочную. Дополнительное подтверждение этих данных было получено методами ДСР и атомно-силовой микроскопии, что позволило дополнительно подтвердить и уточнить строение частиц, образующихся в исследуемых системах.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ № 21-73-00134 на оборудовании ЦКП ТвГУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. D.V. Vishnevetskii, et al, *Soft Matter*, 2020, 16, 9669-9673.
2. D.V. Vishnevetskii, et al, *Soft Matter*, 2021, 17, 10416-10420.
3. D.V. Vishnevetskii, et al, *Soft Matter*, 2022, 18, 3031-3040.

УДК: 547.233.4

Сидорова Милена Тарасовна

Термическая стабильность гексафторфосфатов алкил-(2-гидроксиэтил)диэтиламмония

Руководитель: О.Е. Журавлёв

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

Ионные жидкости (ИЖ) представляют большой интерес благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам, одним из которых является высокая термическая стабильность. Структура катиона и аниона оказывает существенное влияние на термостабильность ионных жидкостей.

Цель работы – синтез гексафторфосфатов алкил-(2-гидроксиэтил)диэтиламмония с различной длиной алкильного заместителя в катионе и исследование их термической стабильности.

Строение полученных соединений подтверждено данными ИК-спектроскопии. Методом термогравиметрии изучена термическая стабильность гексафторфосфатов алкил-(2-гидроксиэтил)диэтиламмония, в температурном интервале 25-600 °С. Определены температуры начала разложения исследуемых ИЖ. Установлено, что термическая стабильность ионных жидкостей с не четным количеством атомов углерода в алкильном заместителе оказалась выше, чем с чётным (Рис. 1.-2).

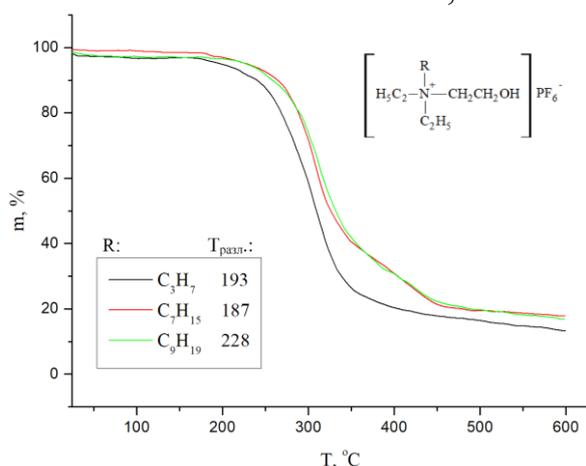


Рис. 1. Термическая стабильность и температуры начала разложения, гексафторфосфатов алкил-(2-гидроксиэтил)диэтиламмония с нечетными заместителями

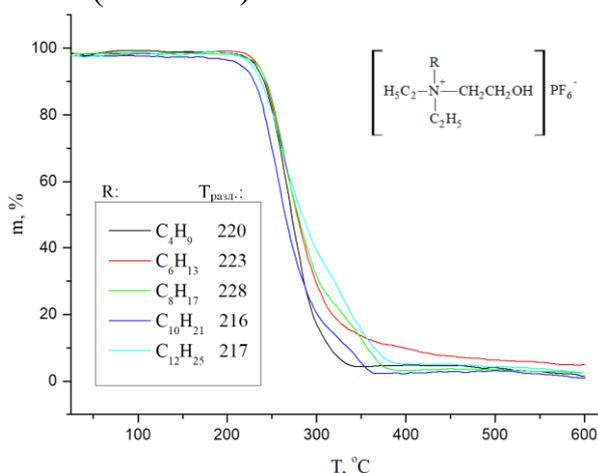


Рис. 2. Термическая стабильность и температуры начала разложения, гексафторфосфатов алкил-(2-гидроксиэтил)диэтиламмония с четными заместителями

УДК 577.1:543.422.27

Смирнова Ксения Александровна

Влияние температуры и УФ облучения на формирование наночастиц серебра в глицин-серебряном растворе

Руководитель: П.М. Пахомов

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Получение биосовместимых и биоразлагаемых бактерицидных препаратов является одной из самых актуальных задач в настоящее время. Наночастицы серебра (НЧС) находят широкое применение во многих сферах деятельности, включая биотехнологию, электронику, медицину, фармацевтическую промышленность и т.д. Использование УФ излучения для получения НЧС является одним из наиболее распространенных методов в виду своей простоты и доступности. Повышение температуры, в свою очередь, может способствовать увеличению скорости образования НЧС. Влияние нагрева или УФ облучения на образование частиц серебра было исследовано нами на примере водного раствора на основе глицина и нитрата серебра (глицин-серебряный раствор – ГСР). Ввиду отсутствия в глицине тиольных SH-групп в ГСР не образуется супрамолекулярный гель, что может способствовать более легкому восстановлению металлических частиц серебра.

Целью данной работы является изучение формирования металлических частиц серебра в растворах ГСР при их нагревании до 60°C или УФ облучении с помощью методов УФ спектроскопии, сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и метода элементного анализа. Все растворы готовили на дистиллированной воде. Рабочие концентрации водных растворов глицина и AgNO_3 – 0.01 М.

Установлено, что нагрев ГСР при 60°C от 24 до 96 часов приводит к изменению окраски раствора до бледно-желтого цвета, а также осаждению серебра на стенках стеклянного сосуда. На электронном спектре раствора после его нагрева обнаружено возникновение полосы плазмонного резонанса в области 420 нм, что подтверждает наличие наночастиц серебра в образце. Анализ морфологии образца, полученный с помощью метода СЭМ, установил выраженную кубическую форму полученных наночастиц как в осадке, так и в растворе.

После УФ облучения ГСР наблюдается образование мелкодисперсного серо-черного осадка. Обнаружено, что полученные частицы состоят из множества нано- и макрочастиц серебра пластинчатой формы, собирающихся в более крупные агрегаты, что может быть обусловлено высокой энергией воздействия УФ излучения.

Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.

УДК 547-304.2

Соловьёва Анастасия Юрьевна

Синтез и физико-химические свойства аммониевых ионных жидкостей

Руководитель: О.Е. Журавлев

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

В настоящее время аммониевые ионные жидкости находят все большее применение в области химической технологии, что обусловлено их необычными характеристиками, такими как незначительное давление паров, негорючесть, низкая воспламеняемость. Эти свойства определяют широкий спектр высокотемпературных применений ионных жидкостей, например, в качестве растворителей для разделения смеси органических веществ при высокой температуре, высокотемпературных смазочных материалов и т.д.

Цель данного исследования заключалась в синтезе различных солей бутилдиметилбензиламмония и изучении их термостабильности. Структура всех синтезированных ионных жидкостей подтверждена данными ИК-спектроскопии.

В виде кривых потери массы (Рис. 1) представлены результаты термогравиметрического анализа, из которых следует, что ионные жидкости, содержащие слабокоординирующие анионы, наиболее устойчивы к высокотемпературному разложению. Для солей бутилдиметилбензиламмония термостабильность увеличивается в ряду анионов: $\text{SO}_4^{2-} < \text{NO}_3^- \approx \text{N}(\text{CN})_2^- < \text{PF}_6^- < \text{BF}_4^-$.

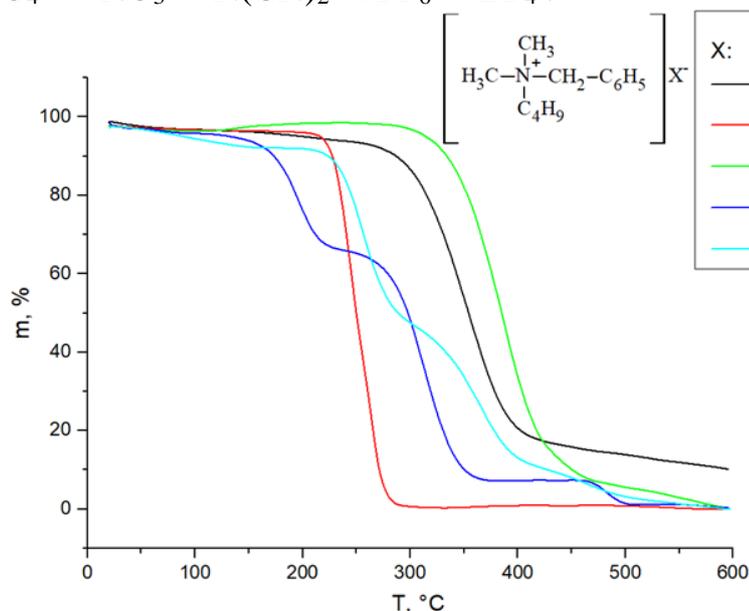


Рис. 1. ТГ-кривые солей бутилдиметилбензиламмония

УДК 544.478

Соловьёв Кирилл Эдуардович

Влияние температуры и давления водорода на процесс гидрирования фруктозы при использовании рутениевого катализатора

Руководитель: М.Е. Григорьев

ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет»

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Гидрирование моносахаридов – ключевой химический процесс, позволяющий получить множество веществ, которые нашли свое применение в фармацевтической и химической промышленности. При присоединении водорода к молекуле моносахарида образуются соответствующие спирты – полиолы. Практическая значимость гидрирования фруктозы заключается в том, что при гидрировании получается маннит и сорбит – шестиатомные спирты, которые, могут быть использованы в фармацевтических целях, а именно - при изготовлении диуретиков, препаратов снижающих внутричерепного и внутриглазного давления. Также стоит отметить тот факт, что маннит, получаемый в ходе гидрирования также может быть использован при производстве твердых лекарственных веществ – таблеток в качестве наполнителя и подсластителя.

В настоящей работе были проведены опыты по гидрированию фруктозы до маннита и сорбита в присутствии рутениевого катализатора Ru/СПС MN 100 при варьировании следующих параметров процесса – температура и давление водорода. В ходе проведения экспериментов было установлено, что при повышении температуры наблюдается увеличение конверсии фруктозы с 82% до 98% и селективности по манниту с 40% до 55% при неизменности остальных параметров процесса (давление водорода 30 бар, масса катализатора 0,05 г, концентрации субстрата 0,0694 моль/л). Также было установлено, что при увеличении парциального давления водорода происходит повышение и селективности по манниту с 55% до 62% и конверсии фруктозы с 85% до 92%.

На основании проведенного исследования можно сделать вывод, что катализатор Ru/СПС MN 100 способен эффективно проводить процесс гидрирования фруктозы с получением полиолов, в особенности маннита.

УДК.544.478

Спиридонова Юлия Викторовна

Влияние температуры на координацию кластеров металлов с ароматическими звеньями стирол-дивинилбензольных сополимеров в отсутствии растворителя

Руководитель: А.В. Быков

Тверской государственной технической университет, г. Тверь

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Стирол-дивинилбензольные сополимеры и их функционализированные аналоги широко используются в современной промышленности как сорбенты, ионообменные смолы, резервуары для хранения водорода, а также как стабилизаторы металлосодержащих гетерогенных каталитических систем.

Работа посвящена изучению адсорбции и подвижности кластеров металлов Pd, Ru, Ni в среде стирол-дивинилбензольного сополимера и состоит из двух частей. Первая часть посвящена поиску основного состояния кластеров M_4 , M_9 , M_{19} никеля, рутения и палладия, определения энергии когезии этих кластеров и энергии адсорбции молекул бензола, имитирующих фенильные радикалы полимера, на кластеры металлов. Во второй части работы подобраны потенциалы Ленарда-Джонса, позволяющие воспроизвести геометрии и энергии рассчитанные на первом шаге, и методами молекулярной динамики изучена координация и подвижность кластеров M_4 , M_9 , M_{19} в среде макромолекулы сополимера стирол-дивинилбензола при температурах от 25 до 300 °С.

Расчёты геометрии и энергий когезии кластеров металлов, а также расчёты геометрии и энергии адсорбции молекул бензола на эти кластеры проведены на уровне теории функционала плотности и не ограничены по спине. Учёт релятивистских эффектов выполнен применением ZORA-формализма. В расчётах использован обменно-корреляционный функционал BP и полноэлектронный базисный набор def2-TZVP для атомов углерода и водорода. Для атомов металлов применён базисный набор old-ZORA-TZVP. Все квантово-химические расчёты выполнены в программном пакете Orca 5.0.3.

УДК: 663.2

Тищенко Анастасия Александровна

Определение качества вина по минеральному составу

Руководители: Л. Н. Толкачева, Т. В. Крюков

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра неорганической и аналитической химии

В данной работе были проведены следующие исследования: обнаружение содержания калия и натрия методом пламенной фотометрии, который основан на измерении интенсивности излучения возбуждаемых в пламени атомов, а также совместное количественное содержание кальция и магния титриметрический методом, который основан на образовании прочного комплексного соединения трилона Б с кальцием и магнием. Результаты данных опытов представлены в таблице 1.

Объект исследования: красное полусладкое вино фирмы "Vranesvilarov" 2024 года, страна производитель Грузия, объемом 750 мл

Таблица 1. Полученные результаты

Исследование	Результат	Норма потребления
Обнаружение содержания калия методом пламенной фотометрии	1118,9 мг/л	3510 мг в сутки
Обнаружение содержания натрия методом пламенной фотометрии	57,04 мг/л	не более 2000 мг натрия в сутки
Совместное количественное содержание кальция и магния титриметрический методом	Ca-85,6 мг/л	1000 мг в сутки
	Mg-89,77 мг/л	300 мг - 350 мг в сутки

Контроль содержания минеральных веществ в вине критически важен для его стабильности и качества. Анализируя содержание этих минералов в исследуемом образце, сделали вывод о качестве вина и отсутствии фальсификации [1]. Однако, несмотря на это, этанол в составе вина снижает всасывание минералов в кишечнике, что делает вино неэффективным для покрытия суточной нормы потребления минералов. Таким образом, вино не следует рассматривать как источник минеральных веществ, несмотря на их присутствие в его составе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бурганова Г.А. Минеральный состав вин при их идентификации и выявлении фальсификации // Наука и образование в глобальных процессах. – 2018. – № 1(5). – С. 74-76.

УДК 544.169

Тищенко Виктория Сергеевна

Сравнение производных эфиров фторангида метилфосфоновой кислоты

Руководитель: Н.П. Русакова

Тверской государственный университет, Тверь

Кафедра физической химии

Оптимизация геометрии молекул эфиров фторангида метилфосфоновой кислоты (Рис.) выполнена с использованием алгоритма V3LYP в программе Gaussian 03. Заряды групп ($q(R)$) получены путем суммирования атомных параметров, рассчитанных в программе AIMALL в рамках «Квантовой теории атомов в молекулах».

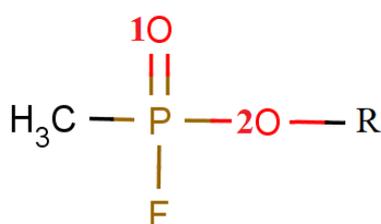


Рис. 1. Общая формула изучаемых эфиров фторангида метилфосфоновой кислоты, где для зарина в качестве R выступает $-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$, для зомана $-\text{CH}(\text{CH}_3)\text{C}(\text{CH}_3)_3$, для фенилметилфосфонофторидата $-\text{C}_6\text{H}_5$ и $-\text{C}_6\text{H}_{11}$ для циклозарина

Сравнение зарядов атомов и групп показало сходность параметров $q(R)$ заместителей в молекулах эфиров фторангида метилфосфоновой кислоты (Таблица); они отличаются не больше, чем на 0,004 а.е. Тем не менее, циклические структуры: предельная в циклозарине и ароматическая в фенилметилфосфонофторидате оказывают существенное влияние на заряды атома кислорода и метильной группы. В молекуле фенилметилфосфонофторидата атом кислорода в положении один имеет наибольшее значение электронного заряда -1,466 а.е. в сравнении со всеми O в этом положении, а в положении два, наоборот, $q(R)$ наименьший -1,357 а.е., что предположительно связано с распределением плотности π -электронов между бензольным кольцом и 2O. Это косвенно подтверждается и уменьшением заряда атома фосфора, через бассейн которого (как и через 2O) так же происходит перераспределение π -электронов

Таблица:

Заряды групп ($q(R)$) молекул алкилметилфосфонофторидата в а.е.

Вещество	1CH ₃	P	1O	F	2O	R*
Зарин	-0,484	3,505	-1,481	-0,814	-1,343	0,617
Зоман	-0,486	3,507	-1,481	-0,815	-1,347	0,621
Фенилметил- фосфонофторидат	-0,478	3,496	-1,466	-0,815	-1,357	0,620
Циклозарин	-0,494	3,506	-1,472	-0,817	-1,342	0,619

* В столбце R – для зарина фрагмент $-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$, зомана $-\text{CH}(\text{CH}_3)\text{C}(\text{CH}_3)_3$, для фенилметилфосфонофторидата $-\text{C}_6\text{H}_5$, для циклозарина $-\text{C}_6\text{H}_{11}$.

УДК: 66.097.5

Труханов Илья Денисович

**Исследование химической стабильности пористых аморфных
нерегулярных ароматических полимеров, полученных одностадийным
синтезом**

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

Тверской государственный технический университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Пористые органические полимеры представляют собой перспективный класс материалов, обладающих четко выраженной пористостью, высокой удельной площадью поверхности (УПП) и функциональными поверхностными группами. Эти свойства делают их востребованными в таких областях, как катализ, адсорбция и разделение веществ. Особое значение имеют пористость и морфология материалов, которые напрямую влияют на их эффективность [1]. Сверхсшитая структура полимеров обеспечивает им высокую стабильность, а также позволяет регулировать природу и концентрацию функциональных групп, что успешно используется в гетерогенном катализе для иммобилизации наночастиц металлов [2].

В рамках данной работы был проведен одностадийный синтез (по реакциям Фриделя-Крафтса и Шолля) пористых аморфных ароматических полимеров на основе гетероциклических азотсодержащих мономеров (индол, карбазол), а также их смесей с другими мономерами (фенантрен, 1-нафтол). Полимеры, синтезированные по реакции Фриделя-Крафтса, продемонстрировали высокие значения УПП, достигающие 787 м²/г для полимера на основе смеси двух мономеров – карбазола и 1-нафтола. В то же время полимеры, полученные по реакции Шолля, в целом показали более низкую УПП, за исключением полимера на основе карбазола, для которого значение УПП составило 810 м²/г.

Исследование химической стабильности полимеров в водно-спиртовых растворах в присутствии гидроксида натрия (условия реакции кросс-сочетания Сузуки) выявило, что, независимо от метода сшивки, полимеры на основе индола менее стабильны, чем полимеры на основе карбазола. Это, вероятно, связано с разрушением метиленовых мостиков в структуре полимера. Применение более мягкого основания (Na₂CO₃) позволило частично решить проблему нестабильности, снизив степень разрушения полимеров. Таким образом, наиболее перспективными для применения в катализе оказались полимеры на основе карбазола, которые сочетают высокую УПП и химическую стабильность.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Y. Wang, Y. Yang, Q. Deng, W. Chen, Y. Zhang, Y. Zhou, Z. Zou, 2023, 33, 2307179.
2. Tan L., Tan B., Chem. Soc. Rev., 2017, 46, 3322.

УДК: 66.096.4

Удовенко Вероника Павловна

**Исследование комплексообразования в системе
этилендиамин-N-N'-диянтарная кислота – скандий (III)**

Руководитель: М.И. Скобин

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра неорганической и аналитической химии

В данной работе было изучено комплексообразование этилендиамин-N-N'-диянтарной кислоты (EDDSA) со скандием в водной системе. Соотношение компонентов EDDSA и Sc составляло 1 к 1.

На основе данных рН-метрического анализа было проведено математическое моделирование химических равновесий. Были обнаружены следующие комплексные формы: $[\text{ScEDDS}]^-$, $[\text{Sc}(\text{OH})\text{EDDS}]^{2-}$, $[\text{Sc}(\text{OH})_2\text{EDDS}]^{3-}$, также были рассчитаны их константы образования.

Наиболее наглядно полученный результат можно представить в виде концентрационной диаграммы распределения комплексных форм для исследуемой системы (рис.).

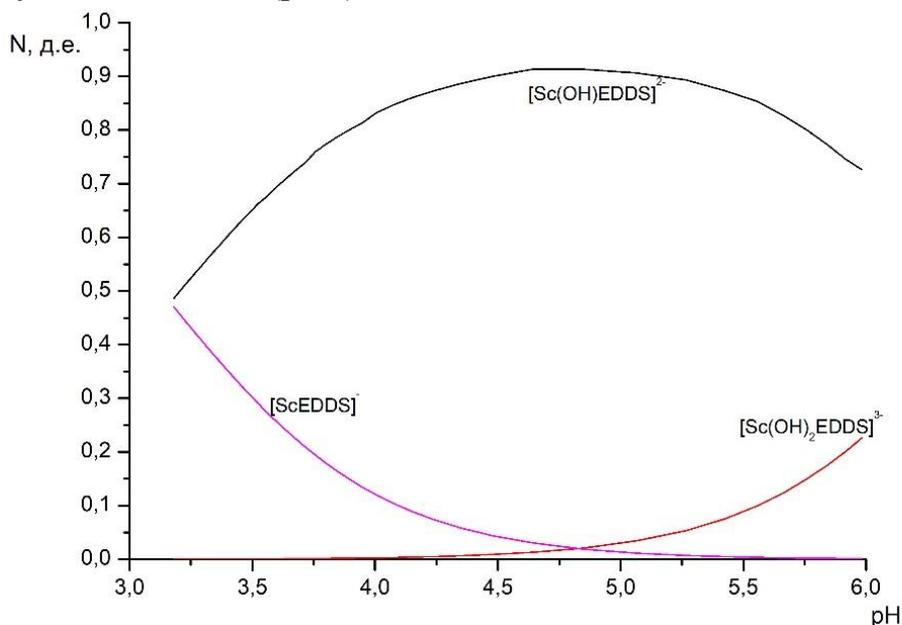


Рис. Диаграмма распределения содержания значимых комплексных форм для системы $\text{Sc}^{3+} - \text{EDDS}^{4-} - \text{H}_2\text{O}$ в зависимости от рН

На основе полученных данных, очевидно, что в исследуемом интервале рН наибольшую концентрацию имеет основной комплекс $[\text{Sc}(\text{OH})\text{EDDS}]^{2-}$. Средний комплекс $[\text{ScEDDS}]^-$ существуют преимущественно при низком значении рН. Такое распределение комплексных форм связано с активными процессами гидролиза скандия в исследуемой области.

УДК 633.522:633.865

Ущাপовский Валентин Игоревич

**Физико-химические свойства меланина
оболочек семян технической конопли**

Руководитель: Е.А. Прутенская

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

В России с увеличением объема производства технической конопли (*Cannabis sativa L.*), законодательно разрешенной к возделыванию [1], возрастает количество вторичного сырья, включая оболочку семян, которая в настоящее время используется недостаточно эффективно. Оболочка семян может содержать биологически активные вещества, в том числе меланин.

Химическая структура меланинов сложна и до конца неизвестна, однако установлено, что в их составе присутствуют хинонные и фенольные фрагменты. Меланины, характерные для растений образованы из предшественников, не содержащих азот, таких как полифенолы [2].

В работе установлено, что меланины из лузги семян технической конопли имеют характерный спектр поглощения в виде пологой кривой с монотонным увеличением поглощения излучения на более низких длинах волн, что характерно для природных меланинов [3] и пиком при $\lambda = 350-360$ нм, свидетельствующим о присутствии белков и полисахаридов в образце. ИК-спектроскопия обнаружила наличие карбоксильных и гидроксильных групп и бензольных колец, что подтверждает полиароматическую структуру меланина и его принадлежность к растительным меланинам – алломеланинам [4]. Полученные меланины обладали темно-коричневым цветом с металлическим блеском. Суммарный выход после удаления посторонних экстрактивных веществ методом Сокслета при оптимальных условиях экстракции составил 6,7% от массы исходного сырья.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Руденко В.Е. Современное состояние отрасли коноплеводства в России / В.Е. Руденко, Т.И. Ашмарина // Естественно-гуманитарные исследования. 2023. № 6(50). С. 414-417.
2. Unraveling the Structure and Function of Melanin through Synthesis / W. Cao et al. // Journal of the American Chemical Society. 2021. № 143(7). P. 2622-2637.
3. From extraction to advanced analytical methods: The Challenges of Melanin Analysis / I. Pralea et al. // International Journal of Molecular Sciences. 2019. V. 20(16). 38 p.
4. Физико-химические характеристики и антиоксидантные свойства меланинов, выделенных из лишайника *leptogium furfuraceum* (harm.) / В.Р. Хабибрахманова, А.Е. Рассабина, А.Ф. Хайруллина, Ф.В. Минибаева // Химия растительного сырья. 2022. № 4. С. 115-125.

УДК: 54.06

Федорова Валерия Сергеевна

**Качественное и количественное исследование лекарственных форм
дротаверина хлорида**

Руководитель: А.А. Степачёва

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Интенсивный рост фармацевтической промышленности и увеличение ассортимента и объёмов производства лекарственных средств приводит к обострению проблем, связанных с качеством лекарств, в том числе их фальсификацией. Обеспечение качества лекарственных препаратов является одной из важных задач. Актуальность анализа качества лекарственных препаратов связана с необходимостью разработки методик для выявления фальсифицированных лекарств и обеспечения доступности качественной лекарственной помощи для потребителей.

Дротаверин - производное изохинолина, препарат со спазмолитическим действием, обладающий миотропным, сосудорасширяющим и гипотензивным эффектами. Дротаверин обладает мощным спазмолитическим действием на гладкую мускулатуру за счет ингибирования фермента фосфодиэстеразы. Имеются данные, что дротаверин может действовать и как блокатор натриевых каналов. Дротаверина гидрохлорид выпускается в виде таблеток и инъекций для растворов, следовательно, в организм он поступает внутрь, внутримышечно, внутривенно или подкожно [1,2].

В данной работе проведены исследования трех лекарственных препаратов дротаверина гидрохлорида: таблеток «Но-шпа» и «Дротаверин», а также раствора для инъекций «Дротаверин». Исследования на подлинность проводились методами качественных реакций, ИК- и УФ-спектроскопии, тонкослойной хроматографии. Количественное определение проводилось методами осадительного и потенциометрического титрования, а также турбидиметрического анализа.

Анализ полученных результатов показал, что все исследуемые образцы содержат дротаверина гидрохлорид, что подтверждено методами качественного анализа. Количественное содержание действующего вещества в образцах соответствует заявленному производителем и требованиям стандартов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Машковский, М.Д. Лекарственные средства: пособие для врачей / М.Д. Машковский. – 16-е изд., перераб., испр. и доп. – М.: Новая волна, 2012. – 1216 с.
2. Государственная фармакопея Российской Федерации. Т.3. – 14-е изд. – М., 2018 – 1926 с.

УДК: 543.443

Филатова Елизавета Алексеевна
Анализ монет Госбанка России

Руководитель: В.М. Никольский, Т.В. Крюков
Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Объект исследования: монеты Госбанка РФ достоинством 5 рублей, выпущенных в XX и XXI веках.

Цель работы: установление различий в составе монет одного достоинства в 5 рублей, но разных лет выпуска.

Химические элементы 11-й группы Периодической системы элементов Д.И. Менделеева (подгруппа меди: Cu, Ag, Au) иногда называют «монетной группой». Это d-элементы переходных металлов [1]. В нумизматической литературе древние монеты, как правило, подразделяют на золотые (Au, Aurum), серебряные (Ag, Argentum), медные (Ae, Aes). Следует обратить внимание на то, что указанные монетные металлы немагнитны. Однако, мы заметили, что некоторые современные пятирублевые монеты банка РФ притягиваются магнитом. Это послужило причиной нашего исследования состава таких монет различных лет выпуска. Был осуществлен анализ неразрушающим методом на энергодисперсионном микроанализаторе Oxford JNCA Energy 350 в комплекте с растровым электронным микроскопом JEOL JSM-6610LV.

Таблица.

Результаты анализа монет достоинством 5 руб. Банка РФ, %

1998 год				2011 год				
Спектр	O	Cu	Итог	Спектр	C	Fe	Ni	Итог
Спектр 1	5.5	94.5	100.0	Спектр 1	20.6	73.5	0.9	95.0
Спектр 2	6.6	93.4	100.0	Спектр 2	20.2	74.4	0.3	94.9
Спектр 3	5.7	94.3	100.0	Спектр 3	22.6	70.6	0.2	93.4
Спектр 4	5.9	94.1	100.0	Спектр 4	18.2	77.5	-	95.7
Спектр 5	5.6	94.4	100.0	Спектр 5	20.2	75.7	-	95.9

Вывод. В XX веке (1998 год) пятирублевые монеты чеканились из медного сплава (немагнитные), а в XXI веке (2011 год) с целью удешевления изготавливались из стали с гальванопокрытием (притягиваются магнитом).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В.Ю. Бажин, Т.А. Александрова, Е.Л. Котова, А.П. Сулов Современный взгляд на аномалии в группах металлов Периодической системы Д.И. Менделеева // Записки Горного института, 2019, Т. 239, С. 520-527; DOI: 10.31897/PMI.2019.5.520.

УДК: 547.711, 547.781.2

Харкунова Мария Константиновна

Исследование условий протекания реакции алкоксилирования

Руководитель: С.А. Темникова

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра органической химии

Реакции алкоксилирования, в которых в молекулу субстрата вводится алкоксильная группа ($-OR$), используют для модификации органических соединений и улучшения их свойств. Проблема этих процессов – подбор катализаторов, соотношений реагентов, растворителей и других условий.

Алкоксилируя амины или аминоспирты эпоксисоединениями, можно получать полифункциональные алканоламины – эффективные отвердители для полиуретановых полимеров.

В данной работе в качестве алкоксилирующего агента использовали фенилглицидиловый эфир, в качестве катализатора – классический триэтиламин и альтернативные катализаторы – ионные жидкости на основе имидазолия.

В ходе исследования варьировали условия протекания реакции: катализатор, температуру, соотношение реагентов. Классическая методика была модифицирована. При использовании в качестве катализаторов ионных жидкостей конечные продукты были получены с большими выходами и в твердой форме. Сделаны предположения о влиянии строения альтернативного катализатора на механизм протекания реакции алкоксилирования, которую катализирует промежуточное соединение – аддукт фенилглицидилового эфира и имидазола, взятые в соотношении 1:1 [1].

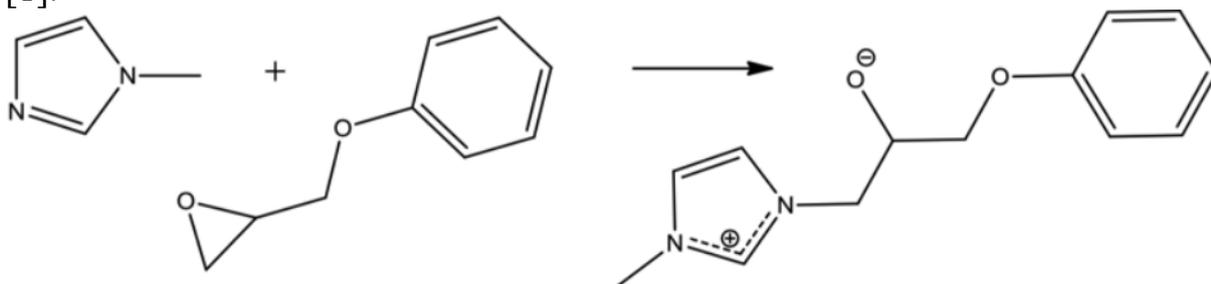


Рис. 1. Получение аддукта, катализирующего реакцию алкоксилирования

Индивидуальность и структура продуктов синтеза подтверждена методом ИК-спектроскопии. Определены характеристики синтезированных алканоламинов: гидроксильное число, кислотное число, аминное число, содержание эпоксидных групп.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Fiona C. Binks, Gabriel Cavalli, Michael Henningsen, Brendan J. Howlin 1 and Ian Hamerton. Examining the Influence of Anion Nucleophilicity on the Polymerisation Initiation Mechanism of Phenyl Glycidyl Ether // Polymer. – 2019. - no11. - p.657.

УДК: 691.175.5/8

Хлопов Степан Алексеевич, Шумилина Василиса Николаевна

Создание омнифобных покрытий с перестраиваемыми полимерными матрицами

Руководители: А.И. Барабанова

Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова

В настоящее время, когда ситуация с эпидемиями остаётся напряжённой, разработка покрытий, предотвращающих адгезию вирусов и бактерий и сохраняющих функциональность длительное время, приобретает особую значимость. Одним из перспективных подходов является использование витримеров – сетчатых материалов с динамической полимерной матрицей, способных к самозаживлению и повторному формованию благодаря реакциям межцепного обмена.

В этой работе были созданы самоочищающиеся витримерные пленки и тканевые покрытия. Они были получены отверждением статистических сополимеров 2,3,4,5,6-пентафторстирола (ПФС) и глицидилметакрилата (ГМА). Процесс отверждения проходил в присутствии двух компонентов: сшивающего агента — гексагидро-4-метилфталевого ангидрида и катализатора межцепного обмена — ацетилацетоната цинка. Звенья ПФС обеспечивают низкую поверхностную энергию, придавая материалу омнифобные свойства, а звенья ГМА участвуют в сшивке полимерных цепей и процессах переэтерификации в узлах сетки.

Анализ химического состава и морфологии показал, что сополимеры равномерно покрывают волокна ткани. Наибольшая концентрация атомов фтора на поверхности ($F = 11\%$) и максимальный контактный угол смачивания водой ($\theta^{H_2O} = 154 \pm 4^\circ$) наблюдались у образца ткани, обработанной сополимером с 70 мол. % звеньев ПФС. При этом θ^{H_2O} для ткани, обработанной сополимером, значительно выше, чем для ткани, пропитанной гомополимером ПФС ($\theta^{H_2O} = 102 \pm 2^\circ$).

Витримерные пленки на основе сополимеров ПФС и ГМА при комнатной температуре проявляют свойства реактопластов, но при нагревании выше температуры стеклования способны изменять свою топологическую структуру. Исследования прочности сварных соединений показали, что разрушение происходит за пределами зоны сварки и зависит от состава сополимера, температуры нагрева и длительности термообработки.

УДК: 635.21

Хомякова Карина Николаевна^{1,2}

Оценка химического состава клубней антоциансодержащих сортов картофеля

Руководители: М.Н. Павлов¹, В.М. Никольский²

¹Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Лаборатория биотехнологий

²Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Для оценки возможности использования антоциансодержащих сортов картофеля в качестве продукта для диетического питания проведен анализ состава клубней трех сортов с различной окраской мякоти (Гала, Сюрприз и Северное Сияние). Исследования проводились в однофакторном опыте на опытном поле Тверской ГСХА в 2023 г.

На основании анализа химического состава клубней картофеля установлено наличие всех искомых элементов и биологически активных веществ. Их содержание представлено в таблице 1.

Таблица 1. Химический состав клубней различных сортов картофеля в пересчете на натуральную влагу

Показатель	Единицы измерения	Сорт		
		Гала	Сюрприз	Северное сияние
Макроэлементы				
Азот (N)	%	0,270	0,301	0,285
Фосфор (P)	%	0,049	0,052	0,039
Калий (K)	%	0,425	0,369	0,477
Микроэлементы				
Железо (Fe)	мг/кг	3,831	4,387	5,663
Цинк (Zn)	мг/кг	2,389	2,596	2,614
Бор (B)	мг/кг	1,083	1,137	1,402
Биологически активные вещества				
Крахмал	%	9,6	10,1	12,4
Антоцианы	мг/100 г	< 0,05	9,38	40,43
Нитраты	мг/кг	42,8	26,5	18,7

Относительно низкое содержание крахмала и нитратов, а также высокое содержание антоцианов и микроэлементов у сортов Сюрприз и Северное сияние можно расценивать как достоинство данных сортов для использования в качестве безопасной и полезной альтернативы привычным сортам картофеля с белой и желтой мякотью.

Исследования выполнены при финансовой поддержке гранта РНФ № 23-76-01058.

УДК 544.163.2

Чернов Ярослав Александрович

Электронное строение нонадиина-1,8 в рамках QTAIM

Руководитель: Ю.Д. Орлов

Тверской государственной университет, г. Тверь

Кафедра общей физики

Исследовано электронное строение одномолекулярного диода нонадиина-1,8. Анализ распределения электронной плотности данного соединения позволяет оценить возможность его применения в качестве фотодиода.

Рис. распределение $\rho(r)$ для нонадиина-1,8, темно-серые сферы – атомы С, светло-серые – атомы Н, синим обозначены границы раздела (атомных групп) в рамках QTAIM.

Равновесная геометрия нонадиина-1,8 получена Gaussian'03 методом B3LYP 6-311++G(3df,3pd). Разбиение молекулярной электронной плотности на фрагменты (атомы и группы атомов) и вычисление интегральных их параметров, а также характеристики связевых путей производилось в программе AIMALL (см. Таблицы 1 и 2).

Таблица 1

Параметры QTAIM для атомных групп нонадиина-1,8

	CH	C	CH ₂	C	CH				
q, a.e.	0.047	-0.279	0.174	0.054	0.008	0.054	0.174	-0.279	0.047
-E, a.e.	38.632	38.282	39.223	39.297	39.315	39.297	39.223	38.282	38.632
V, Å ³	25.9	16.6	23.0	23.2	23.4	23.2	23.0	16.6	25.9

Таблица 2

Параметры связевых путей для атомных групп нонадиина-1,8

	CH≡C	C-CH ₂	CH ₂ -CH ₂	C-CH ₂	CH≡C			
ρ	0,442	0,273	0,239	0,246	0,246	0,239	0,273	0,422
$\nabla^2\rho$	-1,333	-0,752	-0,547	-0,578	-0,578	-0,547	-0,752	-1,333
ϵ	0,002	0,009	0,023	0,015	0,015	0,023	0,009	0,002
L	1,199	1,457	1,539	1,528	1,528	1,539	1,457	1,199

Проведено сравнение полученных интегральных параметров для групп и связевых нонадиина-1,8 со «стандартными» группами н-углеводородов.

УДК: 547.821.3

Шараева Яна Александровна

Электропроводность тетрафенилборатов N-алкилпиридиния

Руководитель: О.Е. Журавлёв

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра органической химии

Ионные жидкости на основе солей пиридиния зарекомендовали себя как универсальные и эффективные вещества для применения в электрохимии. Их уникальная химическая структура и свойства делают их незаменимыми в развитии «зеленой» химии и повышении производительности электрохимических устройств.

Целью работы является исследование электропроводности тетрафенилборатов N-алкилпиридиния с различной длиной алкильного заместителя.

В ходе работы была измерена удельная электропроводность (ЭП) растворов ИЖ в ацетоне при 25°C. На основе полученных данных построена зависимость эквивалентной (ЭП) от концентрации растворов ИЖ (рис.1):

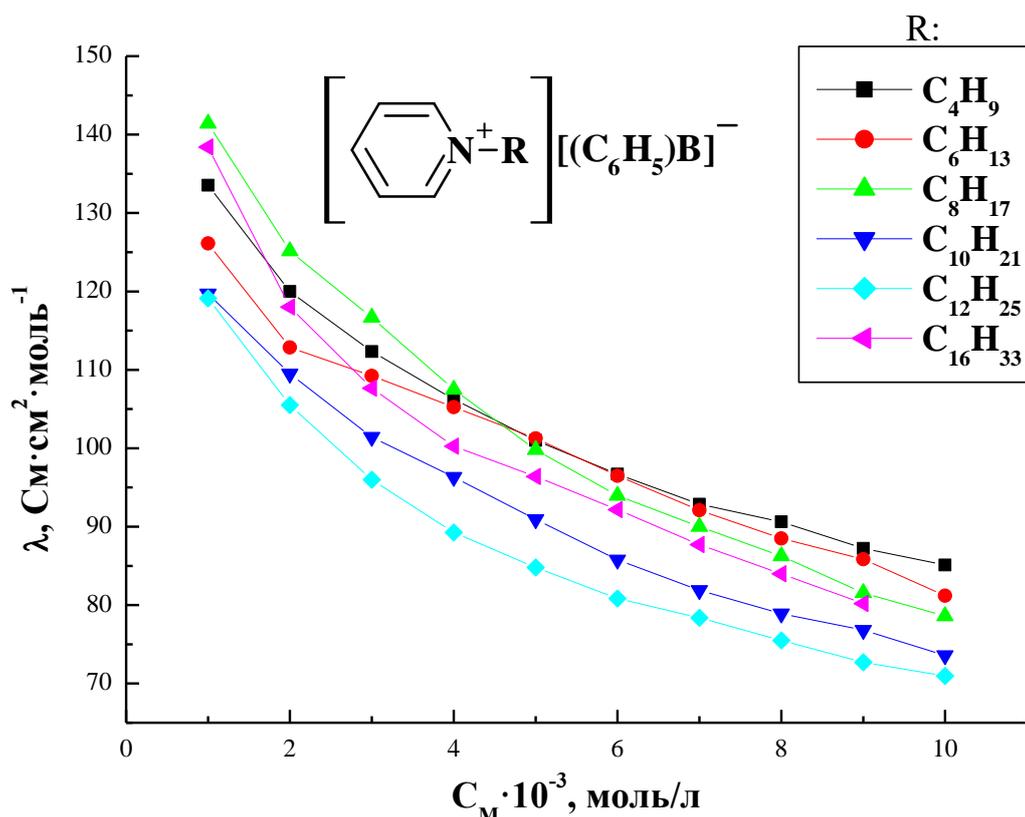


Рис. 1. Зависимость эквивалентной электропроводности тетрафенилборатов N-алкилпиридиния от концентрации

В результате кондуктометрического анализа не было установлено четкой зависимости удельной ЭП тетрафенилборатов N-алкилпиридиния от длины алкильного заместителя.

УДК 541.64.539.199

Шатская Ярослава Николаевна

Компьютерное моделирование самоорганизации сополимеров на основе N-винилкапролактама и N-винилимидазола в селективном растворителе

Руководитель: М.К.Глаголев

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
факультет фундаментальной физико-химической инженерии, Москва

Стимул-чувствительные полимеры, способные направленно и обратимо изменять свои физико-химические свойства под влиянием внешних воздействий, находят широкое применение в области нанотехнологий, в системах направленной доставки, а также в качестве нанореакторов. В работе методом компьютерного моделирования исследуется конформационное поведение сополимеров N-винилкапролактама (ВКЛ) и N-винилимидазола (ВИ). Распределение мономерных звеньев в виртуально синтезированных полимерных цепях соответствовало экспериментально наблюдаемому для синтезированных в реакционной смеси сополимеров.

Показано, что синтезированные *in silico* сополимерные цепи обладают свойствами самоорганизации при изменении внешних условий. В селективном растворителе они формируют глобулы с ярко выраженной мицеллоподобной морфологией с плотным ядром из гидрофобных ВКЛ-звеньев и петлями разной длины из гидрофильных ВИ-блоков [1]. Установлено, что в условиях селективного растворителя длинный блок ВКЛ, формирующийся в процессе синтеза после исчерпания ВИ в реакционной смеси, образует компактное ядро, на которое осаждаются короткие ВКЛ-блоки в составе сополимера, а гидрофильные ВИ-блоки выталкиваются во внешний слой. Определены условия формирования мезоглобул с плотным внешним слоем, сформированным звеньями ВИ.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 25-23-00713) с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. A.I. Barabanova, A.V. Vorozheykina, M.K. Glagolev, P.V. Komarov, A.R. Khokhlov. // *Molecular Systems Design & Engineering*, 2024, 9 (10), 1017–1022.
2. V.V. Voevodin, A.S. Antonov, D.A. Nikitenko, P.A. Shvets, S.I. Sobolev, I.Y. Sidorov, K.S. Stefanov, V.V. Voevodin and S.A. Zhumatiy // *Supercomput. Front. Innov.*, 2019, 6, 4–11.

УДК 631.811.98

Шелков Георгий Андреевич

**Антиоксидантная активность водных растворов шрота
лекарственных трав**

Руководитель: Е.В. Ожимкова

Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Одной из актуальных проблем фармацевтической промышленности является утилизация отходов производства. Во многих случаях эти отходы содержат достаточно большое количество биологически активных веществ.

В практике растениеводства активно применяют препараты, стимулирующие рост растений. Антиоксиданты могут быть также использованы в качестве препаратов, регулирующих рост растений. Известные в настоящее время стимуляторы роста находят ограниченное применение, так как они либо дороги, либо экологически небезопасны. Антиоксиданты, не обладая мутагенной активностью и высокой токсичностью, могут оказаться наиболее пригодными для использования в ряде областей сельскохозяйственного производства в качестве стимуляторов роста.

В данной работе было проведено определение антиоксидантной активности водных экстрактов шрота, а именно: шрот корня женьшеня, шрот плодов перца стручкового и шроты полыни для изучения возможности их дальнейшего применения в качестве стимуляторов роста растений. Весь материал изначально был измельчен до однородной массы. Далее данная масса каждого вида сырья заливалась водой в разном соотношении, гидромодуль был 1:5, 1:10, 1:15, 1:20. Экстракция проводилась 24 часа при температуре $24 \pm 1^\circ\text{C}$. Для каждого вида шрота экспериментально подобраны условия, обеспечивающие получение экстрактов с наибольшей антиоксидантной активностью, которую анализировали перманганатным методом [1]. Экстракт из шрота перца проявил наибольшую антиоксидантную активность среди остальных видов сырья. Экстракт из шрота корня женьшеня показал меньшую активность, чем экстракт из предыдущего сырья, но лучше, чем экстракт из шрота полыни. Данный эксперимент показал, что все 3 экстракта обладают антиоксидантной активностью, лучший результат показал экстракт из шрота перца стручкового.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Нилова Л.П. Определение антиоксидантной активности порошков из растительного сырья перманганатным методом // Торгово-экономические проблемы регионального бизнес пространства. 2015. С. 118-122.

УДК 544.623

Юлмасов Глеб Сергеевич

Термодинамика ионной ассоциации N-алкилпиридиниевых металлосодержащих ионных жидкостей в растворах ацетонитрила

Руководитель: О.Е. Журавлев

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

Металлосодержащие ионные жидкости (МИЖ) – динамично развивающийся класс органических соединений. Как правило это соли, в которых катион и анион подобраны таким образом, что образование упорядоченной структуры затруднено, а это в свою очередь приводит к уменьшению температуры плавления ниже 100 °С. Основные свойства, отличающие ИЖ относительно других соединений: низкое давление пара, высокая термическая и электрохимическая стабильность, способность растворять как полярные, так и неполярные соединения. Отдельный интерес представляют системы, представляющие собой ИЖ, растворенные в молекулярных растворителях, таких как ацетон, ацетонитрил, ДМСО и др.

В данной работе изучались растворы ИЖ состава $[C_nPy][MCl_4]$ ($n = 4, 8, 10, 12, 16$; $M = Ni, Co, Mn$) в ацетонитриле. В ходе эксперимента, методом кондуктометрии, измерялась удельная электропроводность (ЭП) для концентраций в диапазоне 10^{-2} - 10^{-4} М и температурном диапазоне 25-50 °С. На основе полученных данных рассчитывали ряд электрохимических характеристик соединений: константы ионной ассоциации (K_a), предельные эквивалентные ЭП (λ_0), энергии активации (E_a) в температурном диапазоне 30-45 °С, а также энергия Гиббса ассоциации (ΔG). Зависимость константы ионной ассоциации от температуры позволила рассчитать стандартные энтальпии (ΔH°) и энтропии (ΔS°) ионной ассоциации.

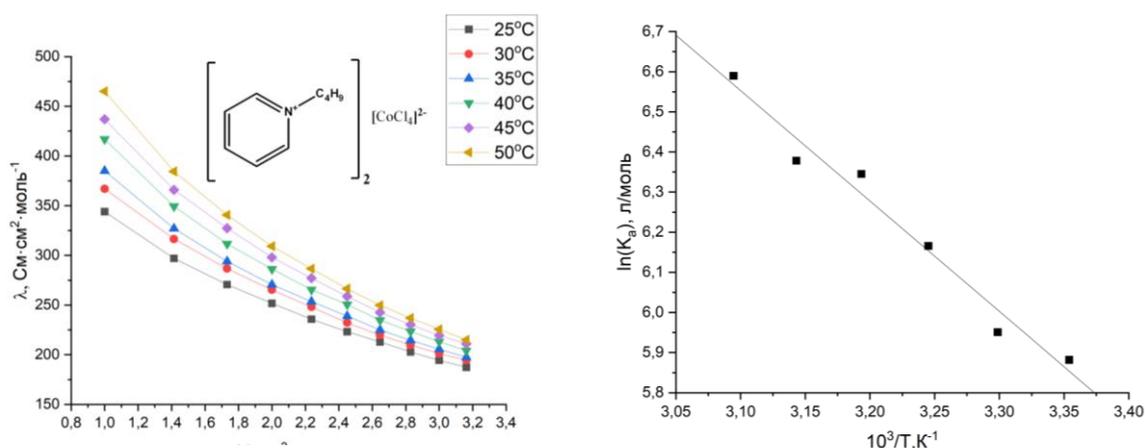


Рис. 1. – Графики концентрационной и температурной зависимости эквивалентной электропроводности (λ) (слева) и температурной зависимости константы ионной ассоциации (K_a) (справа)

УДК 577.15.08

Яковлева Анна Алексеевна

Мультиферментные системы на основе глюкозооксидазы и пероксидазы корня хрена

Руководитель: О.В. Гребенникова

Тверской государственной технической университет, Тверь

Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации

В научном сообществе растет интерес к каскадным реакциям, в которых участвуют несколько ферментов. Мультиферментные каскады позволяют нескольким ферментам работать в синергии, что дает возможность достичь большей эффективности в химических процессах. Так например, глюкоза под действием глюкозооксидазы окисляется до перекиси водорода, одновременно перекись водорода взаимодействует с 2,2'-азино-бис-[3-этилбензтиазолин-6-сульфонат] (АБТС), при участии пероксидазы, вследствие чего образуется окисленная форма АБТС и вода [1].

Вместо нативных форм ферментов используются их иммобилизованные модификации, так как это позволяет повторно использовать их множество раз. При иммобилизации ферменты закрепляются на носителе, что позволяет легко извлекать и вновь использовать их в биохимических процессах. Иммобилизованные ферменты имеют ряд преимуществ такие как: простота отделения от реакционной смеси, высокая каталитическая эффективность и минимальная потеря активности, возможность осуществления непрерывного ферментативного процесса и многое другое [2,3].

В данной работе исследовалась биокаталитическая система на основе глюкооксидазы и пероксидазы в двух последовательных реакциях – окислении D-глюкозы и 2,2'-азино-бис-(3-этилбензтиазолин-6-сульфо кислоты)диаммониевой соли. Оптимальным значением pH при использовании нативных форм ферментов является 7.2. При больших значениях pH, возможно происходит денатурация белковых молекул ферментов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Аттауллаханов, Ф. И. Каскады ферментативных реакций и их роль в биологии / Ф. И. Аттауллаханов // Биология /. – Москва, 2000. – С. 405– 410.
2. Диксон, М. Ферменты: Пер. с англ. / М. Диксон, Э. Уэбб. – М.: мир, 1982. – Т. 1 – 396 с., ил. Биотехнология: учеб. пособие для вузов. / под ред. Н. С. Егорова, В. Д. Самуилова. Кн. 7: Иммобилизованные ферменты. / И. В. Березин, Н. Л. Клячко, А. В. Левашов и др. – М.: высш. шк., 1987. 159 – с.: ил.

Авторский указатель

- Абрамова Е.С., 135, 136*
Агошкова А.А., 21
Акинчиц М.В., 22
Александров Е.В., 87
Александрова Д.Д., 88
Андреев А.А., 23
Андреев К.И., 137
Анофриев В.А., 89
Аразгелдиева Ш., 138
Арефьев А.А., 139
Артамонова А.А., 140
Афанасьева Т.М., 141
Бадаева М.А., 142
Бакаева М.А., 50
Балакшина Д.В., 143
Баранник А.А., 144
Белова В.В., 24
Беляков А.А., 145
Бериллов В.В., 90
Бессуднова А.Р., 23
Бикбаева В.Р., 146
Бирюкова С.С., 103
Блинова А.В., 23
Богданова А.М., 25
Борисов А.К., 94
Бровина В.С., 147
Бурлаков Е.С., 148
Васильева К.Д., 149
Вересов С.А., 91, 128
Веселов А.Д., 98
Викторова Д.Д., 150
Волков А.О., 26
Воробьева А.Д., 27
Вострикова Н.В., 28
Гаврилова Е.П., 151
Галкин И.К., 92
Гапоненко О.В., 152
Глинский Д.Р., 93
Горбань А.П., 153
Горбунова Д.В., 154
Горячева Е.А., 155
Григорьев Р.Е., 127
Гультяева А.С., 29
Гультяева К.А., 156
Гурьева С.А., 94
Гусева А.М., 95
Гусева Д.Д., 157
Джабраилова А.Г., 158
Дмитриева А.А., 30
Дроздова Л.В., 159, 160
Дудиловская А.В., 31
Дю М.А., 161
Дядько А.Ю., 162
Егоров А.А., 164
Егорова Е.М., 25
Егорова К.А., 96
Егорова К.В., 163
Емельянова С.Д., 41
Ершов Н.А., 165
Ершова Е.А., 32
Жамлин А.В., 33
Жихарева В.Е., 166
Заболева Е.В., 23
Зайцева А.Е., 167
Замурьева Е.Э., 168
Зварич М.С., 97
Зверева А.А., 169
Зеников Г.Р., 170
Зимин Р.В., 34
Зиновьев Н.А., 35
Зорин Д.Р., 98
Зуев И.А., 36
Иванов П.Е., 171
Иванюта Я.В., 172
Ипатова О.А., 173
Исаев И.Д., 174
Каракеян И.В., 99
Карапетян А.А., 100
Кафтанов А.Д., 175
Качановская С.В., 101
Ким О.Т., 176
Клименко А.А., 177
Козенкова М.В., 102
Кокорина К.А., 100
Колобков В.В., 37
Колпакова В.М., 38
Комарова В.Д., 178
Кондратьев С.Е., 103
Копин В.А., 179
Кочерова В.А., 39, 40
Кравченко Д.А., 104
Крылов Д.О., 41
Крылова А.В., 180
Кудласевич И.А., 42, 43
Кудрявцева Е.В., 64, 81
Кудрян А.В., 105
Кузмин А.А., 44, 45, 46
Кузнецова А.Ю., 159, 160
Кузьмин Н.Б., 106
Кузьмина О.Е., 47, 48
Кулагина П.В., 49
Кулешова А.Ю., 50
Кунарёва А.А., 181
Куц А.Д., 182
Лебедев В.В., 183
Лисица М.А., 51
Литвинов И.С., 52
Ловягина М.Р., 53
Ломоносов Г.Д., 107, 125
Лузик Д.И., 108
Лукиев И.В., 184, 185
Майфат Д.А., 54, 55
Макаев В.В., 109
Макарова Э.В., 56
Макулин А.А., 110
Малинина А.А., 186
Мамаев П.В., 111
Маранджян Е.С., 187
Мартынюк А.В., 188
Матвей М.Ц., 75
Метлин Ф.А., 189
Механников И.А., 190
Миронова А.п., 192
Миронова С.В., 191
Митрика К.В., 193
Михалева Н.О., 112
Монжаренко М.А., 57
Мочалов В.В., 194
Мухин О.А., 113
Найман Е.В., 195
Неелова А.В., 196
Некрасова А.В., 58
Немцова А.Е., 197
Немытышева И.А., 198
Непша Н.И., 114
Никитин Д.А., 36
Никитин С.А., 199
Новожилова А.С., 200
Носаева В.С., 59
Огнев Д.Д., 115
Озеров В.А., 116
Оспельников Н.М., 117

- Павлов А.С., 60
Павлов Д.А., 118
Павлов И.Е., 201
Павлова К.И., 202
Патренков И.К., 119
Пащенко М.П., 66
Перепелица О.В., 203
Петрова А.И., 61
Полев О.В., 120
Полякова Е.Э., 196, 204
Прокофьева Д.А., 205
Пуйтов В.В., 121
Пуртиев Р.Н., 206
Радаева А.А., 122
Ракунов П.А., 102
Рихмайер А.М., 123
Рихмайер М.А., 123
Родин С.В., 124
Румянцев В.А., 23
Рябчикова А.В., 62
Рязанова А.Ю., 207
Савельев Я.П., 107, 125,
126
Савенко А.О., 208
Савина К.Г., 126, 127
Савицкая Ю.А., 63
Сальников Д.В., 209*
- Самыловская С.А., 210
Саркисян В.К., 211
Серов С.В., 91, 128
Сидорова М.Т., 212
Сметанникова С.Д., 95,
129
Смирнова К.А., 213
Смирнова М.П., 64
Соколов И.В., 65
Соколова Е.С., 66
Соловьёв К.Э., 215
Соловьёва А.Ю., 214
Солодкова С.Д., 67
Спиридонов С.С., 68
Спиридонова Ю.В., 216
Сукнев В.А., 130
Тарасова А.А., 69
Терешина Е.Д., 70
Тимофеев А.М., 131
Тищенко А.А., 217
Тищенко В.С., 218
Ткаченко С.В., 71, 72
Токарев Г.Г., 132
Труханов И.Д., 219
Туманова Г.А., 27
Удовенко В.П., 220
Ущановский В.И., 221*
- Федоренко О.Г., 73
Федорова В.С., 222
Филатова Е.А., 223
Харкунова М.К., 224
Хеззиева А., 36
Хлопов С.А., 225
Хомякова К.Н., 226
Цветков Д.Ю., 74
Черепанова М.В., 76
Чернов Я.А., 227
Чистов Н.Д., 77, 78, 79
Чичельницкий Н.М., 133
Шапошников В.Ю., 80
Шараева Я.А., 228
Шарапова А.А., 81
Шатская Я.Н., 229
Шашуев А.А., 82
Шелков Г.А., 230
Шумилина В.Н., 225
Щихорская Е.Д., 83
Юлмасов Г.С., 231
Яковлев Б.А., 84
Яковлева А.А., 85, 232
Ясиновенко М.А., 86
Ятманов М.И., 134*

Подписано к использованию 01.07.2025.
Электронный образовательный ресурс. Заказ № 115.
Издательство Тверского государственного университета.
Адрес: 170100, г. Тверь, Студенческий пер. 12, корпус Б.
Тел. (4822) 35-60-63.